

شبیه‌سازی هیدرودینامیکی قطرات استخراج مایع - مایع و تأثیر انتقال جرم بر هیدرودینامیک

سپیده رشدی^۱، نوراله کثیری^{*} و احمد رهبر کلیشمی^۲

۱- دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، آزمایشگاه طراحی فرآیند به کمک کامپیوتر، دانشگاه علم و صنعت ایران

۲- دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، آزمایشگاه جداسازی، دانشگاه علم و صنعت ایران

تاریخ دریافت: ۹۶/۱/۲۴ تاریخ پذیرش: ۹۶/۷/۱۰

چکیده

شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال جرمی قطره تولوئن بالارونده در سیال ساکن آب مورد بررسی قرار گرفت. برای شبیه‌سازی هیدرودینامیکی از روش حجم سیال با مدل کشش سطحی CSS و روش PLIC استفاده شد. قطرات در سه رژیم کروی، چرخشی و نوسانی شبیه‌سازی شدند و همخوانی بسیار خوب با نتایج تجربی با میانگین خطای ۳/۶۳٪ به دست آمد. همچنین مدل هیدرودینامیکی تحقیق حاضر توانست رژیم نوسانی قطره را در قطر ۴/۴ mm و قطر قطره با سرعت پیشینه را در قطر ۳/۵ mm پیش‌بینی نماید که دارای همخوانی بسیار خوب با نتایج تجربی بود. در گام بعدی شبیه‌سازی، به‌منظور تأثیر انتقال جرم در سرعت قطرات تولوئن ۲ mm، معادلات انتقال جرمی به شبیه‌سازی‌ها اضافه شد. تمامی خواص سیال در شبیه‌سازی‌ها به غیر از کشش سطحی ثابت نظر گرفته شد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد بدون در نظر گرفتن تابعیت کشش سطحی با غلظت، سرعت شبیه‌سازی‌شده با نتایج تجربی موجود در مقالات دارای میانگین خطای ۸۳٪ بود که با در نظر گرفتن آن میزان خطا تا حدود ۲٪ کاهش یافت. گزارش خطوط جریان، شکل قطرات، سرعت محوری و سرعت حدی از نتایج دیگر این تحقیق است.

کلمات کلیدی: شبیه‌سازی عددی، مدل حجم سیال، استخراج مایع - مایع، انتقال جرم، هیدرودینامیک.

مقدمه

و بازده مرحله‌ای است. همچنین شبیه‌سازی انتقال جرمی سیستم تک قطره کمک شایانی در فهم عمیق پدیده انتقال جرم و شناسایی پارامترهای مؤثر حین حرکت دسته‌جمعی قطرات در برج‌ها در مقیاس صنعتی خواهد نمود. از مهم‌ترین سیستم‌های تک قطره استخراج مایع - مایع می‌توان به سه سیستم استاندارد استخراج مایع - مایع شامل تولوئن/ آب، بوتانول/ آب و بوتیل استات/ آب اشاره کرد که مورد تأیید فدراسیون مهندسی شیمی اروپاست.

شبیه‌سازی انتقال جرم و هیدرودینامیک قطرات بالارونده در سیال ساکن از اهمیت زیادی در سیستم‌های مختلف استخراج مایع-مایع برخوردار است. با استفاده از هیدرودینامیک جریان، زمان ماند و اندازه قطره در سیستم تک قطره معلوم شود که از پارامترهای مهم تأثیرگذار در ضریب انتقال جرم

تأیید فدراسیون مهندسی شیمی اروپا، روش مش دینامیک [۱۲] و روش LS همراه با دو مدل کشش سطحی CSF و GFM^۲ [۱۳] به کار برده شده است که برتری نسبی LS-GFM نسبت به LS-CSF نشان داده شد [۱۳]. در مورد بررسی تجربی و مدل‌سازی سیستم متیل ایزوبوتیل کتون/اسیداستیک/آب به روش LS می‌توان به تحقیق وانگ و همکاران [۱۴] و تکامل یافته مطالعه وانگ توسط چنو همکاران [۱۵] به روش کاهش نفوذ کاذب در جریان جابه‌جایی انتقال جرم با روش شبه لاگرانژی اشاره کرد. همچنین در زمینه مدل‌سازی سیستم متیل ایزوبوتیل/کتون در حضور مواد فعال سطحی نیز قبلاً تحقیقات متعددی انجام شده است که از آن جمله می‌توان به تحقیقات لی و همکاران اشاره کرد که به شبیه‌سازی سیستم متیل ایزوبوتیل کتون/آب در حضور ماده فعال سطحی پرداختند [۱۶ و ۱۷]. در زمینه انتقال جرم از حباب گازی نیز تحقیقات مدل‌سازی متعدد وجود دارند [۲۲-۱۸]. همان‌طور که اشاره شد، اگرچه برخی از مطالعات قبلی روش حجم سیال را به‌عنوان روش تعیین فصل مشترک برای مطالعه هیدرودینامیک و انتقال حباب‌ها به کار برده‌اند، تاکنون، هیچ مطالعه مدل‌سازی وجود ندارد تا روش حجم سیال را برای حرکت قطرات واقعی استخراج مایع-مایع در بازه وسیع از قطرات در تمام رژیم‌های کروی، چرخشی و نوسانی به کار برده باشد. همچنین بعد از مدل‌سازی، اعتبارسنجی دقیق با داده‌های تجربی می‌بایست انجام بگیرد تا مدل به دست آمده قابلیت کاربردی در کاربردهای مهندسی را داشته باشد. بنابراین در مطالعه حاضر به مدل‌سازی هیدرودینامیکی قطرات تولوئن در بازه ۱ تا ۴/۴ mm برای اولین بار با روش حجم سیال و مدل کشش سطحی CSS پرداخته شده است.

در مورد سیستم تولوئن/آب می‌توان به تحقیق وگنر و همکاران اشاره کرد که به بررسی تجربی قطرات تولوئن با اندازه‌های ۱ تا ۷ mm در حالت بدون استون پرداختند [۱]. برای قطر قطرات ۳ mm، دو پروفایل متفاوت از سرعت لحظه‌ای نسبت به زمان از یک نازل یکسان به دست آمد. نتایج شبیه‌سازی انگبرگ و همکاران [۲] توانست نتایج تجربی وگنر و همکاران [۱] (دو سرعت متفاوت از یک نازل یکسان) را توجیه کند. در راستای مطالعات مدل‌سازی و انتقال جرمی سیستم تولوئن/استون/آب می‌توان به مطالعه مدل‌سازی انگبرگ و همکاران [۳ و ۴] به روش LS^۱ اشاره کرد. تأثیر مارانگونی در هیدرودینامیک و انتقال جرم قطرات ۲ و ۵ mm مورد بررسی قرار گرفت و تغییرات سرعت لحظه‌ای در حالت همراه و بدون مارانگونی گزارش گردید. همچنین در مورد سیستم تولوئن/استون/آب در مطالعات اخیر به بررسی تجربی و مدل‌سازی به روش VOF بدون در نظر گرفتن تغییر شکل‌ها نیز اشاره شده است [۸-۵]. در مورد بررسی تجربی انتقال جرم سیستم بوتانول/اسید سوکسینیک/آب می‌توان به تحقیق دهکردی و همکاران [۹] اشاره کرد که به بررسی قطرات بوتانول تحت شرایط انتقال جرم با جز منتقل شونده اسید سوکسینیک همراه و بدون مواد فعال سطحی پرداختند. همچنین شبیه‌سازی هیدرودینامیکی در حالت بدون انتقال جرم سیستم بوتانول/آب، به روش اجزا محدود و لیتیس بولتزمان، به ترتیب توسط برتاکیس و همکاران [۱۰] و کمراکوا و همکاران [۱۱] انجام شده است. در مطالعه برتاکیس، مدل کشش سطحی CSF^۲ و برای ردیابی فصل مشترک از روش LS استفاده شد و تطابق خوب با داده‌های تجربی به دست آمد. اما در مطالعه کمراکوا، میزان انحراف از داده‌های تجربی برای قطرات کوچک‌تر برابر ۵٪ و برای قطرات بزرگ‌تر نوسانی برابر ۲۰٪ گزارش گردید [۱۱]. برای شبیه‌سازی هیدرودینامیکی سه سیستم متداول استخراج مایع-مایع مورد

