

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MİNİ KANALLARDA İKİ FAZLI AKIŞIN NÜMERİK
METOTLARLA MODELLENMESİ VE
DEĞERLENDİRİLMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mak.Müh. Furkan ÖZKAN

Enstitü Anabilim Dalı : MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ
Enstitü Bilim Dalı : Mak. Tasarım ve İmalat
Tez Danışmanı : Yrd.Doç.Dr. H. S. SOYHAN

Aralık 2006

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MİNİ KANALLARDA İKİ FAZLI AKIŞIN NÜMERİK
METOTLARLA MODELLENMESİ VE
DEĞERLENDİRİLMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mak.Müh. Furkan ÖZKAN

Enstitü Anabilim Dalı : MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ

Enstitü Bilim Dalı : Mak. Tasarım ve İmalat

Bu tez 28.12.2006 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

**Yrd. Doç. Dr.Hakan Serhat
SOYHAN
Jüri Başkanı**

**Prof. Dr. Zafer GÜL
Üye**

**Yrd.Doç.Dr. İmdat TAYMAZ
Üye**

ÖNSÖZ

Danışmanım Yrd. Doç. Dr. Hakan Serhad SOYHAN'a, bu tezin gerçekleşmesini sağlayan projede (ERASMUS AB destekli) bana çalışma fırsatı verdiği için ve Almanya'da Karlsruhe Araştırma Merkezinde Reaktör Emniyeti Enstitüsündeki yardımcı danışmanım Dr. Martin Wörner'a, bu çalışmada karşılaştığım tüm problemlerde bana yardımcı olduğu için ve bu projede çalışmaya beni cesaretlendirdiği için, Karlsruhe Araştırma Merkezinde Mikro Proses Enstitüsündeki Kimya Mühendisi Achim Wenka'ya, FLUENT ile ilgili yaptığı simülasyonlar için ve son olarak Reaktör Emniyeti Enstitüsündeki Dr. Michael Bötcher ve Mr. Sergev Gordeev'e bana sırasıyla Ansys CFX, STAR-CD yazılımları hakkında verdikleri her türlü yardımları için, bu çalışmamı sunmadan önce kendilerine çok teşekkür ediyorum. Umarım bu çalışma Türkiye'de bu konu ile ilgili çalışmalar için bir başlangıç olur.

Makine Mühendisi
Furkan ÖZKAN

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	ix
TABLolar LİSTESİ.....	xii
ÖZET.....	xiii
SUMMARY.....	xiv
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ VE ÇOK FAZLI AKIŞLARDA TEMEL KAVRAMLAR.....	6
2.1. Akışkanlar Dinamiği.....	6
2.1.1. Doğal akış ve temel eşitlikler.....	6
2.1.2. Akışkanların kinematiği.....	8
2.1.3. Korunum eşitlikleri.....	10
2.1.3.1. Matematiksel notasyonlar.....	10
2.1.3.2. Matematiksel denklemler.....	12
2.2. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği Metodu.....	17
2.2.1. Giriş.....	17
2.2.2. Temel denklemler (Navier-Stokes denklemi)....	21
2.2.3. EksPLICIT ve implicit metotlar.....	24
2.2.4. Çözüm algoritmaları.....	27
2.2.5. Serbest yüzeyler için metotlar.....	27

2.2.5.1. VOF metodu.....	28
2.2.5.2. Level-Set metodu.....	29
2.2.5.3. Front Tracking metot.....	30
2.2.6. Eş (Colocated) ve Kayık(Staggered) ağ düzenleme metotları.....	31
2.3. Çok Fazlı Akışın Temelleri.....	32
2.3.1. Giriş.....	32
2.3.2. Akış yolları tanımlamaları.....	33
2.3.2.1. Hava kabarcığı akışı.....	34
2.3.3. Çok fazlı akışlarda kuvvetler.....	35
2.3.4. Boyutsuz sayılar.....	36
2.3.5. Hava kabarcığının serbest yükselişi.....	38
BÖLÜM 3.	
NÜMERİK TEST DURUMU.....	40
3.1. Hava Kabarcığı Dizisi.....	40
3.2. Nümerik Model.....	41
3.3. Yazılımlar.....	45
3.3.1. TURBIT-VOF yazılımı.....	45
3.3.2. STAR-CD yazılımı.....	46
3.3.3. Ansys CFX yazılımı.....	47
3.3.4. FLUENT yazılımı.....	49
BÖLÜM 4.	
HESAPLAMALAR.....	52
4.1. Giriş.....	52
4.2.Sadece Kaldırma Kuvvetinin Etkisiyle Hava Kabarcığının Hareketi.....	55
4.3.Kaldırma Kuvveti ve Harici bir Kuvvet Etkisiyle Hava Kabarcığının Hareketi.....	64

BÖLÜM 5.	
SONUÇLAR	72
KAYNAKLAR.....	75
EKLER.....	79
ÖZGEÇMİŞ.....	139

SİMGELER

a_i	:Ara yüzey alan konsantrasyonu	1/m
A	:Sıvının alanı	m^2
H	:Mesafe	m
Ca	:Kılcallık sayısı, $Ca \equiv \mu_L U_B / \sigma$	-
D_B	:Hava Kabarcığı çapı	m
D_h	:Hidrolik Çap	m
E	:Şekil değiştirme hızı tensörü	
F	:Kuvvet	N
F_I	:Atalet Kuvveti $F_I = \frac{V\rho U^2}{L}$	N
F_G	:Yerçekimi Kuvveti $F_G = Vg\rho$	N
F_B	:Kaldırma kuvveti $F_B = Vg\Delta\rho$	N
F_P	:Basınç Kuvveti $F_P = A\Delta p$	N
F_V	:Viskoz kuvveti $F_V = \frac{A\mu U}{L}$	N
F_L	:Yüzey kuvveti $F_L = C\sigma$	N
\hat{e}_y	:Y yönündeki birim vektör	-
f	:Sıvı hacim kesri	-
\mathbf{f}_{pd}	:Harici basınç düşüşüne bağlı hacimsel kuvvet	N/m^3
\mathbf{f}_σ	:Yüzey gerilim kuvveti	N/m^3
g	:Yerçekimsel hızlanma	m/s^2
\mathbf{g}	:Yerçekimi vektörü	m/s^2
h	:Ağ hücre genişliği	m
L_x, L_y, L_z	:Hesaplama Alanı uzunluğu	m
$\hat{\mathbf{n}}_i$:Sıvıdaki ara yüzeyde belirlenmiş birim normal vektör	-

N_i, N_j, N_k	:Ağ hücrelerinin sayısı	-
N_t	:Zaman adımları sayısı	-
p	:Basınç	Pa
P	:Periyodik basınç kısmı	Pa
P	:Akış yüzeyinden içeri doğru etkileyen basınç ifadesi	Pa
$\Delta\tilde{p}$: L_y boyunca hidrostatik olmayan basınç düşüşü	Pa
Re_B	:Hava Kabarcığı Reynolds sayısı,	-
t	:Zaman	s
Δt	:Zaman adım genişliği	s
\mathbf{u}	:Karakteristik Hız (u, v, w)	m/s
U	:Sıvının hızı	m/s
U_B	:Hava Kabarcığının hızı	m/s
U_L	:Birim hücredeki ortalama sıvı hızı	m/s
U_{slug}	:Sıvı ara bölme akışındaki eksenel ortalama hız	m/s
U_{wall}	:FLUENT hesaplamalarındaki kenar duvarların aşağı yönlü hızı	m/s
\mathbf{v}_m	:Merkez kütle hızı	m/s
V_G	:Hesaplama alanındaki gaz fazın hacmi	m^3
x, y, z	:Kartezyen koordinatlar	m
\mathbf{x}	:Konum vektörü $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$	m
α	:Yerel fazın hacim kesri	-
ε	:Hesaplama Alanındaki Ortalama gaz hacmi kesri	-
κ	:Ara yüzey eğrisi (Interface curvature)	1/m
μ	:Dinamik viskozite	Pa s
λ	:Hacimsel deformasyon gerilimleriyle ilgili viskozite	Pa s
ν	:Kinematik viskozite	St
ρ	:Yoğunluk	kg/m^3
σ	:Yüzey gerilim katsayısı	N/m
σ	:Normal Gerilme	N/m^2
τ	:Viskoz Kayma gerilmeleri (τ_{ij})	N/m^2

Alt İndisler

B :Hava Kabarcığı

G :Gaz fazı

i :Ara yüzey

i,j :Koordinat indisleri

L :Sıvı fazı

m :Karışım değeri

Σ :Toplam

PIV :Partikül Görüntü Hızı

HAD :Hesaplmalı Akışkanlar Dinamiği

ECORA :Reaktör Emniyeti Analizleri için Hesaplmalı akışkanlar Dinamiği
Metotlarının Değerlendirilmesi

RTT :Reynolds Transport Teoremi

SEM :Sonlu Elemanlar Metodu

SHM :Sonlu Hacimler Metodu

SIMPLE :Basınç İlişkili Denklemler için Yarı Implicit Metotlar

PISO :Teknik ayırmalı Basınç Implicit

VOF :Akışkan Hacim

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. Sütun Reaktörler.....	2
Şekil 1.2. Thulasidas'ın yapmış olduğu deneyin şematik gösterimi.....	3
Şekil 2.1. Kayma gerilmesine maruz kalan bir akışın deformasyonu.....	6
Şekil 2.2. Kayma diyagramları.....	8
Şekil 2.3. a) Kesişim Çizgisi b)Yörünge Çizgisi.....	10
Şekil 2.4. Akışkan elemanın içinde ve dışında kütle korunumu.....	12
Şekil 2.5. Yüzey Gerilmeleri.....	15
Şekil 2.6. Eş ağ (Colocated Grid) Düzeni.....	31
Şekil 2.7. Eş ağ (Staggered Grid) Düzeni	31
Şekil 2.8. Düşey yöndeki genel gaz-sıvı akış rejimleri.....	33
Şekil 2.9. Yatay yöndeki genel gaz-sıvı akış rejimleri.....	34
Şekil 2.10. 20 °C sudaki izole edilmiş hava kabarcıklarının artan son hızı.....	39
Şekil 3.1. Koordinat sisteminin Görünümü, Hesaplama Alanı, Sınır Şartları (boundary conditions (b.c.)) ve TURBIT-VOF, STAR-CD ve CFX simülasyonlarında kullanılan başlangıç hava kabarcığı şekli. Nümerik boyut değerleri $L_x = L_y = L_z = 2$ mm.....	42
Şekil 3.2. Hesaplama alanı taslağı, Sınır şartları (boundary conditions (b.c.)) ve FLUENT'deki simülasyonlarda kullanılan hava kabarcığı dağılımı.....	51
Şekil 4.1. TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı (test koşulları BH ($\Delta\tilde{p} = 0$ Pa , $\varepsilon = 33\%$) için).....	56
Şekil 4.2. BH ($\Delta\tilde{p} = 0$ Pa , $\varepsilon = 33\%$) şartları için hesaplanan kararlı hava kabarcığının yandan görünüşü a) TURBIT-VOF (durum TBH64F), b) STAR-CD (durum SBH64F), c) FLUENT (durum FBH64Q-G) ve d) CFX (durum CBH48Q-T).FLUENT için ortadaki hava kabarcığı gösterilmiştir.....	58

Şekil 4.3. TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı test koşulları BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) ve BL ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 30\%$) grid yapısı $48 \times 48 \times 48$. STAR-CD ve TURBIT-VOF için kullanılan zaman adımı genişliği $0.757 \mu\text{s}$ CFX için ise $7.57 \mu\text{s}$ dir.....	59
Şekil 4.4. STAR-CD ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı test koşulları ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 30\%$) üç farklı grid yapısı üzerinde.....	60
Şekil 4.5. CFX ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı üç farklı zaman adımı genişliği için test durumu BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) için.	62
Şekil 4.6. Kaldırma kuvveti akışı için hacim kesir denkleminin çözümünde FLUENT de kullanılan farklı çözüm şemalarının, hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızına etkisi.....	63
Şekil 4.7. Kaldırma kuvveti akışı durumunda farklı VOF şemalarıyla elde edilen hava kabarcığı şekli için FLUENT karşılaştırma sonuçları...	64
Şekil 4.8. TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı, test durumu PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$).....	65
Şekil 4.9. PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) şartları için hesaplanan kararlı hava kabarcığının yandan görünüşü a) TURBIT-VOF (TPH64F), b) STAR-CD (SPH64Q), c) FLUENT (FPH64Q-G) ve d) CFX (CPH48Q-T). FLUENT simülasyonu için sadece ortadaki hava kabarcığı gösterilmiştir.....	67
Şekil 4.10. STAR-CD ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı hacim kesir denklemi ve momentum denklemlerinde kullanılan farklı şemalar ve farklı zaman adım genişliği PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) durumu için gösterimi.....	68

Şekil 4.11. Kaldırma kuvveti ve basınçla akan akış için hacim kesir denkleminin çözümünde FLUENT de kullanılan farklı çözüm şemalarının hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızına etkisi.....	69
Şekil 4.12. Kaldırma kuvveti ve basınç etkisiyle akan akış durumunda farklı VOF şemalarıyla elde edilen hava kabarcığı şekli için FLUENT karşılaştırma sonuçları.....	70

TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1. Yararlı Matematik ifadeler.....	10
Tablo 2.2. Boyutsuz Sayılar.....	37
Ek Tablo.I Farklı yazılımlarla gerçekleştirilen simülasyonlara bir bakış. <i>U_B, U_L ve D_B son hızlardır. D_B CFX ve STAR-CD için t=0.03 s için verilmiştir.....</i>	80

ÖZET

Anahtar Kelimeler: Mikro Proses Mühendisliği; Hesaplmalı Akışkanlar Dinamiği; Hava Kabarcığı Dizisi; Modelleme; İki Fazlı Akışlar; Serbest Yüzey Simülasyonları (VOF)

Gaz-sıvı veya sıvı-sıvı akışkanlarının deformasyon yüzeylerinin dinamik değişimlerini detaylı bir şekilde tanımlayan Hesaplmalı Akışkan Dinamiği(HAD) yazılımları, kompakt sistem kavramı altında dar kanallardaki çok akışkanlı akışın özelliklerini araştıran önemli bir araç olabilir. Bu akış tipleri için bilinen HAD yazılımlarının performanslarını araştırmak için, bu çalışmada dikey bir kare mini kanalın içinde aynı yönlü hava kabarcığı dizisi akışı için bir sayısal uygulama gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalar “akışkan hacmi” (VOF) tabanlıdır. VOF metodunda likidin hacimsel kesri için hareket denklemi ya yüzeyin geometrik yenilenme (geometrical reconstruction) metodu yoluyla ya da onun yerine yüksek derece fark şemaları metotları (higher order difference schemes) kullanılarak çözülür. Yazılım karşılaştırmalarında FLUENT, ANSYS-CFX ve STAR –CD ticari programlar olarak ve ticari olmayan TURBIT-VOF kullanılmıştır. Sonuçlar iki ana durumda sunulmuştur. İlkinde akış sadece kaldırma kuvveti etkisindeyken, ikinci durumda akış harici bir basınç gradyanının etkisiyle oluşan ek bir kuvvet tesirindedir. Yazılımların karşılaştırılmasının sonuçlarında VOF metodu için şu söylenebilir; (ara) yüzey yenilenme ile VOF metodu fiziksel olarak tutarlı ve kusursuz sonuçlara önderlik ederken, bunun yanında hacim kesir eşitliği için kullanılan fark şemaları bazı farklılıkları gösterir.

NUMERICAL MODELING and EVALUATION of TWO PHASE FLOW in MINI-CHANNELS

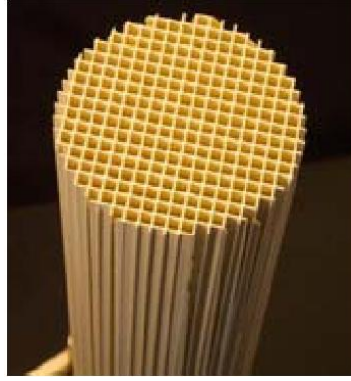
SUMMARY

Key Words: Micro process engineering; code-to-code comparison; volume-of-fluid method; Modeling, bubble-train flow; Taylor flow; square channel

Computational fluid dynamics codes that are able to describe in detail the dynamic evolution of the deformable interface in gas-liquid or liquid-liquid flows may be a valuable tool to explore the potential of multi-fluid flow in narrow channels for process intensification. In the present paper a computational exercise for co-current bubble-train flow in a square vertical mini-channel is performed to investigate the performance of well-known CFD codes for this type of flows. The computations are based on the volume-of-fluid method where the transport equation for the liquid volumetric fraction is solved either by methods involving a geometrical reconstruction of the interface, or by methods that use higher order difference schemes instead. The codes contributing to the present code-to-code comparison are an in-house code and the commercial CFD packages CFX, FLUENT and STAR-CD. Results are presented for two basic cases. In the first one, the flow is driven by buoyancy only, while in the second case the flow is additionally forced by an external pressure gradient. The results of the code-to-code comparison show that only the volume-of-fluid method with interface reconstruction leads to physically sound and consistent results whereas the use of difference schemes for the volume fraction equation shows some deficiencies.

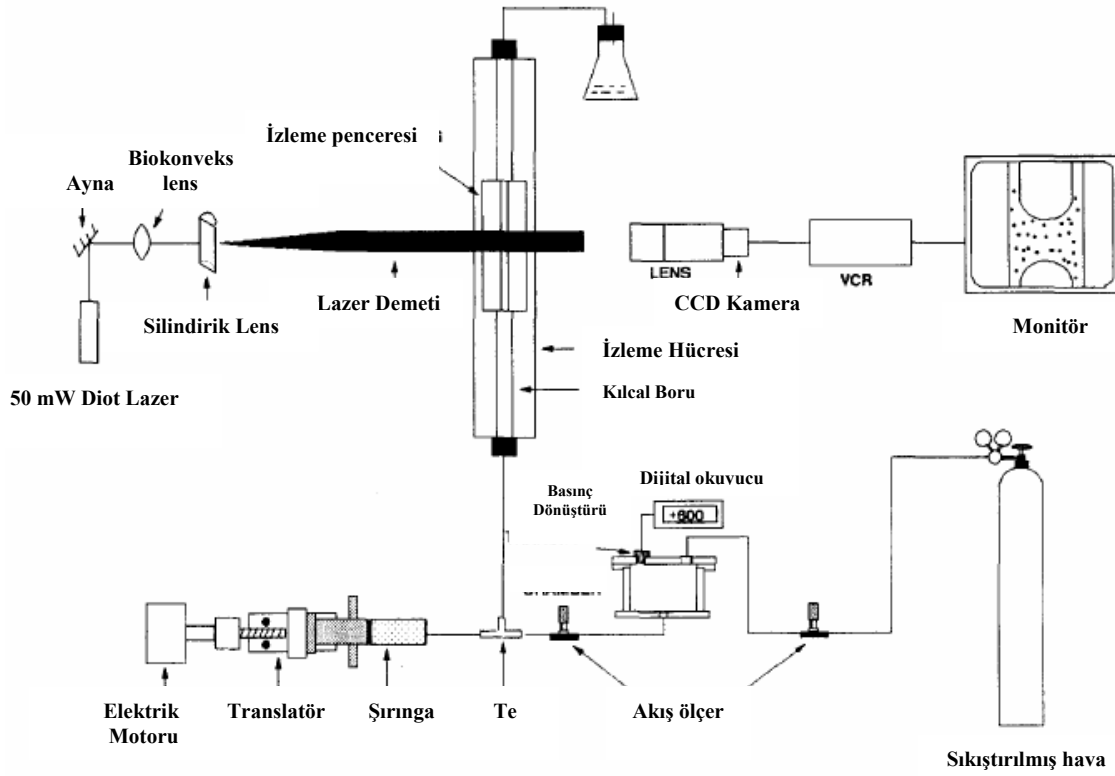
BÖLÜM 1. GİRİŞ

Kompakt sistem kavramı, içten yanmalı motorlardaki yakıt hücrelerinde otomotiv emisyonları ve yakıt sürecinde, petrokimya endüstrisindeki buhar gazı yağı kesrinin kükürdünü giderilmesi gibi endüstriyel uygulamalarda ve mühendislikte güncel bir araştırma konusudur. Tsouris ve Porcelli'e [1] göre kompakt sistemin tanımı; büyük, pahalı, enerji gereksinimli ekipmanlarla daha küçük, ucuz ve daha etkili sistemlerin veya az bir aygıtla (tek bir aparatla) çok işi yapabilen sistemlerle yer değiştirmesi olarak tanımlanır. Kompakt sistemler minyatürleşme ile ele alınabilir [2-5]. Tahmin edilebileceği gibi kompakt sistemler bir gaz akışı ve bir sıvı akışı veya iki karışmaz sıvı akışı gibi çoklu fazlar içerir. Küçük boyutlarda çok fazlı akışlar büyük özel ara yüzey alanlarıyla, ince sıvı filmleri ve kısa difüzyon uzunluğuyla ilişkilidir. Bu nedenle ilişkisi bulunan durumların hepsinin sonucu gerekli sistemlerde yüksek kütle transferi oranlarına sebebiyet verir. Dar kanallarda iki fazlı akışın bulunduğu aygıtlar Mikro Hava Kabarcığı Kolonu(micro bubble columns) [6,7], Mikro Düşüş Film Reaktörü (micro falling film reactors) [6], Mikro Akışkan Ağları (micro-fluidic channel Networks) [8] ve Sütun Reaktörlerinde (monolith reactors) [9] örnek olarak gösterilebilir. Sütun reaktörler hem araçlarda hem de büyük elektrik santrallerinde yanma işleminden egzoz gazlarının temizlenmesi için geliştirilmiştir. Bununla birlikte kimyasal proses ve arıtma endüstrisinde, yeni reaktör uygulamaları için sütun (monolith) yapılarını kullanmamaya yönelik artan bir ilgi vardır [10]. Tipik bir sütun reaktör Şekil 1.1'de gösterilmiştir.



Şekil 1.1 Sütun Reaktör (Resim TuDelft Üniversitesi)

Kompakt sistem fikri, optimal fizikokimya durumlarını gerekli sistem için sağlar. Bu ise yerel hidrodinamik, ısı geçişi ve kütle transferi olaylarının bilinmesini gerektirir. Fakat çözülmesi gerekli her iki fazda, yerel ve zaman bilgilerini deneysel yöntemlerle elde etmek küçük boyutlardan dolayı zordur. Örneğin Thulasidas ve arkadaşları (1995-1997) silikon yağın içinden geçen hava kabarcığı dizisini Şekil 1.2’ de görülen deney düzeneği ile araştırmışlardır. Bu tür deney düzeneklerinde hassas tahribatsız ölçüm teknikleri kullanılır. Boyutların küçüklüğünden ötürü hava kabarcığının şeklini ve akış haritalarının belirlenmesi sınırlıdır. Son zamanlarda, çok sayıda mikro partikül resim hız ölçer ve üç boyutlu mikro PIV (Particul Image Velocity) metodunda gelişmeler olmasına karşın iki fazlı akışkanlar için üç boyutlu ve her iki faz için yerel hızları hakkında bilgi verebilen teknik ve ölçüm metodu yoktur [11].



Şekil 1.2 Thulasidas'ın yapmış olduğu deneyin şematik gösterimi (Resim Referans T. C. Thulasidas, M. A. Abraham and R. L. Cerro* Chemical Engineering Department, The University of Tulsa, Tulsa, OK 74104-3189, U.S.A.(1997))

Gerekli transport (hareket) olgusunu anlaşılması için alternatif bir yol ise bu açıdan hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD)'dir. Tek fazlı akışkan için, belirli bir seviyeye gelen CFX, FLUENT ve STAR-CD ticari HAD yazılımlarında uygun metotlar bulunurken, aynı durumun çözümün bir kısmı olduğu deformasyon ara yüzeyin şekli hakkında bilgi gereken yerlerdeki iki fazlı akışkanlarda geçerli değildir. Bunun sebebi nümerik metotların bazı yetersizlikleri barındırmasındadır. Bu zorluklardan bir bölümü ara yüzeydeki süreksiz yoğunluk ve viskozite ile ilgilidir. Diğer zorluk ise ara yüzeyde tekil olan yüzey gerilim kuvvetinin nümerik tanımı altında yatar. Sonlu Hacimler yazılımlarında yapay veya sahte akımlara neden olan ve literatürde bilinen Brackbill (ve arkadaşları) sürekli yüzey kuvvet modeli şu an standarttır [12]. Eksik ara yüzey gerilim kuvvetinin tanımından kaynaklanan bu fiziksel olmayan olgu özellikle minyatür aygıtlar için büyük sorun olur. Çünkü yüzey gerilim kuvvetinin birim büyüklüğü, uzunluk ölçüsü kıaldıkça artar. Yani aralarında

ters orantı vardır. Geçmişte farklı metotlar deformasyon ara yüzeyli iki akışkan akışı hesaplamaları için geliştirilmiştir. En geniş çapta kullanılanlar akışkan hacim metodu (VOF) [13], adım belirleme (level-set) [14] ve cephe izleme (front tracking) [15] metotlarıdır. Bu metotlar hakkında bilgi Bölüm 2.2.5 de verilecektir. Akademik alanda adım belirleme metodu ve cephe izleme metodu geniş çapta kullanılırken FLUENT ve STAR-CD yazılımlarında sadece akışkan hacim metodu mevcuttur. CFX yazılımında ise direk olarak akışkan hacim metodu (VOF) yerine homojen model altında kullanılan yüksek dereceli şemaların kullanılması ile akışkan hacim metodu kabul edilebilecek bir opsiyon sunar. Küçük kanallardaki ara yüzü iki akışkan akış uygulamaları için ticari HAD yazılımlarının güvenilir uygulamalarını kuvvetlendirmek amacıyla test veya değerlendirme deney problemleriyle HAD yazılımlarındaki akışkan hacim metodunun yeteneklerini araştırmak bu nedenle faydalıdır. Literatürde benzer (Evaluation of computational fluid dynamic methods for reactor safety analysis) ECORA projesi mevcuttur. Projenin gayesi reaktör emniyeti analizleri için HAD yazılımlarının yeterliliklerinin değerlendirmektir [16]. Fakat doğal olarak bu proje büyük boyutlardaki akışkanlara tahsis edilmişti ve ayrıca akışkan hacim metodunun yeterliliği araştırılmadı.

Bu çalışmada farklı akışkan hacim metodunun farklı değişenleri kullanılarak 2 mm x 2 mm yatay kesit bir kare kanalındaki aynı yönlü düşey hava kabarcığı dizisi akışı için belirli test durum hesaplamaları gerçekleştirildi. Bu test koşulları literatürde hem deneysel hem de matematik verileri olan çalışmaların yaklaşımlarıyla paraleldir. Hava kabarcığı akışı için CFX, STAR-CD ve FLUENT yazılımlarıyla elde edilen sonuçlar TURBIT-VOF yazılımıyla elde edilen direkt nümerik simülasyonlarının sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. İkinci bölümde temel denklemlerden ve akışkan hacim metodu için gerekli nümerik kavramlardan son olarak çok fazlı akışkan terminolojisi hakkında bilgi verilecektir. Çalışmanın üçüncü bölümünde test durumunun ve kullanılan farklı bilgisayar yazılımlarının tanımı verilecektir. Dördüncü kısımda simülasyon hesaplamaları sunulacak ve kritik bir tartışma bulunacaktır. Beşinci kısımda bu çalışma, sonuç ile tamamlanmış olacaktır.

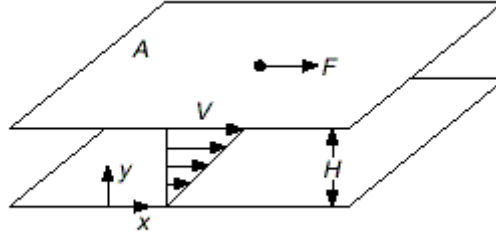
Ek 1'deki Tablo I.'de yapılan tüm çalıřmaları ve bazı sonuçları ihtiva etmektedir. Ek 2'de, tezde Türkçe olarak kullanılan bazı kelimelerin orijinal ifadeleri mevcuttur. Ek 3'de ise bu çalıřmadan çıkan bir makale orijinal haliyle okuyuculara sunulmuřtur.

BÖLÜM 2. AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ VE ÇOK FAZLI AKIŞLARDA TEMEL KAVRAMLAR

2.1. Akışkanlar Dinamiği

2.1.1. Doğal akış ve temel eşitlikler

Sıvılarda şekil değişimi (deformasyon) ve gerilim için gerekli tanımlamaları klasik olarak iki düzlemin arasından geçen bir sıvının fiziksel özelliklerini aşağıdaki şekil yardımıyla tanımlayabiliriz.



Şekil 2.1. Kayma gerilmesine maruz kalan bir akışın deformasyonu

Şekil 2.1. de görüldüğü gibi bir sıvı alanı A olan iki büyük paralel plaka ile sınırlanmış ve küçük bir H mesafesiyle ayrılmıştır. Alt plaka sabitlenmiştir. Üst plaka F kuvvetinin etkisiyle, U hızına sahip bir şekilde hareket etmektedir. Kuvvet uygulandıkça sıvı şekil değiştirmeye devam eder.

Kuvvet plakanın alanıyla direkt olarak orantılıdır. Kayma gerilmesi;

$$\tau = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

Lineer akış profil hızı u , kaymama koşulu ve alt plakanın hızı sıfır ve üst plakanın hızı U olmak şartıyla

$$u = \frac{U_y}{H} \quad (2.2)$$

ile temsil edilir.

Hız gradyanı veya lineer deformasyon tensörü veya şekil değiştirme hızı tensörü

$$e = \frac{du}{dy} \quad (2.3)$$

bu akış için kayma oranı olarak ifade edilebilir. Şekil 2.1 basit bir kayma akışı için temsil etmektedir.

Viskozite, kayma gerilmesinin kayma oranına oranıdır. Bir akışkanın viskozitesi ne kadar yüksekse o akışkan akmaya karşı o kadar dirençlidir.

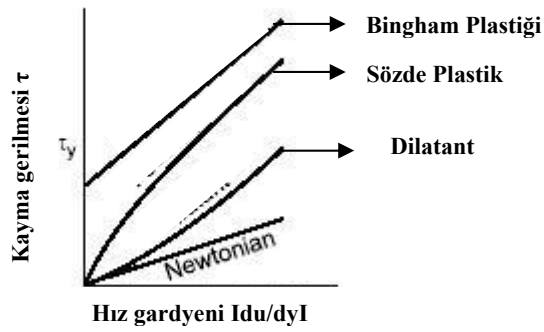
$$\mu = \frac{\tau}{e} \quad (2.4)$$

IS biriminde kg/ms ya da Pa. s olarak ifade edilir.

Kinematik viskozite $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ fiziksel olarak viskozitenin yoğunluğa oranı olarak ifade edilir. Birimi stokes'dur. (S veya St)

Genellikle akış yolları Şekil 2.1'de görüldüğünden daha karmaşıktır ve bu konuyu araştıran bilime reoloji bilimi adı verilir. Reolojinin bir amacı deformasyon oranlarından hesaplanabilen gerilmeler yoluyla, temel ve esas ana bir eşitlik elde etmektir [17]. Akış bilimi akışkan hareketlerini genel anlamda aşağıdaki gibi ayırır.

1. Newtonian akışları (akışkanın viskozitesi sabit)
2. Newtonian olmayan akışlar (akış viskozitesi akış da meydana gelen gerilmelere bağlıdır). Bunu alt kümelerine ayırırsak;
 - Genelleştirilmiş Newtonian olmayan akışlar (saf viskoz akışlar)
 - Viskoelastik akışlar



Şekil 2.2. Kayma diyagramları (Referans [17])

Şekil 2.2.'de de görüldüğü üzere Newtonian akışları lineerdir yani sabit viskoziteye sahiptir. Artan kayma gerilmesiyle aynı oranda kayma oranı da artar, fakat Newtonian akışı olmayanlarda durum bu şekilde gerçekleşmez.

Bu çalışmadaki akışkan, Newtonian akışkanları kanunlarına göre çözülmüştür. Newtonian akışlarında viskozite kayma oranından bağımsızdır. Newtonian akışları akış mühendisliğinde en büyük sınıftır ve büyük öneme sahiptir [17]. Gazlar ve düşük molekül ağırlıklı sıvılar genellikle Newtonian akışıdır. Newtonianun viskozite kanunu ile viskozitenin sabit olduğu denklem 2.1'de bir düzenleme yapılırsa,

$$\tau = \mu e = \mu \frac{du}{dy} \quad (2.5)$$

eşitliğine döner.

2.1.2. Akışkanların kinematiği

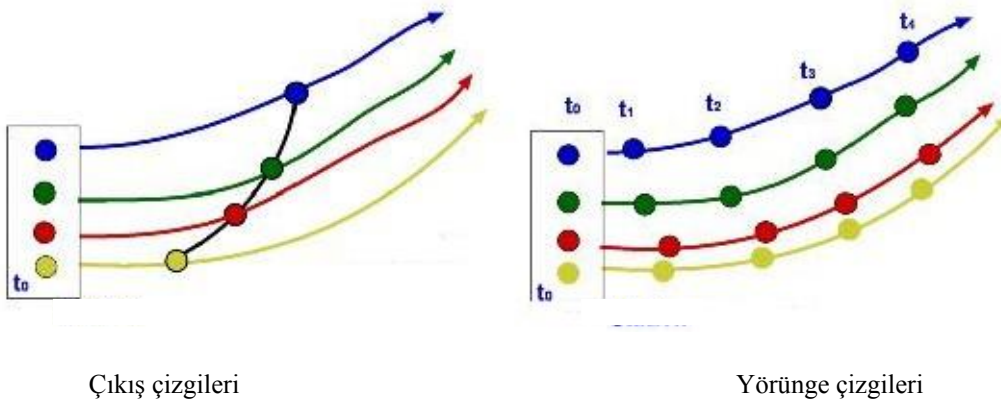
Kinematik terimi akışın hareketi ve deformasyonunu tanımlayan bir değerdir. Deformasyonun oranı, akışkanın içindeki hızın dağılımına bağlıdır. Akış hızı v , bir vektör değeridir. Kartezyen koordinat sistemine göre v_x , v_y , v_z bileşenleridir. Hız vektörü, uzaysal pozisyonun ve zamanın bir fonksiyonudur. Kararlı akış, hızın zamandan bağımsız olduğu durumdur, kararsız akışta ise hız zamanla değişir.

