

Magdalena JASIŃSKA, Mateusz MAŃKOWSKI

e-mail: Magdalena.jasińska@pw.edu.pl

Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Politechnika Warszawska, Warszawa

Badanie deformacji kroplel z wymianą masy w prostym przepływie ścinającym

Wprowadzenie

Wymiana masy pomiędzy kroplą fazy rozproszonej a fazą ciągłą w przepływie charakteryzowanym przez niskie liczby *Reynoldsa* (przepływ pełzający) ma duże znaczenie w wielu praktycznych aplikacjach, w przemyśle chemicznym, spożywczym, czy też przetwórstwa polimerów. Gdy przetwarzane są bardzo lepkie ciecze, takie jak stopione polimery czy materiały spożywcze, urządzenia służące do ich przetwarzania generują przepływy ścinające i stagnacyjne. Wpływa to na kształt kroplel, rozkład prędkości wewnątrz kroplel i w otaczającej je fazie ciągłej, rozwinięcie powierzchni wymiany masy i lokalne gradienty stężenia. To wszystko oddziałuje oczywiście na szybkość wymiany masy między kroplą, a fazą ciągłą. Warto dodać, że wymiana masy w cieczach o wysokiej lepkości charakteryzowana jest przez wysokie wartości liczby Schmidta, $Sc = \nu/D$. Oznacza to, że gradienty stężenia są znacznie wyższe od gradientów prędkości, zatem znacznie trudniej jest uzyskać zbieżność dla profili stężenia, niż profili prędkości. Znajomość profilu stężenia jest niezbędna do wyznaczenia współczynników wnikania.

Problemem samym w sobie jest obliczenie hydrodynamiki przepływu. Teoria *Hadamarda-Rybczyńskiego*, stosowana powszechnie, począwszy od prac *Levicha* [1964] do interpretacji procesu wnikania, zakłada, że kroplel pozostają kuliste, zatem badanie efektu deformacji kroplel na wymianę masy jest uzasadnione; poza tym badanie deformacji i rozpadu kroplel ma duże znaczenie dla takich dziedzin o znaczeniu praktycznym jak reologia emulsji [Bałdyga i in., 2016] czy też projektowanie mieszalników i separatorów [Grace, 1982]. Model teoretyczny wnikania masy pomiędzy deformowanymi kroplami, a fazą ciągłą zaproponowali [Favelukis i Lavrenteva, 2014].

$$\overline{ShA}^*(t^* \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{3}{2\pi(1+\kappa)}} \left[1 + \frac{4(4+31\kappa)}{315(1+\kappa)} Ca \right] Pe \quad (1)$$

Model oparto na założeniach o niskich liczbach kapilarnych Ca , bardzo niskich liczbach *Reynoldsa* Re oraz wysokich liczbach Schmidta i *Pécleta* Pe :

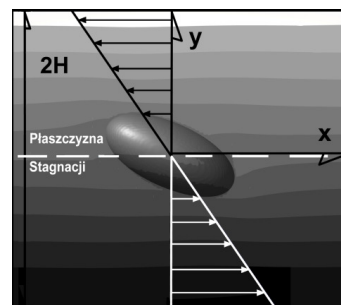
$$Ca = \frac{\mu_c \gamma R_{eq}}{\sigma}, \quad Re = \frac{\gamma R_{eq}^2}{\nu}, \quad Pe = \frac{\gamma R_{eq}^2}{D}$$

przy czym R_{eq} to promień zastępczy, odpowiadający kuli o tej samej objętości co deformowana kropla. Kolejnym parametrem determinującym przebieg procesu jest stosunek lepkości fazy rozproszonej do lepkości fazy ciągłej $\kappa = \mu_c/\mu_d$.

Modelowanie przepływu i wymiany masy

Dla bardzo niskich liczb *Reynoldsa* czyli w reżimie *Stokesa* jedynie siły lepkie i kapilarne determinują zachowanie się kroplel. W trakcie deformacji w prostym przepływie ścinającym, kulista początkowo kropla rozciąga się do postaci elipsoidy, czyli pochyla się w kierunku przepływu, a dokładniej w kierunku determinowanym przez rozciąganie kroplel; po rozłożeniu tensora gradientu prędkości na tensor deformacji i rotacji, obserwujemy rozciąganie kroplel pod kątem 45° w stosunku do kierunku przepływu. Ilustruje to rys. 1 który determinuje domenę obliczeniową.

Zastosowano następujące parametry charakteryzujące przepływ i wymianę masy: gęstość obu faz $\rho = 998,2 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, lepkość obu faz $\mu = 0,1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, napięcie powierzchniowe $\sigma = 0,0024 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$, dyfuzyjność molekularna obu faz $D = 2\cdot 10^{-9} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, prędkość górnej i dolnej ścianki to $V_l = -0,024 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ oraz $V_l = +0,024 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, dla kanału

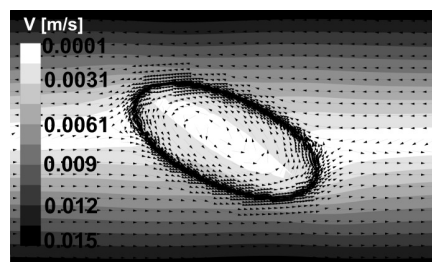


Rys. 1. Domena symulacji: dla $y = H$ i $y = -H$ brak poślizgu i stałe wartości prędkości, dla $x = 0$ i $x = L$ periodyczne warunki brzegowe, $z = 0$ i $z = W$ to płaszczyzny symetrii

o połówkowej wysokości $H = 470 \mu\text{m}$, długość kanału $L = 3000 \mu\text{m}$ szerokość kanału $W = 3000 \mu\text{m}$.