1. Level Set
2. Continuum Surface Force
3. Ghost Fluid Method

حل معادله برای کسر حجمی فاز پراکنده در سیستم‌های دوفازی انجام می‌شود. معادله کسر حجمی به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۳]:

$$\frac{\partial(\alpha)}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla \alpha) = 0 \quad (5)$$

مدل CSS پیشنهادی توسط لافاریه و همکاران [۲۴] در تحقیق حاضر برای مدل‌سازی کشش سطحی به کار رفته است. برخلاف روش CSF، در این روش محاسبه مستقیم انحنا وجود ندارد. روش CSS نیروی کشش سطحی را به فرم تنش T به صورت زیر تبدیل می‌کند:

$$T = \sigma |\vec{n}| (I - \hat{n} \otimes \hat{n}) = \sigma \left(|\nabla \alpha| I - \frac{\nabla \alpha \otimes \nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \quad (6)$$

$$\vec{F}_{sf} = \nabla T = \nabla \cdot \left(\sigma \left(|\nabla \alpha| I - \frac{\nabla \alpha \otimes \nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \right) \quad (7)$$

ترم چشمه به دست آمده از رابطه ۷ بر رابطه ۲ اعمال می‌شود (\otimes ضرب تنسوری دو بردار).

معادلات انتقال جرمی

معادله انتقال جرم برای فازهای مجزای تولوئن و آب به ترتیب به صورت روابط ۸ و ۹ نوشته می‌شوند. در بخش روش حل به ترتیب حل معادلات اشاره می‌شود.

$$\frac{\partial C_d}{\partial t} + \nabla \cdot (C_d \vec{U}) = \nabla \cdot (D_d (\nabla C_d)) \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} + \nabla \cdot (C_c \vec{U}) = \nabla \cdot (D_c (\nabla C_c)) \quad (9)$$

در فصل مشترک قطره-مایع شرایط مرزی فصل مشترک به صورت شرط برابری فلاکس (رابطه ۱۰) و عدم پیوستگی غلظت رابطه ۱۱ زیر تعریف شده‌اند:

$$D_d \frac{\partial C_d}{\partial n} = D_c \frac{\partial C_c}{\partial n} \quad (10)$$

$$\frac{C_d}{C_c} = K \quad (11)$$

غلظت استون در دو سوی فصل مشترک در حالت تعادل ترمودینامیکی به صورت ناپیوسته است. که منجر به تغییرات شدید غلظت در فصل مشترک می‌شود. اعمال شرایط مرزی روابط ۱۰ و ۱۱ در روش حجم سیال با مشکل مواجه است.

بعد از اعتبارسنجی دقیق مدل حاضر با داده‌های تجربی موجود، در مرحله بعد تأثیر معادلات انتقال جرمی بر معادلات هیدرودینامیک در نظر گرفته شده است. ترم کشش سطحی متغیر با غلظت (مارانگونی)، در روش حجم سیال در تحقیق حاضر برای اولین بار به کار برده شد که معادلات هیدرودینامیک را با معادلات انتقال جرم کوپل می‌کند. برای این منظور قطره تولوئن ۲ mm در نظر گرفته شده است و تأثیر غلظت اولیه استون بر سرعت لحظه‌ای قطره تولوئن و الگوی جریان داخل قطره مورد بررسی قرار گرفت.

روش مدل‌سازی

در این قسمت معادلات حاکم بر حل مسئله خلاصه شده است. این معادلات شامل معادلات هیدرودینامیکی همراه با ترم کشش سطحی (به عنوان ترم چشمه معادله مومنتم) از روش CSS^۱ است. در انتها به معادلات انتقال جرم اشاره شده است.

معادلات هیدرودینامیکی

در روش حجم سیال، مؤلفه‌های سرعت و فشار بین فازها به اشتراک گذاشته می‌شود. بنابراین معادله منفرد مومنتم و پیوستگی برای جریان چند فازی حل می‌شود. معادلات میانگین پیوستگی رابطه ۱ و مومنتم رابطه ۲ برای دو سیال غیرقابل امتزاج^۲ به صورت زیر نوشته می‌شود:

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

$$\frac{\partial (\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla P + \nabla \cdot \mu (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T) + \rho \vec{g} + \vec{F}_{sf} \quad (2)$$

که در معادله بالا، نیروی کشش سطحی به عنوان ترم چشمه (\vec{F}_{sf}) وارد شده است. در دیدگاه حجم سیال، مشخصات فاز از قبیل دانسیته و ویسکوزیته از روابط زیر حساب می‌شود [۲۳]:

$$\rho = \alpha(\vec{X}, t) \rho_d + (1 - \alpha(\vec{X}, t)) \rho_c \quad (3)$$

$$\mu = \alpha(\vec{X}, t) \mu_d + (1 - \alpha(\vec{X}, t)) \mu_c \quad (4)$$

برآورد فصل مشترک در دیدگاه حجم سیال توسط

1. Continuum Surface Stress

2. Immiscible

هندسه حاکم بر مسئله، مشخصات مواد مورد استفاده و روش حل

مشخصات مواد مورد استفاده در شبیه‌سازی در جدول ۱ نشان داده شده است. به منظور شبیه‌سازی‌ها از نرم‌افزار فلونت استفاده شده است. شماتیک دامنه محاسباتی همراه ساختار شبکه در شکل ۱ نشان داده شده است. دامنه محاسباتی متشکل از شرایط مرزی دیواره^۲، شرط فشار^۳ و شرط تقارن محوری^۴ است که در شکل ۱- الف نشان داده شده است. معادلات متناسب با هریک از شرایط مرزی یاد شده در نرم‌افزار در شکل ۱- الف نشان داده شده است. گرادایان کسر حجمی در راستای عمود بر دیواره‌ها و در جهت عمود بر شرط تقارن محوری صفر قرار داده شده است. چون ارتفاع دامنه به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شده است، شرایط گرادایان صفر برای بقیه کمیت‌ها در شرط مرزی فشار خروجی لحاظ شده است.

زیرا هیچ گره‌ای^۱ در فصل مشترک وجود ندارد که شرایط مرزی بالا در آن‌ها به‌طور مستقیم اعمال شوند. بنابراین به منظور اعمال شرایط مرزی و ناپیوستگی غلظت در فصل مشترک تک معادله غلظتی معادله ۱۲ پیشنهاد شده است که شرایط معادله ۱۳ را در بر می‌گیرد [۳ و ۲۲]. اثبات چگونگی رسیدن به رابطه ۱۲ از روابط ۸ تا ۱۱ به تفصیل در کار پترا و همکاران پرداخته اشاره شده است [۲۵].