Sıvı akışlar genellikle sıkıştırılamaz sıvı olarak ele alınırlar. Sıkıştırılabilir akışlar (gazlar gibi) şayet basınç ve/veya sıcaklık değişimleri yeteri kadar küçükse ve yoğunluk değişimleri önemsizse, sıkıştırılamaz akışlar gibi davranabilir.

Akışkanların içinde meydana gelen akış yolları vardır. Bu ifadeler akış hakkında görsel olarak bize bilgi verirler. Fiziksel tanımlamalarına kısaca bu kısımda değinilecektir. Akış numunesi içinde bir anlayış sağlayan bu eğriler akış alanlarının içinde meydana gelirler. Akım çizgileri (Streamlines) yerel ani hız vektörünün her noktasındaki tanjantıdır. Yörünge çizgileri (Pathline) bir akış malzemesi elementi tarafından izlenen bir yoldur. Akış kararlı ise bir akım çizgisi ile çakışır. Kararsız akışlarda genellikle anayollarla çakışma olmaz. Çıkış çizgileri (Streakline) ise farklı yol çizgilerinin aynı zamanda (t) deki konumlarının birleştirilmesiyle oluşur. Aşağıdaki Şekil 2.3’de gösterilen şekiller daha iyi kavramamıza yardımcı olacaktır. Şekil 2.3.’de sarı, kırmızı, yeşil ve mavi akışkan parçacıklarının zamana göre değişen eğrilerini gösterir ve buna yol çizgileri adı veririz. Şekil 2.3 a’da akışkanda bulunan farklı akışkanların ise t_0 anındaki bulunduğu konumları ifade eden kesişim çizgileri belirtilmiştir.

Kararlı akışlarda bahsi geçen üç çizgi çakışır, fakat kararsız akışlarda durum böyle değildir. İlerleyen bölümlerde de bahsedileceği gibi bu çalışmada iki bölgeden bahsedilecektir; hava kabarcığının hızının ve şeklinin kararsız olduğu bölüm ve belirli bir noktadan sonrada kararlı akışa sahip akış durumu söz konusu olacaktır.

Laminer (düzenli) akış ve Türbülanslı akışlı akışkanlar iki tip akışı temsil ederler. Laminer akışta anayollar düzgündür ve akış hız bileşenleri şayet akış kararsızsa, zaman ve pozisyonla rahatlıkla değişir. Şekil 2.1’de tanımlanan akış laminerdir. Türbülanslı akış da düzgün akış anayolları yoktur. Hız, zaman ve konumda düzensiz dalgalanmalar gösterir. Verilen herhangi bir akış geometrisi için, boyutsuz Reynolds sayısı (Re) bir Newtonian akışı için $Re=LU/\mu$ olarak tanımlanabilir. Burada L karakteristik uzunluk olarak tanımlanır. Kritik değer altındaki Re sayısı için akışkan laminerdir. Aksi durum için türbülanslı akış geçerlidir. Geometriye bağlı Re sayısı deneysel olarak belirlenir.



Şekil 2.3 a) Çıkış Çizgileri b)Yörünge Çizgileri [18]

2.1.3. Korunum eşitlikleri

Bu bölümde temel korunum eşitliklerinden bahsedilecektir. Bu eşitlikler vasıtasıyla elde edilecek ve detayı Bölüm 2.2.2 de verilen Navier-Stokes denklemi için gerekli kavramlardan bahsedilecektir. İlk kısımda bazı matematik notasyonlardan bahsedilecek ikinci kısımda da temel korunum, süreklilik adıyla anılan bir eşitlik ve Newtonian'un ikinci konundan elde edilen kuvvetler dengesine eşit maddesel türev veya Lagrange türevi olarak da bilinen ifade elde edilerek (Cauchy Denklemi) temelde iki denklem verilecektir. Akışkanlar kinematiği bölümüne ait olan bazı matematik ifadelerde anlaşılma kolaylığı düşünülerek Bölüm 2.1.3.1'de matematiksel notasyonlar hakkında kısa bir bilgi verildikten sonra gradyant ve maddesel ivme ifadelerine yer verilmiştir.

2.1.3.1. Matematiksel notasyonlar

Fiziksel olgular matematik denklemler vasıtasıyla çözümlenebilir. Doğada bulunan fiziksel gerçekleri biz mühendisler çözebilmek için matematikçiler tarafından geliştirilen denklemleri kullanarak ve gerektiğinde bu elde edilen denklemlerde bilinmeyen sayısını azaltmak için varsayımlarda bulunarak istenilen sonuca varabiliriz. Fiziksel bu olguları daha anlaşılır olarak ifade etmek ve işlem yükünden kurtulmak için temel denklemler uygun koordinat sistemlerine göre bazı simgelerle

ifade edilirler. Burada genel olarak kullanılan bazı matematik operatörler ve de kullanılması temel denklemlerde önemli olan matematik kurallardan bahsedilecektir. Tablo 2.1 de görüldüğü gibi iki vektörün skaler çarpımı bir skaler değer verir. İki vektörün noktasız olarak gösterilen dış çarpımı sonucu açığa dokuz bileşeni bulunan ikinci derece bir vektör yani tensör açığa çıkar. Buna göre de bazı nabla operatörü ile ilgili yararlı eşitlikler verilmiştir.

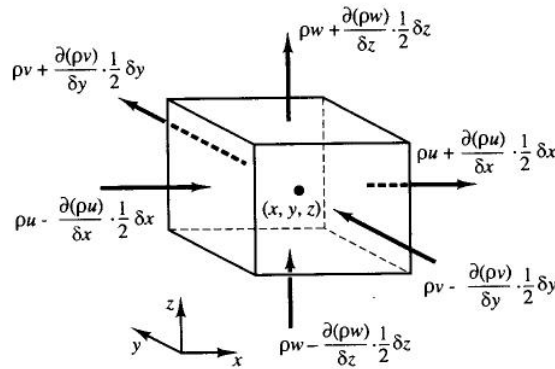
Tablo 2.1. Yararlı Matematik ifadeleri

İfade	Simge	Matematik değer	Açıklama
Skaler	a	(a)	0.dereceden vektör
Vektör	\mathbf{A}	$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}$	1. dereceden vektör
Tensör	\mathbf{A}	$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}$	2.dereceden vektör
Transpoz Tensör	\mathbf{A}^T	$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} \\ A_{12} & A_{22} & A_{32} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{bmatrix}$	2.dereceden vektör A tensörünün transpozu
Kartezyen koordinatlar	$\nabla, \text{div}, \text{grad}$	$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$	Nabla
Skalar Çarpım	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	c	Skaler değer
Dış çarpım	$\mathbf{A} \mathbf{b}$	\mathbf{C}	Tensör
Nabla operatör	∇a	\mathbf{b}	Vektör
Nabla operatör	$\nabla \cdot \mathbf{A}$	b	Skaler değer
Nabla operatör	$\nabla \cdot \mathbf{A}$	\mathbf{b}	Vektör

2.1.3.2. Matematik denklemler

Fiziksel problem, gerekli değişkenlerin belirlenmesi ile makul fiziksel kabuller altında fiziksel kanunlara uygun olarak bir diferansiyel denklem eşitliği olarak yazılabilir. Bu diferansiyel denklemde sonuca ulaşılabilmesi için çözüm tekniğinin uygun seçilmesi ve sınır şartlarının belirlenmesi gerekir.

Kısmi diferansiyel denge eşitlikleri, uzaydaki bir noktanın korunum prensiplerini açıklarlar. Bu noktada fiziksel sistemden kontrol hacmi kavramına olanak sağlayan diferansiyel matematiksel denklemler, akışkanlar mekaniğinin temelini oluşturur. Bu denklemler vasıtasıyla akışkanın durumu hakkında bilgi alabiliriz. Yaklaşım metoduna göre; Lagrange (akışkan hareketli bir şekilde izlenir) ve Euler (akışkan sabit bir noktadan gözlemlenir) olmak üzere iki yaklaşım vardır. Fiziksel olgu için denklemler aynı, fakat referans kabulleri ve matematik notasyonları farklı olabilir.



Şekil 2.4 Akışkan elemanın içi ve dışında kütle korunumu

Elde edilmek istenen fiziksel sistemden kontrol hacmine gidilmesi gerektiğini söylemiştik. Şekil 2.4 de birim uzunluklar x,y,z koordinatları için sırasıyla δx , δy , δz 'dır. Taylor serisi ile kütle korunumu yahut süreklilik olarak da ifade edilen eşitlik kartezyen koordinat sistemindeki Şekil 2.4'deki birim hacim için yazılırsa;

$$\begin{aligned} & \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z - \left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z \\ & + \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$+\left(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \partial z\right) \partial x \partial y - \left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \partial z\right) \partial x \partial y$$

Bu ifade birim hücre yönlerinde meydana gelen koordinat doğrultularındaki hıza bağlı değişimleri gösterir. Akış elemanı üzerindeki değişim oranı da aşağıdaki ifade ile elde edilirse;

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \partial x \partial y \partial z) = \frac{\partial \rho}{\partial t} (\partial x \partial y \partial z) \quad (2.7)$$

Denklem 2.6 ve 2.7 birbirine eşit olacaktır. Her iki taraf birim hücreye bölüldüğünde aşağıdaki form bize diferansiyel kütle korunumu ifadesini verecektir.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2.8)$$

Bu ifade daha uygun formda Bölüm 2.3.2.1 deki matematik notasyonlar doğrultusunda

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.9)$$

yazılabilir.

Diferansiyel kütle korunum denklemi diverjans yardımıyla yüzey kontrolünü hacim kontrolüne dönüştürülmesiyle de aynı ifade bulunulabilir.

Bu diferansiyel kütle korunum denkleminde eşitliğin solundaki ifade, birim hacimdeki yoğunluk değişimini verir ve kararsız durumu ifade eder. İkinci terim ise iletim terimi olarak adlandırılır ve sınır şartlarından geçen net kütle akışını temsil eder. Sıkıştırılamaz (incompressible) akışlarda bu ikinci ifade sıfırdır. Yani;

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.9)$$

Uzun notasyonda ise

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

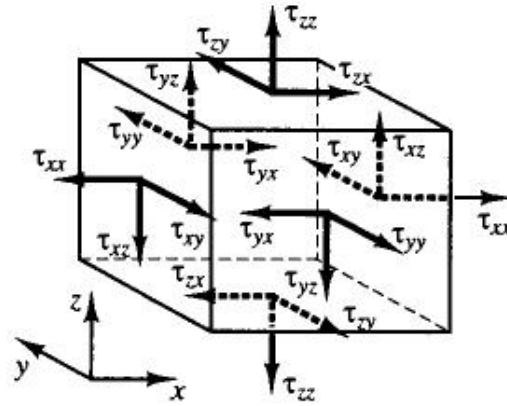
Sırası gelmişken burada *Maddesel Türev* ifadesini açıklamakta fayda vardır. Yerel türevin dışında sisteme etkiyen x,y,z bileşenlerindeki advectif yahut taşınasal etkiyi de hesaba katan bir eşitliktir ve akış alanı içerisinde hareket eden bir akışkan parçacığının izlenmesi ile oluşturulduğunu vurgulayan bir eşitliktir. D/Dt ifadesi, çözüm çerçevesine Lagrange yaklaşımını ifade eden aynı şekilde bir akışkanın izlenmesini vurgulaması açısından birçok yazar tarafından kullanılır[19].

$$\frac{D}{Dt} = \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (2.10)$$

Maddesel türev ismi, toplam türev, partikül türevi, Lagrangian, Euler türev olarak da adlandırılır [19]. Şayet bu ifade ivme için yazılırsa maddesel ivme, basınç için yazılırsa maddesel basınç olarak adlandırılır ve istenilen değişkene göre yazılabilir.

Denklemlerimizden biri 2.7 kütle korunum denklemi idi. Şimdi ise ikinci önemli denklem momentum korunum denklemidir. Akışkan problemlerinde bilinmeyen değişken sayısı kadar denklem elde etmemiz gerekir. Bilinmeyenlerin bulunması açısından momentum denklemi önemli bir eşitlik olacaktır.

Reynold Transport Teoremi'nden (RTT) türetilen ve yüzey kontrolünden hacim kontrolüne geçmeyi sağlayan diverjans (Gauss teoremi olarak da bilinen) teoremi ile elde edilmesi mümkün momentum denklemiyle kütle kuvvetleri ve yüzey kuvvetlerinin toplamı doğrusal momentum denklemini dengeleyecektir. Bu doğrusal momentum denklemi eşitliği Cauchy denklemi olarak da bilinir.



Şekil 2.5 Yüzey Gerilmeleri

Şekil 2.5’de x,y,z bileşenlerinde meydana gelen gerilme kuvvetleri gösterilmiştir. Bu kuvvetler yüzeyde oluşan kuvvetlerdir. Ayrıca kütlede dolaylı olarak oluşan kuvvetler vardır. Newton’un ikinci kanunu;

$$F_{\Sigma} = F_{k\u00fctle} + F_{y\u00fczey} = m \cdot a \quad (2.11)$$

kullanılarak yukarıdaki eşitlik elde edilir. $m = \rho \cdot V = \rho \cdot dx \cdot dy \cdot dz$ (V birim hacim ρ ise sıvının yoğunluğu) den yararlanılarak kuvvetler toplamı tekrar kontrol hacim için yazılırsa

$$\sum F_{KH} = dm \frac{D}{Dt} \mathbf{u} = \rho \cdot dx \cdot dy \cdot dz \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + u \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u} + v \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{u} + w \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u} \right) \quad (2.12)$$

Maddesel türev tanımı daha öncede verildiği gibi yerel ve taşınımsal terimleri içerirdi. Denklem 2.12’de bu terim uzun notasyon halinde tekrar sağ tarafta belirtilmiştir.

Denklem 2.11’de kütle ve yüzey kuvvetlerinden bahsedilmişti. Bu denklemdeki kütle ve yüzey kuvvetleri açık bir şekilde yazılacak olunursa sırasıyla Denklem 2.13 ve 2.14 elde edilir.

$$F_{K\u00fctle} = \rho \mathbf{g} \, dx \, dy \, dz \quad (2.13)$$

$$F_{Y\u00fczey} = \nabla \cdot \sigma_{ij} \quad (2.14)$$

Buradaki denklemlerde \mathbf{g} vekt\u00f6r olup x,y,z y\u00f6nlerinde g_x, g_y, g_z bile\u00feenleri vardır. Aynı \u00e7ekilde i ve j alt indisleri \u00d7ekil 2.5 de belirtilen x,y,z ve bile\u00feenlerindeki gerilmeleri nabla operat\u00f6r\u00fc ile ifade eder ve toplam dokuz adettir. Dokuz bile\u00feenden \u00fc\u00e7 tanesi simetri ko\u00f7ulundan e\u00e7ittir. A\u00e7a\u011fıda bir gerilme tens\u00f6r\u00fcn\u00fcn t\u00fcm bile\u00feenleri g\u00f6sterilmi\u00e7tir.

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{yx} & \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{zy} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Denklem 2.12'deki kontrol hacimdeki kuvvet ifadesi y\u00fczey ve k\u00fctle kuvvetlerine e\u00e7it olaca\u011fından bu ifade d\u00fczenlenirse, Denklem 2.16 okunur.

$$dF = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \sigma_{ij} = \frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (2.16)$$

Yukarıdaki ifade Fransız bilim adamı Cauchy tarafından bulunmu\u00e7tır ve Cauchy denklemi olarak bilinir. Bu denklemde $\rho \mathbf{g}$ ifadesi k\u00fctle kuvvetini $\nabla \sigma_{ij}$ y\u00fczey kuvvetlerini ifade eder. En sa\u011fdaki ifade dikkatli incelenirse denklem 2.12 yani kontrol hacmindeki kuvvet dengesini ifade etti\u011fi anla\u00e7ılacaktır. Notasyonun farklı olması Denklem 2.10 da tanımını ge\u00e7en maddesel t\u00fcrev ifadesi ile ilgilidir.

2.2. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD) Metodu

2.2.1. Giriş

HAD metodu bilgisayar tabanlı simülasyonlar vasıtasıyla akışkan akışı, ısı transferi ve kimyasal reaksiyonlar gibi ilgili konuları içeren sistemlerin analizidir. HAD tekniği endüstriyel ve akademik uygulama alanlarında güçlü ve geniş bir perspektife sahiptir. Bazı örnekler aşağıdaki gibidir;

- Transport araçların aerodinamik yapısı
- Gemilerin hidrodinamiği
- Güç santralleri; içten yanmalı motorlar ve gaz türbinlerindeki yanma
- Turbo makineler
- Elektrik ve elektronik mühendisliği; mikro çevrim içeren ekipmanların soğutulması
- Kimyasal proses mühendisliği; karıştırma ayırma ve polimer kalıplaması
- Dâhili ve harici çevresel yapıların inşası; rüzgâr yüklü ve ısıtmalı vantilatörler
- Deniz mühendisliği
- Çevresel mühendislik; kirlenme ve fabrika atığı sularının dağılımı
- Hidroloji ve denizbilim; deniz nehir ve nehirlerin birleşimi
- Meteoroloji; hava tahmini
- Bio mühendislik kılcal ve ana damarlardaki kan akışı

Şüphesiz bilgisayar destekli mühendisliğin günümüzde gittikçe hızla yayılmasının en önemli nedenlerinden biri, kısa zamanda ve az bir maliyetle araştırılmak istenen olgunun gerekli koşullar altındaki simülasyonlarını inceleyerek gerekli sistemde istenen bölgelerin kolaylıkla gözlenmesine, gerekirse geliştirilmesine olanak vermesiyle optimum sistemin kurulmasına yardımcı olur. Bazı avantajları aşağıdaki gibidir;

- Yeni tasarımların maliyetinde ve kısa sürede sonuçlara gidilmesi
- Deneysel sistemlerin kurulmasında zorluk içeren yahut imkânsız olan sistemlerde çalışma imkânı sağlaması; örneğin çok büyük veya çok küçük sistemlerde

- Tehlikeli koşullar altındaki sistemlerde çalışma imkânının sağlanması (tehlake senaryoları)
- Sonuçların detaylarının limitsiz şekilde elde edilmesi [20]

Diğer analiz yöntemlerinde olduğu gibi HAD yazılımlarında da üç ana proses altında çalışır, (i) ön işlem, (ii) çözüm, (iii) sonuç süreci.

Ön işlemden geometri ve grid (mesh=ağ) yapısı malzeme özelliklerinin ve sınır şartlarının belirtildiği bölümdür, HAD yazılımlarının kapasiteleri genellikle ön işlem kısmını belirler, gerekli problemin kurulabilmesi için ön işlem kısmında gerekli giriş bilgilerini sağlayacak aygıtların bulunması gerekir. Bu aygıtlar takip eden birimlerle zaten ilişki içersindedir.

Çözüm prosesinde üç ayrı nümerik çözüm tekniği bulunur, sonlu fark (sonlu hacimler), sonlu elemanlar ve spektral metot. Ana hatlarıyla bu nümerik metotlar çözüm prosesinde aşağıdaki adımları içerirler

- Basit fonksiyonlarla bilinmeyen akış değişkenleri için matematiksel yaklaşımlarda bulunulması
- Geliştirilen akış eşitlikleri ve matematik manipülasyonlarında uygun yaklaşımlarla ayrıştırılma yapılması (discretization)
- Cebirsel denklemlerin çözümü [20]

Bahsi geçen üç nümerik metot arasındaki ana fark ayrıştırma işleminin ve bilinmeyen akış parametreleri için farklı yaklaşım metotlarının kullanılmasıdır.

Sonlu Farklar Yöntemi; bu yöntemde bilinmeyen akış parametresi ϕ koordinat düzlemini ağ yapısının düğümlerindeki numune noktaları yoluyla belirlenirler. ϕ 'nin türevlerinin sonlu farklar yaklaşımını oluşturmak için genellikle Taylor serisi kullanılır. Kullanılan denklemde bulunan türevler her bir ağ noktasında ϕ değeri için bir cebirsel sonlu fark ürünleri tarafından yer değiştirilirler.

Sonlu Elemanlar Metodu (SEM); Sonlu elemanlar yönteminde elemanların üzerinde geçerli olan ϕ bölgesel değişimlerini tanımlamak için parçalı fonksiyonlar (piecewise functions) kullanılır. Sonlu eleman metodu ilk başlarda gerilim analizleri için geliştirilmiştir. Akışkanlar uygulaması için ilk Zienkiewicz ve Taylor (1991) tarafından yapılmıştır [20].

Ayrıca SEM metodunun kullanılmasında bazı potansiyel durumlar olmasına karşın şu nedenlerden dolayı hala sonlu eleman yöntemi akışkanlar mekaniği için olumlu değildir. En baştaki zorluk akış doğrultulu (upwind) doğal iletimle ilgisi olmasıdır. Standart sonlu elemanlar (SEM) metodunun bir belirgin uygulaması merkezi fark şemasına (central difference) benzer bir eşitliği verecektir. Şu iyi biliniyor ki; bu tür bir formülasyon HAD problemlerinde gerçekçi olmasın fiziksel sonuçlara neden olacaktır. Akış doğrultulu ayrıklaştırma veya üstel bir şemaya benzer bir yöntem gerekecektir ki; düzensiz ağ yapıları için adapte edilmesi hangi yaklaşımla ve nasıl olacağı bilinmemektedir. Ayrı düğümlü ağ düzeninin kullanımı bu yöntemde ağ çizgilerinin koordinat yönleri boyunca tasarlandığından dolayı mümkündür ve bu yöndeki hız bileşenlerinin uygun bir şekilde yerini değiştirebilir. Ayrı düğümlü ağa benzeyen ihtiyaç SEM yazılımlarındaki standart üçgen biçimindeki yapıdır. Şayet tüm değişkenler aynı eş ağ düzeni için hesaplanabilseydi (co-located) hesaplamalı akışkanlar dinamiği metotlarında genel ve başlıca sorun olan süreklilik denklemindeki basınç alan değerinin bilinmemesine bağlı olarak basınç gradyanının temsil edilmesi ve süreklilik denkleminin temsil edilmesindeki zorluklara benzer sıkıntılar kaçınılmaz derecede artacaktır. Kayık ağ yapısı ile eş ağ yapısının tanımı bölüm 2.2.6 da değinilecektir. Burada eş ağ yapısının ucuzluk bakımından tercih edilmesi konusuna deyinmekte fayda vardır. Akışkan akışı ile ilgili sonlu elemanlar metodu ile araştırılmış birçok uygulamalarında hız bileşenleri ve basınç çözümünü vermek için tüm momentum denklemleri ve süreklilik denklemini eş zamanlı bir çözüm metodu ile çözülür. Direkt çözüm metotları pahalı olduğundan eş zamanlı bir çözümden ziyade sıralı bir şekilde SIMPLE gibi bir algoritmanın formülleştirilmesi momentum ve süreklilik denklemlerinin çözümü ucuz olması bakımından daha avantajlıdır. [21] SIMPLE algoritması bölüm 2.2.4 de bahsedilecektir. SIMPLE algoritmasının istenmesi, ucuzluk ile ilgili olduğunu hatırlatmakta fayda vardır.

Spektral Metot; bu metotta Chebyshev polinomları serisi ve Fourier serisi kullanılarak çözüme gidilir. Sonlu farklar ve hacimler yaklaşımlarına benzemeksizin yakınlaşmalar bölgesel değil hesaplanan tüm alanda geçerlidir.

Sonlu Hacimler Metodu (SHM) sonlu farklar yönteminden türetilmiş ve geliştirilmiş özel bir durumdur. Bu metot HAD metoduna iyice yerleşmiştir. Nümerik algoritma aşağıdaki adımlardan oluşur;

— Akışkan akışında kullanılan denklemlerin formal entegrasyonu çözüm bölgesinin kontrol hacminin bölgesidir.

— Konveksiyon, difüzyon ve kaynak gibi integrasyon denkleminde temsil edilen akış işlemlerindeki terimler için sonlu fark tipi yaklaşımlı ayrıklaştırma (discretization) vardır. Bu durum cebirsel denklem sistemindeki integral denklemlerini dönüştürür.

— Bir iteratif metot ile cebirsel denklemler çözülür [20]

Birinci adım yani kontrol hacim entegrasyonu, diğer HAD yazılım çözüm tekniklerinden ayıran en büyük özelliktir. Sonuç durumları her bir sonlu hacim hücresi için ilgili özelliklerin korunumunu ifade eder. Bu nümerik algoritma ve temelini oluşturan fiziksel korunum prensipleri formları arasındaki açık ilişki cazip özelliklerinden biridir ve bu metot mühendisler tarafından sonlu elemanlar ve spektral metoda göre daha kolay anlaşılır. Bir genel akış değişkeni korunumu ϕ , örneğin bir hız bileşeni veya entalpi, bir kontrol hacmi içinde çeşitli dengeyi arttırıcı veya azaltmaya meyilli çeşitli prosesler arasında bir denge olarak ifade edilebilir. Zamana uygun hareket eden kontrol hacmindeki

$\phi =$ Kontrol hacmindeki iletme bağlı ϕ nin net akışı + kontrol hacmindeki difüzyona bağlı ϕ 'nin net akışı+ kontrol hacmindeki oluşturulan ϕ 'nin oranı

Fiziksel olay karışık ve doğrusal olmadığından iteratif çözüm yaklaşımı gereklidir. Bu konu bölüm 2.2.4 de algoritmalar kısmında bahsedilecektir.

Akışkanlar mekaniğinde çözüm prosesinde özellikle iki fazlı problemlerinde bilinenlerden çok bilinmeyenlerin olmasından dolayı yukarıdaki bahsi geçen metotlarda bazı varsayım ve teoremlerle sonuca gidilir, bu teoremlerin doğruluğu deney ve test sonuçlarıyla literatürde belirlenmiştir.

Sonuç gözleme HAD kodlarında çok yönlü sonuç alabilme araçları mevcuttur (grafik hız kesit alanı gözleme, animasyon gibi). Bu gözlemler akış çizgilerinin yollarının akışkan içindeki matematik konumlarının belirlenmesiyle akışın özellikleri ile ilgili fikir verir.

2.2.2. Temel denklemler (Navier Stokes denklemi)

Katıların hareket ve harici kuvvetlerle oluşan reaksiyonları Newton'un hareket kanunlarıyla açıklanırken akışkanlar (gaz ve sıvılar) için kütle momentum ve enerji korunumlarını ifade eden ve birim deformasyon tensörü tanımını açıklayan Navier Stokes denklemleriyle (19 yy.) sıvıların hareket ve harici kuvvetlerle oluşan reaksiyonları tanımlanır.

Bölüm 2.1.3.2'de elde edilen Cauch denklemi tekrar yazılırsa;

$$dF = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \sigma_{ij} = \frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u}) \quad (2.17)$$

Bu denklemdeki en büyük sıkıntı σ_{ij} gerilim değerlerinin hız ve basınç ifadesini tam açıklayamamasıdır. Hız ve basınç etkisi akışkanın durumu hakkında bilgi almak için temel özelliklerdir. Bilinmeyen bu gerilim değerleri için Navier-Stokes bilim adamları tarafından uygun bir model geliştirilmiştir. Bu denklemdeki esas unsur, σ_{ij} gerilim değerlerinin hız ve basınç alanının yoluyla açıklanmasıdır.

σ_{ij} ifadesi genel bir gerilim ifadesi olarak düşünülürse, bu ifade de akış yüzeyinden içeri doğru etkileyen P basınç ifadesi ve koordinat doğrultusundaki viskoz gerilimlerini mevcuttur. Durgun akışlarda viskoz gerilimleri sıfırdır. Fakat hareketli

akışlarda bu durum böyle değildir. Ana koordinat doğrultuları yönü dışında kalan gerilmeler Şekil 2.5’de gösterildiği gibi kayma viskoz gerilmeleridir. Bu ifadeleri matematik denklem olarak şu şekilde ifade edebiliriz;

$$\sigma_{ij} = P + \tau_{ij} = \begin{bmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

Temel denklemler, bilinmeyen τ_{ij} viskoz gerilim bileşenlerini içerirler. Akışkan akışları için korunum denklemlerinin en kullanışlı formu viskoz gerilmeler için ileri sürülen bir uygun modelle elde edilir. Birçok akışkan akışlarda viskoz gerilmeleri yerel deformasyon oranının (veya zorlanma oranı) fonksiyonları olarak açıklanabilir. Üç boyutlu akışlarda yerel deformasyon oranı lineer ve hacimsel deformasyon oranlarından ibarettir [20]

Tüm gazlar ve birçok sıvılar izotropiktir. Önemli derecede polimer molekül miktarı içeren sıvılar anizotropik veya akışla zincirimsi polimer moleküllerinin dizilmesinin sonucu olarak direk viskoz gerilim özelliklerini sergilerler. Biz burada izotropik akışlardan bahsedeceğiz.

Bir akışkan elementinin lineer deformasyon oranı, üç boyutta dokuz bileşene sahiptir. Bunların altısı izotropik akışlarda birbirinden bağımsızdır (Schlichting 1979) ve E_{ij} sembolü ile belirtilirler. Üç lineer deformasyon bileşeni vardır;

$$E_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad E_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad E_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.19)$$

Altı tane de lineer kayma deformasyon bileşeni mevcuttur;

$$E_{xy} = E_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), E_{xz} = E_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right), E_{yz} = E_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (2.20)$$

Hacimsel deformasyon aşağıdaki gibi tanımlanabilir;

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \text{div } \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (2.21)$$

Newtonian akışkanlarında viskoz gerilmeleri deformasyon oranı ile doğru orantılıdır. Sıkıştırabilir akışkanlar için Newtonian Viskozite Kanununun üç boyutlu formu doğru orantılı iki sabit içerir. İlki, lineer deformasyon gerilmeleriyle ilgili dinamik viskozite μ , ikinci viskozite ise hacimsel deformasyon gerilmeleriyle ilgili λ 'dır. Pratikte etkisinin az olmasından dolayı, ikinci viskozite λ ihmal edilebilir. Bazı sistemlerde gazlar için işe yarayan iyi bir yaklaşım $\lambda = -2/3 \mu$ alınmasıdır (Schlichting 1979). Burada ikinci terim ihmal edilerek eşitlikler yazılacaktır. Dokuz viskoz gerilim bileşenleri, bunlardan altı tanesi simetri koşulundan bağımsızdır ve aşağıdaki gibidir;

$$\tau_{ij} = 2e_{ij}\mu \quad (2.22)$$

$$\begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} & \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

Böylelikle de viskoz gerilmeleri, dinamik viskozite çarpı yerel lineer deformasyon oranının iki katıdır.

Denklem 2.23'deki uzun notasyon ifadesi Denklem 2.18'de yerine yazılırsa ve bu ifade de momentum denkleminde 2.17 de yerine yazılırsa 19. yüzyılda bilim adamları tarafından türetilmiş olan Navier-Stokes denklemleri elde edilir.

x yönündeki momentum denkleminde bu ifadeleri yazarsak;

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \quad (2.24)$$

Burada şu aşağıdaki eşitlikten yararlanılarak tekrar bir düzenleme yapılabilir;

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) = \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2.25)$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right] \quad (2.26)$$

Süreklilik denkleminde hatırlanacağı gibi Denklem 2.9'da sıkıştırılamaz akışlar için

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{uzun notasyonda } \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0) \text{ idi. Denklem 2.24'de süreklilik kısmı}$$

sıfır olduktan sonra Navier-Stokes denklemi için aşağıdaki eşitlik genel gösterimdir.

$$\rho \frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\nabla P + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.27)$$

2.2.3. Açık (Implicit) ve Kapalı (Expilic) metotlar

Nümerik çözüm şemaları genellikle kapalı veya açık olarak adlandırılırlar. Bağımlı değişkenlerin bir hesaplaması bilinen değerler yoluyla yapılabilir. Bu hesaplama kapalı olarak adlandırılabilir. Tersisi durumda ise bağımlı değişkenler, denklem setleri ile tanımlanırsa ve matris ve yahut iteratif tekniği çözüme ulaşmak için gerekli ise bu nümerik metot açık metot olarak adlandırılır.

Hesaplamalı akışkan metotlarında temel denklemler lineer değil ve bilinmeyen değişkenlerin miktarı çoktur. Bu şartlar altında iteratif teknikler kullanılarak açık olarak formülize edilen denklemlerle çözülür.

İterasyonlar, başlangıçtan son adım dizisine doğru ilerlemek amacıyla kullanılırlar. Bu durum araştırılan çözümün bir transient problemde tek bir adımda ya da kararlı durumdaki son sonuç adımı için geçerlidir. Her iki durumda, iterasyon adımları bir zaman işlemi gibi hayal edilebilir. Tabii ki iterasyon adımları genellikle gerçek bir zamana bağlı bir davranış göstermezler. Aslında bu durum kararlı bölgedeki hesaplamalar için cazip olan bir açık metodunun kullanılmasının en avantajlı durumlarından biridir. Çünkü bir çözüm için gerekli bir iterasyon sayısı genellikle kararlı koşullara yaklaştığı düşünülen bir tam transient çözümü için gerekli zaman adımından çok daha azdır.

Diğer bir yandan bu çarpık geçiş bölgesi (distorted transient) özelliği şu soruyu akla getirecektir: “Zamana bağlı problemler için bir açık veya kapalı çözüm metotlarının kullanımının sonuçları nelerdir?”. Bu sorunun cevabı iki yönlüdür; bir kısmı nümerik istikrarlılık diğeri ise nümerik doğruluk ile ilgilidir. İlerleyen konularda bu ikisi üzerinde durulacak ve en son da bir fiziksel örnek vererek bu konu sonlanacaktır.

İstikrarlılık Durumu: Programlaması zor olan ve her bir çözüm adımında daha fazla hesaplama çabası ihtiyacı gösteren açık metodunun kullanımı için prensip olarak temel neden geniş zaman adımları boyutuna izin vermesidir. Basit bir değer modeli yardımıyla bu durumun nasıl çalıştığı hakkında biraz fikir edinelim. Q değerini alalım ve $Q^{n+1} = Q^n + \Delta t S$ zamanında $t = n\Delta t$ zamanındaki değer vasıtasıyla hesaplamak istenirse $Q^{n+1} = Q^n + \Delta t S$ olur, buradaki S , Q değerindeki değişimi gösterir.

Bir kapalı nümerik metodunda S bir önceki zaman adımı n 'deki bilinen değerler vasıtasıyla belirlenebilir. Aksine S 'deki bazı veya tüm terimler bir açık metotta $n+1$ yeni zaman adımında bilinmeyen değerler yoluyla belirlenir. Q denkleminin sağ ve sol tarafında yeni bilinmeyen değerler gözüktüğünden ötürü buna yeni $n+1$

değerlerinin açık tanımı olarak adlandırılır. Genellikle bir matris veya iteratif çözümler, yeni değerleri bulmak için kullanılmak zorundadır.