Prowadzi to do następujących liczb bezwymiarowych: $Ca = 0,3$, $Pe = 1,69110\cdot 10^3$, $Sc = \nu_c/D = 5,01\cdot 10^4$, $Re = V_l H/\nu_c = 0,113$ (dla kanału). Początkowy promień kroplel niezdeformowanej to $R_0 = 141 \mu\text{m}$. Początkowe stężenie pasywnego traseru w fazie ciągłej równe było $f = 0$, w fazie rozproszonej $f = 1$.

Obliczenia wykonano przy użyciu *Eulerian, multi-fluid VOF model* korzystając z pakietu obliczeniowego *ANSYS Fluent* dla 327 520 węzłów i 303 147 komórek; krok czasowy dla obliczeń hydrodynamiki wynikał z wartości liczby *Couranta-Friedrichsa-Lewy'ego* równej 0,2, obliczenia skalara miały stały krok czasowy 10^{-4} s .



Rys. 2. Rozkład prędkości w deformowanej kropli i jej otoczeniu

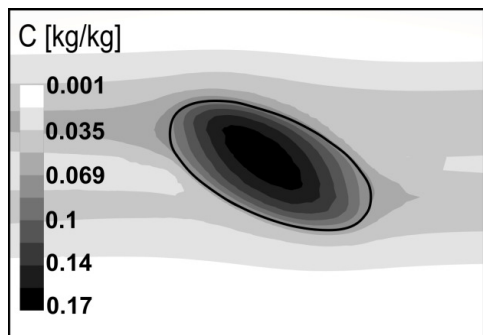
Wyniki symulacji pola prędkości zgadzają się z opublikowanymi wynikami doświadczeń [Sybillo i in., 2006; Vananroye i in., 2006], jak również z wynikami symulacji numerycznych wykonanych z wykorzystaniem metody *Lattice-Boltzmann* przedstawionych w pracy *Kamrakovej i in.* [2015].

Stoień deformacji określony za pomocą tzw. parametru deformacji *Taylor'a* [1932], który ma zastosowanie do układów nieograniczonych ściankami, gdy uformowana kropla ma kształt idealnej elipsoidy obrotowej, definiowany jest jako

$$D_T = \frac{L-B}{L+B} = \frac{16+19K}{16(1+K)} Ca \quad (2)$$

Dla układu nieograniczonego ściankami ze wzoru (2) uzyskuje się $D_T = 0,328$, w niniejszej pracy $D_T = 0,37$, co zgadza się z wynikami symulacji [Kamrakova, i in., 2015] – patrz rys. 7a i 8c w tejże pracy. Jak widać wpływ ścianek jest znaczący i obliczenia ze wzoru *Taylor'a* nie mogą być wprost stosowane dla stosunkowo dużych liczb kapilarnych oraz przy obecności ścianek.

Na rys. 3 pokazano rozkład stężeń traseru po czasie $t = 1,0 \text{ s}$.



Rys. 3. Rozkład stężeń po czasie t = 1 s

Wartości współczynników wnikania obliczano z zależn. (3) i (4) odpowiednio dla współczynników wnikania wewnątrz i na zewnątrz kropli.

$$k_{L,wew} = \frac{V_k}{A_m} \frac{C_{k_{i-1}} - C_{k_i}}{(t_i - t_{i-1})(C_{k_i} - C_{s_i})} \quad (3)$$

$$k_{L,zew} = \frac{V_w}{A_m} \frac{C_{w_i} - C_{w_{i-1}}}{(t_i - t_{i-1})(C_{s_i} - C_{w_i})} \quad (4)$$

gdzie:

V_w – objętość fazy ciągłej,

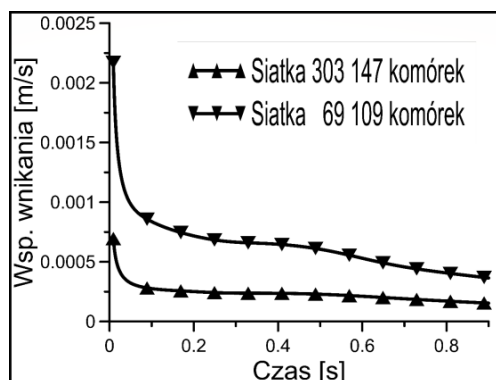
V_k – objętość kropli, A_m – powierzchnia międzyfazowa,

C_w – stężenie skalaru w fazie ciągłej,

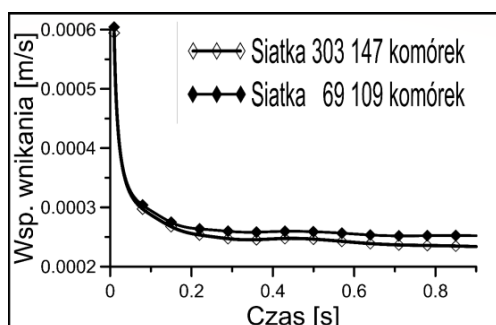
C_k – stężenie skalaru w kropli,

C_s – stężenie skalaru na powierzchni międzyfazowej.