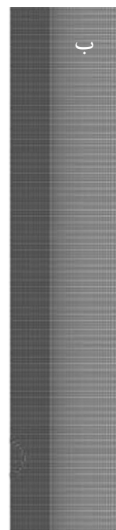
$$\frac{\partial \hat{C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{U} \hat{C}) = \nabla \cdot (D (\nabla \hat{C})) \quad (12)$$

که در آن مقدار \hat{C} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\hat{C} = C_d \quad \text{برای } \alpha = 1 \quad (13)$$

$$\hat{C} = C_c \quad \text{برای } \alpha = 0$$

به جای حل یک معادله برای فاز قطره و یک معادله برای فاز پیوسته، رابطه منفرد ۱۲ برای هر دو فاز با شرایط رابطه ۱۳ حل می‌شود. در رابطه ۱۲ به جای غلظت \hat{C} در فاز پراکنده و پیوسته، بر طبق رابطه ۱۳ به ترتیب C_d و C_c قرار داده می‌شوند [۳].



الف

شرایط مرزی فشار

$$\frac{\partial v}{\partial N} = 0 \quad \frac{\partial u}{\partial N} = 0$$

$$P^* = 0 \quad \frac{\partial \alpha}{\partial N} = 0$$

شرایط مرزی دیواره

$$\frac{\partial \alpha}{\partial N} = 0 \quad \frac{\partial P^*}{\partial N} = 0$$

$$u, v = 0$$

شرایط مرزی دیواره

$$\frac{\partial \alpha}{\partial N} = 0 \quad u, v = 0$$

$$\frac{\partial P^*}{\partial N} = 0$$

ب

شرایط مرزی تقارن محوری

$$\frac{\partial \alpha}{\partial N} = 0$$

$$\frac{\partial P^*}{\partial N} = 0$$

$$\frac{\partial v}{\partial N} = 0$$

$$u = 0$$

شکل ۱ شماتیک دامنه محاسباتی الف) همراه با شرایط مرزی، ب) همراه با ساختار مش

جدول ۱ مشخصات مواد مورد استفاده در شبیه‌سازی [۶]

ماده	دانسیته (kg/m ³)	ویسکوزیته (mPa.s)	ضریب نفوذ (m ² /s)
آب	۹۹۷/۰۲	۰/۸۹۰۳	۲/۹×۱۰ ^{-۹}
تولون	۸۶۲/۳	۰/۵۵۲	۱/۲۵×۱۰ ^{-۹}

1. Node
2. Wall
3. Pressure Outlet
4. Axis Symmetric

$$\sigma = 0.0025 + 0.03285 \exp(-0.0145C_D) \quad (15)$$

به‌منظور گسسته‌سازی معادلات (روابط ۱، ۲، ۵ و ۱۲) از روش حجم محدود استفاده شده است. ترتیب حل معادلات به‌صورت است که در ابتدا معادله کسر حجمی حل می‌شود (رابطه ۵) و مشخصات سیال شامل دانسیته و ویسکوزیته (معادله ۳ و ۴) بر مبنای آن به‌روزرسانی می‌شوند. سپس معادله مومنتم در هر دو جهت x و y حل می‌شود (رابطه ۲) و پس از آن معادله پیوستگی حل می‌شود و سرعت‌های به‌دست‌آمده به روزرسانی می‌شوند (رابطه ۱). بعد از حل معادله پیوستگی معادله غلظت حل می‌شود (معادله ۱۲) و سپس معادله کشش سطحی با مقادیر غلظت به‌دست‌آمده به‌روزرسانی می‌شود (رابطه ۱۵). پس از کشش سطحی به‌دست‌آمده از معادله غلظت، ترتیب حل معادلات از ابتدا (از معادله کسر حجمی (رابطه ۵) تکرار می‌شوند تا حل به همگرایی برسد. به‌منظور کوپل سرعت-فشار از الگوریتم PISO استفاده شده است. به‌منظور محاسبه گردایان‌ها از روش Least square cell based، و برای معادله فشار از روش گسسته‌سازی PRESTO استفاده شده است. ترم‌های جابه‌جایی معادله مومنتم با روش Quick و ترم‌های نا پایا در روابط ۱ و ۲ با روش ضمنی مرتبه دوم حل شده‌اند. به‌منظور حل معادله اسکالر^۲ غلظت رابطه ۱۲، از روش آپویند درجه دوم استفاده شده است. همچنین به‌منظور حل معادله کسر حجمی (رابطه ۵) از روش صریح و برای گسسته‌سازی آن بر روی سطوح حجم کنترل از روش PLIC استفاده شده است.

نتایج و بحث

در این بخش نتایج شبیه‌سازی در حالت با و بدون استون خلاصه شده است.

شرایط مرزی فشار بر مبنای تصحیح‌شده با استفاده از رابطه ۱۴ در نظر گرفته شده‌اند که در پایان نامه دکترای راجه و همکاران به آن پرداخته شده است [۲۶].

$$P^* = P - \rho g y \quad (14)$$

در رابطه ۱۴، y فاصله از کف دامنه محاسباتی است. با توجه به شرایط اشاره‌شده، شرایط مرزی در شکل ۱- الف نشان داده شده است. قطره در حالت اولیه به‌صورت کروی و مکان اولیه آن بالاتر از دیواره پایینی و به‌صورت سکون در نظر گرفته شده است^۱ و از سرعت صفر و به‌دلیل نیروی بویانسی شروع به حرکت می‌کند. اندازه عرض دامنه محاسباتی ۸ برابر اندازه قطر قطره فرض شده است، همچنین در هر قطر معین قطر، ارتفاع دامنه محاسباتی به اندازه‌ای تغییر داده شده است که سرعت حدی با ارتفاع تغییر نکند. با این مشخصات حل، نتایج وابسته به‌اندازه دامنه محاسباتی نیستند. ساختار شبکه در شکل ۱- ب نشان داده شده است. به‌منظور شبکه‌بندی از نرم‌افزار گمبیت و نوع شبکه منظم^۲ در نظر گرفته شد. به‌منظور رسیدن به درجه کافی از ریزتر شدن شبکه برای ردیابی فصل مشترک، در اطراف قطره ناحیه‌ای با عرض ۱/۵ برابر قطر قطره در نظر گرفته شد اندازه شبکه در داخل آن مطابق داده‌های جدول ۲، $\frac{1}{8}$ برابر قطر قطره برای قطرات در نظر گرفته شد. در دامنه اطراف قطره (بیرون ناحیه حرکت قطره)، شبکه درشت‌تر شد (شکل ۱- ب). بر طبق نتایج تجربی و گنر و همکاران [۶]، هنگامی که مقدار استون در فاز پراکنده تولوئن کمتر از ۰.۳٪ وزنی باشد، مقدار ضریب توزیع در دمای محیط برابر ۰/۶۳ می‌شود. با توجه به اینکه غلظت استون در تولوئن در تحقیق حاضر در این بازه قرار دارد، بنابراین مقدار ۰/۶۳ در شبیه‌سازی‌ها به‌کار رفته است (معادله ۱۱). به دلیل غلظت پایین استون در شبیه‌سازی‌ها تمامی خصوصیات به غیر از کشش سطحی مستقل از غلظت فرض شده‌اند و تابعیت کشش سطحی با غلظت به‌صورت زیر نوشته می‌شود [۶ و ۴، ۳]:

1. Patch
2. Structured
3. User Defined Scalar(UDS)

جدول ۲ آنالیز حساسیت از مش برای قطرات ۲ mm تولوئن با روش حجم سیال و مدل کشش سطحی CSS