Doğruluk Durumu: dt değeri yakınsama için gerekli olan yeteri kadar küçük bir iterasyon olduğunda durum $Q^{n+1}=Q^n+dt/(1+Cdt)S^n$ e neden olur. Bu, şunu gösterir ki; açık formülasyon bir zaman adımında Q'ya kapalı metodun meydana getireceğinden daha küçük bir değişiklik ekler. Bunun nedeni zaman adımını arttıran gevşeme faktörü $A=1/(1/Cdt)$ 'dir.

Kapalı yaklaşım için genel kural olarak $Cdt \leq 1$ durumunda bir kararlı duruma neredeyse eşit olduğu gözlemlenebilir. Başka bir kural ise kapalı kararlılığı ve doğruluğu için zaman adım boyutları genellikle eşittir. Böylece $Cdt > 1$ durumunda bir kapalı metot kararsız olabilir fakat açık metot ise iteratif çözümün kararlılığını daha kolayca gevşeme faktörü etkisiyle sürdürebilir. Fakat bu artan zaman adımı genişliği ve artan sönüm etkisiyle transient davranışta hatalara neden olacaktır.

Şayet gereğinden fazla küçük zaman adımı kullanılmışsa kapalı metodunun kullanılması avantajlı olabilir.

Şöyle bir fiziksel örnek ile bahsi geçen iki metot daha da açıklanacaktır; bir basınç dalgası yayılımı içeren bir temel fiziksel problem açık ve kapalı metotların arasındaki farklılıkları hayal edilmesi için kullanılabilir. Basınçta bir artışın olduğu ve karşı tarafı kapalı bir damara basıncın uygulandığını düşünelim. Basınç dalgası damarda ilerleyecek ve kapalı uçtan yansiyarak geri dönecektir. Verilen yeterli zamanda basınç dalgaları damarın içinde birçok kez ileri geri hareket edecektir ve belirli bir zaman sonrada basınç dağılımı damarın içinde sabit değere ulaşacaktır.

Şayet sadece kararlı durumdaki değerler isteniyorsa, açık çözüm şeması kullanılmalıdır ki; basınç dalgalarının birçok sönümleriyle mümkün olduğu kadar kısa sürede kararlı bölgeye ulaşılsın.

Şayet geçiş bölgesindeki basınç dalgalarının hareketi ve yansımaları incelenecekse kapalı metodunun kullanılması istenilen durum olacaktır [22]

2.2.4. Çözüm Algoritmaları

Korunum denklemleri farklı çözüm algoritmaları ile çözülebilir. Geliştirilen çözüm algoritmaları basınç düzeltici katsayılar içerir ve sistemde hız basınç ilişkisini gerçeğe yakınlıktırmaı amaçlar. Bunlardan en yaygın ve temel olanı orijinal ismiyle “Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations (SIMPLE)” yani, Basınç İlişkili Denklemler için Yarı Implicit Metotlardır. Orijinal olarak adlandırılan bu algoritma Patankar ve Spalding (1972) tarafından uygulanmıştır. SIMPLE algoritması hız ve basınç alanlarının hesaplanmaları için bir iteratif yöntemidir. Bir giriş basınç alanından başlar ve aradaki uygun hız bileşenlerini ayrıştırılmış momentum denkleminde çözer, basınç düzelticisi değeri için süreklilik denklemini çözümler ve algoritma için temel denklemler vasıtasıyla elde edilen basınç ve hız doğrulanır. Bu işlemler her bir bilinmeyen yahut bilinmesi istenen değeri için yakınsama değeri ulaşana kadar tekrarlanır. Ayrıca ekstra düzeltici bir adım ile oluşturulmuş algoritmaya Pressure Implicit with Splitting of Operators (PISO) adı verilir. Bu algoritma her bir iterasyon için SIMPLE’a göre daha performanslıdır [20].

2.2.5. Serbest Yüzey Simülasyonları için Metotlar

Bir gaz ve sıvı arasındaki ara yüzeye genellikle serbest yüzey olarak tanımlanır. Serbest olarak adlandırılmasının nedeni gaz ve sıvı yoğunlukları arasındaki yüksek farktan dolayıdır. Düşük gaz yoğunluğunun manası; şayet sıvı fazına göre karşılaştırıldığında gazın ataletinin yok sayılabilmektedir. Bu yüzden sıvı gazdan bağımsız olarak serbestçe hareket eder. Sadece gazın etkisi sıvı alan üzerindeki sarf ettiği basınçtır [22].

Serbest yüzeyli akışlar, hareketli sınır şartına sahip zor bir akış sınıfıdır. Sınır şartı pozisyonu ilk baştaki zamanda bilinir. Sonraki zamanlardaki pozisyonu, çözümün bir parçası olarak belirlenmelidir. Serbest yüzeylerinin şekillerinin bulunması için birçok metot kullanılır. İki ana başlık altında sınıflandırabiliriz [23]

Ara yüzeyin izleme metodu (“Interface Tracking Methods”) olarak bilinen metotta serbest yüzey bir keskin ara yüzey olarak tanımlanır ve bu ara yüzeyin hareketi takip edilir. Bu metot da uygun sınır şartları ağları (hareketli ağ) kullanılır ve serbest yüzeyin hareketi boyunca her bir zaman da ilerletilirler[23].

Ara yüzey yakalama metotları (Interface Capturing Methods) olarak bilinen metotta ara yüzey keskin bir sınır şartı olarak tanımlanmaz. Hesaplamalar sabit bir ağda gerçekleşir. Serbest yüzeyin şekli, her bir komşu ara yüzey hücrenin oransal olarak doldurduğu hesaplanan kesir vasıtasıyla belirlenir[23].

Yukarıda tanımlanan metotlardan ekonomik ve yaklaşımı serbest yüzey olgusuna uygun olduğundan (Euler ağ yaklaşımına da uygun olan) ara yüzey yakalama metotlarını kullanmak daha avantajlı olacaktır. Bu metotta bu tür akışlarda önemli durumlardan biri her iki faz arasındaki orijinal ismi “smearing” yani sayısal yayılma etkisinden kaçınılarak keskin bir ara yüzeyin tutulmasıdır [24]. Bu açıdan ya yüksek dereceden şemalar ya da geometrik yenilenme metotları gerekli serbest yüzey metotlarında kullanılarak sayısal yayılma durumundan mümkün olduğu kadar kaçınılır.

Ara yüzey yakalama metotlarından literatürde cephe izleme (Front Tracking) şeması ile adım belirleme metodu (Level-Set) akademik çalışmalarda geniş bir şekilde kullanılırken, ticari HAD yazılımlarında akışkan hacim metodu (VOF) metodu kullanılır [25].

2.2.5.1. VOF metodu

VOF metodunun temel fikri bir fazın bir hücre içinde doldurduğu hacim kesrini f skaler bir değer ile tanımlamasıdır. Şayet $f=1$ ise hücre tamamıyla sıvı ile dolu $f=0$ durumunda ise gaz fazı ile olduğunu belirtir. Her iki fazın tek bir ağ hücresinde bulunması $0 < f < 1$ ile tanımlanır.

Aslında akışkan hacim metodunun denklem setleri homojen model yaklaşımından çıkar. Fakat VOF metodunda ortalama hacim ağ hücre ile denktir. Yani ortalama hacim için tek bir ağ hücre göz önünde bulundurulur. Bu durumda izlenen ara yüzey keskin bir şekilde izlenebilir.

Sıvı hacim kesri f için bir hareket denklemi ile ifade eden her iki fazın kütle korunumu;

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{v}_m = 0 \quad (2.26)$$

Burada f sıvı hacim kesrini, fazların birim hücredeki oranlarına bağlı olarak v_m hız ortalama (karışım) hızı olarak nitelendirilir.

Ve diverjans (uzaklaşma) serbest hız alanının durumu ile de her iki fazın kütle korunumu şu şekilde belirtilebilir [11];

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0 \quad (2.27)$$

Denklem 2.26 standart fark şemaları ile çözülmez, çünkü sonuçlar nümerik hataların nedeniyle iki faz arasında sayısal yayılma durumu meydana gelecektir. Bu açıdan geometrik yeniden yapılanma veya yüksek derece fark şemaları her iki fazdaki keskinliği korumak için kullanılır.

2.2.5.2. Adım belirleme (Level-set) metodu

Bu metot ara yüzeydeki “sayısal yayılma” olgusundan kaçınmak için farklı bir yaklaşım takip eder. Bir düzgün skalar fonksiyonu ϕ sıfır adım kurulum olarak ara yüzey tanımlanması bu metodun esasıdır. Matematik olarak ifade edersek $S_i = \{x | \phi(x, t) = 0\}$ dir.

Gaz bölgesi (akışkan 2) $\phi < 0$ ve sıvı bölgesinde (akışkan 1) $\phi > 0$ 'dır. Böylelikle ϕ konum ve zamana göre şu şekilde belirlenir;

$$\phi(x, t) = \begin{cases} > 0 & \text{\textit{şayet } } x \in E \text{ faz1} \\ = 0 & \text{\textit{şayet } } x \in E \text{ } S_i \\ < 0 & \text{\textit{şayet } } x \in E \text{ faz2} \end{cases}$$

Pratikte ϕ ara yüzeyden işaretlenmiş uzaklık olarak alınır. Faz dağılımı adveksiyon eşitliği ile hesaplanır;[24]

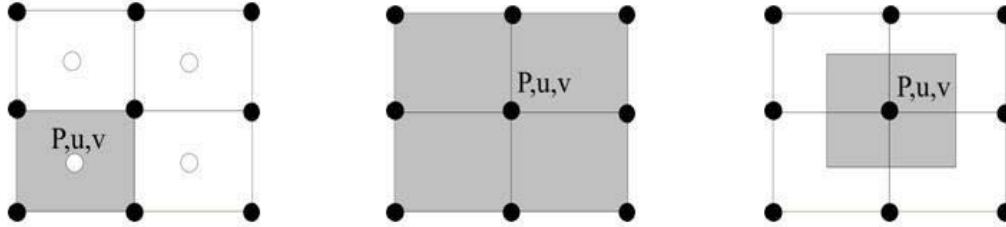
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{v} = 0 \quad (2.28)$$

2.2.5.3. Cephe izleme (Front tracking) metodu

Adım kurulum metoduna benzer olarak cep izleme metot sonlu farklar ile ayrıştırılmış momentum denkleminin formülasyonun, yerel ve tek bir alana bağlı olmasıdır. Bu metodun kilit noktası sabit düzenli bir ağ üzerindeki momentum denkleminin çözümünden hız alanı hesaplanmasıdır, fakat faz ara yüzeyi ise işaretlenmiş parçacıklar takımı ile temsil edilir.

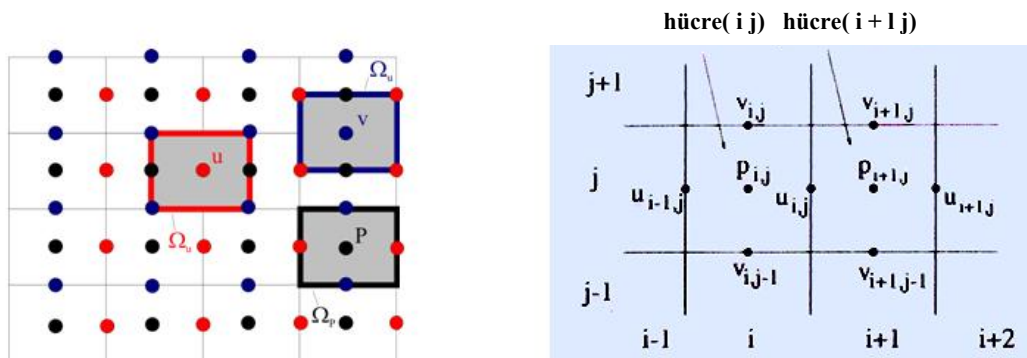
Bu metodun avantajı sürekli bir yüzeyi doğru bir şekilde temsil edebilmesidir. En büyük dezavantajı, ara yüzeydeki birleşme ve ayrılmalarının idare etmesinin zor olması ve ek önlemlere ihtiyaç duymasındır [24].

2.2.6. Eş (Colocated) ve Kayık (Staggered) ağ düzenleme metotları



Şekil 2.6 Eş ağ düzeni (Introduction to numerical simulation of fluid flows Technical University of Munich (2004))

Bu yöntemde; Şekil 2.6’da görüldüğü gibi basınç ve hız değişkenleri kontrol hacminin ortasındaki tek bir düğüm noktası için hesaplanır. Bu metodun programlamada seçilmesi tüm değişkenlerin bir noktada saklanabilmesinden dolayı kolaylık sağlayacaktır [23]. Bu avantajından dolayı genellikle ticari HAD yazılımlarında eş ağ metot kullanılır. Aslında bu metodun uygulanmasının başlaması ve artması basınç ve hız ayrımını sağlayan Rhie Chow tarafından geliştirilen interpolasyonun bulunması ile olmuştur.



Şekil 2.7 Kayık ağ düzeni ((Introduction to numerical simulation of fluid flows Technical University of Munich (2004))

Tüm kontrol hacimlerinde tüm değişkenler için aynı uygulama sürdürülür. Bu düzenin bir dezavantajı verilen tek bir düğüm noktasında saklandığından muhtemel basınç dalgalanmalarına yol açabilmesidir.

Kartezyen koordinat düzleminde kayık ağ düzenlenmesi Harlow ve Welsh (1965) tarafından geliştirilmiştir. Bu düzenlemede Şekil 2.7’de tasvir edildiği gibi eş ağ düzenindeki gibi verilen tek bir noktada saklanması yerine tüm bilgilerin tek bir ağ de saklanmasıdır. İnterpolasyona gerek kalmadan ikinci dereceden bir yaklaşım ile terimler hesaplanabilir [23].

2.3. Çok Fazlı Akışın Temelleri

2.3.1. Giriş

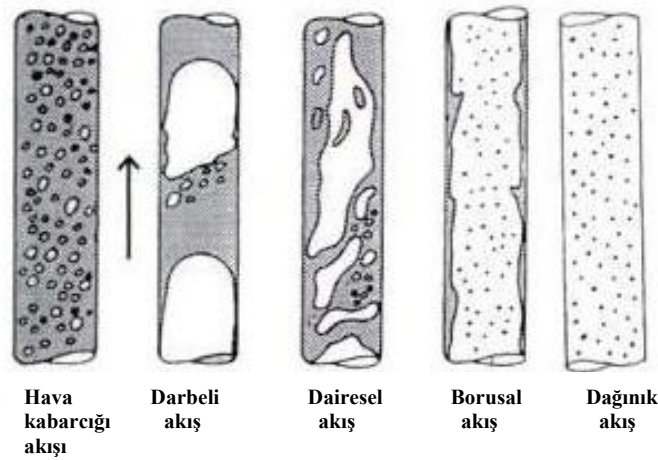
Yüzeysel olarak reaktör tiplerini iki kısma ayırırsak; yatak (bed) reaktörler ve sütun (monolith) reaktörler. Son zamanlarda otomotiv sektöründe emisyon kontrolü için geliştirilen sütun reaktörler çok fazlı reaktörlerde başarılı şekilde katalist olarak kullanılmaya başlanmıştır.

Şu avantajlara sahiptir; düşük basınç düşüşü, iyi gaz-sıvı kontağı ve daha iyi sıvı dağılımı, minimum eksenel yayılım ve yüksek verimlilik, yüksek akış oranı [26].

Bu avantajlara sahip olan sütun reaktörlerde kütle ve ısı transferi parametrelerinin belirlenebilmesi için iki fazlı hava kabarcığı dizisi akış araştırmaları yapılmaktadır, bu bölümde bu kanallarda meydana gelen tipik akışlar ve çok fazlı akışta meydana gelen kuvvetler ve etkileri ve boyutsuz ifadeler ve son olarak da literatürde boyutsuz ifadelerle ifade edilen bir deney ile araştırılmış hava kabarcığının bulaşık su ve temiz sudaki serbest yükselişinden bahsedilecektir.

2.3.2. Akış yolları tanımlamaları

İki fazlı akış bir kanalın içinde bulunduğu zaman birbirinden çok farklı kombinasyonlarda sıralanabilirler. Bu çeşitli akışlara akış yolları veya akış rejimleri denir. Her bir akış yolu iki fazlı akış ve ara yüzeylerinin dağılımı ile göreceli olarak karakterize edilirler. Gaz-sıvı akışının geometrisinde önemli bir değişiklik olduğunda bir akış yolundan başka birine geçiş vuku bulur. Şekil 2.8 ve Şekil 2.9 sırasıyla yatay ve düşey dairesel kesitli borulardaki akış rejimleri gösterilmiştir.



Şekil 2.8 Düşey yöndeki genel gaz-sıvı akış rejimleri [27]

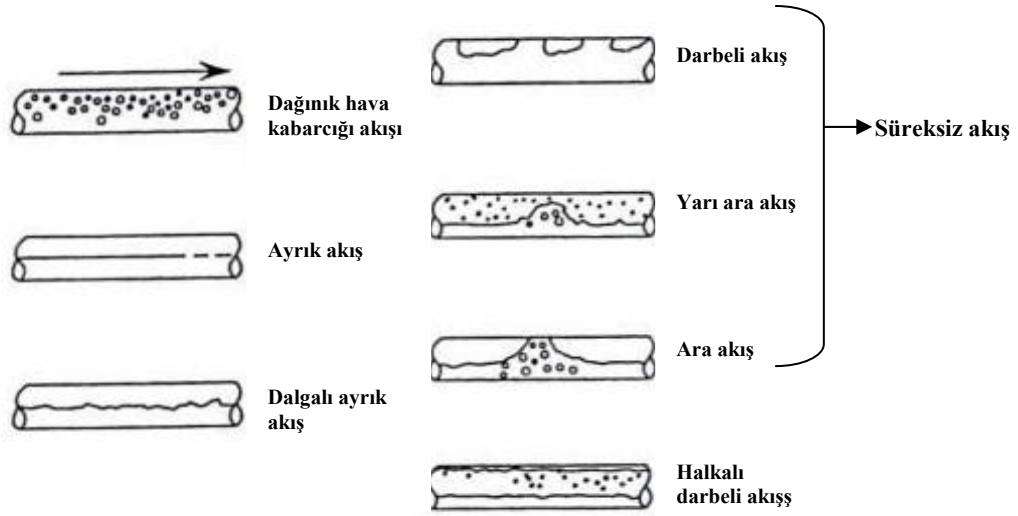
Hava Kabarcığı Akışı: Sıvı sürekli fazdır ve gaz sıvının içine değişik hacim ve şekillerde dağılmıştır.

Darbeli akış: Slug(ara akış bölmesi) akış hemen hemen kanalı dolduran büyük gaz kabarcıklarıyla karakterize edilir ve sıvı ara akışı ayırt edilebilirler.

Dairesel Akış: Dairesel akış annular sıvı filimin den ve içinde sıvı damlaları bulunan ya da bulunmayan gaz kürelerinden meydana gelir.

Dağınık akış: Gaz kesit alanının çoğunu işgal eder ve sıvı gazın içinde küçük damlacıklar formunda yayılmıştır.

Ayrık akış: Yerçekimi kuvveti nedeniyle yatay düzlemin üstünde veya kanalın içinde sıvı akışı boyunca oluşan akıştır. Gaz akışı üst kısımdadır [27].



Şekil 2.9 Yatay yöndeki genel gaz sıvı akış rejimleri [27]

Literatürde dar kanallardan geçen akış türü fazlasıyla vardır. Bizim modelimizde ise dikey konumdaki hava kabarcığı dizisinin yükselişi incelenecektir..

2.3.2.1. Hava kabarcığı akışı

Hava kabarcığı akışı kimyasal proses endüstrisinde önemlidir. Hem tek bir kabarcık hem de kümelenmiş yükselen kabarcıklar sıvının akışında dikkate değer önem taşırlar. Aslında hava kabarcığı akışının tam bir akış rejimi olduğu söylenemez. Çünkü pratikte verilen zaman ve mesafede hava kabarcıkları birbirleriyle çarpışabilir ve bir araya toplanmaları büyük kava kabarcığı formuna veya sıvı ara akışına sebep olabilir[27]. Bölüm 2.3.4’de Hava kabarcığının serbest yükselişinde meydana gelen şekil değiştirmelerine değinilecektir.

Bu çalışmanın modellenmesinde düzenli hava kabarcığı dizisi göz önünde bulundurulmuştur. Özellikle sütun reaktörlerde istenen sabit son hava kabarcığı hızları için farklı HAD yazılımları kullanılarak elde edilen bu hızlar karşılaştırılacak ve HAD yazılımlarında mini kanallarda gerçekleşen bu akış için kritik eleştirilerde bulunulacaktır.

2.3.3. Çok fazlı akışlarda kuvvetler

Genellikle kuvvetler üç farklı kategoride sınıflandırılabilir. Bu, sınıflandırma kuvvetinin etki ettiği boyut ile ilgilidir. Hacimsel kuvvetler (keza ağırlık kuvvetleri olarak da bilinir) hacim elemanları üzerinde etkilidir ve $V \propto L^3$ ile doğru orantılıdır. Yüzey kuvvetleri ise alan ile doğru orantılıdır. Son olarak çizgisel kuvvetler vardır birim uzunlukla doğru orantılıdır [24].

Çok fazlı akışkan rejim içinde görülen hacimsel kuvvetlerden ilki atalet kuvvetidir. Bu kuvvet hacim yoğunluğu ve hızın karesiyle doğru orantılı olurken birim uzunluk arttıkça atalet kuvvetini azaltacaktır. Bu kuvvet maddenin hareketinin değişmemesi için ve gerçek durumunu korumak için dış kuvvetlere direnç gösterir.

$$F_I = \frac{V\rho U^2}{L}$$

İkinci hacimsel kuvvet ise yerçekimine bağlı olan yerçekimi kuvvetidir. Birim hacim arttıkça bu kuvvet de artacaktır. Bu, kuvvet yerçekimi ivmesi yönünde akışkanın hızını arttıracaktır.

$$F_G = Vg\rho$$

Hacimsel kuvvetlerden üçüncüsü, yerçekimi kuvvetiyle ilgili olan kaldırma kuvvetidir. Çoğu eşitlikte yerçekimi ve kaldırma kuvveti beraber belirtilir. Bu kuvvet Archimedes kuvveti ile yerçekimi arasındaki farkı temsil eder.

$$F_B = Vg\Delta\rho$$

Akışlarda etki derecesine göre viskoz ve viskoz olmayan akış (ki aslında viskoz terimi olmasına rağmen Euler denkleminde etkisi basınç kuvvetlerine göre ihmal edilebileceğinden bu ismi alır). Alana etki eden bu kuvvetler yüzey kuvvetleri ve basınç kuvvetleridir.

Yüzey kuvvetlerinden olan basınç kuvveti basınç gradyanı yönünde akışkanı hızlandırmaya meyillidir.

$$F_p = A\Delta p$$

İkinci yüzey kuvveti viskoz kuvvetidir. Akışkanı aynı biçime getiren ve böylelikle de hız farklarını azalttığı bir kuvvettir.

$$F_V = \frac{A\mu U}{L}$$

İki fazlı akışlara (gaz-sıvı veya sıvı-sıvı) özel olan bir kuvvet değeri yüzey kuvvetidir. Bu kuvvet doğrusaldır ve ara yüzeyin yüzey alanını minimize etmek için etkilidir.

$$F_L = C\sigma \quad (C \text{ karakteristik uzunluk, yüzey gerilim katsayısı})$$

2.3.4. Boyutsuz Sayılar

Akışkanlar dinamiğinde bazen bilinmeyenleri çözmek için gerekli denklem sayısına ulaşamadığından akışta etkisi diğerlerine göre ihmal edilebilenleri belirlenmesi gerekir. Akışkan olayları hakkında bilgi edinmek amacıyla kendi aralarında ve birbiriyle ilgili değerlerin oranları bize boyutsuz değerler verecektir. Bu boyutsuz veriler sayesinde ihmal edilebilecek değerler temel denklemlerinde sıfır alınabilir. Bu açıdan, genellikle de bilim adamlarının ismi ile anılan, boyutsuz ifadeler akışkanlar dinamiğinde önemli yere sahiptir. Bunlardan bazılarını aşağıdaki tabloda görebiliriz;

Tablo (2.2) Boyutsuz Sayılar

Reynolds Sayısı	$Re = \frac{F_I}{F_V} = \frac{f_I}{f_V} = \frac{\rho LU}{\mu}$
Euler Sayısı	$Eu = \frac{F_P}{F_I} = \frac{f_p}{f_I} = \frac{\Delta p}{\rho U^2}$
Froude Sayısı	$Fr^2 = \frac{F_I}{F_G} = \frac{f_I}{f_G} = \frac{U^2}{gL}$
Weber Sayısı	$We = \frac{F_I}{F_S} = \frac{f_I}{f_S} = \frac{\rho LU^2}{\sigma}$
Eötvös Sayısı	$Eo = \frac{F_B}{F_S} = \frac{f_B}{f_S} = \frac{\Delta \rho g L^2}{\sigma}$
Kılcallık Sayısı	$Ca = \frac{F_V}{F_S} = \frac{f_V}{f_S} = \frac{\mu U}{\sigma}$
Morton Sayısı	$Mo = \frac{F_B F_V^4}{F_I^2 F_S^3} = \frac{g \Delta \rho \mu_c^4}{\rho_c^2 \sigma^3} = \frac{Eo We^2}{Re^4}$
Eş değer Çap	$d_{eq} = \left(\frac{6V_p}{\pi} \right)^{1/3}$

Reynolds sayısı akış hakkında bize bazı bilgiler sunar. Matematiksel olarak ifade edilen akış türlerinden bir akışın “sürünme akışı” olup olmadığını Re sayısının boyutu ile anlayabiliriz. Aynı şekilde Re sayısı geometriye bağlı olarak da akışın düzenli veya düzensiz olması hakkında bilgi verebilir.

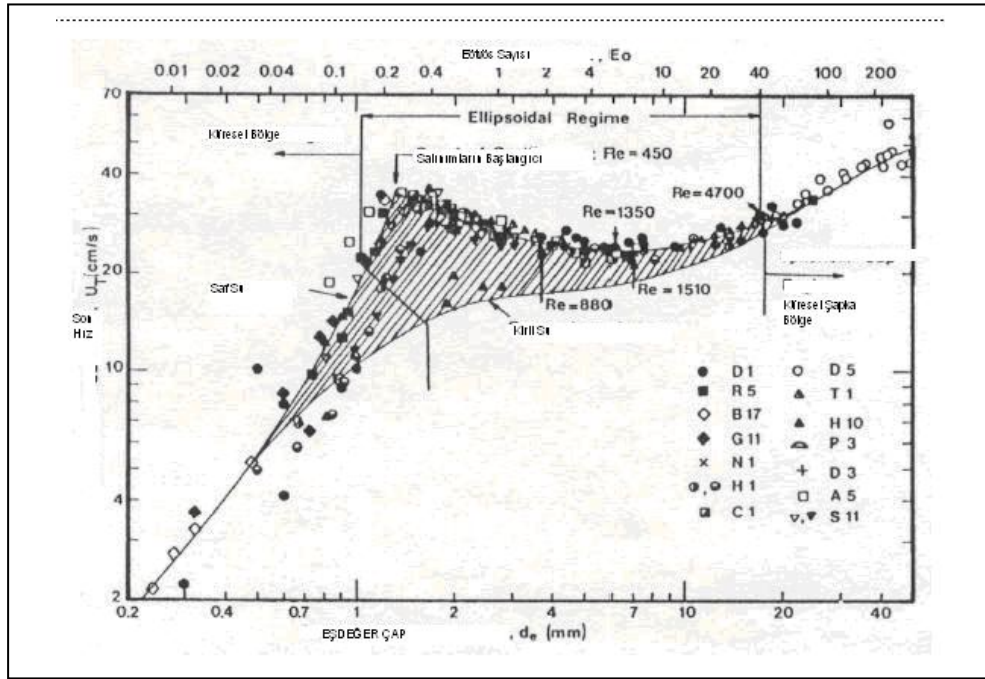
Euler sayısı ise basınç farkının yoğunluk ve referans hızın karesi ile boyutsuzlaştırması ile boyutsuz basınç farkını ifade eder.

Froude sayısı sistemin serbest yüzeylilik ifadesidir.

2.3.5. Hava kabarcığının serbest yükselişi

İzole edilmiş parçacıkların ve kümelerin içindeki parçacıkların serbest yükselişi veya düşüşü üzerinde birçok sayıda araştırma mevcuttur. İzole edilmişin manası, bir akış etrafında bulunan tek bir parçacıktır. Şimdi durgun bir sıvının içinde izole edilmiş hava kabarcıklarının serbest yükselişi üzerinde durulacaktır. Kümeli yığın parçacıkların akışı hakkında bilgi burada bahsedilmeyecektir.

Şekil 2.10'da görülen deneysel veri eşdeğer çapın fonksiyonu olarak Eötvös Sayısı'na göre suyun içinde yükselen hava kabarcığının son hızı (terminal hızı) V_T gösterilmiştir. Veriler üstteki çizgi saf sistem ve alttaki çizgi bulaşıklı su sistemindeki yükselen hava kabarcıkları için verilmiştir. Her ikisi arasındaki bölge taranmıştır. Burada bulaşıklı suyun manası su saflığını bozan parçacıkların veya yüzey gerilmesini azaltan maddelerin bulunmasındandır. Şekil 2.10'da üç farklı rejim görülmektedir. Küçük çaplar için hava kabarcığı küreseldir ve doğrusal bir yol boyunca yükselir. Çok büyük hava kabarcıkları içinde hava kabarcıklarının yükselişi doğrusaldır fakat görünümü küresel şapka şeklindedir. Her iki durumda küresel rejim ve küresel şapka rejiminde yükselen hız eşdeğer çap ile artar ve sistemin saflığına bağlı yükselen hız bağımlılığı çok zayıftır. Şekil 2.10'da elipsoidal olarak tahsis edilen rejim orta çap içindir. Bu rejim en karmaşık olanıdır ve suyun saflığına bağlı olarak büyük veri dağılımı gösterir. Bulaşıklı su için yükselen hız monoton olarak çap ile artar ve akış yolu da düzgündür. Saf su için ve elipsoidal rejimin içinde artan hız artan hava kabarcığı büyüklüğüne bağlı olarak önce artar. Fakat bir yerel maksimum hıza ulaştıktan sonra düşey hız, yerel bir minimum değere düşer ve sonra tekrar artar. Şayet eşdeğer çap artan hızdaki yerel maksimuma denk gelenden daha küçük ise elipsoidal hava kabarcığının şekli kararlı ve yörüngesi doğrusaldır. Tam tersi durumunda, yani maksimum bölgedeki çaptan daha büyük olan çaplar için hava kabarcığı şekli kararlı olacaktır. Aynı şekilde izlediği yörüngesi düzgün değildir ve izlerin kararsızlığı hava kabarcığı yolunda salınımlara neden olacaktır. Bu hava kabarcığı yollarının şekli zigzag veya heliseldir. Bu durum hava kabarcığı hızının düşey bileşenini azaltıcı yönde olur. Eşdeğer çap değerinin birazcık daha arttırılması hava kabarcığı şeklini kararsız yapacaktır ve hem hava kabarcığı şeklinde hem de yörüngelerinde düzensiz salınımlar vardır.



Şekil 2.10 20 °C sudaki izole edilmiş hava kabarcıklarının artan son hızı [28]

Şekil 2.10'de gösterilen son hava kabarcığı hızları hava su sistem için geçerlidir. Genellikle son artan hız her iki fazın fiziksel özelliklerine bağlıdır[24].

BÖLÜM 3. NÜMERİK TEST DURUMU TANIMI

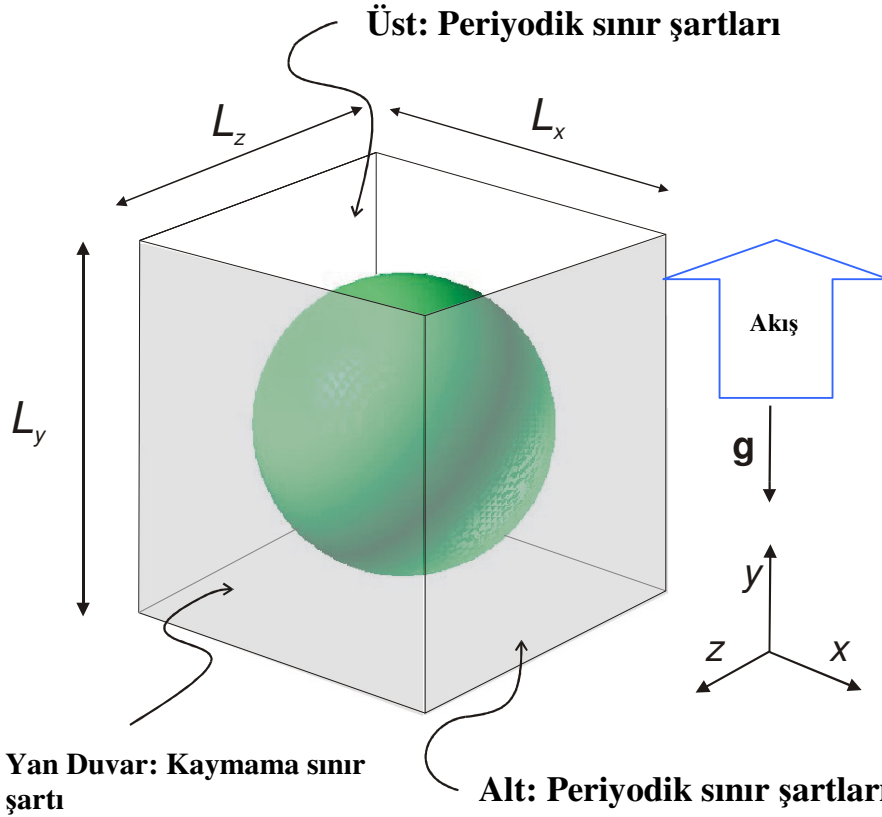
Bu bölümde önce hava kabarcığı dizisi akışı test durumu ve sonrasında fiziksel ve nümerik model hakkında bazı detaylar verilecektir. Bu bölümün ikinci kısmında yazılım karşılaştırılması için kullanılan farklı bilgisayar yazılımlarının kısa bir tanımı verilecek ayrıca şuan ki çalışmada yapılan tüm simülasyonlarda kullanılan parametre ve nümerik metotların detayları verilecektir.