Na rys. 4 i 5 pokazano zmienność w czasie współczynników wnikania od strony fazy ciągłej (Rys. 4) i wewnątrz kropli (Rys. 5).

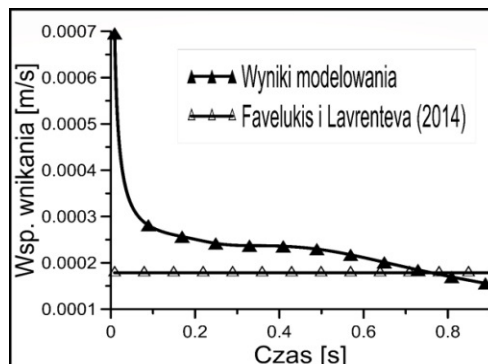


Rys. 4. Współczynnik wnikania masy po stronie fazy ciągłej



Rys. 5. Współczynnik wnikania masy wewnątrz kropli

Na rys. 4 i 5 pokazano również wpływ zbyt małej liczby komórek (69 401) na wyniki modelowania. Dla zastosowanej w pracy dyskretyzacji uzyskano brak wpływu liczby komórek na wartości współczynników wnikania.



Rys. 6. Współczynniki wnikania po stronie fazy ciągłej; porównanie z modelem Favelukisa i Lavrenteva [2014]

Na rys. 6 pokazano porównanie przewidywań modelu Favelukisa i Lavrenteva [2014] dla stanu stacjonarnego z wynikami uzyskanymi w niniejszej pracy. Po dostatecznie wysokim czasie wyniki uzyskane w tej pracy zbliżają się do wyników przewidywanych przez model Favelukisa i Lavrenteva.

Dyskusja i wnioski

Oba współczynniki wnikania od strony fazy ciągłej i wewnątrz kropli zmniejszają się w czasie, aż do osiągnięcia stanu stacjonarnego wymiany masy.

Wyniki przedstawione na rys. 5 pokazują, że wartości współczynnika wnikania wewnątrz deformowanych kropli z cyrkulacją wewnętrzną są niemal ośmiokrotnie wyższe, niż te przewidywane dla brył sztywnych.

Współczynnik wnikania masy od strony fazy ciągłej przybiera wartości bliskie tym przewidywanym przez model Favelukisa i Lavrenteva. Model ten stosowano również do opisu współczynników transportowych w przepływie burzliwym ale dla kropli o rozmiarach mniejszych od skali Kolmogorowa, gdzie podobnie jak dla prostego przepływu ścinającego w zakresie laminarnym, występuje deformacja, kontrakcja i rotacja poszczególnych elementów płynu [Bałdya i Jasińska, 2017].

LITERATURA

- Bałdya J., Jasińska M., Kowalski A. J., (2016). Effect of rheology of dense emulsions on the flow structure in agitated systems. *Chemical Engineering Research and Design*, 108, 3-12, DOI: 10.1016/j.cherd.2015.11.026
- Bałdya J., Jasińska M., (2017). Energetic efficiency of mixing and mass transfer in single phase and two phase systems. *Chem. Proc. Eng.*, 38(1), 79-96, DOI: 10.1515/cpe-2017-0007
- Favelukisa M., Lavrenteva O., (2014). Mass transfer around oblate spheroidal drops in a biaxial stretching motion. *Can. J. Chem. Eng.*, 92, 964-972, DOI 10.1002/cjce.21929
- Komrakova, A. E., Shardt, O., Eskin, Grace H.P. (1982). Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems. *Chem. Eng. Commun.*, 14, 225-277, DOI: 10.1080/00986448208911047
- D., & Derksen, J. J. (2015). Effects of dispersed phase viscosity on drop deformation and breakup in inertial shear flow. *Chem. Eng. Sci.*, 126, 150-159. DOI: 10.1016/j.ces.2014.12.012
- Levich, V.G., (1962). *Physical hydrodynamics*. Prentice-Hall, Englewood-Cliffs
- Sibillo V., Pasquariello G., Simeone M., Cristini V., Guido S., (2006). Drop deformation in microconfined shear flow. *Physical Review Letters*, 97(5), 054502-1-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.054502
- Taylor G.I., (1932). The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid. *Proc. R. Soc. A*, 138, 41-48. DOI: 10.1098/rspa.1932.0169
- Vananroye A., Van Puyvelde P., Moldenaers P., (2006). Effect of confinement on droplet breakup in sheared emulsions. *Langmuir*, 22, 3972-2974, DOI: 10.1021/la060442+

Praca została wykonana w ramach projektu finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki zgodnie z UMO-2017/27/B/ST8/01323