اندازه مش (mm)	$\frac{d}{۲۰}$	$\frac{d}{۴۰}$	$\frac{d}{۶۰}$	$\frac{d}{۸۰}$	$\frac{d}{۱۰۰}$	$\frac{d}{۱۲۰}$
سرعت حدی (mm/s)	۹۸/۷۰	۱۰۷/۰۳	۱۰۹/۰۲۹	۱۱۰/۲۴	۱۱۰/۲۳	۱۱۰/۲۵

به سمت بیضوی و به دنبال آن افزایش ضریب درگ، کاهش می‌یابد. رژیم نوسانی از قطر قطرات ۴/۴ mm شروع شده است که دارای همخوانی بسیار خوب با نتایج تجربی وگنر و همکاران است (شکل ۲-ج) [۱]. سرعت حدی قطرات تولوئن در شکل ۲-د نشان داده شده است. تطابق بسیار خوب با نتایج تجربی در بازه وسیع قطر قطرات ۱ تا ۴/۴ mm در شکل ۲-د مشاهده می‌شود. خطای روش LS نسبت به روش حجم سیال اندکی کمتر است که این به دلیل جریان‌های مجازی کمتر در روش LS است [۲۷].

به منظور مقایسه با نتایج شبیه‌سازی، نتایج سرعت حدی رابطه گریس و همکاران [۲۸]، همیلک و همکاران [۲۹] و تورسن و همکاران [۳۰] در شکل ۲-د نمایش داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، نتایج گریس و همکاران مقادیر سرعت حدی کمتری نسبت به نتایج شبیه‌سازی و نتایج سرعت بیشینه تجربی ارائه می‌دهند. این به آن دلیل است که رابطه گریس برای سیستم‌های آلوده است که در آن تنش‌های سطحی منتج از آلودگی‌ها سبب افزایش ضریب درگ و کاهش سرعت حدی می‌شود. همچنین مدل همیلک و همکاران [۲۹] توانسته است با دقت خوب برای قطرات کروی-چرخشی به کار رود. درحالی‌که برآورد مدل تورسن از سرعت حدی برای قطرات نوسانی مناسب نیست [۳۰].

شکل قطرات و پروفایل سرعت محوری و خطوط

جریان

شکل قطرات تولوئن در قطرهای ۱ تا ۴/۴ mm در شکل ۳ نشان داده شده است.

نتایج شبیه‌سازی هیدرودینامیک بدون انتقال جرم

آنالیز حساسیت از مش

نتایج شبیه‌سازی با روش حجم سیال در این بخش خلاصه شده است. نتایج آنالیز حساسیت مش قطره ۲ mm در جدول ۲ خلاصه شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، در اندازه مش برابر $\frac{d}{۸۰}$ قطر قطره، نتایج شبیه‌سازی به مقادیر ثابت میل کرده‌اند. بنابراین برای شبیه‌سازی هیدرودینامیکی اندازه مش $d/۸۰$ به کار رفته است.

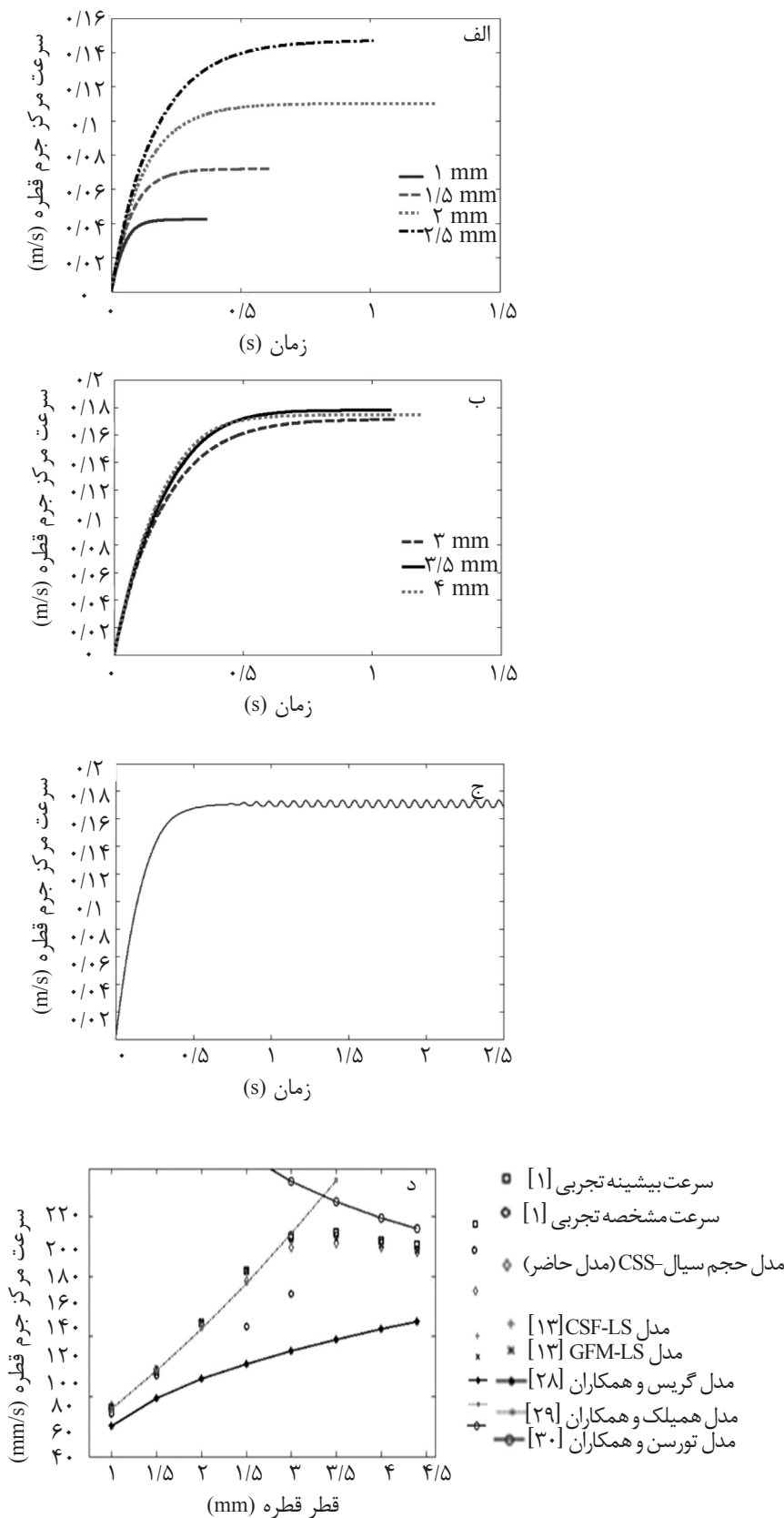
سرعت قطرات

به منظور به دست آوردن سرعت لحظه‌ای قطرات از رابطه ۱۶ استفاده شد:

$$V_{cm,y} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i V_i v_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i V_i} \quad (16)$$