3.1. Hava Kabarcığı Dizisi

Hava kabarcığı dizisi gaz-sıvı akış içeren küçük kanallarda yaygın bir akış yoludur. Hava kabarcığı dizisi ardı ardına gelen, aynı şekil ve hacme sahip hava kabarcıklarından oluşur. Ara akış bölme ile birbirlerinden ayrılan hava kabarcıkları bütün kanalın kesitini neredeyse tamamen doldurur, literatürdeki tanımı “Taylor Hava Kabarcığı”dır ve aynı aksenal hızla ilerlerler. Bu açıdan hava kabarcığı dizisi akışı veya Taylor hava kabarcığı bir hava kabarcığı ve sıvı ara akış bölmesinden oluşan bir birim hücreyle tam olarak tanımlanabilir. Thulasidas ve arkadaşları [26] gaz olarak hava ve sıvı olarak silikon yağı kullanarak 2mm x 2mm kesite sahip bir kanalın içinde ve 2 mm iç çapa sahip dairesel kılcal borularda hava kabarcığı dizisi deneyini gerçekleştirmiştir. Dar kanallarda iki akışkan akışları için ilgili boyutsuz gurup kılcallık sayısıdır (Ca) ve şu formülle ifade edilir; $Ca = \mu_L U_B / \sigma$, burada U_B hava kabarcığının hızı, μ_L sürekli sıvı fazın viskozitesi ve σ yüzey gerilim katsayısıdır. Küçük boyutlarda iki akışkan akışı için kılcallık sayısının önemi iki baskın kuvvet olan yüzey gerilim ve viskoz kesrinin birbirine oranını ifade etmesinden dolayıdır. Geniş bir kılcallık sayı aralığını karşılamak amacıyla Thulasidas ve arkadaşları [26] farklı viskozitelere sahip silikon yağını kullanılarak deneylerini gerçekleştirmişlerdir.

3.2. Nümerik Model

Şekil 3.1.'de temel hesaplama düzenin bir taslak resmi gösterilmiştir. Koordinat sistemi y eksenin eksenal, x ve z eksenin iki duvar normal yönleri olarak alınmasıyla tanımlanmıştır. Yerçekimi vektörü negatif y yönündedir. Kanalin dört yana bakan duvarında kaymayan sınır koşulu uygulanmıştır. Hava kabarcığı dizisi akışı için bir model kurmak için Ghidersa ve arkadaşlarının [11] yaklaşımı takip edilmiştir. Buna bağlı olarak bir birim hücre göz önünde bulundurularak akış yönünde periyodik (veya döngüsel) sınır şartları kullanılmıştır. Böylelikle; hesaplama alanı içinde tek bir hava kabarcığı ele alınarak, periyodik sınır şartı vasıtasıyla takip eden ve öncü olan hava kabarcıklarının etkisi göz önüne alınmıştır. Thulasidas ve arkadaşlarının deneyine uygun olarak $L_x \times L_z = 2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ kesite sahip bir kare mini kanal bu çalışmada kullanılmıştır. Birim hücrenin uzunluğu için $L_y = 2 \text{ mm}$ seçilerek hesaplama alanı bir küp olmuştur. Bu seçim Thulasidas ve arkadaşlarının [26] deneylerine nazaran kısa hava kabarcıkları sonucunu açığa çıkarır. Thulasidas ve arkadaşlarının [26] deneylerinde hava kabarcığı uzunluğu kanal genişliğinin birkaç katıdır. Wörner ve arkadaşları tarafından birim hücre uzunluğunun etkisi araştırılmıştır. Wörner [29] çalışmasında $2 \text{ mm} \leq L_y \leq 4 \text{ mm}$ arasında sekiz farklı değer üzerinde çalışmıştır. Sadece $L_y \geq 2.5 \text{ mm}$ durumlarının sonuçlarında, hava kabarcığı hızı ve faz gerçek hızı, Wörner ve arkadaşlarının nümerik çalışması ve Thulasidas ve arkadaşlarının [26] deney sonuçları ile karşılaştırıldığında uyumlu sonuç elde edilmiştir. Daha uzun birim hücreler daha gerçekçi iken, bu çalışmada her şeye rağmen $L_y = 2 \text{ mm}$ durumu iki nedenden dolayı kullanılmıştır. İlki hesaplama maliyeti ile ilgilidir. İkincisi sıvı ara akışkan bölgenin uzunluğu ile ilgilidir. Birim hücrenin içindeki aynı ortalama gaz hacim kesir için L_y daha kısa sıvı ara akışkan bölgesine neden olur ve böylelikle de ardışık hava kabarcıklarının arasında daha küçük bir mesafe olur. Herhangi bir CFD yazılımı için bu durum kontrol edilmesi güç bir durumdur. Çünkü herhangi bir kusur hava kabarcıklarının birleşmesine neden olacaktır ki sonrasında ise hava kabarcığı dizisi akışı değil fakat borsal akışa sebep olacaktır. Biraz önce tanımlanan hesaplama seti TURBIT-VOF, STAR-CD ve CFX yazılımları ile hesaplamalar için kullanılır. FLUENT yazılımı için hesaplama setinin değiştirilmesine gerek vardır. Bununla ilgili bilgi bölüm 3.3.4' de bulunmaktadır.



Şekil 3.1: Koordinat sisteminin Sketçi, Hesaplama Alanı, Sınır Şartları (boundary conditions)ve TURBIT-VOF, STAR-CD ve CFX simülasyonlarında kullanılan başlangıç hava kabarcığı şekli. Nümerik boyut değerleri $L_x = L_y = L_z = 2$ mm.

Gerçekleştirilen nümerik hesaplamalar (VOF) metodu tabanlıdır ki bu metot orijinal olarak Hirt and Nichols [13] tarafından geliştirilmiştir. Akışkan hacim metodunun temel kavramı bir boyutsuz f (veya α_L) skaler değerdir. Burada f , sürekli fazın kapladığı ki, burada sıvı fazdır, ağ hücre hacim kesrini temsil eder. Böylece $f = 1$ için ağ hücresi tamamıyla sıvı ile doldurulmuşken $f = 0$ durumunda gaz ile doldurulmuştur. Ara yüzeyin bir kısmını içeren bir ağ hücresinde, her iki faz bulunur ve bu durumda f değeri 0 ve 1 arasındadır. f 'e bağlı olarak bir karışım yoğunluğu, ρ_m , karışım viskozitesi, μ_m , ve kütle merkezin hızı, v_m , tanımlamak mümkündür;

$$\rho_m \equiv f \rho_L + (1 - f) \rho_G \quad (3.1)$$

$$\mu_m \equiv f \mu_L + (1 - f) \mu_G \quad (3.2)$$

$$\mathbf{v}_m \equiv \frac{f \rho_L \mathbf{v}_L + (1-f) \rho_G \mathbf{v}_G}{\rho_m} \quad (3.3)$$

Yukarıdaki tanımlamaları kullanarak ara yüzeydeki sınır şartları koşulu gibi gaz ve sıvı fazı hareketi için temel denklemleri, tüm iki faz alanında geçerliliği olan bir tek süreklilik ve momentum denklemleri setinde birleştirilebilir. Sabit fiziksel özellikleriyle Newtonien akışkanları için bu şu şekilde yazılabilir;

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{v}_m = 0 \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m = -\nabla p + \nabla \cdot \mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) + \rho_m \mathbf{g} + \mathbf{f}_\sigma \quad (3.6)$$

Burada $\mathbf{g} = (0, -g, 0)^T$ yer çekimi vektörü, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$, yerçekimi ivmesi ve \mathbf{f}_σ birim hacimdeki yüzey gerilim kuvvetini temsil eder. Şunu belirtmeliyiz ki, momentum eşitliğinin bu formunda ara yüzey ağ hücrelerinde her iki fazın aynı basınca izin verdiği ve aynı hız alanını paylaştığı kabul edilir (homojen model).

Denklem (3.6)'daki basınç p periyodik olmadığından, periyodik sınır şartlı bir alan için uygun olan bir formda bu denklemi tekrar yazmalıyız. Bu amaçla basıncı şu şekilde ayırılabilir;

$$\begin{aligned} p &\equiv P - \rho_L g \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} + \left(\frac{\bar{p}|_{y=L_y} - \bar{p}|_{y=0} + \rho_L g L_y}{L_y} \right) \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} = P + \rho_L \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} + \frac{\Delta \tilde{p}}{L_y} \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} \\ &= P + \rho_L \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f}_{pd} \cdot \mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Burada $\hat{\mathbf{e}}_y = (0, 1, 0)^T$ eksenel yöndeki birim vektör ve $\Delta \tilde{p}$, L_y mesafesi karşısındaki hidrostatik olmayan eksenel basınç düşüşünü temsil eder. $\bar{p}|_{y=0}$ ve $\bar{p}|_{y=L_y}$ ise sırasıyla $y = 0$ ve $y = L_y$ eksenel pozisyondaki kesitte ortalama basıncı gösterir. Tanımlanan

(3.7) denklemi (3.6) denklemde yerine yazılırsa Navier-Stokes denklemi şu formda açıklanabilir;

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m = -\nabla P + \nabla \cdot \mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) + (\rho_m - \rho_L) \mathbf{g} - \mathbf{f}_{pd} + \mathbf{f}_\sigma \quad (3.8)$$

Bu denklem $\bar{P}|_{y=L_y} = \bar{P}|_{y=0}$ 'nin eşit olması ve P 'nin periyodik olmasından ötürü bir periyodik hesaplama alanı için kullanılabilir. Bu nümerik çalışmada iki durum göz önüne alınacaktır. İlkinde $\Delta \tilde{p} = 0 \text{ Pa}$ 'dır ve $(\rho_m - \rho_L) \mathbf{g}$ terimi yoluyla harekete neden olan kuvvet sıvının kaldırma kuvvetidir. İkinci durumda hava kabarcığı hem sıvının kaldırma kuvvetine göre hem de harici bir $\Delta \tilde{p} = -18 \text{ Pa}$ basınç gradyanının etkisiyle yükselir. $\Delta \tilde{p} = -18 \text{ Pa}$ nin kütle kuvvetindeki değeri $-\Delta \tilde{p} / L_y = 18 \text{ Pa} / 0.002 \text{ m} = 9000 \text{ N/m}^3$ dir.

Sıvı fazın sabit fiziksel özellikleri olarak yoğunluğu $\rho_L = 957 \text{ kg/m}^3$ ve viskozitesi $\mu_L = 0.048 \text{ Pa s}$ değerlerini kullandık. Yüzey gerilim katsayısının değeri $\sigma = 0.02218 \text{ N/m}$ 'dir. Bu değerler Thulasidas ve arkadaşlarının [26] değerlerine karşılık gelirken, biz nümerik testlerimiz için gaz yoğunluğu ve viskozitesi değerlerini on kat arttırdık. Böylelikle $\rho_G = 11.7 \text{ kg/m}^3$ ve $\mu_G = 1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$ 'dir. Bu gaz ve viskozitedeki deki yapay artışı ticari olmayan TURBIT-VOF yazılımı ile gerçekleştirilen bir nümerik çalışmanın sonuçlarıyla kontrol edildi. Turbit VOF sonuçlarında $\rho_G = 1.17 \text{ kg/m}^3$ ve $\mu_G = 1.85 \times 10^{-6} \text{ Pa s}$ ile elde edilen sonuçlarla on kat arttırılmış sonuçlar karşılaştırıldı. Hava kabarcığı hızındaki, sıvı hızındaki ve hava kabarcığı şeklindeki farklılıkların çok küçük olduğu bulundu[29]. Arttırılan gaz özellikleri için kapalı zaman entegrasyon şemasında çok daha büyük zaman adımları kullanılarak önemli derecede CPU zamanından tasarruf sağlandı.

Belirtilen akışkan özelliklerine göre $(\rho_G - \rho_L)g = 9273.4 \text{ N/m}^3$ kaldırma kuvveti büyüklüğüne neden olur. Bu harici basınç gradyanına bağlı olan kütle kuvveti gibi aynı derecede bir büyüklüktür. Her iki kütle kuvveti aynı yönde yani düşey yukarı doğru hareket ederler. Fakat kaldırma kuvvetine bağlı kütle kuvveti sadece gazın

içinde etkiliyken harici basınç gradyanına bağlı kütle kuvveti tüm hesaplama alanında yani gaz ve sıvı fazın içinde etkilidir.

3.3. Yazılımlar

3.3.1. TURBIT-VOF Yazılımı

TURBIT-VOF bir sonlu hacimler metodu tabanlıdır ve kayık yapısı kullanır. Yüzey gerilim terimi[30] şu şekilde verilir;

$$\mathbf{f}_\sigma = a_i \sigma \kappa \hat{\mathbf{n}}_i \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}_i \quad (3.9)$$

Burada a_i hacimsel ara yüzey alan konsantrasyonu, κ ikiz ana ara yüzey eğrisi ve $\hat{\mathbf{n}}_i$ likidin içinde belirlenen ara yüzey birim normal vektördür. TURBIT-VOF'da, korunum denklemleri (3.4), (3.5) ve (3.8) boyutsuz formda çözülür. Detaylı bilgi için referans [11]'e bakınız. Projeksiyon metot, momentum denklemi (3.8) için kullanılırken, denklem (3.5)'e göre bir serbest hız alanı uzaklaşma ile gerçekleştirilmiştir. Denklem (3.8) zaman entegrasyonu için bir kapalı üçüncü dereceden Runge-Kutta metodu kullanılmıştır. Bütün konumsal türevler ikinci dereceden merkezi farklarla (CV) yakınlaştırılmıştır.

Ara yüzey değişiminin hesaba katılması için VOF metodunda ara yüzey tekrar yapılanma denklemi (3.4) fark şeması ile çözülmedi fakat iki adım içeren geometriksel bir usulle çözüldü. Birinci adımda her bir ağ hücresinde ara yüzey oryantasyonu ve bölgesi PLIC (piecewise linear interface calculation) metodu EPIRA (exact plane interface reconstruction algorithm), bu metot bölgesel olarak bir düzlem ile bir ağ hücresindeki ara yüzey yaklaşımı yapar detay için Sabisch ve arkadaşları [31], kullanılarak tekrar yapılandırıldı. İkinci adımda ağ hücre cephesinin karşısındaki sıvı akıları hesaplanır. Bu durumun en büyük avantajı kütle korunumu yüksek doğrulukta korunur. TURBIT-VOF geleneksel kanallarda tek farklı şekildeki hava kabarcıkları için doğrulandı [31] ve hava kabarcığı kümelerinin (bubble swarm) içinde bir yassı hava kabarcığı kolonu (flat bubble column) araştırılması için kullanıldı [32].

Bu çalışma simülasyonları 8 GB RAM li tek bir Siemens Fujitsu VPP5000 paralel vektör bilgisayar prosesörü ve her bir prosesör için 9.6 GFlops teorik pik performansı ile gerçekleştirildi. Tipik CPU zamanı her bir ağ ve zaman adımı için 70 μ s dir.

3.3.2. STAR-CD Yazılımı

CFX ve FLUENT ile birlikte, CD-Adapco STAR-CD önder ticari HAD yazılımlarından biridir. Bütün bu üç yazılım paketleri endüstri ve akademiden gelen akışkan dinamiği olgusuyla alakalı bütün alanlardaki problemleri çözmeyi iddia ediyorlar. CFX ve FLUENT gibi STAR-CD sonlu hacimler metodu tabanlı ve eş ağ yapısını kullanırlar. Bu çalışma başlandığında güncel olarak STAR-CD yazılımının versiyonu 3.26'ydı. Bu versiyonda uygulanan akışkan hacim metodu, ara yüzey keskinliğini sağlamak için “*Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes*” (CICSAM) [33] yaklaşımıyla hacim kesir denklemi (3.4)'ün çözümü için kullanılır. STAR-CD 3.26 versiyonunda uygulanan CICSAM şeması Courant sayısı denilen bir sınırlama içerir. Bu boyutsuz sayı, bölgesel hız ve ağ hücre genişliği tabanlıdır ve 0.3 değerini aşmamalıdır. Yukarıda tanımlanan hava kabarcığı modeli için belirli bir zaman adımı STAR-CD 3.26 ile başarılı bir şekilde çözümlenmiştir, fakat sonuç olarak Courant sayısı limiti aştığından simülasyonun durmasıyla sonuçlanmıştır. Bu duruşun meydana geldiği zaman adımı her zaman tekrarlanan değildi. Yani her seferinde farklı zaman adımlarında simülasyon durdu. Birçok farklı nümerik şemalar ve yakınsama parametreleri denenmesine rağmen, hava kabarcığı akışının yakınsamasız simülasyonu STAR-CD 3.26 ile elde edilemedi. Yani hava kabarcığı sabit bir son hıza STAR-CD 3.26 yazılımında ulaşamadı. Bu araştırmanın gidişatı sırasında STAR-CD 4.0 sürümü kullanılabilir duruma geldi. Serbest yüzey ve yüzeysel uygulamalar ile ilgili yazılımın yetenekleri çok sağlam bir şekilde COMET, CD-Adapco tarafından şu an distribütörlüğü yapılan, yazılımından gelen nümerik metotların uygulanmasıyla geliştirildi. STAR-CD 4.0 ile 3.26 sürümündeki yakınsama problemleri ile karşılaşılmadı ve bu dokümanda sunulan tüm simülasyonlar sürüm 4.0'ın VOF metodu ile elde edildi. STAR-CD VOF metodunda ara yüzey tekrar yapılanma opsiyonu yoktur. Onun yerine denklem (3.4) sadece fark

şemalarıyla çözülebilir. Burada, hacim kesir eşitliğinde (3.4) iletim terimleri için “*High Resolution Interface Capturing*” (HRIC) [34] şeması kullanılmıştır. Momentum denkleminde ise iletim ve yayılım terimleri için MARS şeması (blending factor 0.5) ile ayrıştırılmıştır. Hız-basınç ikilisi SIMPLE algoritması ile gerçekleştirildi. Bizim hava kabarcığı akış simülasyonları için SIMPLE algoritmasında maksimum iterasyon sayısının standart değer 5 den 50’ye artırılması gerek şarttır. Zaman ayrışımı için VOF metoduyla kombinasyon içinde olan 1. dereceden Euler açık metodu kullanılır. Bu metot STAR-CD yazılımında uygun olan tek metottur. STAR-CD yazılımında dögüsel sınır şartlarının yerine getirilmesi periyodik alan boyunca basınç düşüşünün direk tanımlanmasına olanak verdiğiinden $\Delta\bar{p} = -18\text{Pa}$ ’lık bir basınç düşüşüne karşılık gelen durum bu opsiyon kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Yüzey gerilim etkileri sürekli yüzey modeli (continuum surface model (CSF)) yoluyla hesaba katıldı. Yüzey gerilim kuvvetinin [35] büyüklüğü şu eşitlikle verilir

$$|\mathbf{f}_\sigma| = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_L}{|\nabla \alpha_L|} \right) \quad 3.10$$

STAR-CD simülasyonları her prosesör için 4.4 GFlops teorik pik performansı ve 2 GB RAM’li her bir nodun 2.2 GHz AMD Opteron 248 prosesörden oluşan seri modülde bir Linux Cluster (Derleyici) üzerinde gerçekleştirilmiştir. Tipik CPU zamanı birim ağ hücre ve zaman adımı için yaklaşık 50–100 μs .

3.3.3. Ansys CFX Yazılımı

Yazılım karşılaştırılması için ANSYS CFX 10.0 sürümü kullanıldı. CFX yazılımı bir sonlu hacimler metodu tabanlıdır ve eş ağ yapısı kullanılır. Formal olarak, CFX akış hacim metodunu (VOF) bize sunmaz. Ara yüzey ile ilgili akışkanlar, her iki faz arasında açık bir şekilde belirlenmiş ayrılabilir ve iyi tanımlanmış ara yüzeyin kaldığı müddetçe, homojen model olarak düşünülebilir. Bir CFX simülasyonu homojen modelin süreklilik denkleminin yüksek dereceli farklar yöntemi ile çözüldüğü yerde ve ara yüzey gerilim kuvvetinin süreklilik yüzey kuvveti modeli(CSF) ile

desteklendiği yerde STAR-CD yazılımındaki VOF metoduna denk olduğu kabul edilebilir. CFX yazılımındaki ara yüzey gerilim kuvveti[36], güncel terminolojiye uyarlanarak, şu şekilde verilebilir;

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \hat{\mathbf{n}}_i |\nabla \alpha_L| \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \hat{\mathbf{n}}_i \quad 3.11$$

CFX'deki yüzey gerilim kuvveti için kullanılabilir üç opsiyondan biri hacim kesri alanının tesviye edilmesi (yumuşak şekilde hassasiyetleştirilmesi) için tanımlanması gerekir. Bunlar tesviyesiz, Laplacian tesviye, ve hacim ağırlıklı tesviyedir. Kullanıcı kitabında Laplacian tesviye tavsiye edildiğinden burada bu opsiyon seçilmiştir. CFX'de yüzey gerilimin modellenmesi ile ilgili başka bir parametre gevşeme faktöründeki eğriliktir (curvature under-relaxation factor). Bu değer 0 ile 1 arasında sıralanır. Kullanıcı kitabında yüzey gerilim ile akan akışlar için daha küçük değerlerin kullanımı tavsiye edildiğinden, 0.25 değeri burada kullanılmıştır. CFX serbest yüzey kontrol panelinde üstelik “interface compression level” opsiyonu seçilmelidir. Bu tam sayı parametresi 0 ile 2 arasındaki değerleri alabilir. CFX kullanıcı el kitabında 2 derecesinin kullanılması keskin ara yüzeyi korumak amacıyla tavsiye edilir. Bu yüzden bu sayı alınmıştır.

Momentum ve süreklilik denklemleri ayrıştırması için yüksek çözüm adveksiyon şeması kullanılır. Momentum denklemi zaman entegrasyonu birinci dereceden geri adımlı(1st order backward Euler scheme) şeması kullanılarak STAR-CD koşulları ile uyum sağlanmıştır. Bir simülasyonda ikinci dereceden geri adımlı(2nd order backward Euler scheme) zaman entegrasyon kullanılarak, etkisi araştırılmıştır. Tüm simülasyonlarda periyodik sınır şartı kullanılmıştır. Harici basınç gradyanını hesaba katmak amacıyla 9000 N/ m³ lük bir kaynak terimi momentum denkleminin y bileşenine tanımlanmıştır.

CFX simülasyonları paralel modülde 16 GB RAM'lik Dual AMD Opteron 275'den oluşan bir Linux Derleyicinde gerçekleştirilmiştir. Birim ağ hücre ve zaman adımı için tipik CPU zamanı 40 µs aralarındadır.

3.3.4. FLUENT Yazılımı

Bu çalışmadaki ticari CFD yazılımlarından sadece FLUENT ara yüzeyin geometrik tekrar yapılandırması ile VOF'u sunar. Ayrıca, bu yazılım hacim kesir eşitliğinin çözümü için fark şemalarının kullanılmasına olanak verir. FLUENT birincil faz için (burada hacim kesir eşitliğini, α_L) değil ikincil faz için (burada α_G) çözüm yapar. Maalesef FLUENT 6.2.16 versiyonu VOF metodu ile periyodik sınır şartlarının birleşmesine izin vermez. Bu sebeple temel hesaplama kurulumunda bazı değişiklikler yapılması gerekmektedir.

Diğer kodlar tarafından hesaplamalara benzemeksizin, FLUENT simülasyonları sabit bir referans çerçevesinde değil fakat hava kabarcığı ile hareket eden bir referans çerçevesinde gerçekleştirilmiştir. FLUENT yazılımıyla bu tür simülasyonlar yakın zamanlarda Taha ve Cui [37] tarafından gerçekleştirilmiştir. Burada, referans çerçevesi aşağıya hareket eden duvarlar ile sağlanmıştır. Duvarların aşağıya yöndeki hızları, U_{wall} TURBIT-VOF yazılımıyla hesaplanan U_B ye göre yani son hava kabarcığı hızına göre ayarlanmıştır. Hesaplamalı alanının üstündeki giriş sınır şartları sıvı faz için tanımlanmıştır. Aşağı yönlü sıvı giriş hızı, giriş kesitin üzerinde yayılıdır ve $U_B - U_{slug}$ ile tanımlanmıştır. Sıvı ara bölme hızın değeri yine TURBIT-VOF simülasyonuna göre alınmıştır. Sıvı ara hız bölmesinde ana eksenel hız toplam "superficial" hız ile uyumlu olduğundan şu şekilde hesaplanır; $U_{slug} = \varepsilon U_B + (1 - \varepsilon) U_L$. U_{wall} duvar hızı tüm FLUENT hesaplamalarında sabit tutulduğundan, U_{slug} ara bölmenin hızı için mukabil TURBIT-VOF değeri sadece bir başlangıç tahmini değer olarak alınır ve sonrasında doğrulanır, öyle ki FLUENT simülasyonlarında hava kabarcıkları neredeyse askıda kalır ve kararlı akış koşulları elde edilir.

FLUENT yazılımında kullanılan hesaplama setinin şeması Şekil 3.2'de gösterilmiştir. Hesaplama alanının boyutu beş birim hücreye denk gelir. Üç eş hacimli küresel hava kabarcıkları bu alanın içine kurulmuştur ve böylelikle alt ve üstteki birim hücreler, 1 ve 5, sadece sıvı içerirler. Üç hava kabarcığının her birinin hacmi, yani 2,3, ve 4 nolu birim hücrelerin gaz hacim kesirleri $\varepsilon = 33.06\%$ dur. Bu üç hava kabarcığı konfigürasyonu öyle bir seçildi ki üst ve alttaki hava kabarcığının etkisi ortadaki hava kabarcığı üzerinde, hava kabarcığı dizisinde öncü ve takip eden

hava kabarcığının etkisi gibi gözükmelidir. Sıvı ile doldurulmuş birim hücre 1 hücre 2'ye girdiği zaman şu durumdan emin olunmalıdır; yayılı giriş hız parabolik profil halinde aşağı yönlü gelişmelidir. 5.birim hücre şunu son olarak sağlar ki; hesaplama alanın alt kısmı için tanımlanan çıkış hızı şartı, en alttaki hava kabarcığından yeteri kadar uzaktadır.

Hesaplama alanındaki başlangıç hızı sıfırdır. Bunun anlamı sabit bir referans çerçevesinde hem hava kabarcığı hem de sıvı yukarıya aynı hızla yukarıya doğru U_{wall} hızıyla hareket ederler. Belirlenen giriş ve çıkış hız şartlarının seçimi şunu yansıtır ki; hesaplama alanı boyunca gereği gibi basınç düşüşü uygun yapılmış ve hacim akış oranı gereği gibi tanımlanmıştır ve böylece simülasyonun sonucu da başlangıç giriş değerleri olmuştur. Bu simülasyon bu yüzden TURBIT-VOF, STAR-CD ve CFX için hesaplama setinde durumun tersi olmuştur.

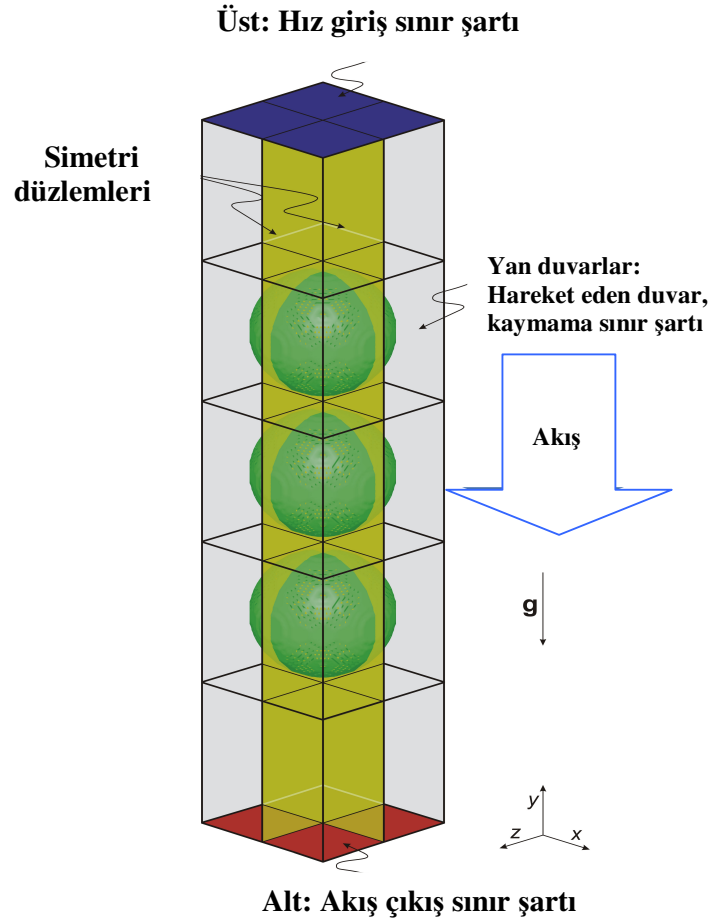
FLUENT kayık ağ düzeni çözüm temel denklemlerin nümerik çözümü için kullanılır. Basınç hız birleşimi için PISO algoritması gelişmiş iteratifsiz zaman şeması ile uyarlanmıştır. Momentum denklemi için QUICK şeması kullanılır ve zaman entegrasyonu 1. derece implicit şeması ile gerçekleştirilir.

FLUENT yazılımında VOF metodu ile dört farklı nümeriksel şemaları hacim kesri denklemini çözmek mümkündür. Bunların ikisi bir ara yüzey tekrar yapılanmayı içeren “geometric interface reconstruction method” ve “donor-acceptor method” ile gerçekleştirilecektir. Bir Youngs [38] metodunun genelleştirilmesi tabanlı olan geometrik ara yüzey tekrar yapılandırma, en doğru şema olarak değerlendirilebilir. Sebebi ise TURBIT-VOF yazılımdakine benzeyen bu metotta ara yüzey, “piecewise linear” elemanları ile temsil edilir. Fakat Hirt ve Nichols'un [13] donor-acceptor şemasında parçalı doğru olarak ifade edilebilen “piecewise linear” elemanlarında ara yüzey temsili “piece-wise” sabittir. Karşılaştırma için hesaplamalar FLUENT yazılımında bulunan dört farklı VOF şemaları ile gerçekleştirilmiştir.

FLUENT'de ara yüzey gerilim kuvveti için CSF (continuum surface model) modelin aşağıdaki formülasyonu kullanılmıştır [39].

$$\mathbf{f}_\sigma = \frac{\rho_m \sigma \kappa \nabla \alpha_L}{\frac{1}{2}(\rho_G + \rho_L)} \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \cdot \frac{\nabla \alpha_L}{|\nabla \alpha_L|} \quad (3.12)$$

FLUENT simülasyonları 3.4 GHz Dual XEON işlemcili ve 8 GB RAM'li bir iş istasyonunda çalıştırılmıştır. Birim ağ hücre ve zaman adımı için gerekli tipik zaman yaklaşık 50 μ s'dır.



Şekil 3.2 Hesaplama alanı taslağı, Sınır şartları (boundary conditions (b.c.)) ve FLUENT daki simülasyonlarda kullanılan hava kabarcığı dağılımı. Şekilde tüm kanalın kesiti gösterilirken sadece dörtte birlik kısmı simetri sınır şartları kullanılarak çözülmüştür. Bu yüzden hesaplama alanının boyutu 1 mm \times 10 mm \times 1 mm.

BÖLÜM 4. HESAPLAMALAR

4.1. Giriş

Hava kabarcığı akışı için nümerik sonuçlarının gerçekçi bir karşılaştırılmasına olanak sağlamak amacıyla mümkün olduğu kadar benzer nümerik metotlar ve ayrıştırıcı parametreler farklı yazılımlarda kullanılmıştır. Ekteki Tablo'I de bu çalışmadaki gerçekleştirilen bütün simülasyonlar hakkında bir genel bakış verilmiştir. Bütün bu çalışmalarda bir yayılı dörtgen ve homojen altıgensel ağ kullanılarak simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Ağ iyileştirme çalışmasını sağlamak için üç farklı ağ boyutu değeri göz önünde tutulmuştur. Yani $h / 2 \text{ mm} = 1/48, 1/64 \text{ and } 1/128$. Ağ iyileştirme çalışmaları TURBIT-VOF ve STAR-CD için gerçekleştirilmiştir. Bazı simülasyonlarda hesaplama alanı tüm kısmı içerirken çoğunda kanal kesitin dörtte birlik kısmı x ve y yönünde düşey, kanalın orta tabakalarında ise simetri sınır şartıyla beraber göz önüne alınmıştır. Böylelikle tüm hesaplama hacmi yerine dörtte birlik kısmı çözülmüştür. CFX ve FLUENT yazılımları ile yapılan tüm simülasyonlar kanal kesitinin dörtte birlik kısmı için gerçekleştirilmiştir.

Bütün simülasyonlar transient olarak (hızla, çabuk değişen) gerçekleştirildi ve birçok simülasyonda zaman adımı $\Delta t = 0.757 \mu\text{s}$ kullanılmıştır. Bu zaman adımı genişliği ve ağ boyutu $h / 2 \text{ mm} = 1/64$ daha önceden hava kabarcığı dizisi akışı için TURBIT-VOF ile gerçekleştirilen literatürdeki simülasyonlarla eşitir. Ticari HAD yazılımları CFX, STAR-CD ve FLUENT açık zaman entegrasyon şemaları kullandığından dolayı TURBIT-VOF'daki kapalı zaman entegrasyonu şeması ile kullanılan zaman genişliğinden daha büyük zaman adımları kullanmak mümkündür. Bu açıdan HAD yazılımları ile yapılan bazı simülasyonlarda beş kat veya on kat daha büyük zaman adımı genişliği kullanılmıştır. $\Delta t = 7.57 \mu\text{s}$ en büyük zaman adım genişliği iken herhangi bir yakınsama problemine neden olmadı fakat bu değer artırılmasıyla FLUENT yazılımında hesaplamaların bozulmasına neden olduğu görülmüştür.

Bütün simülasyonlar akışkan hareketsiz durumdayken başlatıldı. Başlangıç faz dağılımı için hesaplama alanının merkezinde bir küresel hava kabarcığı tanımlanmıştır. Esas olarak bir birim hücrenin içinde iki farklı başlangıç gaz hacim kesri göz önünde bulundurulmuştur, $\varepsilon \approx 33\%$ ve $\varepsilon \approx 30\%$. Bu değerler yaklaşık olarak sırasıyla 1.714 mm ve 1.661 mm başlangıç küresel hava kabarcığının çapına karşılık gelir. Hesaplama alanının içindeki gaz hacim kesrine karşılık gelen hava kabarcığının başlangıç şartlarının oluşturulmasını HAD yazılımlarında sağlamak, sıradan bir görev değildir ve genelde bazı deneme yanılma yapmayı gerektirir. Bunun nedeni ise ara yüzeydeki sınır şartın şekil itibariyle küresel hava kabarcığı olmasından dolayı tam istenen değeri yakalamak güçtür. Sonuç olarak tüm simülasyonlarda tam bir başlangıç gaz tanımlanamadı. Akışkanlar karışmaz ve faz değişimi veya kütle transferi olmadığından, gaz hacim kesri tüm simülasyon boyunca sabit olmalı ve başlangıç değeri ε_0 den sapmamalıdır.

Bu kısımda yazılım karşılaştırmasının sonuçları; önce sadece kaldırma kuvveti tarafından akan akışın ve sonrasında kaldırma kuvvetine ek olarak bir hacimsel kuvvete denk gelen $-\Delta\tilde{p}/L_y = 9000 \text{ N/m}^3$ ile belirlenen bir basınç gradyanının olduğu durumlar için sunulacaktır. Farklı bilgisayar yazılımlarının karşılaştırılması için hesaplama alanındaki ana düşey yöndeki gaz ve sıvı hızın zamanla değişimi takdim edilecektir. Her hangi bir andaki ortalama hızlar şu ilişki ile hesaplanır;

$$U_B = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} (1 - f_{i,j,k}) v_{y,i,j,k}}{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} (1 - f_{i,j,k})} \quad (4.1)$$

$$U_L = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} f_{i,j,k} v_{y,i,j,k}}{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} f_{i,j,k}} \quad (4.2)$$

Burada v_y , v_m 'nin y yönündeki hız bileşenidir. i , j ve k alt indisleri x, y, ve z yönlerindeki ağ hücreleri belirtir ve N_i , N_j ve N_k bu yönlerdeki ağ hücrelerin

numaralarını belirtir. Bu hızlar bize y yönündeki fazların ortalama hızlarını verirler. Burada hesaplanan hızlar birim hücredeki hızın gaz veya sıvı olmasına bağlı olarak ortalamaya katılarak istenen fazın ortalama hızını verirler. Hesaplama alanındaki her bir hücrenin y yönündeki hız bileşeni f katsayı ile hesaplanır ve bu her bir zaman adımı için gerçekleştirildiğinde gerekli fazın zamanla değişimindeki hızı elde edilmiş olur. FLUENT için U_B ve U_L hız değerleri sabit duvar hızı U_{wall} , uç hava kabarcığı için denklem (4.1) ve (4.2) ile hesaplanan değerlere eklenerek bulunmuştur. Şayet uç hava kabarcığı hesaplama alanında tam olarak hareketsiz kalırsa, o zaman FLUENT için denklem (4.1)'e göre U_B sıfır olur. Fakat, pratikte hava kabarcıklarının pozisyonların değişiminde her zaman yukarı/aşağı yönlü önemsiz değişimler vardır, sonuç olarak U_B , U_{wall} 'dan azda olsa farklı olabilir.

Endüstriyel aygıtlar için iyi bir performans; sütun reaktörler gibi (monoliths), hava kabarcığı dizisi akışının bir kararlı bölgeye ulaştığı zaman elde edilir [26]. Bu yüzden kararlı koşullarda hava kabarcığı akışının elde edilmesi yüksek ara yüzey alanları ve difüzyon yolları ile yüksek ısı ve kütle transferi oranları elde etmek için en önemli konulardan biridir. Bu açıdan esasen bizim buradaki ilgileneceğimiz konu sadece son hava kabarcığı ve arasındaki sıvı bölmenin ulaştığı son hızlardır. Transient fazdaki hava kabarcığının hızlanması ve ilk durum şeklinin deforme olması burada konu olmayacaktır. Yine de birazdan üzerinde durulacak grafiklerde U_B ve U_L 'nin bütün değerlerinin, yani başlangıç durumundan itibaren, zamanla değişimi gösterilecektir.

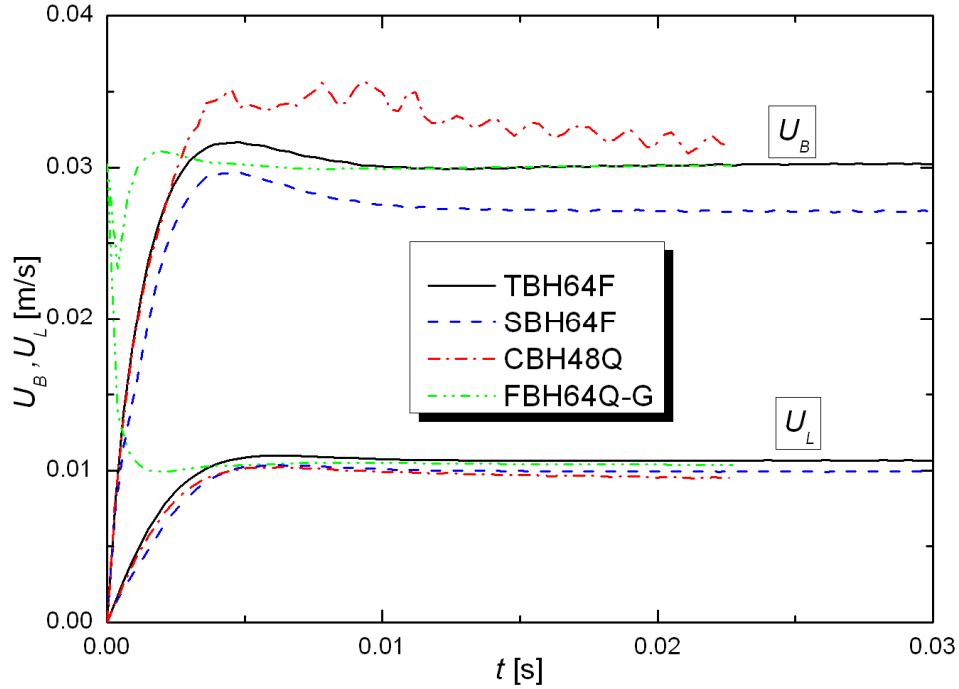
Bu kısımda ayrıca kararlı bölgedeki hava kabarcığı şekillerinin resimleri gösterilecektir. Bütün simülasyonlarda hava kabarcığı aksel simetriktir ve bu açıdan her hangi bir eksenin kesiti hava kabarcığı boyunca bir çember sonucunu verecektir. Hava kabarcığının şeklini belirlemek için, hava kabarcığının aksel kesitteki bu çemberin en büyük çapı, hava kabarcığının çapı D_B 'yi verir, farklı çalışmalarla elde edilen D_B 'nin nümerik değerleri Ekteki Tablo I'de verilmiştir. Ayrıca birim zamanda hesaplama alanında yazılımın kütle korunum özelliklerinin hassasiyetini ölçmek için ortalama gaz kesir değişimi de bu tabloda vardır. Gerekli sonuçlar 4.2 bölümünün sonunda tartışılacaktır.

Thulasidas ve arkadaşlarının [26] deneylerine karşı TURBIT-VOF yazılımının doğrulanması Wörner [29] ve arkadaşları tarafından yapılmıştır ve sonuçlar yeterli uzun birim hücreleri için iyi bir uyum içindedir. TURBIT-VOF sonuçları bu açıdan burada referans alınabilir. Bu çalışmada kullanılan birim hücre uzunluğu oldukça kısadır ve Thulasidas ve arkadaşlarının [26] deneyindeki değerden çok daha kısa olduğundan sunulan nümerik sonuçlarla bu deney sonuçlarının direkt bir karşılaştırılması anlamsız olacaktır.

4.2. Sadece Kaldırma Kuvvetinin Etkisiyle Hava Kabarcığının Hareketi

Bu bölümde hava kabarcığı akışı için etkiyen kuvvetin kaldırma kuvveti olduğu, bu yüzden basınç gradyanı değerinin sıfır olduğu $|\mathbf{f}_{pd}| = 0 \text{ N/m}^3$, sonuçlar tartışılacaktır. Şekil 4.1'de ortalama hava kabarcığı hızı U_B ve ortalama sıvı hızı U_L 'nin zamana bağlı değişimini farklı yazılımlarla hesaplanan BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) (farklı durumların tanımlanması için kullanılan terminolojinin tarifi için Ekteki Tablo I'in dipnotuna ve simgeler kısmına bakınız) yani sadece kaldırma kuvveti ve gaz hacim kesrinin yüksek olduğu temel durumu için gösterilmiştir. TURBIT-VOF, CFX ve STAR-CD ile başlatılan simülasyonlar bir sabit referans çerçevesi içinde hareketsiz başlatıldığından hem U_B ve U_L 'nin değerleri ani olarak şiddetli bir şekilde artarlar. TURBIT-VOF ve STAR-CD için U_B ve U_L değerleri yaklaşık 0.01 s'den sonra neredeyse bir sabit değere ulaşırken CFX için hava kabarcığı hızı $t > 0.02 \text{ s}$ için bile artan durumdadır. FLUENT hesaplamaları için geometrik ara yüzey tekrar yapılanma şemaları kullanılmıştır. Bu simülasyon TURBIT-VOF ile hesaplanan son hava kabarcığı hızı değeri ile hareketli bir referans çerçevesinde akışkanın hareketsiz durumundan başlatıldığından, FLUENT sonuçları başlangıçta U_B ve U_L değerlerinde keskin bir düşüş ve sonrasında her iki hız için de sabit değerlere ulaşana kadar bir artış gösterir. Ayrıca bu son hızlar yaklaşık 0.007s' den önce kararlı bölgeye ulaşılır. TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımlarında son hava kabarcığı hızı kılcallık sayısı hesaplaması için alındığında $Ca = 0.065$ elde edilir ve bir hava kabarcığı Reynolds sayısı $Re_B \equiv \rho_L D_h U_B / \mu_L = 1.205$ 'dir ki, burada $D_h = 2 \text{ mm}$ hidrolik çaptır.

Şekil 4.1’de farklı eğrilerin karşılaştırması şunu gösterir ki; STAR-CD ve CFX ile elde edilen U_L ’nin son hızları TURBIT-VOF ile elde edilen sonuçlardan azıcık



Şekil 4.1. TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı (test koşulları BH ($\Delta\tilde{p} = 0\text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) için).

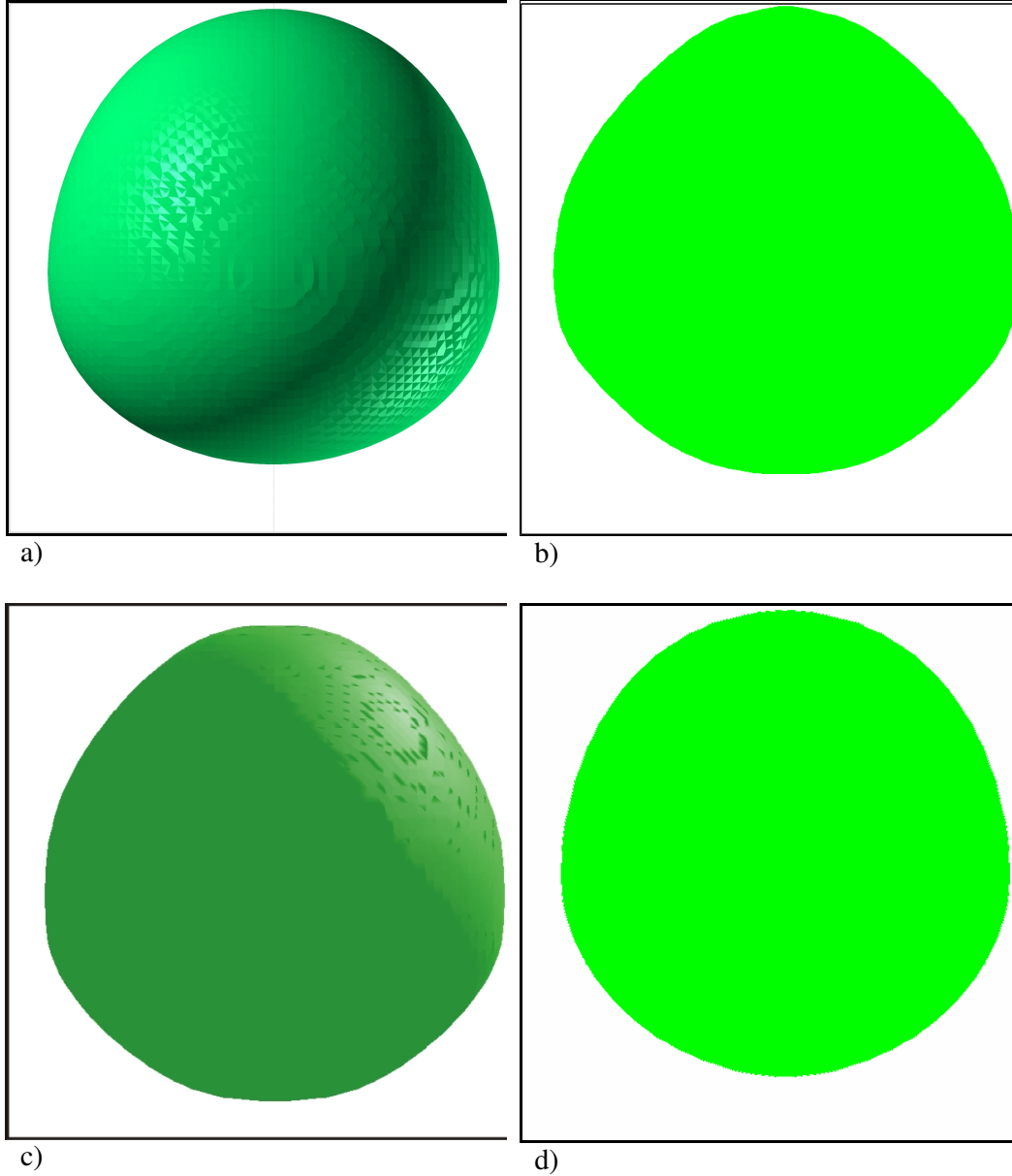
küçüktür. Bununla birlikte hava kabarcığı hızına göre, ilgili TURBIT-VOF yazılımının sonucu gerçek değer alınırsa STAR-CD yazılımının sonuçları gerçek değerinin altında ve CFX yazılımı sonuçları gerçek değerinin üstündedir. Aksine, TURBIT-VOF ve FLUENT için U_B ’nin son hızı yaklaşık %0.3’lük bir farkla neredeyse aynıdır. Ayrıca Şekil 4.1’de FLUENT ile hesaplanan ortalama U_L değeri TURBIT-VOF ile iyi uyduğu gözükmemektedir. Fark sadece yaklaşık %2.6’dan küçüktür. Buda şunu gösterir ki; TURBIT-VOF ve FLUENT sonuçları, farklı referans çerçevelerinde gerçekleştirilmesine rağmen iyi uyum içindedir. Bu durum için daha fazla bir delil, basınç farkı birim hücre boyunca $\Delta\tilde{p}$ basınç farkıdır. TURBIT-VOF yazılımında $\Delta\tilde{p} = 0\text{ Pa}$ değeri bir giriş verisi iken, FLUENT yazılımında simülasyonun bir sonucu ve değeri ise -0.7 Pa olarak elde edildi.

Böylece şu sonuç ortaya çıkar ki; TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımlarında uygulandığı gibi parçalı doğru geometrik ara yüzey tekrar yapılandırma (piecewise linear geometrical interface reconstruction) ile çözülen VOF metotları çok benzer sonuçlar verirler. Bu sonuçlar hacim kesir denklemini (Denklem 3.4) çözmek için ara yüzey yenilenme metodunu gerçekleştirilmeyen fakat yüksek derece fark metodunu kullanan STAR-CD ve CFX yazılımlarıyla elde edilen sonuçlardan farklıdır. Ayrıca diğer yazılımlarla elde edilen eğriler çok düzgün iken hava kabarcığı hızı (U_L için değil) için CFX sonuçları düzensiz salınımlar gösterir. Fakat bu durum CFX yazılımı için düşük ağ çözülmesi ile ilgili olabilir. CFX yazılımında bu ağ yapısının kullanılması teknik olanaklarımızla ilgilidir.

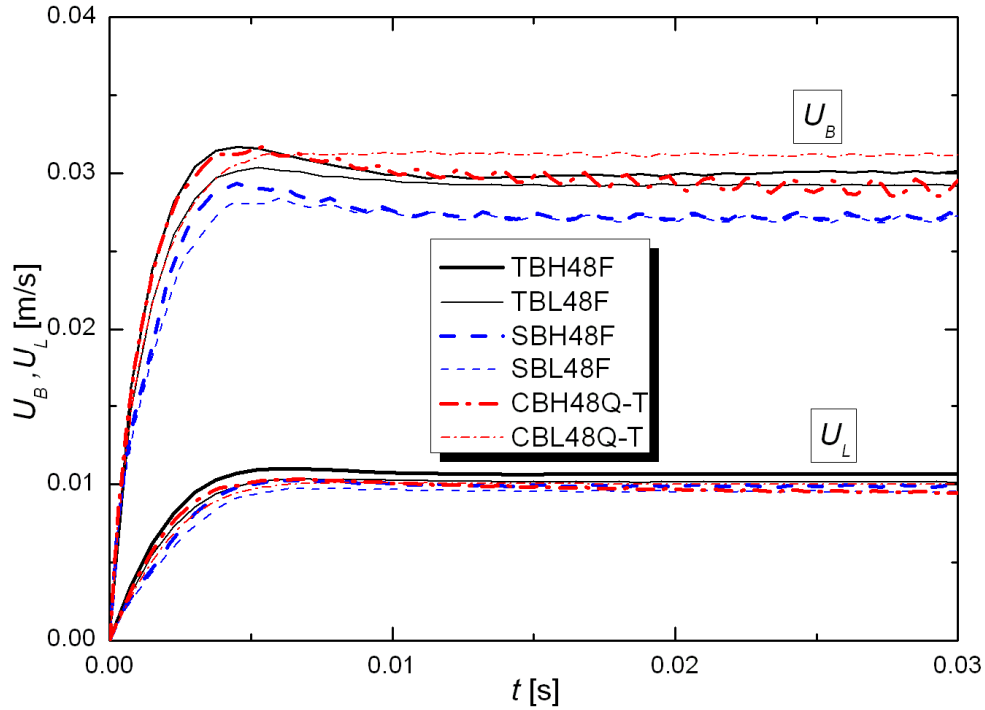
Şekil 4.2’de dört farklı yazılımlarla hesaplanan son hava kabarcığının yandan görünümü BH ($\Delta\bar{p} = 0\text{Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) yani; sadece sıvının kaldırma kuvvetinin etkisi altında ve yüksek hacim kesrine sahip durum için gösterilmiştir. TURBIT-VOF yazılımı için hava kabarcığının şekli şu usul ile edilmiştir. Her iki fazı içeren ($0 < f < 1$) her bir ağ hücre (mesh cell) için ara yüzeyin temsil edilen tabakasının merkezi hesaplanır. Komşu ağ hücreler için bu yolla hesaplanan noktalar üçgen veya dörtgen formunda birleşirler böylelikle kapalı bir yüzey elde edilmiş olur. Üç ticari HAD yazılımı için hava kabarcığının şeklinin elde edilmesi basit bir yolla olur. Yazılımların analiz kısmında $f = 0.5$ değeri alınarak bir eş yüzey (iso-surface) oluşturulmasıyla gerçekleşir. İlk bakışta Şekil 4.2.’deki hava kabarcığı şekilleri birbirine benzer gözüktür de bazı farklılıkları belirtmek gerekir. Bu farklı metotlar başlıca hava kabarcığının baş kısmının ucunu etkiler. TURBIT-VOF ve CFX’de yuvarlak, STAR-CD’de nokta ve FLUENT’de yassıdır. Ek Tablo I’de de görüldüğü üzere hava kabarcığı çapı D_B , neredeyse TURBIT-VOF FLUENT ve CFX’de birbirine çok yakinken STAR-CD için bu değer azıcık yüksektir. Hava kabarcığı şekillerindeki farklılıklar hava kabarcığının yarısının alt kısmı içinde gözlenebilir. Bu yandan görünüşte hava kabarcığının arka bölümü TURBIT-VOF ve CFX yazılımlarında eğrilmiş STAR-CD ve FLUENT yazılımlarında ise yassıdır.

TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımları kullanılarak elde edilen son hava kabarcığı hızı değerleri ile STAR-CD yazılımları kullanılarak elde edilenler karşılaştırıldığında yaklaşık %10 küçük olması ve CFX ile elde edilen değerlerle ($0.005\text{ s} < t < 0.015\text{ s}$

için) karşılaştırıldığında yaklaşık %10 büyük olması ve bununla birlikte farklı hava kabarcığı çapları ve hava kabarcığı görünümünün elde edilmesi şaşırtıcıdır. Bu tutarsızlıkla ilgili muhtemel nedenleri incelemek amacıyla ilave simülasyonlar CFX, STAR-CD ve TURBIT-VOF yazılımlarında gerçekleştirilmiştir.



Şekil4.2 BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) şartları için hesaplanan kararlı hava kabarcığının yandan görünüşü a) TURBIT-VOF (durum TBH64F), b) STAR-CD (durum SBH64F), c) FLUENT (durum FBH64Q-G) ve d) CFX (durum CBH48Q-T).FLUENT için ortadaki hava kabarcığı gösterilmiştir.

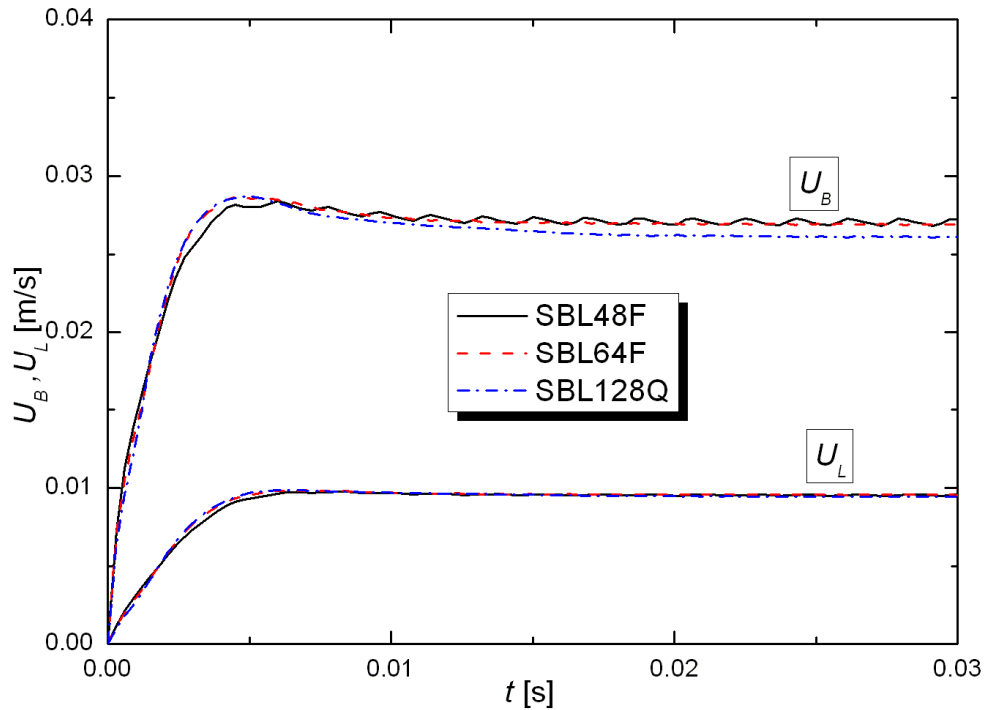


Şekil 4.3. TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı test koşulları BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\epsilon = 33\%$) ve BL ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\epsilon = 30\%$) ağ yapısı $48 \times 48 \times 48$. STAR-CD ve TURBIT-VOF için kullanılan zaman adımı genişliği $0.757 \mu\text{s}$ CFX için ise $7.57 \mu\text{s}$ dir.

ϵ , başlangıç hacim kesri, %33'den %30'a indirilmiştir. Ek olarak gerçekleştirilen CFX simülasyonlarında 10 kat artırılan bir zaman genliği kullanılmıştır. CFX yazılımında bu artışın sebebi elimizdeki teknik olanaklarla ilgilidir. Proje için ayrılan süreyi daha verimli kullanmak amacıyla ticari HAD yazılımlarının da kapalı denklemleri yerine açık denklemlerinin kullanılması nedeniyle bir problem olmadan zaman genliğinin arttırabileceğini varsaydık ve kısa zamanda karşılaştırma sonuçlarımızı elde etmek istedik.

CFX, STAR-CD ve TURBIT-VOF ile elde edilen sonuçlar her iki hacim kesirleri için Şekil 4.3'de gösterilmiştir. Akışın sadece kaldırma kuvveti ile ilerlemesinden dolayı şu beklenir ki, ϵ 'nin azalması U_B ve U_L hızlarının azalmasına neden olacaktır. Şekil 4.3'de bu TURBIT-VOF yazılımı için geçerli olduğu gözükür. STAR-CD yazılımı için ise sadece U_L hızında bir azalış gözlemlenirken hava kabarcığı hızı U_B

etkilenmeden kalır. CFX için durum iki nedenden dolayı kafa karıştırıcıdır. İlki yüksek hacim kesir durumu ve arttırılan zaman adımı genişliği için durum, hava kabarcığı hızı TURBIT–VOF ve FLUENT ile karşılaştırılırsa gerçek değer in üstünde değil fakat altındadır. İkincisi, düşük hacim kesir durumu için, arttırılan zaman adımı genişliği ile hava kabarcığı hızı yüksek hacim kesri durumununkinden çok daha yüksektir. Bu sonuçların fiziksel olmadığı gözükmektedir.



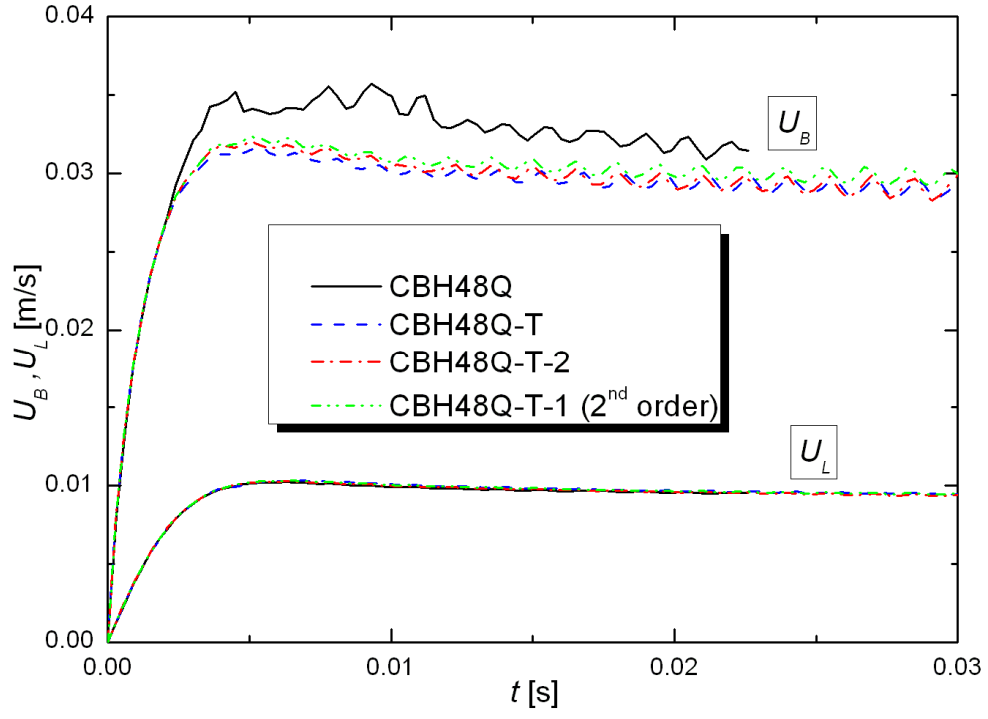
Şekil 4.4 STAR-CD ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı test koşulları ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 30\%$) üç farklı ağ yapısı üzerinde

CFX ve STAR-CD simülasyonlarında bu tutarsızlık için olası bir neden, yetersiz ağ çözünürlüğü olabilir. Bu konuyu araştırmak için STAR-CD ile üç farklı ağ kullanılarak aynı koşullar altında simülasyonlar gerçekleştirildi. Şekil 4.4’de sonuçlar gösterilmiştir. Üç farklı ağ üzerinde, son ortalama sıvı hızı için dikkate değer fark teşhis edilemedi. Fakat hava kabarcığı hızı en iyi ağ yapısında biraz küçüktür. Bir de, en kaba ağ durumunda (SBL48F), diğer iki ağ durumlarında gözlenmeyen, hafif bir salınım vardır. Bu salınım bu ağ yapısının üzerinde tüm CFX

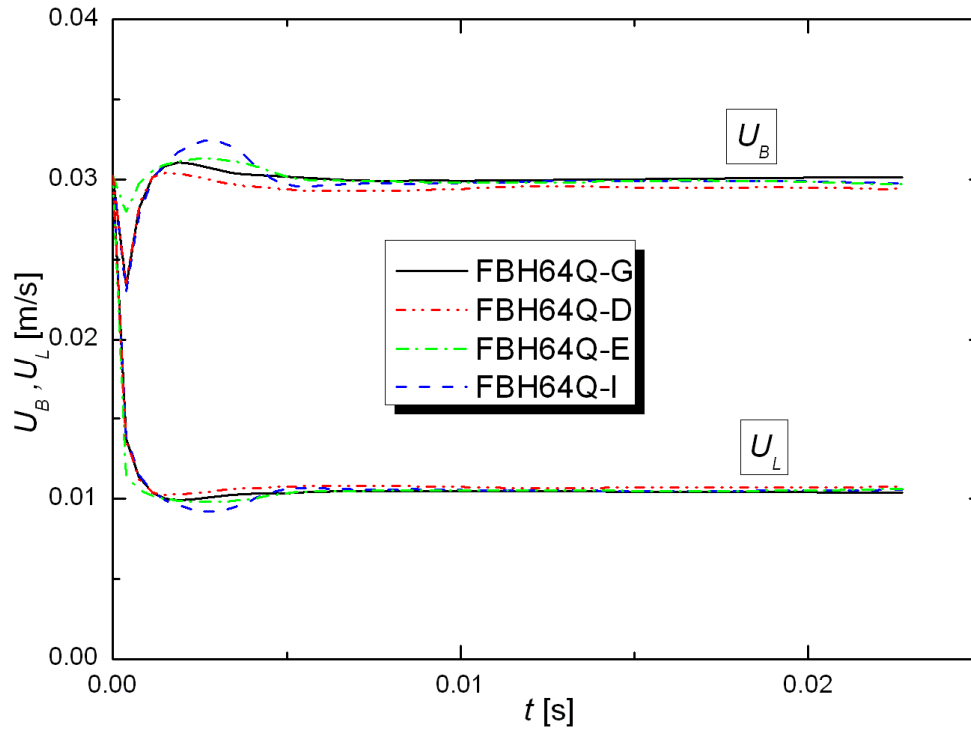
simülasyonlarında zaten gözlenmiştir. Yinede şu sonuç çıkarılabilir ki; TURBIT-VOF ve FLUENT ile karşılaştırıldığında STAR-CD ile elde edilen hava kabarcığının hızının düşüklüğü yetersiz ağ çözünürlüğü ile ilgili değil onun yerine hava kabarcığı çapının istenilenden büyük olması ile ilgili olabilir. Böylece hava kabarcığı şekli hava kabarcığı sürtünmesi üzerinde güçlü bir etkiye sahip olacaktır. Hava kabarcığı sürtünmesindeki farklılıklar direk olarak hava kabarcığındaki hızlarla ilişkilidir.

TURBIT-VOF içinde bir ağ iyileştirme çalışması gerçekleştirildi. Ek Tablo I'de TBH48F ve TBH64F durumları için U_B ve U_L hızlarının karşılaştırılmasındaki farklılıkların çok küçük olduğu gözükmektedir. Fakat bu karşılaştırmada hava kabarcığı çaplarının farkı birazcık büyüktür. Basınç gradyanlı durumlar için ise TPH48F ve TPH64F sonuçları neredeyse eşittir.

CFX için zaman adımı genişliği etkisi daha detaylı olarak incelenmiştir. Şekil 4.5'de $24 \times 48 \times 24$ ağ hücrelerinin ağ yapısı ve üç farklı zaman adım genişliği değeri kullanılarak BH ($\Delta\tilde{p} = 0\text{Pa}$, $\varepsilon = \%33$) durumu için sonuçlar karşılaştırılmıştır. $\Delta t = 3.785 \mu\text{s}$ ve $\Delta t = 7.57 \mu\text{s}$ zaman adım genişliği için sonuçların çok benzer olduğu gözükmekteyken en küçük zaman genişliği $\Delta t = 0.757 \mu\text{s}$ için hava kabarcığı hızı daha yüksektir. Daha küçük zaman adımı için sonuçların daha doğru olması beklenmesi gerekirken daha büyük zaman adımları için sonuçlar TURBIT-VOF ve FLUENT ile daha uyum içindedir. Şekil 4.5'de ayrıca şu not edilebilir ki; ikinci derece zaman entegrasyon şeması derecesinin etkisinin küçük olduğudur.

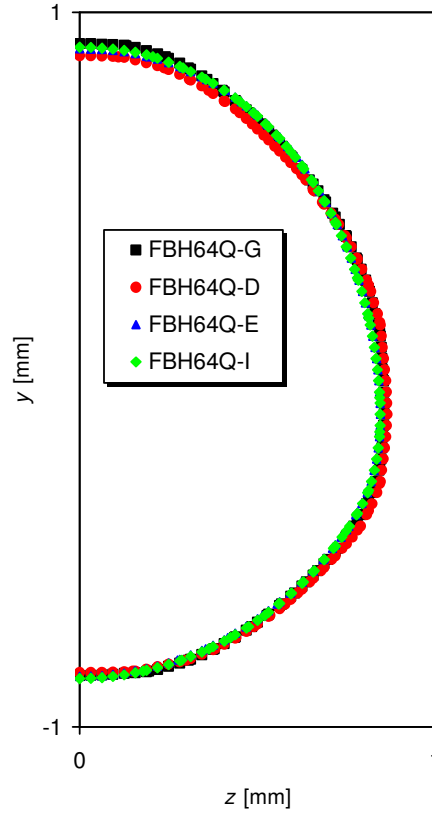


Şekil 4.5. CFX ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı üç farklı zaman adımı genişliği için test durumu BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) için. CBH48Q-T-2 durumu zaman adımı genişliği beş kez, CBH48Q-T ve CBH48Q-T-1 durumu için CBH48Q durumunda kullanılan $\Delta t = 0.75 \mu\text{s}$ den on kez daha yüksektir.