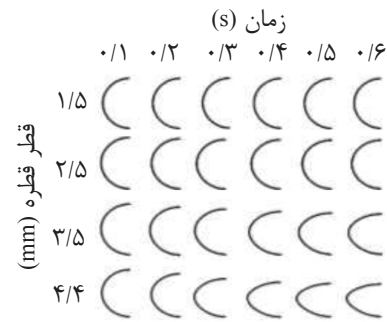
در معادله ۱۶، $V_{cm,y}$ مؤلفه y سرعت مرکز جرم، α_i کسر حجمی قطره در سلول محاسباتی i ، v_i حجم آمین سلول محاسباتی و v_i مؤلفه y سرعت فاز قطره در مرکز سلول محاسباتی i است. قطرات در سیستم استخراج مایع-مایع به سه رژیم کروی، چرخشی و نوسانی تقسیم می‌شوند. قطرات با نسبت ابعادی^۱ بیشتر از ۰/۹۵ قطرات کروی و قطرات با تغییرات نسبت ابعادی بیشتر از ۰/۲ نسبت به زمان، قطرات نوسانی نامیده می‌شود [۱۲]. قطرات مابین حدود اشاره شده قطرات چرخشی نامیده می‌شوند. سرعت‌های لحظه‌ای قطرات تولوئن در رژیم‌های کروی، چرخشی و نوسانی در شکل ۲-الف تا ج نشان داده شده است. با افزایش اندازه قطر قطره از ۱ تا ۳/۵ mm، افزایش سرعت مشاهده می‌شود ولی پس از آن کاهش می‌یابد. این به دلیل افزایش نیروی بویانسی در مقابل نیروی وزن است. ولی بعد از قطر قطرات ۳/۵ mm سرعت به دلیل افزایش سطح قطره و تمایل قطره برای تغییر شکل از کره

1. Aspect Ratio



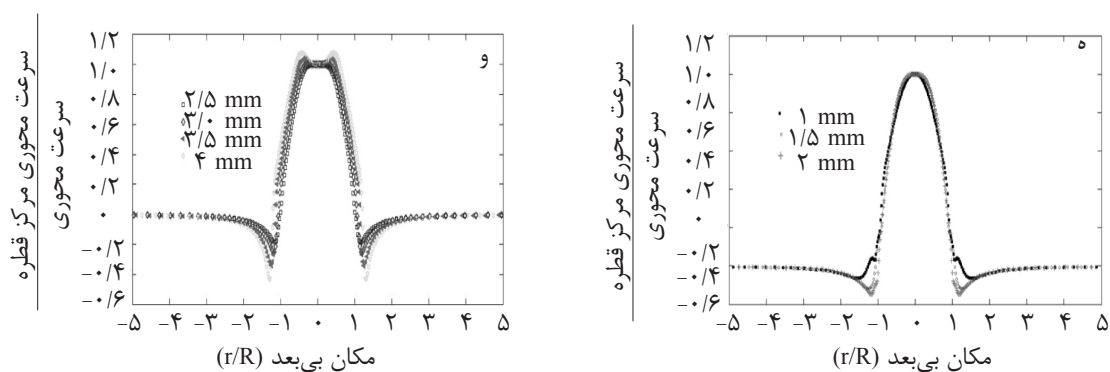
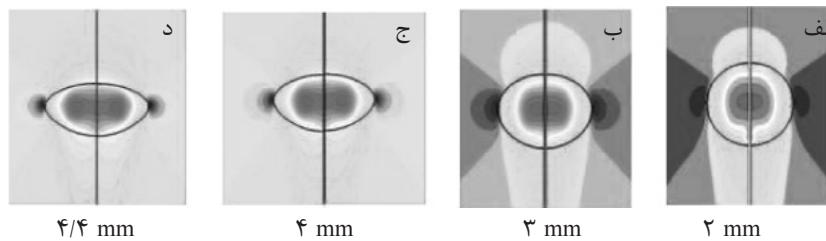
شکل ۲ سرعت لحظه‌ای قطرات تولوئن در الف) رژیم کروی، ب) چرخشی، ج) نوسانی و د) سرعت حدی قطرات تولوئن به دست آمده از شبیه‌سازی حال حاضر در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی انگبرگ و همکاران [۱۳]، نتایج تجربی وگنر و همکاران [۱] و روابط تجربی گریس [۲۸]، همپلیک [۲۹] و تورسن [۳۰]

دونقطه بیشینه در مرکز قطره دیده می‌شود (شکل ۴-ج و د). به منظور بررسی کمی توزیع سرعت محوری در اندازه مختلف قطرات، نمودارهای توزیع سرعت محوری در شکل‌های ۴-ه و ۴-و نشان داده شده است. اعداد محور عمودی، تغییرات سرعت محوری به سرعت محوری در مرکز قطره و اعداد محور افقی، فاصله از مرکز قطره را به صورت بی‌بعد نشان می‌دهد. در مرکز قطره، سرعت محوری دارای بیشترین مقدار است. با پیشروی از مرکز قطره به سمت فصل مشترک، به دلیل تنش‌های برشی اعمالی از سیال پیوسته بر فاز پراکنده، سرعت محوری کمتر می‌شود. همچنین با پیشروی از فصل مشترک به سمت آب، سرعت قطره کمتر می‌شود. سرعت صفر مربوط به نواحی دوردست قطره در سیال آب است که به دلیل بزرگ‌تر فرض کردن دامنه محاسباتی، سرعت در آن نقاط صفر شده است و از حرکت قطره تأثیر نپذیرفته‌اند.



شکل ۳ شکل قطرات تولون در رژیم‌های مختلف

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، با افزایش اندازه قطرات، شکل قطرات از کروی به سمت بیضوی میل می‌کند. شکل قطرات شبیه‌سازی در تطابق خوب با نتایج تجربی موجود در مقالات [۲۸ و ۱۲] قرار دارد. کانتورهای سرعت محوری در شکل ۴-الف نشان داده شده است. در قطرات ۲ و ۳ mm سرعت در مرکز قطره یکنواخت و دارای بیشترین مقدار است (شکل ۴-الف وب). در حالی که در قطرات ۴ و ۴/۴ mm، سرعت بیشینه در مرکز قطره غیر یکنواخت و



شکل ۴ الف تا د) کانتورهای سرعت محوری قطرات تولون در اندازه‌های مختلف، ه و و) نمودار توزیع سرعت محوری در داخل قطره در اندازه‌های مختلف

پیدا نمی‌کند و کشش سطحی شدیداً تابع غلظت می‌شود. تعداد متعددی از نواحی چرخشی در داخل قطره اتفاق می‌افتد (شکل ۶- الف تا ج) و سبب برهم ریختگی الگوی منظم جریان در داخل قطره می‌شود و نسبت به حالت الگوی چرخشی منظم در حالت بدون انتقال جرم (شکل ۵)، سبب کاهش سرعت لحظه‌ای و حدی می‌شود.

تأثیر غلظت استون در سرعت لحظه‌ای، حدی، سرعت محوری و خطوط جریان.

سرعت لحظه‌ای قطرات تولوئن ۲ mm در حالت بدون استون و همراه با استون با غلظت اولیه ۷/۵ g/L در شکل ۷ نشان داده شده است. در حالت بدون پدیده مارانگونی و فرض کشش سطحی ثابت ۰/۳۵ (N/m)، تأثیر معادله غلظت (معادله ۱۲) از طریق معادله کشش سطحی (رابطه ۱۵) بر معادله مومنتم (رابطه ۲) حذف می‌شود و معادله مومنتم مستقل از معادله غلظت حل می‌شود. بنابراین سرعت حدی قطرات تولوئن همراه استون به حالت بدون انتقال جرم در شکل ۷ میل می‌کند. بنابراین میانگین خطای سرعت حدی تا ۸۳٪ افزایش می‌یابد. با در نظر گرفتن مارانگونی میزان سرعت حدی به مقدار تجربی آن در شکل ۷ میل می‌کند و میانگین خطا تا حدود ۲٪ کاهش پیدا می‌کند [۸]. در نظر گرفتن پدیده مارانگونی (کشش سطحی با تابعیت غلظت رابطه ۱۵)، سبب به هم ریختگی الگوی جریان داخل قطره شده (شکل ۶ نسبت به شکل ۵) و تنش‌های برشی اضافی در فصل مشترک شکل می‌گیرد که منجر به ایجاد مومنتم اضافی در خلاف جهت حرکت قطره شده و سبب کاهش سرعت لحظه‌ای و حدی و در نتیجه افزایش نیروی درگ می‌شود.