Şekil 4.6 Kaldırma kuvveti akışı için hacim kesir denkleminin çözümünde FLUENT yazılımında kullanılan farklı çözüm şemalarının hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızına etkisi

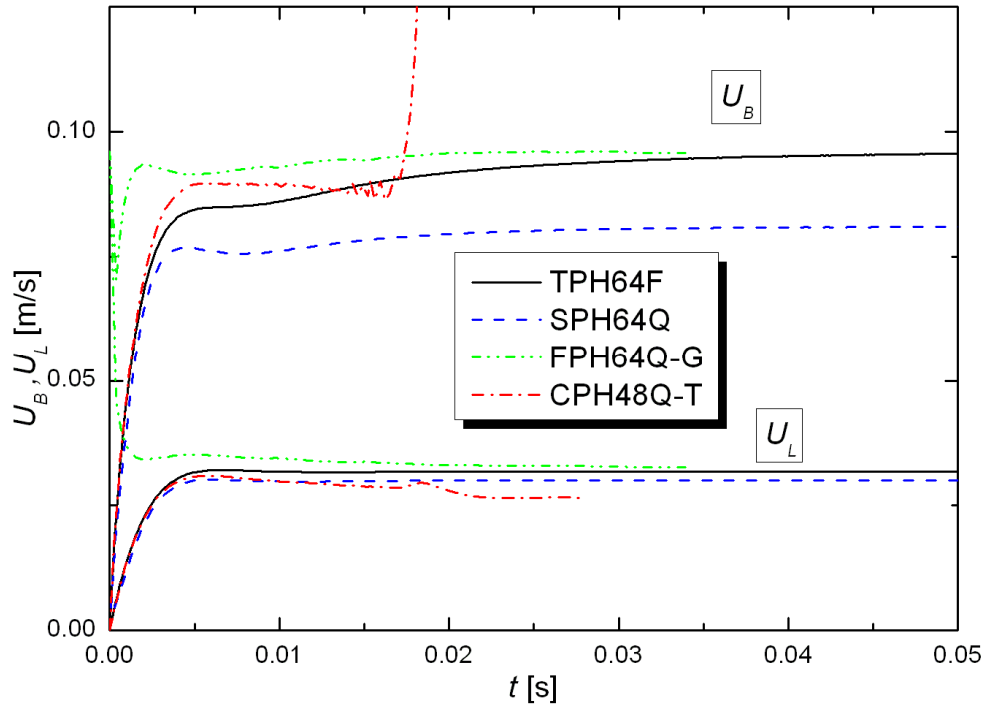
Şekil 4.6’da FLUENT ile elde edilen sonuçlar dört farklı VOF metotları (“geometric interface reconstruction”, “donor- acceptor”, “Euler-explicit” ve “implicit”) karşılaştırılmıştır. Farklı metotlar arasındaki farklılıklar başlangıç transient faz için biraz büyükken; ki bu, başlangıç küresel şekilden itibaren değişen hava kabarcığının deformasyonu ile ilgilidir, gaz ve sıvının son hızlarında gözlemlenecek farklar azda olsa vardır. Bununla beraber karşılaştırma sonuçları çok kötü de değildir. Ayrıca, TURBIT-VOF sonuçlarıyla en uyumlu sonuç ise geometrik ara yüzey yapılandırma yöntemi ile olduğu gözükmektedir. Şekil 4.7’de farklı VOF metotlarıyla elde edilen hava kabarcığı şekilleri gösterilmiştir. Bazı farklar varken, genel olarak hava kabarcığı şekilleri birbirine çok benzerdir.



Şekil 4.7 Kaldırma kuvveti akışı durumunda farklı VOF şemalarıyla elde edilen hava kabarcığı şekli için FLUENT yazılımının karşılaştırma sonuçları. Euler-explicit şeması FLUENT yazılımı ile sadece kaldırma kuvveti ile sürüklenen hesaplama alanında yüksek oranda hava kabarcığı ile dolu FBH64Q-E durumu, aynı durumu içeren fakat implicit şeması ile çözülen (FBH64Q-I) durumundaki hava kabarcığı yüzey sınırının altında olduğundan dolayı fark etmek güçtür. (Ortadaki hava kabarcığı durumu için gösterilmiştir.)

4.3. Kaldırma Kuvveti ve Harici bir Kuvvet Etkisiyle Hava Kabarcığının Hareketi

Hava kabarcığı dizisi akışı için bu bölümde kaldırma kuvveti etkisi ve 9000 N/m^3 değerinde bir kütle kuvvetine denk gelen harici eksenel bir basınç gradyanıyla elde edilen sonuçlardan bahsedilecektir. Farklı yazılımların kullanımı ile zamana bağlı olarak elde edilen ortalama hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı için sonuçlar Şekil 4.8'de gösterilmiştir.

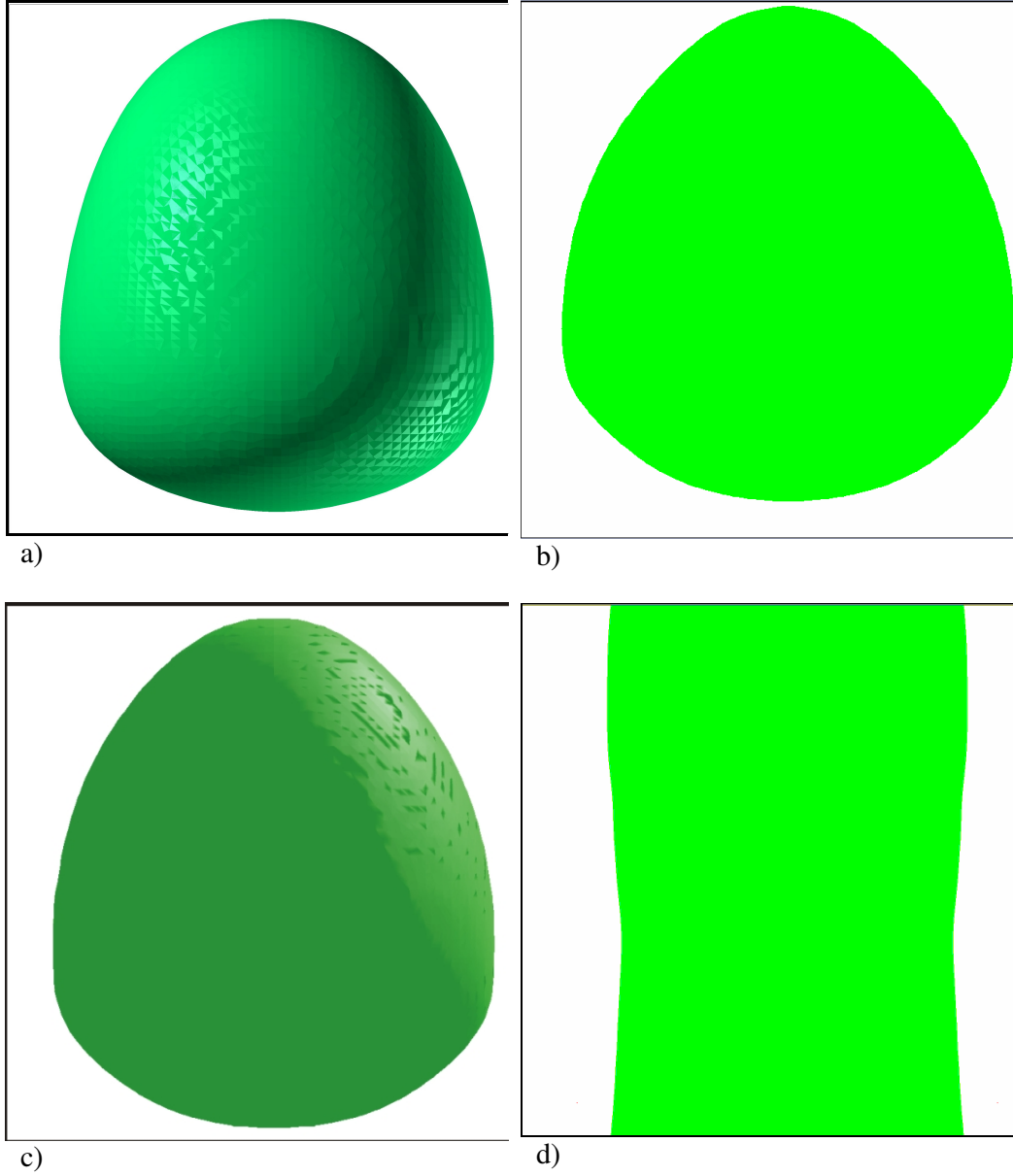


Şekil 4.8 TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX ve FLUENT ile hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızı, test durumu PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$)

FLUENT için geometrik ara yüzey yapılandırma yöntemi kullanılmıştır. Beklenildiği gibi basınç gradyanlı durumda hem U_B hem de U_L değerleri sadece kaldırma kuvvetli olan hızlardan daha yüksektir. Sonuç olarak da, hava kabarcığının son hızına ulaşana kadarki transient faz daha fazla zaman alır. TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımlarındaki son hava kabarcığı hızı kılcılık sayısı $Ca = 0.204$ 'e ve bir hava kabarcığının Reynolds sayısı $Re_B = 3.75$ değerine denktir. Şekil 4.1'de gösterilen sadece kaldırma kuvvetli durumuna benzer STAR-CD yazılımları sonuçları tekrar TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımlarındaki sonuçların durumlarına göre aşağıdadır. CFX sonuçları Şekil 4.1'e benzer şekilde, hava kabarcığı hızı başlangıçta TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımları ile elde edilenlerden yüksektir. Fakat durum yaklaşık $t \approx 0.017 \text{ s}$ 'de şiddetli bir şekilde U_B hızı aniden uzaklaştığında değişir. Bunun nedeni kısaca; başlangıçta küresel hava kabarcığı sıvı ara akış bölmesi kaybolana kadar uzamaya devam eden hava kabarcığı sonunda borusal (annular) akış formu alır. Böylece CFX ile bu ağ yapısında sabit hava kabarcığı dizisi akışı hesaplanamaz.

FLUENT ve TURBIT-VOF yazılımları için son hava kabarcığı artan hızı yaklaşık olarak birbirinden %1.6 ile farklı ve FLUENT yazılımlarının ortalama sıvı hızı yaklaşık %4.7 daha büyüktür. FLUENT hesaplamalarından hesaplanan birim hücre boyunca basınç farkı $\Delta\tilde{p}$ -21.5'dir. Bu değer $\Delta\tilde{p} = -18$ Pa giriş değeri TURBIT-VOF ile kabul edilebilir bir uyum içindedir. Burada “donor-acceptor” metot için daha iyi bir uyum elde edilmiştir. Konu ile ilgili değer -17.9 Pa'dır. TURBIT-VOF ve FLUENT sonuçlarının karşılaştırıldığı zaman şunu hatırlamalıyız ki; TURBIT-VOF yazılımında periyodik sınır şartına bağlı olarak “sonsuz” sayıda eş hava kabarcıkları göz önünde bulunduruldu, fakat FLUENT yazılımında bunun yerine üç hava kabarcığı simüle edildi. Bunun akılda tutulması her iki kod arasında kayda değer bir uyumun olduğu fikrini iddia edebilir.

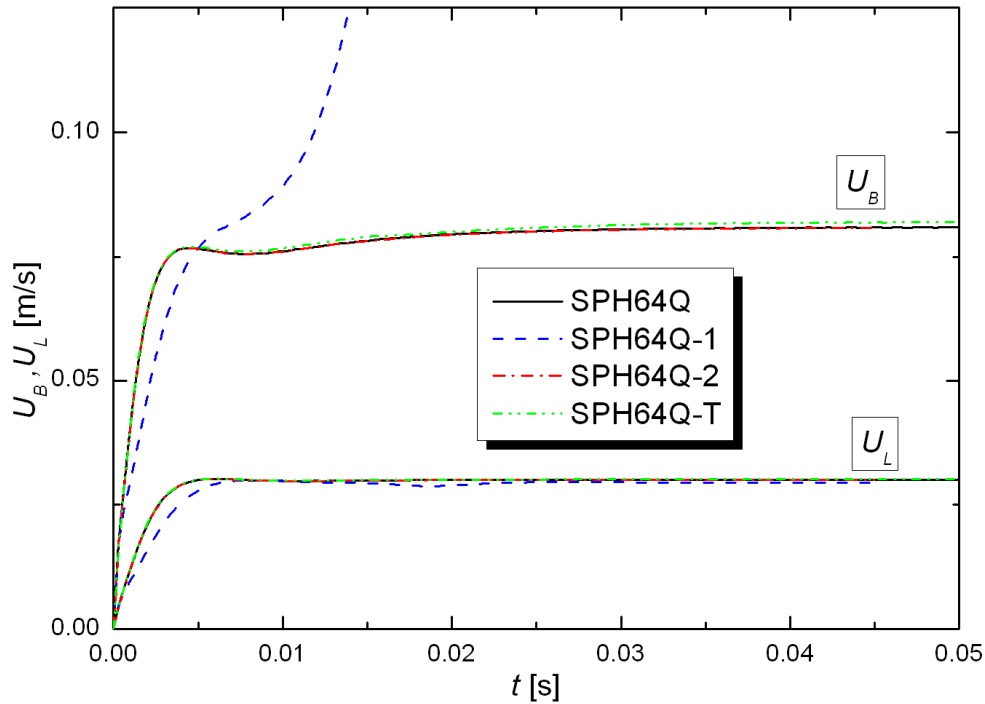
Şekil 4.9'da dört farklı yazılımla hesaplanan son hava kabarcığı şeklinin yandan görünümü PH ($\Delta\tilde{p} = -18$ Pa, $\varepsilon = 33\%$) durumu için gösterilmiştir. Baştan başa, TURBIT-VOF, FLUENT, ve STAR-CD yazılımları ile hesaplanan hava kabarcığı şekilleri birbirine çok benzer olduğu görünmektedir. Ekteki Tablo I'den TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımları için hava kabarcığı çapı neredeyse aynı denebilir. Fakat yine STAR-CD yazılımının D_B değeri, sadece kaldırma kuvveti ile olan durum için daha öncede görüldüğü gibi, biraz büyüktür. Ayrıca FLUENT yazılımı için sıvı akış ara bölmesinin uzunluğu TURBIT-VOF ve STAR-CD yazılımlarının sonuçlarından azıcık kısadır.



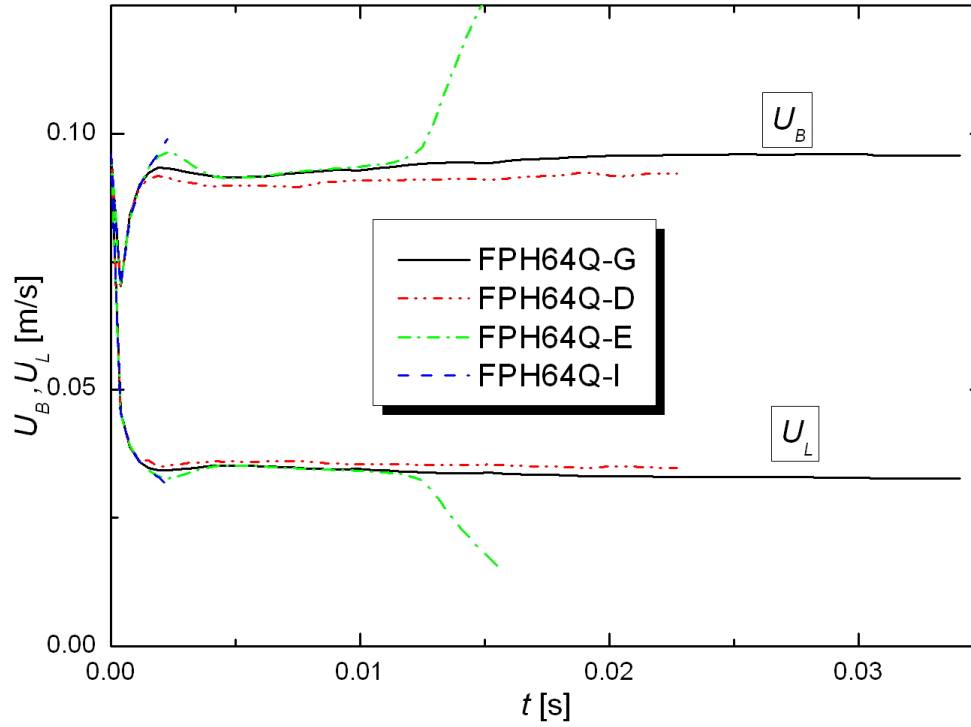
Şekil 4.9. PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) şartları için hesaplanan kararlı hava kabarcığının yandan görünüşü a) TURBIT-VOF (TPH64F), b) STAR-CD (SPH64Q), c) FLUENT (FPH64Q-G) ve d) CFX (CPH48Q-T). FLUENT simülasyonu için sadece ortadaki hava kabarcığı gösterilmiştir.

STAR-CD için ilave simülasyon çalışmaları zaman adım genişliği ve farklı şema etkisinin araştırılması için gerçekleştirilmiştir. Hacim kesir denklemi (3.4) ve momentum denklemi (3.6) için temel durum (SPH64Q) ve (SPH64Q-T) durumunda yüksek çözünürlük iletim şeması her ikisinde de kullanılmasına rağmen SPH64Q-1 durumunda bunun yerine hacim kesir denklemi için akış doğrultulu (upwind) ayrıklaştırma şeması ve momentum denklemi için SPH64Q-2’de doğrultulu (upwind)

şeması kullanılmıştır. SPH64Q ve SPH64Q-T durumları arasındaki tek fark zaman adımı genişliğidir. SPH64Q-T’de on kez zaman adımı genişliği arttırılmıştır. Şekil 4.10’da sonuçlar gösterilmiştir. SPH64Q ve SPH64Q-2 karşılaştırmasında momentum denklemi için yüksek çözünürlük şeması veya akış doğrultulu ayrıklaştırma şemasının seçilmesi herhangi bir fark teşkil etmediği görülür. Fakat SPH64Q ve SPH64Q-1 durumlarının karşılaştırılmasında hacim kesir denkleminde kullanılan yüksek çözüm şemasının akış doğrultulu ayrıklaştırma şeması ile yer değiştirmesinde gerçekçi sonuçların alınmadığı ortaya çıkmıştır. Hacim kesir denklemi için akış doğrultulu ayrıklaştırma şemasının kullanımı birçok ağ hücre (mesh cell) üzerinde orijinal ismiyle önemli bir “smearing”e yani; iki faz arasındaki keskin bir sınır yerine nümerik hatalardan dolayı oluşan sıvı-gaz bileşiminin kalınlığının arttığı ve sıvı ara bölmenin gittikçe birbirine yaklaşmasına sebep olan bu etki hava kabarcığı dizisi akışı düzenini tutamaz fakat onun yerine borusal (annular) akışa sebep olur. SPH64Q ve SPH64Q-T durumlarının karşılaştırılması şunu gösterir ki; STAR-CD de zaman adımı genişliğinin etkisi çok küçüktür.



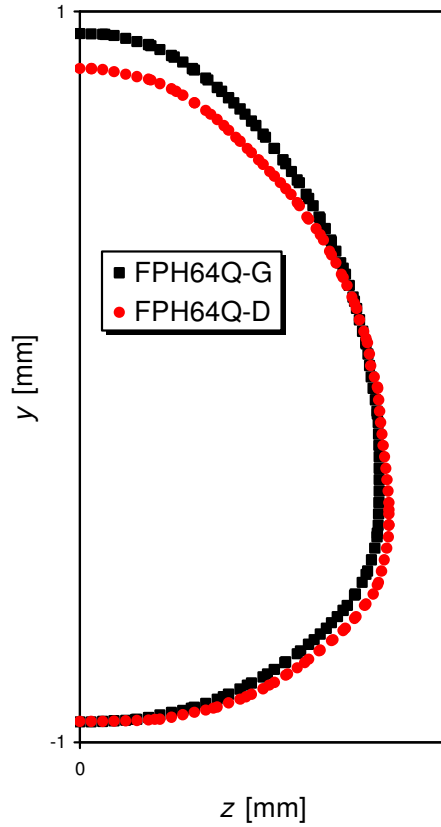
Şekil 4.10 STAR-CD ile hesaplanan zamana bağlı HK hızı ve ortalama sıvı hızı hacim kesir denklemi ve momentum denklemlerinde kullanılan farklı şemalar ve farklı zaman adım genişliği PH ($\Delta\tilde{p} = -18\text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) durumu için gösterimi



Şekil 4.11 Kaldırma kuvveti ve basınçla akan akış için hacim kesir denkleminin çözümünde FLUENT de kullanılan farklı çözüm şemalarının hesaplanan zamana bağlı hava kabarcığı hızı ve ortalama sıvı hızına etkisi

Şekil.4.11’de dört farklı VOF metodu (geometric interface reconstruction”, “donor-acceptor”, “Euler-explicit” ve “implicit”) kullanılarak elde edilen FLUENT sonuçları basınç gradyanlı durumlar için karşılaştırılmıştır. Geometrik ara yüzey yenilenme şeması ve donor-acceptor metotları kullanılarak hava kabarcığı dizisi akışı hesaplanmıştır. Bununla beraber, “Euler-explicit” şemasının kullanımının yazılımın uygulamasında bir durma ile sonuçlandı ve “çok fazla VOF alt zaman adımları” mesajı alınırken “implicit” şemanın kullanımı hiçbir yakınsama çözümü verememiştir. Hacim kesir dağılımı grafikte görüldüğü üzere belirli bir zamana kadar hesaplanmıştır ve U_B ’deki hızlı artış ve U_L ’deki hızlı düşüş hava kabarcıklarının birleşimi, borsal akışa neden olacaktır. FLUENT Euler-explicit şeması ve implicit şeması ile yakınsama çözümlenmeleri, daha küçük zaman adımları kullanıldığında mümkün olabilir. Fakat bu konu henüz araştırılmamıştır. Geometrik ara yüzey yenilenme şeması ile ve donor-acceptor şemasıyla elde edilen hava kabarcığı şekli

Şekil 4.12 de gösterilmiştir. Kaldırma kuvveti etkisindeki akış için her iki metot arasındaki hava kabarcığı şeklindeki fark Şekil 4.7’de görüldüğü gibi oldukça küçüktü şimdi ise temel farklılıklar Şekil 4.12’de gözlemlenebilir. “Donor-acceptor” metodunda hava kabarcığı çapı büyükken hava kabarcığının uzunluğu daha çok kısadır ve sonuç olarak sıvı ara akış bölmesinin uzunluğu da geometrik ara yüzey yenilenme durumu ile karşılaştırıldığı zaman daha büyüktür.



Şekil 4.12 Kaldırma kuvveti ve basınç etkisiyle akan akış durumunda farklı VOF şemalarıyla elde edilen hava kabarcığı şekli için FLUENT karşılaştırma sonuçları. Sonuçlar, FPH64Q-D durumu için zaman adımı 3000, FPH64-G durumu için 4500 dir. Arasındaki fark çok fazla değildir.(Ortadaki hava kabarcığı durumu için gösterilmiştir.)

Her HAD yazılımı ile iki fazlı akışların hesaplaması için burada eleştirilen bir diğer konu ise fazların kütle korunumudur. Bu çalışmada her iki fazın yoğunluğu sabit olduğundan kütle korunumu hacim korunumu ile eşittir. Transient hesaplamalarda genel olarak kütle belirlenir bir miktarında nümerik difüzyon veya “truncation” hatalarında dolaylı, her bir adımda ya hacim kazanılır yahut kaybedilir. Bu miktarın hesaplanması için uygun ölçüm değeri aşağıdaki gibi verilebilir,

$$\frac{V_G(t = N_t \Delta t) - V_G(t = 0)}{V_G(t = 0)} \cdot \frac{1}{N_t} = \frac{\varepsilon_{N_t} - \varepsilon_0}{\varepsilon_0 N_t} = \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_0 N_t} \quad (4.3)$$

Burada V_G gaz fazın hacmidir. Ekteki Tablo I de farklı yazılım ve bu yazılımlarda çalıştırılan farklı simülasyonlar için $\log_{10}(|\Delta \varepsilon|/(\varepsilon_0 N_t))$ değerleri listelenmiştir. TURBIT-VOF için $-\log_{10}(|\Delta \varepsilon|/(\varepsilon_0 N_t))$ büyüklüğü 9.1– 9.5, FLUENT için bu değerler 7.7 – 8.3, STAR-CD yazılımı için 6.5 – 7.7 ve CFX için 3.1 – 6.1 değerleri arasındadır. Bu sonuçlar şunu gösterir ki, TURBIT-VOF ve FLUENT parçalı doğru geometrik ara yüzey tekrar yapılandırma metodlarındaki birim zaman adımı kütle korunum hatası FLUENT, CFX ve STAR-CD yazılımlarında yüksek derece fark şemaları metodları ile elde edilen sonuçlardan daha iyidir. CFX yazılımının birim zaman adımındaki kütle korunum hatası diğer kodlarından daha büyüktür. Bu çarpıcı durum yazılım karşılaştırılması çerçevesinde CFX yazılımının zayıf performansı ile açıklanabilir. CFX’de kütle korunum hatasının zamana değişimini yakın bir aralıkta araştırılması ilginç bir sonuçla karşılaşmıştır ki; başlangıçtaki hata oranı CBH48Q durumu için STAR-CD’deki gibi 6-7 arasında bulunmuştur. Fakat hava kabarcığı hesaplama alanın üst kısmına geçer geçmez ve hesaplama alanın alt kısmından tekrar içeri girer girmez, CFX’deki kütle korunum hatası güçlü bir şekilde artar. Bu gözlem şunu ileri sürer ki; periyodik sınır şartı davranışı ile ilgili yazılımda bir hata yahut kusur olabilir.

BÖLÜM 5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, etraflı bir yazılım karşılaştırma testi, bir küçük kare kanalın içinde hava kabarcığı dizisi akışı için HAD yazılımlarının ve nümerik metotlarının kabiliyetlerini değerlendirmek amacıyla gerçekleştirilmiştir. Bununla beraber yüzey gerilim etkilerinin en etkili olduğu ve deformasyon ara yüzeyin şekli çözümün bir parçası olduğu küçük boyutlardaki ara yüzey akışlarına değinmek için bu çalışma gerçekleştirilmiştir. Araştırılan akış konfigürasyonu, iki fazın aynı yönde olduğu düşey durumdaki 2 mm × 2 mm kesitindeki kare bir mini kanal içindeki silikon yağı boyunca ilerleyen hava kabarcıkları dizisinden meydana gelir.

Hesaplamalar akışkan hacim metodu TURBIT-VOF yazılımı ve üç ticari HAD paketi, CFX, STAR-CD ve FLUENT ile gerçekleştirildi. Bahsi geçen ilk üç yazılımda, hava kabarcığı dizisi periyodik sınır koşullarının eksenal yönde kullanılmasıyla ve akış birim hücresinde bir hava kabarcığının göz önünde bulundurulduğu bir hesaplama setinde gerçekleştirilmiştir. Bu hesaplama seti FLUENT yazılımı için geçerli bir opsiyon olmadığından, FLUENT yazılımındaki hesaplamalar sabit bir referans çerçevesinde değil fakat hava kabarcığının uygun giriş ve çıkış sınır şartları ile birlikte hareketli bir referans çerçevesinde gerçekleştirilmiştir. Her iki hesaplama seti için iki durum göz önünde bulundurulmuştur. İlkinde akış sadece kaldırma kuvvetinin etkisindeyken ikincisinde akış hem kaldırma kuvveti etkisi hem de harici bir eksenal basınç gradyanı etkisi altındadır. Bu yazılımlarda yerine getirilen VOF için iki farklı yaklaşım ayırt edilebilir. İlkinde sıvı hacimsel kesir için hareket denklemi ya “piece-wise linear” ya da “piece-wise”ın sabit olduğu bir ara yüzey geometrik yenilenme (geometrical reconstruction of the interface) içeren metotlarla çözülür. İkinci yaklaşımda ise daha yüksek dereceli farklar yöntemi kullanılır.

Farklı yazılımlarla ve metotlarla elde edilen sonuçları değerlendirmek için, temel olarak hava kabarcığı hızı, ortalama sıvı hızı ve hava kabarcığının çapları karşılaştırıldı. TURBIT-VOF ve FLUENT yazılımlarında uygulandığı gibi akışkan hacim metot ile parçalı doğru geometrik ara yüzey yapılandırmaya çok benzer ve tutarlı sonuçların verdiği bulunmuştur. Ayrıca piece-wise sabit ara yüzey yaklaşımı tabanlı FLUENT'in donor-acceptor metodu tatmin edici sonuçlar verir. Aksine, hacim kesir denklemini çözmek için ara yüzey yenilenme değil fakat yüksek derece fark şemaları içeren tüm metotlar farklılıklar gösterirler. Bunlar FLUENT yazılımının Euler-explicit ve implicit şemaları ve STAR-CD ile CFX yazılımında bulunan metotlarla ilgilidir. Bu yetersizlikler sadece hava kabarcığı dizisi akışının kaldırma kuvvetiyle hareketi halindeki durum gibi hava kabarcığı ve sıvı hızını etkilemez, aksine tüm akış yapısını da etkileyebilir. Bu hava kabarcığı dizisi akışının kaldırma kuvveti ve harici bir basınç gradyanı etkisindeki durumları gösterilmiştir. Geometrik ara yüzey yapılandırma tabanlı metotlar ince sıvı ara akış bölmesini koruyabilirken ve çözebilirken, VOF metotlarındaki ara yüzeyin yüksek oranda nümerik hatalardan dolayı yapışkanimsi durum olan sayısal yayılmaya meyilli farklar şemaları, yapay hava kabarcığı birleşmelerine neden olur ve böylece hava kabarcığı dizisi akışı yerine borsal akış veya çalışan simülasyonların çökmesine ve durmasına neden olur. Bu akışkan hacim metotlarının farklar şemasının noksanlıkları kaldırma kuvveti akışı ile hareket eden sistemlerdeki gaz miktarı etkisinin (STAR-CD ve CFX için) araştırılmasıyla ve zaman adım genişliğinin etkisinin araştırılmasıyla (CFX) kanıtlanmıştır.

HAD yazılımının kütle korunum özelliği önemli bir konu olduğundan, farklı yazılım ve şemalar için her bir zaman adımı için gaz fazının kütle korunumundaki hata büyüklüğü hesaplanmıştır. Sonuçlar parçalı doğrular ile yapılandırılan ara yüzey yapılanma metodunu içeren yazılımların daha iyi olduğunu göstermiştir. Yani FLUENT ve TURBIT-VOF yazılımlarında parçalı doğru ara yüzey yapılanma metodunu kullanıldığında yüksek dereceli farklar şemalarıyla (higher order difference scheme methods) elde edilen FLUENT, STAR-CD ve CFX sonuçlarında daha iyi bir büyüklük elde edilmiştir.

Özet olarak hacim kesir denklemi çözümü için yüksek derece fark şemaları kullanılan ara yüzey akışlar problemlerinde akışkan hacim metodu hesaplamaları gerçekçi sonuçlara sadece bazı durumlar için izin verebilir fakat bunun geliştirilmesi tavsiye edilmez. Bu özellikle küçük boyutlarda yüzey gerilim etkisinin en etkili olduğu durumlardaki akışlar için geçerlidir. Bunun aksine parçalı doğru yöntemli geometrik ara yüzey yenilenmesi içeren VOF metotlarının kullanımı gerçekçi ve tutarlı sonuçlar verdiği için son derece tavsiye edilir. Bu çalışmanın devamı olarak VOF metodu ile otomotiv uygulamalarındaki iki fazlı akışkanlar incelenebilir (örneğin yakıt tankında çalkalanma problemi).

KAYNAKLAR

- [1] TSOURIS, C., PORCELLI, J. V., Process intensification – has its time finally come? *Chem. Eng. Progr.* 2003; **10**:50–55.
- [2] WEGENG, R. S., DROST, M. K., BRENCHLEY, D. L., Process intensification through miniaturization of chemical and thermal system in the 21st century. In *Proc 3rd Int. Conf. Microreaction Technology (IMRET3)*, Ehrfeld W (ed); Springer: Berlin, 2000; pp. 2–13.
- [3] CHARPENTIER, J.-C., Process intensification by miniaturization. *Chem. Eng. Technol.* 2005; **28**(3):255–258.
- [4] SCHUBERT, K., BRANDNER, J., FICHTNER, M., LINDER, G., SCHYGULLA U, WENKA, A., Microstructure devices for applications in thermal and chemical process engineering. *Microscale Therm. Eng.* 2001; **5**:17–39.
- [5] PFEIFER, P., HAAS-SANTO, K., GÖRKE, O., BOHN, L., SCHUBERT K., Fuel to hydrogen an overview over fuel conversion activities at the institute for micro process engineering. In *Proc. AIChE Spring National Meeting / IMRET-8*, Atlanta, U.S.A, April 11 - 14, 2005.
- [6] JÄHNISCH K, BAERNS M, HESSEL V, EHRFELD, W., HAVERKAMP, V., LÖWE, H., WILLE, C. G., A Direct fluorination of toluene using elemental fluorine in gas/liquid microreactors. *J. Fluorine Chem.* 2000; **105**(1):117–128.
- [7] HAVERKAMP, V., HESSEL, V., LÖWE, H., MENGES, G., WARNIER MJF., REBROV, EV., de Croon MHJM, SCHOUTEN, J. C., LIAUW, M., Hydrodynamics and mixer-induced bubble formation in microbubble columns with single and multiple channels. *Chem. Eng. Technol.* 2006; **29**(9):1015–1026.
- [8] GÜNTHER, A., KHAN, S. A., THALMANN, M., TRACHSEL, F., JENSEN, K. F., Transport and reaction in microscale segmented gas-liquid flow. *Lab Chip* 2004; **4**:278–286.

- [9] KREUTZER, MT., KAPTEIJN, F., MOULIJN, JA., EBRAHIMI, S., KLEEREBEZEM, R., van Loosdrecht MCM. Monoliths as bioreactors: smart gas-liquid contacting for process intensification. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2005; **44**:9646–9652.
- [10] WILLIAMS, JL., Monolith structures, materials, properties and uses. *Catal. Today* 2001; **69**:3–9.
- [11] GHIDERSA, B., WÖRNER, M., CACUCI, DG., Exploring the flow of immiscible fluids in a square vertical mini-channel by direct numerical simulation. *Chem. Eng. J.* 2004; **101**(1–3):285–294.
- [12] BRACKBILL, JU., KOTHE, DB., ZEMACH, C., A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.* 1992; **100**(2):335–354.
- [13] HIRT, CW., NICHOLS, BD., Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.* 1981; **39**:201–225.
- [14] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., OSHER, S., A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.* 1994; **114**:146–159.
- [15] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., JAN, Y-J., A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *J. Comput. Phys.* 2001; **169**:708–759.
- [16] SCHEUERER, M., HEITSCH, M., MENTER, F., EGOROV, Y., TOTH, I., BESTION, D., PIGNY, S., PAILLIERE, H., MARTIN, A., BOUCKER, M., KREPPER, E., WILLEMSSEN, S., MUHLBAUER, P., ANDREANI, M., SMITH, B., KARLSSON, R., HENRIKSSON, M., HEMSTROM, B., KARPPINEN, I., KIMBER, G., Evaluation of computational fluid dynamic methods for reactor safety analysis (ECORA). *Nucl. Eng. Des.* 2005; **235**:359–368.
- [17] PERRY, R. H., GREEN, D. W., Perry's Chemical Engineers' Handbook 7th Edition, ISBN 0-07-049841-5, 1999, Section 6 Fluid and Particle Dynamics, (635-684)
- [18] (www.ae.su.oz.au/aero/props/evanalysis/node8.html)
- [19] ÇENGEL, Y. A., CIMBALA, J.M., Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications ISBN 0-07-247236-7, 2005 (Chapter 4,9,10)
- [20] VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W., An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method, ISBN 0-470-21515-2 (sadece USA) 1995 (Chapter 1,2,4,5)
- [21] PATANKAR, S. V., Numerical Heat and Fluid Flow, ISBN 0-89116-522-

3, 1980, (Chapter 8)

- [22] (www.flow3d.com)
- [23] FERZIGER, J.H., PERIC, M., Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd edition, ISBN 3-540-4274-6, 2002. Chapter (7,12,
- [24] WÖRNER, M., A Compact Introduction to the Numerical Modeling ,FZKA 6932, 2003 (Lecture Notes)
- [25] ÖZKAN, F., WÖRNER, M., WENKA, A., SOYHAN, H.S, Critical evaluation of CFD codes for interfacial simulation of bubble-train flow in a narrow channel, International Journal for Numerical Modeling in Fluids 2006 (in press)
- [26] THULASIDAS, TC., ABRAHAM, MA., CERRO, RL., Bubble-train flow in capillaries of circular and square cross section. *Chem. Eng. Sci.* 1995; **50**:183–199.
- [27] SALOMON, L., Two-Phase Flow in Complex Systems; 1999 page 160-161)
- [28] CLIFT, R., GRACE, J.R, ve WEBER, M.E., Bubbles, drops and particles, Academic Press, 1978
- [29] WÖRNER, M., GHIDERSA, B., ONEA, A., A model for the residence time distribution of bubble-train flow in a square mini-channel based on direct numerical simulation results. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 2006, in press.
- [30] WÖRNER, M., SABISCH, W., GRÖTZBACH, G., CACUCI, DG., Volume-averaged conservation equations for volume-of-fluid interface tracking. In *Proc. 4th Int. Conf. on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, U.S.A., CD-ROM, May 27 - June 1, 2001.
- [31] SABISCH, W., WÖRNER, M., GRÖTZBACH, G., CACUCI, DG., 3D volume-of-fluid simulation of a wobbling bubble in a gas-liquid system of low Morton number. In *Proc. 4th Int. Conf. on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, U.S.A., CD-ROM, May 27 - June 1, 2001.
- [32] WÖRNER, M., GHIDERSA, B., ILIĆ, M., CACUCI, DG., Volume-of-fluid based numerical simulations of gas-liquid two-phase flow in confined geometries. *Houille Blanche* 2005; No. 6:91–104.
- [33] UBBINK, O., ISSA, RI., A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *J. Comput. Phys.* 1999; **153**:26–50.
- [34] MUZAFERIJA, S., PERIC, M., Computation of free surface flows using interface-tracking and interface capturing methods. In *Nonlinear water wave interaction*, Mahrenholtz O, Markiewicz M (eds); WIT Press: Southampton, 1999; pp. 59–100.

- [35] STAR-CD Version 4.00 Methodology, CD-adapco 2006.
- [36] ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Theory.

- [37] TAHA, T., CUI, ZF., CFD modelling of slug flow inside square capillaries. *Chem. Eng. Sci.* 2006; **61**:665–675.

- [38] YOUNGS DL., Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Morton KW and Baines MJ (eds); Academic Press, 1982; pp. 273–285.

- [39] FLUENT documentation, chapter 24.2.8.

EKLER

Ek 1

Tablo I: Farklı yazılımlarla gerçekleştirilen simülasyonlara bir bakış. U_B , U_L ve D_B son hızlardır. D_B CFX ve STAR-CD için $t=0.03$ sn için verilmiştir.

Code	Case [#]	$\Delta\tilde{p}$ [Pa]	ε_0 [%]	Domain	Grid	Δt [μ s]	N_t [-]	U_B [cm/s]	U_L [cm/s]	D_B [mm]	$\log_{10}(\Delta\varepsilon /(\varepsilon_0 N_t))$ [-]	Remark
TURBIT-VOF	TBL48F	0.0	30.38	Full	48×48×48	1.892	20 000	2.917	1.011	1.670	-9.1	
	TBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	22 000	3.012	1.066	1.628	-9.2	
	TBH64F	0.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	94 000	3.023	1.066	1.711	-9.5	
	TPH48F	-18.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	40 000	9.435	3.179	1.628	-9.4	
	TPH64F	-18.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	100 000	9.409	3.171	1.629	-9.5	
STAR-CD	SBL48F	0.0	30.37	Full	48×48×48	0.750	80 000	2.699	0.956	1.713	-7.7	
	SBL64F	0.0	30.37	Full	64×64×64	0.750	119 600	2.691	0.954	1.712	-7.2	
	SBL128Q	0.0	30.37	Quarter	64×128×64	0.750	60 000	2.574	0.931	1.718	-7.7	
	SBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	0.750	60 000	2.714	0.989	1.750	-7.7	
	SBH64F	0.0	33.05	Full	64×64×64	0.750	88 400	2.700	0.992	1.756	-6.5	
	SPH64Q	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	82 000	8.098	3.009	1.693	-7.5	
	SPH64Q-1	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	("Annular flow")			-7.7	Sürekli dnk için Upwind
	SPH64Q-2	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	8.089	3.009	1.699	-7.2	Momentum dnk için Upwind
SPH64Q-T	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	7.500	12 000	8.203	3.021	1.693	-7.0	10x Δt	
CFX	CBL48Q-T	0.0	30.07	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.117	0.999	1.658	-3.1	10x Δt
	CBH48Q	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	0.750	38 100	3.143	0.951	1.704	-6.1	
	CBH48Q-T	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	6 000	2.796	0.931	1.700	-3.3	10x Δt
	CBH48Q-T-1	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.000	0.948	1.708	-3.1	2 nd derece zaman entegresi
	CBH48Q-T-2	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	3.785	7 927	2.988	0.941	1.708	-3.4	5x Δt
CPH48Q-T	-18.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	("Annular flow")			-3.1	10x Δt	
FLUENT	FBH64Q-G	-0.7	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	3.013	1.038	1.709	-8.3	Geo-reconstruct
	FBH64Q-D	1.4	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.943	1.073	1.727	-8.0	Donor-acceptor
	FBH64Q-E	0.8	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.969	1.060	1.689	-7.7	Euler-explicit
	FBH64Q-I	-1.0	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.974	1.057	1.689	-7.7	Implicit
	FPH64Q-G	-21.5	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	4 500	9.584	3.322	1.634	-8.5	Geo-reconstruct
	FPH64Q-D	-17.9	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	9.228	3.108	1.684	-7.7	Donor-acceptor
	FPH64Q-E	-	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	2 050	(Execution stop by code)			-	Euler-explicit
	FPH64Q-I	-	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	300	(No converging solution)			-	Implicit

Ek 2

Colocated Arrangement =Eş ağ düzeni
 Staggered Arrangement = Kayık ağ düzeni
 VOF(Volume of Fluid) Method=Akışkan hacim metodu (AHM)
 Minyatürleşme=miniaturization
 Streakline=Çıkış Çizgiler
 Divergence=Diverjans
 Grid ,mesh=Ağ
 Piecewise functions=Parçalı fonksiyonlar
 Piece-wise linear= parçalı doğru
 Upwind Discretization =Akış Doğrultulu Ayrıklaştırma
 Discretization= Ayrıklaştırma
 İterative= İteratif
 Explicit ve implicit metotlar=Açık ve Kapalı Metotlar
 Transient=Geçiş Bölgesi
 Distorted transient= Çarpık transient
 Numerical stability=Sayısal Stabil veya Kararlılık
 Numerical accuracy=Sayısal Hassasiyet
 Convergence= Yakınsama
 Under-relaxation factor=Gevşeme Katsayısı
 Over Relaxation Factor=Hızlandırma Katsayısı
 Damping= Sönüm
 Free surface=Serbest yüzey
 Interface Tracking Methods= Ara yüzey izleme metodu
 Interface capturing Methods= Ara yüzey yakalama metotları
 Smearing= Sayısal Yayılma
 Front Tracking Method= Cephe İzleme Metodu
 Level-set Method=Adım Belirleme Metodu
 Swarm=Kümelenmiş
 Governing equations= Korunum Denklemleri
 Contaminated system=Bulaşıklı Sistem
 Surfactants =Yüzey Gerilmesini Azaltan Maddeler
 Body force= Kütle kuvveti
 Geometric interface reconstruction scheme=Ara Yüzey Tekrar Yapılandırma şemaları
 Interface reconstruction= Ara Yüzey Yapılandırma
 High order difference method= Yüksek Dereceli farklar metodu
 Void fraction= Boşluk kesri
 Volume fraction equation= Hacim kesir denklemi
 High resolution advection scheme=Yüksek Çözünürlüklü Taşınım Yöntemi
 Higher order difference scheme methods= yüksek dereceli farklar yöntemleri

Ek 3

Critical evaluation of CFD codes for interfacial simulation of bubble-train flow in a narrow channel

Furkan Özkan^{1,2,*,\dagger}, Martin Wörner^{2,\#\ddagger}, Achim Wenka^{3,\S} and Hakan S. Soyhan^{4,\P}

¹ *University of Sakarya, Institute of Science and Technology, Sakarya, Turkey*

² *Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit, Karlsruhe, Germany*

³ *Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Mikroverfahrenstechnik, Karlsruhe, Germany*

⁴ *University of Sakarya, Engineering Faculty, Mechanical Engineering Department,
Sakarya, Turkey*

SUMMARY

Computational fluid dynamics codes that are able to describe in detail the dynamic evolution of the deformable interface in gas-liquid or liquid-liquid flows may be a valuable tool to explore the potential of multi-fluid flow in narrow channels for process intensification. In the present paper a computational exercise for co-current bubble-train

* Corresponding author in the print and online version of the paper when published

Correspondence during the submission and review process to: M. Wörner, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit, Postfach 3640, 76021 Karlsruhe, Germany

\dagger E-mail: ozkanfurkan@gmail.com

\ddagger E-mail: woerner@irs.fzk.de

flow in a square vertical mini-channel is performed to investigate the performance of well-known CFD codes for this type of flows. The computations are based on the volume-of-fluid method where the transport equation for the liquid volumetric fraction is solved either by methods involving a geometrical reconstruction of the interface, or by methods that use higher order difference schemes instead. The codes contributing to the present code-to-code comparison are an in-house code and the commercial CFD packages CFX, FLUENT and STAR-CD. Results are presented for two basic cases. In the first one, the flow is driven by buoyancy only, while in the second case the flow is additionally forced by an external pressure gradient. The results of the code-to-code comparison show that only the volume-of-fluid method with interface reconstruction leads to physically sound and consistent results whereas the use of difference schemes for the volume fraction equation shows some deficiencies.

KEY WORDS: micro process engineering; code-to-code comparison; volume-of-fluid method; bubble-train flow; Taylor flow; square channel

1. INTRODUCTION

A current trend in engineering and industrial applications such as automotive emissions and fuel processing, fuel cells in internal combustion engines, desulphurization of vapor gas oil fractions in the petrochemical industry etc. falls under the term *process intensification*. According to Tsouris and Porcelli [1], process intensification refers to technologies that

§ E-mail: wenka@imvt.fzk.de

¶ E-mail: hsoyhan@sakarya.edu.tr

replace large, expensive, energy-intensive equipment or processes with ones that are smaller, less costly and more efficient, or that combine multiple operations into fewer devices (or a single apparatus). One way toward process intensification is therefore by miniaturization [2–5]. It is expected that the potential for process intensification is in particular large for systems that involve multiple phases, such as the flow of a gas and a liquid or that of two immiscible liquids. The reason for this is that multi-fluid flows in small dimensions are associated with large specific interfacial areas, thin liquid films and short diffusion length which, all together, results in high mass transfer rates. Examples for devices where the potential of two-fluid flow in narrow channels has already been shown are micro bubble columns [6, 7], micro falling film reactors [6], micro-fluidic channel networks [8] and monolith reactors [9]. The monolith reactor was developed for the cleaning of exhaust gases from combustion processes, both in cars and large power plants. There is, however, now an increasing interest to employ monolithic structures for new reactor applications in the chemical process and refining industries [10].

The idea of process intensification is to provide optimal physical-chemical conditions for the respective system. This requires knowledge of the local hydrodynamic, thermal and mass transfer phenomena. However, it is very difficult to provide the required local and time-resolved information within both phases by experiments because of the small dimensions. An alternative way is therefore to use computational fluid dynamics (CFD) to get insight in the relevant transport phenomena. While, for single phase flow, the methods available in commercial CFD codes such as CFX, FLUENT and STAR-CD have now

reached a certain level of maturity, this is not valid to the same extent for two-phase flows where the information about the shape of the deformable interface is part of the solution. The reason for this lies to one part in the difficulties of numerical methods to deal with the discontinuous density and viscosity at the interface. Another difficulty lies in the numerical description of the surface tension force, which is singular at the interface. It is known for some time that the continuous surface force model of Brackbill et al. [11] that is now the standard surface tension force model in finite volume codes may lead to so-called artificial or spurious currents. This unphysical flow phenomenon caused by inadequate representation of the surface tension force may become in particular troublesome for miniaturized devices because the magnitude of the surface tension force increases when the length scale decreases. Different methods have been developed in past for computation of two-fluid flows with deformable interfaces. Most widely used ones are the volume-of fluid method [12], the level-set method [13] and the front-tracking method [14]. While the level-set method and the front tracking method are widely used in the academic field, in the codes CFX, FLUENT and STAR-CD only the volume-of-fluid method is available. To foster the reliable application of commercial CFD codes for interfacial two-fluid flow applications in small channels, it is therefore useful to assess the capabilities of the volume-of-fluid method in these CFD codes by test or benchmark problems. We note that it was the objective of the ECORA project to evaluate the capabilities of CFD software packages for reactor safety analysis [15]. However, naturally this project was devoted to flow in large dimensions and also the capabilities of the volume-of-fluid method were not investigated.

In the present paper we perform test case computations for the co-current vertical bubble-train flow (BTF) in a square channel of $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ cross section using different variants of the volume-of fluid method. We compare the results obtained for bubble-train flow by CFX, STAR-CD and FLUENT with results of direct numerical simulations obtained by an in-house computer code called TURBIT-VOF. In section 2 of this paper we give a description of the test case and of the different computer codes used in the present code-to-code comparison. In section 3 we present the simulation results and provide a critical discussion. The paper is completed by conclusions to be presented in section 4.

2. DESCRIPTION OF NUMERICAL TEST CASE

In this section we first describe the bubble-train flow test case and then give some details about the physical and numerical model. Next we give a short description of the different computer codes used for this code-to-code comparison and also give details of the numerical methods and parameters used as well as an overview on all the simulations performed within the present study.

2.1. *Bubble-train flow*

Bubble-train flow is a common flow pattern for gas-liquid flow in small channels. It consists of a regular sequence of bubbles of identical size and shape. The bubbles, which are separated by liquid slugs, fill almost the entire channel cross-section (Taylor bubbles) and travel with the same axial velocity. Therefore, bubble-train flow or Taylor flow is fully described by a unit cell, which consists of one bubble and one liquid slug. Thulasidas et al.

[16] performed experiments of bubble-train in circular capillaries with 2 mm inner diameter and in a square capillary with a cross-section of 2 mm \times 2 mm using air as gaseous and silicon oil as liquid phase. The relevant non-dimensional group for two-fluid flows in narrow channels is the capillary number $Ca = \mu_L U_B / \sigma$, where U_B is the bubble velocity, μ_L is the viscosity of the continuous liquid phase and σ is the coefficient of surface tension. The relevance of the capillary number is due to the fact that it represents the ratio of the two dominant forces for two-fluid flow in small dimensions, namely viscous friction and surface tension. To cover a wide range of capillary numbers, Thulasidas et al. [16] performed their experiments using silicon oil of different viscosities.

2.2. Numerical model

Figure 1 shows a sketch of the basic computational set-up. The coordinate system is defined by taking y as axial direction and x and z as the two wall-normal directions. The gravity vector points in negative y -direction. At the four sidewalls of the channel no slip conditions are applied. To set up a model for bubble-train flow we follow the approach of Ghidersa et al. [17]; we consider one unit cell only and use periodic (or cyclic) boundary conditions in the stream-wise direction. Thus, within the computational domain there is only one bubble and the influence of the trailing and leading bubbles are taken into account by the periodic boundary conditions. In correspondence to the experiment of Thulasidas et al. [16] we consider a square mini-channel with a cross section of $L_x \times L_z = 2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$. For the length of the unit cell we choose $L_y = 2 \text{ mm}$, so that the computational domain is a cube. This choice results in rather short bubbles, in contrast to the experiments of

Thulasidas et al. [16] where the bubble length is several times the channel width. The influence of the length of the unit cell has been investigated by Wörner et al. [18], where it covers eight distinct values in the range $2 \text{ mm} \leq L_y \leq 4 \text{ mm}$. In that paper good agreement of the numerical results with the experimental ones of Thulasidas et al. [16] has been obtained for the bubble velocity, phase relative velocity and bubble diameter only for cases where $L_y \geq 2.5 \text{ mm}$. While longer unit cells are more realistic, the present study is nevertheless restricted to the case $L_y = 2 \text{ mm}$ for two reasons. The first one is to limit the computational costs, while the second is related to the length of the liquid slug. For the same overall gas volume fraction within the unit cell, small values of L_y lead to shorter liquid slugs and thus a smaller distance between consecutive bubbles. For any CFD code this situation is more severe, since any inaccuracy will immediately lead to bubble coalescence which then results not in bubble-train flow but in annular flow. The computational set-up just described is used for computations with TURBIT-VOF, STAR-CD and CFX codes. It was necessary to modify the set-up for the FLUENT code. The reason for this and the modifications made are explained in section 2.3.4.

The numerical computations to be performed are based on the volume-of-fluid (VOF) method which was originally developed by Hirt and Nichols [12]. The basic concept of the VOF method is the definition of a non-dimensional scalar quantity f (or α_L), which represents the fraction of the mesh cell volume occupied by the continuous phase, which is here the liquid phase. Thus, for $f = 1$ the mesh cell is entirely filled with liquid while for $f = 0$ it is entirely filled with gas. In a mesh cell which instantaneously contains a part of the

interface, both phases coexist and it is $0 < f < 1$. Based on f it is possible to define a mixture density, ρ_m , mixture viscosity, μ_m , and centre-of-mass velocity, \mathbf{v}_m ,

$$\rho_m \equiv f \rho_L + (1 - f) \rho_G \tag{1}$$

$$\mu_m \equiv f \mu_L + (1 - f) \mu_G \tag{2}$$

$$\mathbf{v}_m \equiv \frac{f \rho_L \mathbf{v}_L + (1 - f) \rho_G \mathbf{v}_G}{\rho_m} \tag{3}$$

Using the above definitions, the equations governing the motion of the liquid and the gas phase as well as the dynamic boundary condition at the interface can be combined into one single set of continuity and momentum equations which are valid in the entire two-fluid domain. For Newtonian fluids with constant physical properties these read

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{v}_m = 0 \tag{4}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0 \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m = -\nabla p + \nabla \cdot \mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) + \rho_m \mathbf{g} + \mathbf{f}_\sigma \tag{6}$$

Here, $\mathbf{g} = (0, -g, 0)^T$ is the gravity vector, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ is the gravitational acceleration and \mathbf{f}_σ represents the surface tension force per unit volume. Note that in this form of the momentum equation it is already assumed that in interfacial mesh cells (i.e. for $0 < f < 1$) both phases obey the same pressure and share the same velocity field (homogeneous model).

Because the pressure p in equation (6) is not periodic, we have to recast this equation in a form which is appropriate for a domain with periodic boundary conditions. For this purpose we split the pressure as

$$p \equiv P - \rho_L g \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} + \left(\frac{\bar{p}|_{y=L_y} - \bar{p}|_{y=0} + \rho_L g L_y}{L_y} \right) \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} = P + \rho_L \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} + \frac{\Delta \tilde{p}}{L_y} \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{x} \quad (7)$$

$$= P + \rho_L \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f}_{pd} \cdot \mathbf{x}$$

Here, $\hat{\mathbf{e}}_y = (0, 1, 0)^T$ is the unit vector in axial direction and $\Delta \tilde{p}$ represents the non-hydrostatic axial pressure drop across the distance L_y , while $\bar{p}|_{y=0}$ and $\bar{p}|_{y=L_y}$ represent the cross-section averaged pressure at axial position $y = 0$ and $y = L_y$, respectively. Introducing definition (7) in equation (6) we obtain the Navier-Stokes equation in the form

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m = -\nabla P + \nabla \cdot \mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) + (\rho_m - \rho_L) \mathbf{g} - \mathbf{f}_{pd} + \mathbf{f}_\sigma \quad (8)$$

This equation can be used for a periodic domain since it is $\bar{P}|_{y=L_y} = \bar{P}|_{y=0}$ and P is periodic.

In the present numerical study two cases will be considered. In the first one it is $\Delta\tilde{p} = 0$ Pa and the only driving force is buoyancy by means of the term $(\rho_m - \rho_L)\mathbf{g}$. In the second case the bubble rises both, due to buoyancy and due to an external pressure gradient of $\Delta\tilde{p} = -18$ Pa which results in a body force of $-\Delta\tilde{p}/L_y = 18 \text{ Pa} / 0.002 \text{ m} = 9000 \text{ N/m}^3$.

As constant physical properties of the liquid phase (silicon oil) we use a density $\rho_L = 957 \text{ kg/m}^3$ and viscosity $\mu_L = 0.048 \text{ Pa s}$. The value of the coefficient of surface tension is $\sigma = 0.02218 \text{ N/m}$. While these values correspond to the experiment of Thulasidas et al. [16], we increase for our numerical tests the gas density and viscosity of that experiment by a factor of ten, so that $\rho_G = 11.7 \text{ kg/m}^3$ and $\mu_G = 1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$. This artificial increase of the gas density and viscosity is justified by results of a numerical study performed with the in-house code TURBIT-VOF where we compared the results to those obtained with $\rho_G = 1.17 \text{ kg/m}^3$ and $\mu_G = 1.85 \times 10^{-6} \text{ Pa s}$. We found that the differences in bubble velocity, mean liquid velocity and in bubble shape are very small [18], while for the increased gas properties much larger time steps could be used in the explicit time integration scheme. This results in a considerable saving of CPU time.

The present fluid properties result in a magnitude of the buoyancy force of $(\rho_G - \rho_L)g = 9273.4 \text{ N/m}^3$. This is the same order of magnitude as the body force due to the external pressure gradient. Both body forces act in the same direction, namely vertically

upward. However, the body force due to buoyancy acts only in the gas phase while the body force due to the external pressure gradient acts in the entire domain, i.e. both in the gas and in the liquid phase.

2.3. *Computer codes*

2.3.1. *Computer code TURBIT-VOF*

The in-house computer code TURBIT-VOF is based on a finite volume method and uses a staggered grid. The surface tension term is given by [19]

$$\mathbf{f}_\sigma = a_i \sigma \kappa \hat{\mathbf{n}}_i \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}_i \quad (9)$$

Here, a_i is the volumetric interfacial area concentration, κ is twice the mean interface curvature and $\hat{\mathbf{n}}_i$ is the unit normal vector to the interface pointing into the liquid. In TURBIT-VOF, the governing equations (4), (5) and (8) are solved in non-dimensional form, see [17]. A projection method is used to solve the momentum equation (8) while enforcing a divergence free velocity field according to equation (5). For time integration of equation (8) an explicit third order Runge-Kutta method is used. All spatial derivatives are approximated by second-order central differences.

To account for the interface evolution, in the VOF method with interface reconstruction equation (4) is not solved by a difference scheme but in a rather geometrical manner that involves two steps. In the first step, the interface orientation and location inside each mesh cell is reconstructed using the PLIC (piecewise linear interface calculation) method EPIRA

(exact plane interface reconstruction algorithm) that locally approximates the interface in a mesh cell by a plane, see Sabisch et al. [20] for details. In a second step the fluxes of liquid across the faces of the mesh cell are computed. This ensures that mass is conserved with high accuracy. TURBIT-VOF has been verified for single bubbles of different shape in conventional channels [20] and has also been used for investigations of bubble swarms in a flat bubble column [21].

The present simulations are performed on one processor of a Siemens Fujitsu VPP5000 parallel vector computer with 8 GB RAM and a theoretical peak performance of 9.6 GFlops per processor. The typical CPU time per mesh cell and time step is about 70 μ s.

2.3.2. Computer code STAR-CD

Together with CFX and FLUENT, the computer code STAR-CD of CD-adapco is one of the leading commercial CFD codes. All three software packages claim to be able to cover almost all areas which are related to fluid dynamics phenomena and to solve problems coming both, from industry and academia. Like CFX and FLUENT, STAR-CD is based on a finite volume method and uses a co-located grid. When the present computational study was started, the actual version of STAR-CD was version 3.26. In the volume-of-fluid method implemented in that version, the *Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes* (CICSAM) [22] is used for solution of the volume fraction equation (4) in order to maintain the interface sharp. The CICSAM scheme as implemented in version 3.26 of STAR-CD involves a restriction that the Courant number based on the local velocity and mesh cell width may not exceed a value of 0.3. While a certain number of time

steps for the bubble-train flow set-up described above could be successfully computed by STAR-CD version 3.26, eventually the Courant number limit was exceeded which resulted in a stop of the simulation. The time step at which this stop occurred was not always reproducible. Although a number of different numerical schemes and convergence parameters have been tried, eventually no converging simulation of bubble-train flow could be obtained with STAR-CD version 3.26, where the bubble has reached a constant terminal velocity.

During the course of the present research version 4.0 of STAR-CD became available. The capabilities of the code to deal with free surface and interfacial applications have been substantially improved by implementation of numerical methods from the COMET code, which is now also distributed by CD-adapco. With STAR-CD version 4.0 the convergence problems of version 3.26 have not been faced with and all simulations to be presented in this paper have been obtained by the VOF method of version 4.0. In the VOF method of STAR-CD no interface reconstruction is available and equation (4) can only be solved by difference schemes. Here, for the convective terms in the volume fraction equation (4) the *High Resolution Interface Capturing* (HRIC) scheme [23] is used while the convective and diffusive terms in the momentum equation are discretized by the MARS scheme (blending factor 0.5). The velocity-pressure coupling is treated by the SIMPLE algorithm. For our bubble-train flow simulations it was essential to increase the maximum number of iterations within the SIMPLE algorithm from the standard value 5 to 50. For temporal discretization the 1st order Euler implicit method is used which is the only available option in STAR-CD in combination with the VOF method. Since the implementation of the cyclic boundary

conditions in STAR-CD allows for direct specification of the pressure drop across the periodic domain, the simulation for the case corresponding to a pressure drop of $\Delta\tilde{p} = -18\text{ Pa}$ have been realized by this option. Surface tension effects are accounted for via the continuum surface model. The magnitude of the surface tension force is given by [24]

$$|\mathbf{f}_\sigma| = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_L}{|\nabla \alpha_L|} \right) \quad (10)$$

The STAR-CD simulations were performed in serial mode on a Linux Cluster where each node consists of two 2.2 GHz AMD Opteron 248 processors with 2 GB RAM and a theoretical peak performance of 4.4 GFlops per processor. The typical CPU time per mesh cell and time step is about 50–100 μs .

2.3.3. Computer code CFX

For the present code-to-code comparison version 10.0 of ANSYS CFX is used. The CFX code is based on a finite volume method and uses a co-located grid. Formally, CFX does not offer the volume-of-fluid method. For interfacial flows, where the distinct resolvable interface between both phases remains well defined, the homogeneous model can be used instead. A CFX simulation where the continuity equation of the homogeneous model is solved by a high order difference scheme and where the surface tension force is encountered for in the momentum equation by the continuum surface force model can thus

be considered equivalent to the difference scheme VOF method in STAR-CD. The surface tension force in CFX is, adopting the present nomenclature, given by [25]

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \hat{\mathbf{n}}_i |\nabla \alpha_L| \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \hat{\mathbf{n}}_i \quad (11)$$

For computation of the surface tension force in CFX one of three available options for the smoothing of the volume fraction field needs to be specified. These are “no smoothing”, “Laplacian smoothing” and “volume-weighted smoothing”. In the user manual the Laplacian smoothing is recommended so this option is used here. Another parameter related to the modelling of surface tension in CFX is the “curvature under-relaxation factor”. The respective real value is in the range from 0 to 1. As for flows that are strongly driven by surface tension the use of a smaller value is recommended in the manual, a value of 0.25 is adopted here. In the CFX free surface control panel furthermore a value of the “interface compression level” has to be chosen. This integer parameter may take values between 0 and 2. In the CFX user manual the use of level 2 is recommended in order to keep the interface sharp, therefore this value is adopted here.

For the discretization of the momentum equation and the continuity equation the high resolution advection scheme is used. Time integration of the momentum equation is performed by the 1st order backward Euler scheme for almost all simulation in order to agree with STAR-CD conditions. To investigate the influence of the time integration scheme, in one simulation the 2nd order backward Euler scheme is used instead. In all

simulations periodic boundary condition are used. In order to account for the external pressure gradient, in the y -component of the momentum equation a source term of 9000 N/m^3 is specified.

The CFX simulations are performed in parallel mode on a Linux cluster consisting of Dual AMD Opteron 275 processors with 16 GB RAM. The typical CPU time per mesh cell and time step is in the order of $40 \mu\text{s}$.

2.3.4. Computer code *FLUENT*

From the three commercial CFD codes used in the present study FLUENT is the only one which offers the volume-of-fluid method with geometrical reconstruction of the interface. However, the code also provides the possibility to use difference schemes for solution of the volume fraction equation. FLUENT does not solve the volume fraction equation for the primary phase (i.e. α_L) but for the secondary phase, i.e. for α_G . Unfortunately, version 6.2.16 of FLUENT does not allow the combination of the VOF method with periodic boundary conditions. For this reason some changes of the basic computational set-up had to be made.

Unlike the computations by the other codes, the FLUENT simulations are not performed in a fixed frame of reference, but in a frame of reference moving with the bubble. Such simulations with FLUENT have been recently performed by Taha and Cui [26]. Here, this frame of reference is realized in the code by downward moving walls, where the downward

velocity of the walls, U_{wall} , is set according to the terminal bubble velocity, U_B , computed by TURBIT-VOF. At the top of the computational domain inlet boundary conditions are specified for the liquid phase. The downward liquid inlet velocity is uniform over the inlet cross-section and is given by $U_B - U_{\text{slug}}$. The value of the liquid slug velocity is again taken from the respective TURBIT-VOF simulation. Since the mean axial velocity in the liquid slug agrees with the total superficial velocity it is computed as $U_{\text{slug}} = \varepsilon U_B + (1 - \varepsilon) U_L$. While the wall velocity U_{wall} is kept constant in all FLUENT computations, for the slug velocity U_{slug} the respective TURBIT-VOF value is only taken as an initial guess and is then slightly adjusted so that in the FLUENT computations the bubbles stay almost at rest and steady flow conditions are obtained.

A sketch of the computational set-up used in FLUENT is displayed in Figure 2. The size of the computational domain corresponds to five unit cells. However, only three equal-sized spherical bubbles are initialized within this domain, so that the fictitious “unit cells” no. 1 and 5 at the top and bottom of the computational domain contain only liquid. The volume of each of the three bubbles is so that the gas volume fraction in the fictitious unit cells no. 2, 3 and 4 is $\varepsilon = 33.06\%$. This three-bubble configuration is chosen so that the influence of the top and bottom bubble on the bubble in the middle should resemble the influence of the leading and trailing bubbles in bubble-train flow. The liquid filled fictitious unit cell 1 ensures that the uniform inlet velocity can develop downstream in a parabolic profile when it enters the fictitious unit cell 2. The fictitious unit cell 5 ensures that the outflow boundary specified for the bottom of the domain is sufficiently far away from the lowest bubble.

The initial velocity within the domain is zero, which means that in a fixed frame of reference both the bubbles and liquid move upward with the same velocity, namely U_{wall} . The present choice of inflow and outflow conditions implies that the volumetric flow rate is specified while the pressure drop across the computational domain adjusts accordingly and thus is a result of the simulation. This situation is therefore vice versa as in the computational set-up for TURBIT-VOF, STAR-CD and CFX.

For the numerical solution of the governing equations the segregated solver of FLUENT is used. For the pressure-velocity-coupling the PISO algorithm is adopted with the non-iterative time-advancement scheme which means that there are no outer iterations. For the momentum equation the QUICK scheme is employed and time integration is performed by the 1st order implicit scheme.

The FLUENT code offers within its VOF method four different numerical schemes for solution of the volume fraction equation. Two of these are performing an interface reconstruction (the “geometric interface reconstruction method” and the “donor-acceptor method”), while the other two employ difference schemes (the “Euler-explicit method” and the “implicit method”). The geometric interface reconstruction which is based on a generalization of the method of Youngs [27] can be considered as the most accurate scheme, since in this method the interface is, similar to TURBIT-VOF, represented by piecewise linear elements whereas in the donor-acceptor scheme of Hirt and Nichols [12]

the interface representation is piece-wise constant. For comparison, however, computations are performed by all four different VOF schemes.

In FLUENT the following formulation of the CSF model for the surface tension force is used [28]

$$\mathbf{f}_\sigma = \frac{\rho_m \sigma \kappa \nabla \alpha_L}{\frac{1}{2}(\rho_G + \rho_L)} \quad \text{with} \quad \kappa = -\nabla \cdot \frac{\nabla \alpha_L}{|\nabla \alpha_L|} \quad (12)$$

The FLUENT simulations have been run on a work station with Dual XEON processors of 3.4 GHz and 8 GB RAM. The typical CPU time per mesh cell and time step is about 50 μ s.