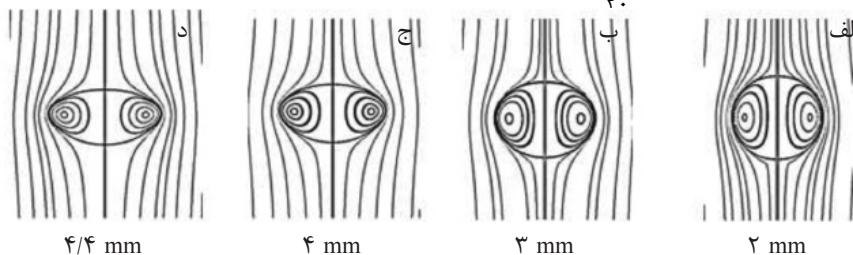
همچنین با تغییر شکل قطرات از کروی به بیضوی (به ترتیب شکل‌های ۴- ه و ۴- و)، پروفایل سرعت محوری تغییر و اندازه جریان برگشتی در اطراف فصل مشترک بیشتر می‌شود. خطوط جریان در قطرات در شکل ۵ نشان داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، جریان چرخشی داخل قطره به دلیل انتقال مومنتم فصل مشترک شکل می‌گیرد و هیچ گردابه‌ای در پشت قطره تولوئن مشاهده نمی‌شود.

شبیه‌سازی همراه انتقال جرم

در این قسمت نتایج شبیه‌سازی در حضور استون خلاصه شده است.

آنالیز حساسیت مش در حضور انتقال جرم

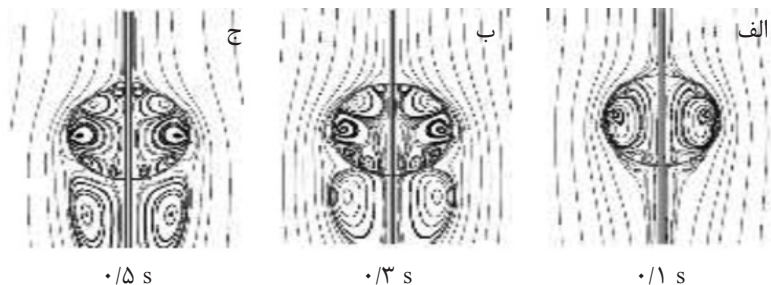
اثرات اندازه مش در سرعت حدی قطرات ۲ mm با غلظت اولیه استون ۷/۵ g/L در جدول ۳ نشان داده شده است. با اندازه مش $\frac{d}{20}$ ، اندازه انتقال جرم افزایش و مقادیر بیشتری از استون در زمان‌های اولیه خیزش قطره از سیال تولوئن به سیال آب انتقال می‌یابد، بنابراین مقادیر غلظت در معادله کشش سطحی (رابطه ۱۵) به مقادیر بسیار کوچک و ثابت میل می‌کند که برابر حالت بدون انتقال جرم است و سرعت حدی قطره به حالت بدون انتقال جرم میل می‌کند. با ریزتر کردن اندازه مش، مقادیر انتقال جرم به مقادیر واقعی میل می‌کنند و سرعت حدی نیز به مقادیر تجربی نزدیک‌تر می‌شود. در شبیه‌سازی‌های همراه انتقال جرم، $\frac{d}{100}$ به عنوان شبکه مناسب در محاسبات انتقال جرمی نیز به کار رفته است. در مورد اندازه مش $\frac{d}{100}$ ، به دلیل اینکه سرعت انتقال جرم به مقادیر واقعی میل می‌کند، غلظت اولیه قطره مانند اندازه مش $\frac{d}{20}$ ، سریعاً افت



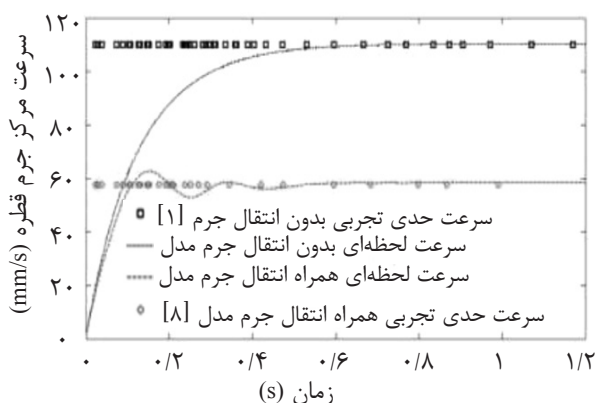
شکل ۵ خطوط جریان در قطرات با اندازه‌های مختلف.

جدول ۳ تأثیر اندازه مش در سرعت حدی قطره ۲ mm تولوئن با غلظت اولیه استون ۷/۵ g/L

اندازه مش (mm)	$\frac{d}{20}$	$\frac{d}{60}$	$\frac{d}{100}$	$\frac{d}{120}$
سرعت حدی (mm/s)	۱۰۹/۱۷	۶۵/۶۶	۵۸/۶۲	۵۸/۰۶



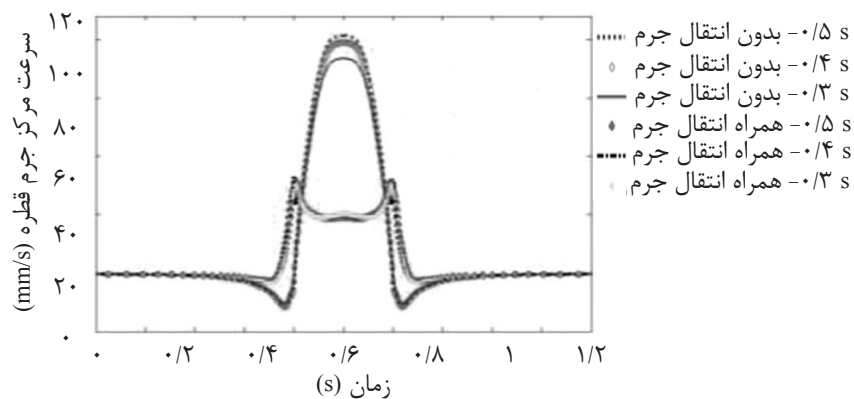
شکل ۶ الگوی جریان قطره ۲ mm در اندازه مش $\frac{d}{100}$ در زمان‌های مختلف با غلظت اولیه استون ۷/۵ g/L



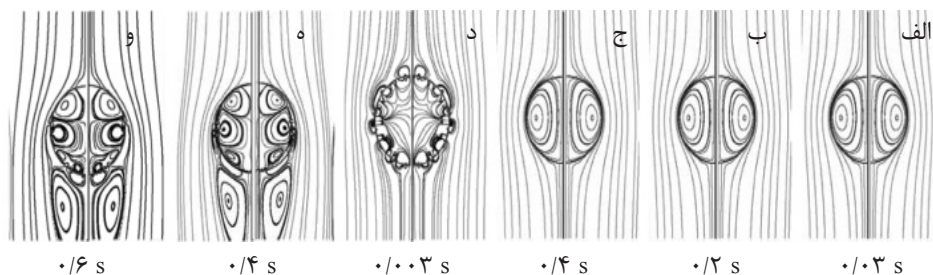
شکل ۷ تأثیر غلظت استون در سرعت لحظه‌ای و سرعت حدی قطرات تولوئن

بدون انتقال جرم در شکل ۵ می‌شود. زیرا در این حالت تأثیر معادله غلظت بر معادله مومنتم حذف می‌شود و الگوی جریان و خطوط جریان مستقل از غلظت استون شده و هیچ‌گونه گردابه‌ای در خارج از قطره تشکیل نمی‌شود شکل ۹-الف تا ج. همچنین در داخل قطره نیز همانند آنچه در حالت بدون انتقال وجود دارد (شکل ۵-الف)، الگوی جریان منظم حاکم است. در حالت با مارانگونی، همان‌طور که از شکل ۹ از قسمت (د) تا (و) مشاهده می‌شود، در زمان‌های اولیه انتقال جرم، گردابه‌های بسیار کوچک در فصل مشترک قطره سیال شکل می‌گیرد و در طول زمان تمام قطره را پوشش می‌دهند (شکل ۹-ه، و). همچنین انتقال جرم سبب ظهور گردابه‌ها در خارج قطره نیز شده است (شکل ۹-د، ه، و). کانتورهای غلظت استون در فاز پراکنده و پیوسته در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند.

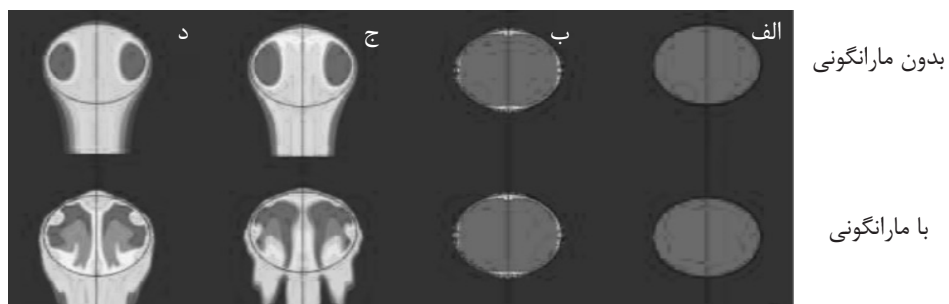
تغییرات سرعت محوری در راستای شعاع (r/R) در حالت همراه و بدون انتقال جرم در شکل ۸ نشان داده شده‌اند. همان‌طور که از شکل ۹ ملاحظه می‌شود، در حالت بدون انتقال جرم، اندازه سرعت محوری در طول زمان افزایش می‌یابد و در نهایت به حالت پایا می‌رسد. این در حالی است که در غلظت اولیه ۷/۵ g/L، سرعت‌های محوری در مقادیر نسبتاً کمتر نسبت به حالت بدون انتقال جرم واقع شده‌اند. خطوط جریان قطرات ۲ mm در حالت انتقال جرم در دو حالت همراه و بدون مارانگونی در شکل ۹ نشان داده شده است. در حالت بدون مارانگونی (شکل ۹-الف تا ج) الگوی جریان با غلظت اولیه ۷/۵ g/L با حالت بدون انتقال جرم برابر است (شکل ۵-الف). هنگامی که انتقال جرم از داخل قطره تولوئن بدون مارانگونی (بدون در نظر گرفتن تابعیت غلظت کشش سطحی) در نظر گرفته شود، الگوهای جریان در داخل و خارج قطره شبیه حالت



شکل ۸ تغییرات سرعت محوری در حالت همراه و بدون انتقال جرم در راستای شعاعی در زمان‌های مختلف



شکل ۹ خطوط جریان در قطرات ۲ mm با غلظت اولیه $7/5 \text{ g/L}$ در حالت انتقال جرم در دو حالت بدون مارانگونی (الف تا ج) و همراه مارانگونی (د تا و)



شکل ۱۰ تغییر کانتورهای غلظت استون در دو حالت بدون مارانگونی (ردیف بالا) و همراه مارانگونی (ردیف پایین) در زمان‌های الف) صفر ثانیه، ب) ۰/۰۰۳ s، ج) ۰/۴ s و د) ۰/۶ s

رژیم قطره‌کروی، چرخشی و نوسانی برای اولین بار به روش حجم سیال با مدل کشش سطحی CSS انجام شد. بعد از اعتبارسنجی دقیق مدل هیدرودینامیکی، به شبیه‌سازی انتقال جرمی برای اولین بار با روش حجم سیال-CSS پرداخته شد. مارانگونی به صورت ترم کشش سطحی با تابعیت غلظت در محاسبات وارد شد و سبب وابستگی معادله مومنتم به معادله غلظت شد. خطوط جریان، سرعت محوری، سرعت حدی و شکل قطرات گزارش گردید. نتایج زیر از شبیه‌سازی حال حاضر حاصل گردید:

۱- شبیه‌سازی حجم سیال با مدل کشش سطحی

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، در حالت بدون مارانگونی پروفایل غلظت در داخل قطره به حالت گردابه‌ای تبدیل می‌شود. در حالی که در حالت همراه مارانگونی پروفایل غلظت در داخل قطره در زمان‌های مختلف متفاوت است.

نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال جرمی قطرات بالارونده تولوئن با جز منتقل‌شونده استون در سیال ساکن آب در تحقیق حاضر مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، شبیه‌سازی هیدرودینامیکی در سه

D : ضریب نفوذ (m^2/s)

Vt : سرعت حدی (m/s)

d_p : قطر قطره (V) حجم قطره (m^3)

F_{SF} : نیروی کشش سطحی (N)

X : بردار موقعیت (m)

g : شتاب جاذبه (m/s^2)

n : بردار عمود بر سطح مشترک

N : بردار عمود بر سطح

P : فشار (kg/ms^2)

t : زمان (s)

U : بردار سرعت (m/s)

u : مؤلفه x سرعت (m/s)

V_t : سرعت حدی (m/s)

V : حجم قطره (m^3)

X : بردار موقعیت (m)

حروف یونانی

μ : ویسکوزیته دینامیک (Pa.s)

δ : ضریب کشش سطحی (N/m)

ρ : دانسیته (kg/m^3)

a : کسر حجمی

زیروندها

c : فاز پیوسته

d : فاز پراکنده

t : زیروند سرعت حدی

CSS تطابق بسیار خوب با نتایج تجربی در هر سه رژیم کروی، چرخشی و نوسانی با میانگین خطای ۳/۶۳٪ نشان داد.

۲- شبیه‌سازی هیدرودینامیکی، شروع رژیم نوسانی برای قطرات تولوئن را از قطر ۴/۴ mm نشان داد. همچنین قطر قطره ۳/۵ mm دارای بیشترین اندازه سرعت در میان قطرات شبیه‌سازی شده بود. نتایج اشاره شده با نتایج تجربی موجود در مقالات در تطابق کامل قرار داشت.

۳- با افزایش اندازه شبکه محاسباتی در حالت انتقال جرم، سرعت انتقال جرم افزایش یافت و بیشتر از مقدار واقعی شد و سرعت شبیه‌سازی به حالت بدون انتقال جرم میل کرد. بهترین اندازه شبکه برای $d/100$ به دست آمد.

۴- بدون لحاظ اثر مارانگونی، الگوی جریان در داخل و خارج قطره در حالت همراه و بدون انتقال جرم با یکدیگر برابر است. بنابراین انتقال جرم هیچ تأثیری بر هیدرودینامیک قطرات نخواهد داشت.

۵- با در نظر گرفتن مارانگونی خطای سرعت حدی در غلظت اولیه $7/5 g/L$ ، از ۸۳٪ تا حدود ۲٪ کاهش یافت و سرعت حدی قطرات ۲ mm تولوئن برابر $58 mm/s$ بر به دست آمد که در تطابق بسیار دقیق با نتایج تجربی موجود در مقالات قرار داشت.

۶- در نظر گرفتن پدیده مارانگونی سبب بهم‌ریختگی الگوی چرخشی منظم جریان در داخل قطره می‌شود. متعاقب آن نواحی چرخشی متعدد در داخل قطره و در فصل مشترک شکل می‌گیرد و سبب کاهش سرعت حدی قطره می‌شود.

علائم و نشانه‌ها

v : مؤلفه y سرعت (m/s)

مراجع

- [1]. Wegener M., Kraume M., and Paschedag A. R., "Terminal and transient drop rise velocity of single toluene droplets in water," *AIChE J.*, Vol. 56 ,No.1, pp. 2-10 ,2010.
- [2]. Engberg R. F. and Kenig E. Y., "An investigation of the influence of initial deformation on fluid dynamics of toluene droplets in water," *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 76, No. 2015, pp. 144-157 2015.
- [3]. Engberg R. F., Wegener M., and Kenig E. Y., "The impact of Marangoni convection on fluid dynamics and mass transfer at deformable single rising droplets—A numerical study," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 116, pp. 208-222, 2014.
- [4]. Engberg R. F., Wegener M. and Kenig E. Y., "The influence of Marangoni convection on fluid dynamics of oscillating single rising droplets," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 117, pp. 114-124, 2014.
- [5]. Wegener M., Grünig J., Stüber J., Paschedag A. and Kraume M., "Transient rise velocity and mass transfer of a single drop with interfacial instabilities—experimental investigations," *Chem. Eng. Sci.* ,Vol. 62, No.11, pp. 2967-2978, 2007.
- [6]. Wegener M., Eppinger T., Bäuml K., Kraume M., Paschedag A. and Bänsch E., "Transient rise velocity and mass transfer of a single drop with interfacial instabilities— numerical investigations," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 64 ,No. 23, pp. 4835- 4845,2009.
- [7]. Wegener M., "A numerical parameter study on the impact of Marangoni convection on the mass transfer at buoyancy-driven single droplets," *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 71, pp. 769-778, 2014.
- [8]. Wegener M., Fevre M., Paschedag A. and Kraume M., "Impact of Marangoni instabilities on the fluid dynamic behaviour of organic droplets," *Int. J. Heat and Mass Transfer* , Vol. 52, No. 11, pp. 2543-2551, 2009.
- [9]. Dehkordi A. M., Ghasemian S., Bastani D. and Ahmadpour N., "Model for excess mass-transfer resistance of contaminated liquid-liquid systems," *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 46, No. 5, pp. 1563-1571, 2007.
- [10]. Bertakis E., Groß S., Grande J., Fortmeier O., Reusken A. and Pfennig A., "Validated simulation of droplet sedimentation with finite-element and level-set methods," *Chem. Eng. Sci.* , Vol. 65, No. 6, pp. 2037-2051, 2010.
- [11]. Komrakova A., Eskin D. and Derksen J., "Lattice Boltzmann simulations of a single n-butanol drop rising in water," *Phys. Fluids (1994-present)*, Vol. 25, No. 4, pp. 421-422, 2013.
- [12]. Bäuml K., Wegener M., Paschedag A., and Bänsch E., "Drop rise velocities and fluid dynamic behavior in standard test systems for liquid/liquid extraction—experimental and numerical investigations," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 66, No. 3, pp. 426-439, 2011.
- [13]. Engberg R. F. and Kenig E. Y., "Numerical simulation of rising droplets in liquid-liquid systems: A comparison of continuous and sharp interfacial force models," *Int. J. Heat Fluid Flow*, Vol. 50, pp. 16-26, 2014.
- [14]. Wang J., Wang Z., Lu P., Yang C. and Mao Z. S., "Numerical simulation of the Marangoni effect on transient mass transfer from single moving deformable drops," *AIChE Journal*, Vol. 57, No. 10, pp. 2670-2683, 2011.
- [15]. Chen J., Wang Z., Yang C. and Mao Z. S., "Numerical simulation of the solute-induced marangoni effect with the semi-lagrangian advection scheme," *Chem. Eng. Tech.* , Vol. 38, No. 1, pp. 155-163, 2015.
- [16]. LiX., Zai-Sha, Mao, Weiyang Fei, "Unsteady motion of a single droplet in surfactant solutions," *Chinese j. Chem. Eng.*, Vol. 11, pp. 715-725, 2003.

- [17]. Li X., Zai-Sha Mao, Weiyang Fei, "Effects of surface-active agents on mass transfer of a solute into single buoyancy driven drops in solvent extraction systems," Chem. Eng. Sci., Vol. 58 ,pp. 3793-3806, 2003.
- [18]. Bothe D. and Fleckenstein S., "A Volume-of-fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles," Chem. Eng. Sci. , Vol. 101, pp. 283-302, 2013.
- [19]. Bothe D. and Warnecke H., "VOF-Simulation of rising air bubbles with mass transfer to the ambient liquid," in 10th Workshop on Transport Phenomena in Two-phase Flow, Bothe & Warnecke, Sunny Beach, Bulgaria, pp 61-72 ,2005.
- [20]. Bothe D., Kröger M. and Warnecke H. A., "VOF-based conservative method for the simulation of reactive mass transfer from rising bubbles," Fluid Dynamics & Materials Processing, Vol. 7, No. 3, pp. 303-316, 2011.
- [21]. Kroger M., Alke A., Bothe D. and Warnecke H., "A VOF-based approach for the simulation of reactive mass transfer from rising bubbles," Fortschritt Berichte-VDI Reihe3 Verfahrenstechnik, Vol. 883, p. 290, 2007.
- [22]. Francois M. M. and Carlson N. N., "The global embedded interface formulation for interfacial mass transfer within a Volume tracking framework," Comput. Fluids., Vol. 87, pp. 102-114, 2013.
- [23]. Ranade V. V., "Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering," Vol. 5, Elsevier, 12th September 2001.
- [24]. Lafaurie B., Nardone C., Scardovelli R., Zaleski S. and Zanetti G., "Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER," J. Comput. Phys., Vol. 113, No. 1, pp. 134-147, 1994.
- [25]. Petera J. and Weatherley L., "Modelling of mass transfer from falling droplets," Chem. Eng. Sci, Vol. 56, pp. 4929- 4947, 2001.
- [26]. Rusche H., "Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions," Imperial College London (university of London), 2003.
- [27]. Abadie T., Aubin J. and Legendre D., "On the combined effects of surface tension force calculation and in terface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks," J. Comput. Phys., Vol. 297, pp. 611-636, 2015
- [28]. Grace J., Wairegi T. and Nguyen T., "Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids," Trans. Inst. Chem. Eng ,Vol. 54, pp. 167-173, 1976.
- [29]. Hamielec A., Storey S. and Whitehead J., "Viscous flow around fluid spheres at intermediate Reynolds numbers (II)," The Canadian J. Chem. Eng., Vol. 41, pp. 246-251, 1963.
- [30]. Thorsen G., Stordalen R. and Terjesen S., "On the terminal velocity of circulating and oscillating liquid drops," Chem. Engin. Sci., Vol. 23, pp. 413-426, 1968.