2.4. *Overview on simulation runs*

In order to allow for a reasonable comparison of the numerical results for bubble-train flow, similar numerical methods and discretization parameters have been used in the different CFD codes, as far as possible. Table I gives an overview about all the simulations performed within the present numerical study. In all runs a uniform, rectilinear and isotropic hexahedral grid is used. To allow for grid refinement studies, three different values of the mesh size h are considered, namely $h / 2 \text{ mm} = 1/48$, $1/64$ and $1/128$. Grid refinement studies are performed for TURBIT-VOF and STAR-CD. While in some of the simulations the computational domain consists of the entire cross section, in most of the simulations a quarter of the channel cross-section is considered only together with

symmetry conditions in x - and z -direction at the two vertical channel mid-planes. With CFX and FLUENT only simulations for a quarter of the channel cross-section are performed.

All simulations are performed transient and in most of the simulations a time step width $\Delta t = 0.757 \mu\text{s}$ is used. This time step width and the grid size $h / 2 \text{ mm} = 1/64$ correspond to previous simulations performed with TURBIT-VOF for bubble-train-flow [17, 18]. Since the commercial CFD codes CFX, STAR-CD and FLUENT use implicit time integration schemes, much larger time steps are possible than can be used with the explicit time integration scheme in TURBIT-VOF. Therefore, in some simulations with the commercial CFD codes a fivefold or tenfold larger time step width is used. While the largest time step width $\Delta t = 7.57 \mu\text{s}$ did not lead to any convergence problems, it was found that a further increase of the time step width in FLUENT lead to a breakdown of the computation.

All simulations are started from fluid at rest. The initial phase distribution corresponds to a spherical bubble placed in the centre of the computational domain. Essentially, two different initial gas volume fractions within the unit cell are considered, namely $\varepsilon \approx 33\%$ and $\varepsilon \approx 30\%$. These values correspond to an initial spherical bubble with a diameter of about 1.714 mm and 1.661 mm, respectively. The initialization of a bubble which corresponds to a prescribed gas volume fraction within the domain is, however, not always a trivial task in commercial CFD codes and requires in general some trial and error. This is because usually the initialization of the volume fraction distribution is associated with some smearing of the interface. As a consequence not in all the simulations exactly the same

initial gas hold up could be obtained. Because the fluids are immiscible and there is no phase change or mass transfer, the gas volume fraction should be constant throughout the entire simulation and should not deviate from the initial value ε_0 .

3. RESULTS AND DISCUSSION

In this section we will present the results of our code-to-code comparison, first for the cases where the flow is driven by buoyancy only ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$) and then where in addition to buoyancy a constant body force corresponding to a pressure gradient $-\Delta\tilde{p}/L_y = 9000 \text{ N/m}^3$ is specified. For a comparison of the different computer codes we first present results for the temporal evolution of the mean vertical gas and liquid velocity within the computational domain. For any instant in time these mean velocities are evaluated by relations

$$U_B = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} (1 - f_{i,j,k}) v_{y;i,j,k}}{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} (1 - f_{i,j,k})} \quad (13)$$

$$U_L = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} f_{i,j,k} v_{y;i,j,k}}{\sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} f_{i,j,k}} \quad (14)$$

Here, v_y is the y-component of \mathbf{v}_m . The subscripts i, j and k denote the mesh cell index in x -, y -, and z -direction and N_i, N_j and N_k denote the number of mesh cells in this direction. For FLUENT, the velocities U_B and U_L are obtained by adding to the values computed by

equation (13) and (14) for all three bubbles the constant wall velocity U_{wall} . If all the three bubbles would stay exactly at rest within the domain, then U_B according to equation (13) would be zero for FLUENT. However, in practice there was always a slight intermittent upward/downward variation of the bubble positions. As a consequence U_B may differ from U_{wall} .

A good performance for industrial devices, such as monoliths, is obtained when the bubble-train flow reaches a steady zone [16]. Therefore keeping BTF in steady conditions is one of the most important issues to get high mass and heat transfer rates via very thin diffusion paths and large interfacial area. Our interest here is therefore mainly only the steady terminal bubble and liquid velocity, and not on the transient phase when the bubble accelerates and deforms from its initial spherical shape. Nevertheless, in the following we show figures which display the entire temporal evolution of U_B and U_L .

In this section we will also show figures of the steady bubble shape. In all simulations the bubble is axisymmetric and, therefore, any axial cross-section through the bubble results in a circle. To quantify the bubble shape, we give numerical values for the bubble diameter D_B , which is the largest diameter of this circle for all axial cross-sections of the bubble. The steady state numerical values of U_B , U_L and D_B obtained by the different runs are given in Table I. Also given there is the change of the overall gas void fraction in the computational domain per time step, which is a measure for the accuracy of the mass conservation properties of the code. The corresponding results will be discussed at the end of section 3.2.

The validation of the in-house code TURBIT-VOF against experiments from Thulasidas et al. [16] has already been done in [18] resulting in good agreement for long enough unit cells. The TURBIT-VOF results can, therefore, be considered here as reference values. Since the unit cell length used in the present study is rather short, and is much shorter than in the experiment of Thulasidas et al. [16], a direct comparison of the present numerical results with these experimental data is not meaningful.

3.1. *Bubble-train flow driven by buoyancy only*

In this section, we will discuss results for bubble-train flow where the only driving force is buoyancy and where, therefore, $|\mathbf{f}_{pd}| = 0 \text{ N/m}^3$. Figure 3 shows the temporal evolution of the bubble velocity U_B and the mean liquid velocity U_L for the basic case BH[†] ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) computed by the different computer codes. As the simulations with TURBIT-VOF, CFX and STAR-CD are started from fluid at rest in a fixed frame of reference, both U_B and U_L strongly increase initially. While for TURBIT-VOF and STAR-CD both U_B and U_L reach an almost constant value after about 0.01 s, the bubble velocity for CFX is decreasing even for $t > 0.02 \text{ s}$. For the FLUENT computations the geometric interface reconstruction scheme has been used. Since this simulation is started from fluid at rest in a frame of reference moving with the terminal bubble velocity computed by TURBIT-VOF, the FLUENT results show initially a sharp decrease of U_B and U_L and then an increase till almost constant values are reached for both velocities, too. These terminal velocities are,

[†] For an explanation of the nomenclature used for the description of the different cases see the footnote in Table I.

however, attained more early at about 0.007 s. The terminal bubble velocity in TURBIT-VOF and FLUENT corresponds to a capillary number $Ca = 0.065$ and a bubble Reynolds number $Re_B \equiv \rho_L D_h U_B / \mu_L = 1.205$, where $D_h = 2$ mm is the hydraulic diameter.

The comparison of the different curves in Figure 3 shows that the terminal values of U_L obtained by STAR-CD and CFX are slightly smaller than the respective value obtained by TURBIT-VOF. However, as concerns the bubble velocity, the respective TURBIT-VOF result is strongly underestimated by STAR-CD and substantially overestimated by CFX. In contrast, the terminal value of U_B for FLUENT and TURBIT-VOF is almost the same as the difference is only about 0.3%. Figure 3 shows that the terminal mean liquid velocity U_L computed by FLUENT also corresponds well with the TURBIT-VOF value as it is only about 2.6% smaller. This indicates that the TURBIT-VOF and FLUENT result do well agree, though performed in different frames of reference. A further indication for this is the pressure difference $\Delta\bar{p}$ across the unit cell. While in TURBIT-VOF the value $\Delta\bar{p} = 0$ Pa was an input, in FLUENT it is a result of the simulation and a value of -0.7 Pa obtained. We thus can conclude that the VOF methods with piecewise linear geometrical interface reconstruction as implemented in the TURBIT-VOF and FLUENT code give very similar results which differ from those obtained by the STAR-CD and CFX code, which do not perform an interface reconstruction but use high order difference method to solve the volume fraction equation. We also note that the CFX results for the bubble velocity (not for U_L) show irregular oscillations in time while the curves obtained by the other codes are very smooth. However, this may be related to the lower grid resolution used for CFX.

In Figure 4 we show a lateral view of the terminal bubble shape computed by the four different codes for case BH ($\Delta\bar{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$). For TURBIT-VOF the bubble shape is obtained as follows. For each mesh cell that contains both phases ($0 < f < 1$) the centroid of the plane representing the interface is computed. For neighboring mesh cells the points computed in this way are then connected to form triangles or quadrangles so that a closed surface is obtained. For the three commercial CFD codes the bubble shape is obtained in a simpler manner, namely as the iso-surface corresponding to the value $f = 0.5$. While at a first look the bubble shapes in Figure 4 appear to be very similar, there are some differences to note. These concern mainly the bubble tip, which is rounded for TURBIT-VOF and CFX, is pointed for STAR-CD and is flat for FLUENT. The bubble diameter D_B is almost the same for TURBIT-VOF, FLUENT and CFX, while the value for STAR-CD is slightly higher, see Table I. Differences in bubble shape can be observed for the lower half of the bubble, too. While the rear part of the bubble is rather smoothly curved in TURBIT-VOF and CFX, there is in FLUENT and STAR-CD a part where the interface is almost flat in this lateral view.

From the visual impression of the bubble shape and the values for the bubble diameter (and) the underestimation of the bubble terminal velocity by STAR-CD of about 10% and the overestimation by CFX of about 10% (for $0.005 \text{ s} < t < 0.015 \text{ s}$) as compared to the TURBIT-VOF and FLUENT results is surprising. To investigate possible reasons for this discrepancy additional simulations have been performed by CFX, STAR-CD and TURBIT-

VOF, where the initial overall void fraction ε is reduced from about 33% to about 30%. The additional CFX simulations performed use a time step width which is increased by a factor of ten. The results obtained by CFX, STAR-CD and TURBIT-VOF for both void fractions are displayed in Figure 5. Since the flow is driven by buoyancy only, it can be expected that the decrease of ε will result in a decrease of both, U_B and U_L . Figure 5 shows that this is valid for TURBIT-VOF. For STAR-CD, however, there is only a decrease of U_L while the bubble velocity U_B remains unaffected. For CFX the situation is even more confusing for two reasons. First, for the high void fraction case and with the increased time step width now the bubble velocity is no more overestimated but underestimated as compared to TURBIT-VOF and FLUENT. Second, with the increased time step width, the bubble velocity for the low void fraction case is much higher than that for the high void fraction case. These results appear to be rather unphysical.

A possible reason for the discrepancies in the CFX and STAR-CD simulations may be an insufficient grid resolution. To investigate this topic, simulations with STAR-CD for three different grids and otherwise unchanged conditions have been performed. The results are displayed in Figure 6. For the terminal mean liquid velocity no notable difference can be identified on the three different grids. However, the bubble velocity is somewhat smaller on the finer grid. Also, we observe a slight oscillation of the mean bubble velocity on the coarsest grid (SBL48F) which is not present on the two finer grids. This oscillation is, however, also observed in all CFX simulations on this grid. Nevertheless, we may conclude that the underestimation of the bubble velocity by STAR-CD as compared to TURBIT-

VOF and FLUENT is not a result of insufficient grid resolution. Instead, it may be related to the overestimated bubble diameter and thus to the bubble shape, which has a strong influence on the bubble drag. Differences in the bubble drag are directly linked to differences in bubble velocity.

For TURBIT-VOF a grid refinement study is performed, too. The comparison of the data for U_B and U_L in Table I for case TBH48F and TBH64F shows that the differences are very small, while the difference for the bubble diameter is somewhat larger. For the case with pressure gradient, however, the results of case TPH48F and TPH64F are almost identical.

For CFX the influence of the time step width is investigated in more detail. In Figure 7 results are compared for case P(B)H ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) using a grid of $24 \times 48 \times 24$ mesh cells and three different values of the time step width. We see that the results for the time step width $\Delta t = 3.785 \mu\text{s}$ and $\Delta t = 7.57 \mu\text{s}$ are very similar, while for the smallest time step width $\Delta t = 0.757 \mu\text{s}$ the bubble velocity is much higher. While one should expect that the results for the smaller time step are more accurate, the results for the larger time steps are in better agreement with those of TURBIT-VOF and FLUENT. In Figure 7 one can also note an influence of the order of the time integration scheme which is, however, small.

In Figure 8 results obtained by FLUENT using the four different VOF methods (“geometric interface reconstruction”, “donor-acceptor”, “Euler-explicit” and “implicit”) are compared. While the differences between the different methods are somewhat larger for the initial

transient phase, which is associated with a deformation of the bubble from the initial spherical shape, the differences in the terminal velocities of gas and liquid are notable but are not dramatic. However, the best agreement with the TURBIT-VOF results is obtained for the geometric interface reconstruction scheme. The bubble shapes obtained with the different VOF schemes are displayed in Figure 9. While some differences can be noted, in general the bubble shapes are very similar.

3.2. *Bubble-train flow driven by buoyancy and external pressure gradient*

In this section we now present the results for the bubble-train flow driven by buoyancy and by an external axial pressure gradient which corresponds to a body force of 9000 N/m^3 . The results for the time-dependent main bubble velocity and mean liquid velocity obtained by the different computer codes are displayed in Figure 10. For FLUENT the geometric interface reconstruction scheme has been used. As expected, in the case with pressure gradient both U_B and U_L are higher than in the case with buoyancy only. As a consequence, the transient phase till the bubble reaches its terminal velocity takes more time. The terminal bubble velocity in TURBIT-VOF and FLUENT corresponds to a capillary number $Ca = 0.204$ and a bubble Reynolds number $Re_B = 3.75$. Similar to the case with buoyancy only, displayed in Figure 3, the STAR-CD results are again lower as their TURBIT-VOF and FLUENT counterparts. For CFX, again similar to Figure 3, the bubble velocity is initially higher than the one obtained by TURBIT-VOF and FLUENT. However, the situation changes drastically at $t \approx 0.017 \text{ s}$ when U_B suddenly runs away. The reason for this is that the initially spherical bubble continues to elongate till finally the liquid slug

disappears and an annular flow is formed. Thus, with CFX on this grid no stable bubble-train flow is computed. For FLUENT and TURBIT-VOF the terminal bubble rise velocity differs by only about 1.6% while the mean liquid velocity of FLUENT is about 4.7% higher. The pressure difference $\Delta\tilde{p}$ across the unit cell evaluated from the FLUENT computations is -21.5 Pa which is in acceptable agreement with the TURBIT-VOF input value $\Delta\tilde{p} = -18$ Pa. Here, for the donor-acceptor method a much better agreement is obtained as the respective value is -17.9 Pa. When comparing the results of TURBIT-VOF and FLUENT we have to recall that for the first code due to the periodic boundary conditions a bubble-train flow consisting of an “infinite” number of identical bubbles is considered, while in FLUENT instead only a three bubble configuration is simulated. Having this in mind one may argue that the agreement between both codes is remarkable.

In Figure 11 we show a lateral view of the terminal bubble shape computed by the four different codes for case PH ($\Delta\tilde{p} = -18$ Pa, $\varepsilon = 33\%$). Overall, the bubble shapes computed by TURBIT-VOF, FLUENT and STAR-CD appear to be very similar. From Table I one can note that the bubble diameter for TURBIT-VOF and FLUENT is almost the same. However, for STAR-CD again the value of D_B is somewhat larger as was also observed for the case with buoyancy only. It also appears that for FLUENT the length of the liquid slug is slightly shorter than for TURBIT-VOF and STAR-CD.

For STAR-CD additional simulation runs have been performed to investigate the influence of the difference scheme and the time step width. While in the basic case (SPH64Q) and in

case SPH64Q-T the high resolution advection scheme is used both, for the volume fraction equation and for the momentum equation, in case SPH64Q-1 instead the upwind scheme is used for the volume fraction equation, while in case SPH64Q-2 the upwind scheme is used for the momentum equation. Cases SPH64Q and SPH64Q-T differ only by the time step width, which is increased in the latter case by a factor of ten. The results are shown in Figure 12. The comparison of cases SPH64Q and SPH64Q-2 shows that the choice of the high resolution scheme or upwind scheme for the momentum equation makes no difference. However, the comparison of cases SPH64Q and SPH64Q-1 reveals that the replacement of the high resolution scheme in the volume fraction equation by the upwind scheme does not give reliable results. The use of the upwind scheme for the volume fraction equation is associated with a considerable smearing of the interface over several mesh cells and does not lead to bubble-train flow but to annular flow. A comparison of cases SPH64Q and SPH64Q-T shows that the influence of the time step width in STAR-CD is very small.

In Figure 13 results obtained by FLUENT using the four different VOF methods (“geometric interface reconstruction”, “donor-acceptor”, “Euler-explicit” and “implicit”) are compared for the case with pressure gradient. For the geometric interface reconstruction scheme and the donor-acceptor method bubble-train flow is computed. However, the use of the implicit scheme did not yield a converging solution at all, while the use of the Euler-explicit scheme resulted in a stop of the code execution and the message “to many VOF sub-timesteps”. The void fraction distribution computed up to this time step and the strong increase of U_B and the strong decrease of U_L suggest that coalescence of the bubbles will

occur yielding to annular flow. It may be possible to obtain converging solutions with the implicit scheme and the Euler-explicit scheme of FLUENT when smaller time steps are used. However, this topic has not been investigated yet. The bubble shapes obtained with the geometric interface reconstruction scheme and the donor-acceptor scheme are displayed in Figure 14. While for buoyancy driven flow the difference in bubble shape between both methods was rather small (see Figure 9) now substantial differences can be observed. In the donor-acceptor method the bubble diameter is larger, while the length of the bubble is much smaller and, as a consequence, the length of the liquid slug is much larger as compared to the case with the geometric interface reconstruction scheme.

A critical issue for the computation of two phase flows by any CFD code is the mass conservation of the phases. As in the present study the density of both phases is constant mass conservation is equivalent to volume conservation. In transient computations typically a certain amount of mass respectively volume is gained or lost per time step, e.g. because of numerical diffusion or truncation errors. A suitable measure for this amount is given by the quantity

$$\frac{V_G(t = N_t \Delta t) - V_G(t = 0)}{V_G(t = 0)} \cdot \frac{1}{N_t} = \frac{\varepsilon_{N_t} - \varepsilon_0}{\varepsilon_0 N_t} = \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_0 N_t} \quad (15)$$

Here, V_G is the volume of the gas phase. In Table I the values of $\log_{10}(|\Delta \varepsilon|/(\varepsilon_0 N_t))$ are listed for the different codes and simulation runs. For TURBIT-VOF the order of magnitude of $-\log_{10}(|\Delta \varepsilon|/(\varepsilon_0 N_t))$ is in the range 9.1 – 9.5, for FLUENT it is in the range

7.7 – 8.3, for STAR-CD it is in the range 6.5 – 7.7 and for CFX it is in the range 3.1 – 6.1. These results indicate that the mass conservation error per time step in the piecewise linear interface reconstruction methods of TURBIT-VOF and FLUENT is about one order of magnitude better than the one that can be obtained by the higher order difference scheme methods in FLUENT(CFX) and STAR-CD. The mass conservation error per time step of CFX is up to six orders of magnitude higher than for the other codes. This is dramatic and may explain the poor performance of the CFX code within the present code-to-code comparison. A closer investigation of the temporal evolution of the mass conservation error in CFX yields the interesting result that initially (and for case CBH48Q) $-\log_{10}(|\Delta\varepsilon|/(\varepsilon_0 N_t))$ is in the range 6 – 7 and thus is similar to the values found for the STAR-CD code. However, as soon as the bubble crosses the top of the computational domain and reenters it through its bottom the mass conservation error in CFX strongly increases by about three orders of magnitude. This observation suggests that there may be an inaccuracy or error in the code related to the treatment of periodic boundary conditions.

4. CONCLUSIONS

In the present paper a comprehensive code-to-code comparison exercise for bubble-train flow in a square mini-channel has been performed in order to assess the capabilities of CFD codes and numerical methods and to deal with interfacial flows in small dimensions where surface tension effects are predominant and where the shape of the deformable interface is part of the solution. The flow configuration investigated consists of the co-current vertical bubble-train flow of air bubbles through silicone oil in a square mini-channel of $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ cross section.

The computations are performed with the volume-of-fluid method as implemented in the in-house code TURBIT-VOF and the commercial CFD packages CFX, STAR-CD and FLUENT. In the three codes mentioned first, the bubble-train flow is realized by a computational set-up which considers one bubble within the flow unit cell only and uses periodic boundary conditions in axial direction. Since this set-up is not a valid option for the FLUENT code, computations with FLUENT have not been performed in a fixed frame of reference but in a frame of reference moving with the bubble in conjunction with appropriate inflow and outflow boundary conditions. For both computational set-ups two cases have been considered. In the first one, the flow is driven by buoyancy only while in the second one it is driven both, by buoyancy and by an external axial pressure gradient. For the volume-of-fluid method, as implemented in these codes, two distinct approaches

can be distinguished. In the first one the transport equation for the liquid volumetric fraction is solved by methods that involve a geometrical reconstruction of the interface, which is either piece-wise linear or piece-wise constant. In the second approach, higher order difference schemes are used instead.

To evaluate the results obtained by the different codes and methods mainly the bubble velocity, the mean liquid velocity and the bubble diameter are compared. It is found that the volume-of-fluid method with piece-wise linear geometrical interface reconstruction as implemented in the TURBIT-VOF and FLUENT codes gives very similar and consistent results. Also the donor-acceptor method of FLUENT which is based on a piece-wise constant interface approximation yields satisfactory results. In contrast, all methods that do not perform an interface reconstruction but use high order difference schemes to solve the volume fraction equation show some deficiencies. These concerns the Euler-explicit scheme and the implicit scheme of FLUENT and the methods implemented in STAR-CD and CFX. These deficiencies do not only affect the bubble and liquid velocity, as is the case for bubble-train flow driven by buoyancy only, but also may affect the entire flow structure. This is demonstrated for the case where the bubble-train flow is driven by buoyancy and an external pressure gradient. While the methods based on geometric interface reconstruction are all able to resolve and maintain the thin liquid slug, the higher rate of smearing of the interface which is associated with the difference scheme for volume-of-fluid methods results in artificial bubble coalescence and thus annular flow instead of bubble-train flow or even results in a breakdown of the simulation run. The deficiencies of the difference scheme volume-of-fluid methods have also been demonstrated by investigating the

influence of gas hold up for buoyancy driven flow (for STAR-CD and CFX) and by investigating the influence of the time step width (CFX).

As the mass conservation property of a CFD code is an important issue, the magnitude of the error in mass conservation of the gas phase per time step has been evaluated for the different codes and schemes. The results indicate that the mass conservation error per time step in the piecewise linear interface reconstruction methods of TURBIT-VOF and FLUENT is at least about one order of magnitude better than the one that can be obtained by the higher order difference scheme methods in FLUENT, STAR-CD and CFX.

In summary one may conclude that volume-of-fluid method computations for interfacial flows using higher order difference schemes for solution of the volume fraction equation may lead to reliable results only for certain situations but can not be in general recommended. This is especially valid for flows in small dimensions where surface tension effects are predominant. In contrast, the use of volume-of-fluid methods that involve a piece-wise linear geometric interface reconstruction gave reliable and consistent results and their use is highly recommended. This should also hold for two-phase flows in automotive applications (e.g. the sloshing of fuel in a tank) which will be a future task for us.

ACKNOWLEDGEMENTS

The support of EU Erasmus program is gratefully acknowledged. The authors are also grateful for the support of M. Böttcher and S. Gordeev.

NOMENCLATURE

a_i	Interfacial area concentration	1/m
Ca	Capillary number, $Ca \equiv \mu_L U_B / \sigma$	-
D_B	Bubble diameter	m
D_h	Hydraulic diameter	m
$\hat{\mathbf{e}}_y$	Unit vector in y-direction	-
f	Liquid volumetric fraction	-
\mathbf{f}_{pd}	Body force due to external pressure drop	N/m ³
\mathbf{f}_σ	Surface tension force	N/m ³
g	Gravitational acceleration	m/s ²
\mathbf{g}	Gravity vector	m/s ²
h	Mesh cell width	m
L_x, L_y, L_z	Length of computational domain	m
$\hat{\mathbf{n}}_i$	Unit normal vector to interface pointing into the liquid	-
N_i, N_j, N_k	Number of mesh cells	-
N_t	Number of time steps	-
p	Pressure	Pa
P	Periodic part of pressure	Pa
$\Delta\tilde{p}$	Non-hydrostatic pressure drop across L_y	Pa
Re_B	Bubble Reynolds number, $Re_B \equiv \rho_L D_h U_B / \mu_L$	-
t	Time	s
Δt	Time step width	s
U_B	Bubble velocity	m/s
U_L	Mean liquid velocity in unit cell	m/s
U_{slug}	Mean axial velocity in liquid slug	m/s
U_{wall}	Downward velocity of the walls in FLUENT computations	m/s

\mathbf{v}_m	Center-of-mass velocity	m/s
V_G	Volume of gas phase in domain	m^3
x, y, z	Cartesian coordinates	m
\mathbf{x}	Position vector $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$	m

GREEK SYMBOLS

α	Local phase volume fraction	-
ε	Overall gas volume fraction in domain	-
κ	Interface curvature	1/m
μ	Dynamic viscosity	Pa s
ρ	Density	kg/m^3
σ	Coefficient of surface tension	N/m

SUBSCRIPTS

B	Bubble
G	Gas phase
i	Interface
L	Liquid phase
m	Mixture quantity

REFERENCES

1. Tsouris C, Porcelli JV. Process intensification – has its time finally come? *Chem. Eng. Progr.* 2003; **10**:50–55.
2. Wegeng RS, Drost MK, Brenchley DL. Process intensification through miniaturization of chemical and thermal system in the 21st century. In *Proc 3rd Int. Conf. Microreaction Technology (IMRET3)*, Ehrfeld W (ed); Springer: Berlin, 2000; pp. 2–13.
3. Charpentier J-C. Process intensification by miniaturization. *Chem. Eng. Technol.* 2005; **28**(3):255–258.
4. Schubert K, Brandner J, Fichtner M, Linder G, Schygulla U, Wenka A. Microstructure devices for applications in thermal and chemical process engineering. *Microscale Therm. Eng.* 2001; **5**:17–39.
5. Pfeifer P, Haas-Santo K, Görke O, Bohn L, Schubert K. Fuel to hydrogen – an overview over fuel conversion activities at the institute for micro process engineering. In *Proc. AIChE Spring National Meeting / IMRET-8*, Atlanta, U.S.A., April 11 - 14, 2005.

6. Jähnisch K, Baerns M, Hessel V, Ehrfeld W, Haverkamp V, Löwe H, Wille C, Guber A. Direct fluorination of toluene using elemental fluorine in gas/liquid microreactors. *J. Fluorine Chem.* 2000; **105**(1):117–128.
7. Haverkamp V, Hessel V, Löwe H, Menges G, Warnier MJF, Rebrov EV, de Croon MHJM, Schouten JC, Liauw M. Hydrodynamics and mixer-induced bubble formation in microbubble columns with single and multiple channels. *Chem. Eng. Technol.* 2006; **29**(9):1015–1026.
8. Günther A, Khan SA, Thalmann M, Trachsel F., Jensen KF. Transport and reaction in microscale segmented gas-liquid flow. *Lab Chip* 2004; **4**:278–286.
9. Kreutzer MT, Kapteijn F, Moulijn JA, Ebrahimi S, Kleerebezem R, van Loosdrecht MCM. Monoliths as bioreactors: smart gas-liquid contacting for process intensification. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2005; **44**:9646–9652.
10. Williams JL. Monolith structures, materials, properties and uses. *Catal. Today* 2001; **69**:3–9.
11. Brackbill JU, Kothe DB, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.* 1992; **100**(2):335–354.
12. Hirt CW, Nichols BD. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.* 1981; **39**:201–225.

13. Sussman M, Smereka P, Osher S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.* 1994; **114**:146–159.
14. Tryggvason G, Bunner B, Esmaeeli A, Juric D, Al-Rawahi N, Tauber W, Han J, Nas S, Jan Y-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *J. Comput. Phys.* 2001; **169**:708–759.
15. Scheuerer M, Heitsch M, Menter F, Egorov Y, Toth I, Bestion D, Pigny S, Paillere H, Martin A, Boucker M, Krepper E, Willemsen S, Muhlbauer P, Andreani M, Smith B, Karlsson R, Henriksson M, Hemstrom B, Karppinen I, Kimber G. Evaluation of computational fluid dynamic methods for reactor safety analysis (ECORA). *Nucl. Eng. Des.* 2005; **235**:359–368.
16. Thulasidas TC, Abraham MA, Cerro RL. Bubble-train flow in capillaries of circular and square cross section. *Chem. Eng. Sci.* 1995; **50**:183–199.
17. Ghidersa B, Wörner M, Cacuci DG. Exploring the flow of immiscible fluids in a square vertical mini-channel by direct numerical simulation. *Chem. Eng. J.* 2004; **101**(1–3):285–294.
18. Wörner M, Ghidersa B, Onea A. A model for the residence time distribution of bubble-train flow in a square mini-channel based on direct numerical simulation results. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 2006, in press.
(available online at <http://www.sciencedirect.com/science/journal/0142727X>).

19. Wörner M, Sabisch W, Grötzbach G, Cacuci DG. Volume-averaged conservation equations for volume-of-fluid interface tracking. In *Proc. 4th Int. Conf. on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, U.S.A., CD-ROM, May 27 - June 1, 2001.
20. Sabisch W, Wörner M, Grötzbach G, Cacuci DG. 3D volume-of-fluid simulation of a wobbling bubble in a gas-liquid system of low Morton number. In *Proc. 4th Int. Conf. on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, U.S.A., CD-ROM, May 27 - June 1, 2001.
21. Wörner M, Ghidersa B, Ilić M., Cacuci DG. Volume-of-fluid based numerical simulations of gas-liquid two-phase flow in confined geometries. *Houille Blanche* 2005; No. 6:91–104.
22. Ubbink O, Issa RI. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *J. Comput. Phys.* 1999; **153**:26–50.
23. Muzaferija S, Peric M. Computation of free surface flows using interface-tracking and interface capturing methods. In *Nonlinear water wave interaction*, Mahrenholtz O, Markiewicz M (eds); WIT Press: Southampton, 1999; pp. 59–100.
24. STAR-CD Version 4.00 Methodology, CD-adapco 2006.

25. ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Theory.
26. Taha T., Cui ZF. CFD modelling of slug flow inside square capillaries. *Chem. Eng. Sci.* 2006; **61**:665–675.
27. Youngs DL. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Morton KW and Baines MJ (eds); Academic Press, 1982; pp. 273–285.
28. FLUENT documentation, chapter 24.2.8.

LIST OF FIGURES

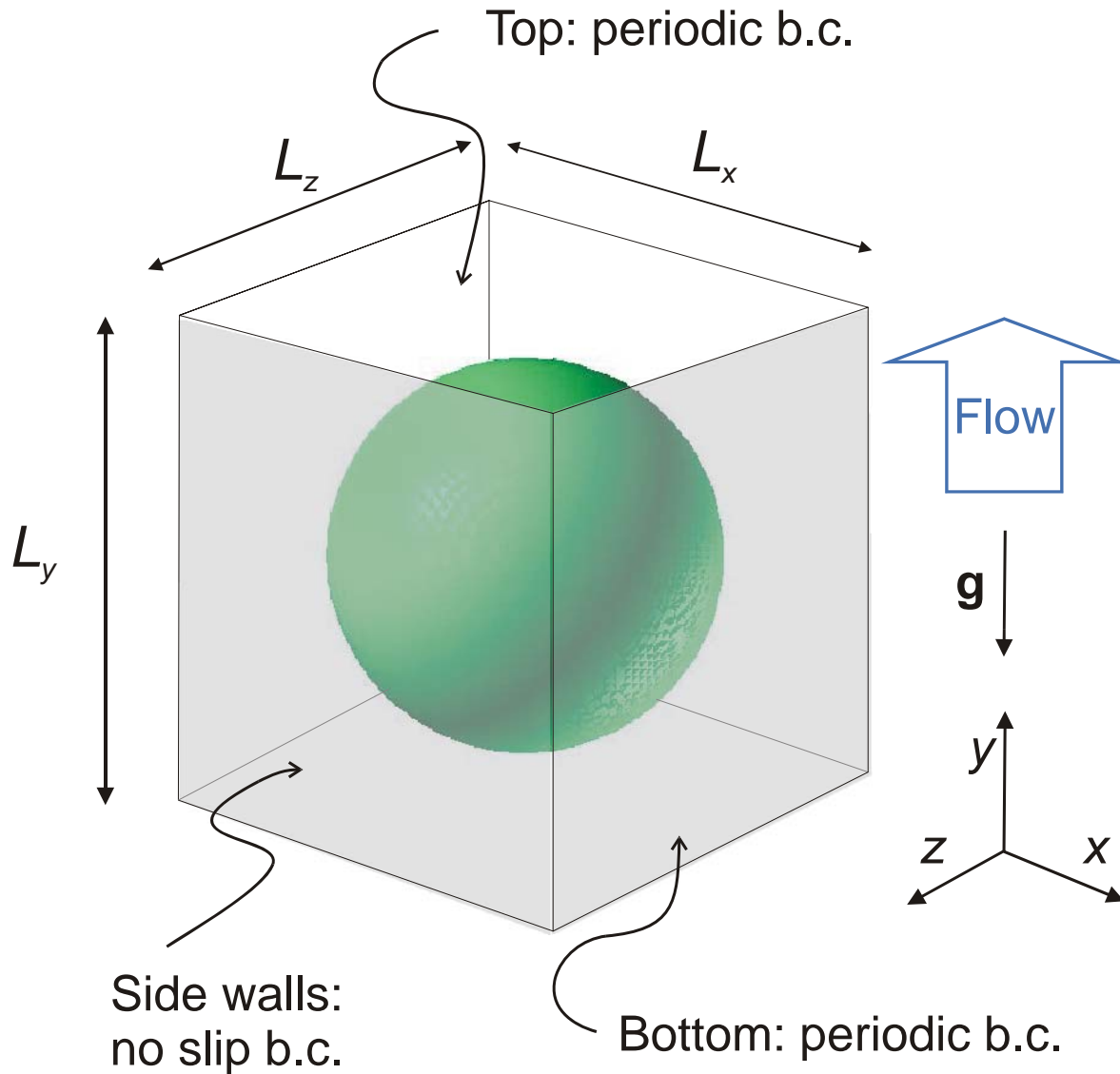


Figure 1: Sketch of co-ordinate system, computational domain, boundary conditions (b.c.) and initial bubble shape used in the simulations with TURBIT-VOF, STAR-CD and CFX.

The numerical values of the dimensions are $L_x = L_y = L_z = 2$ mm.

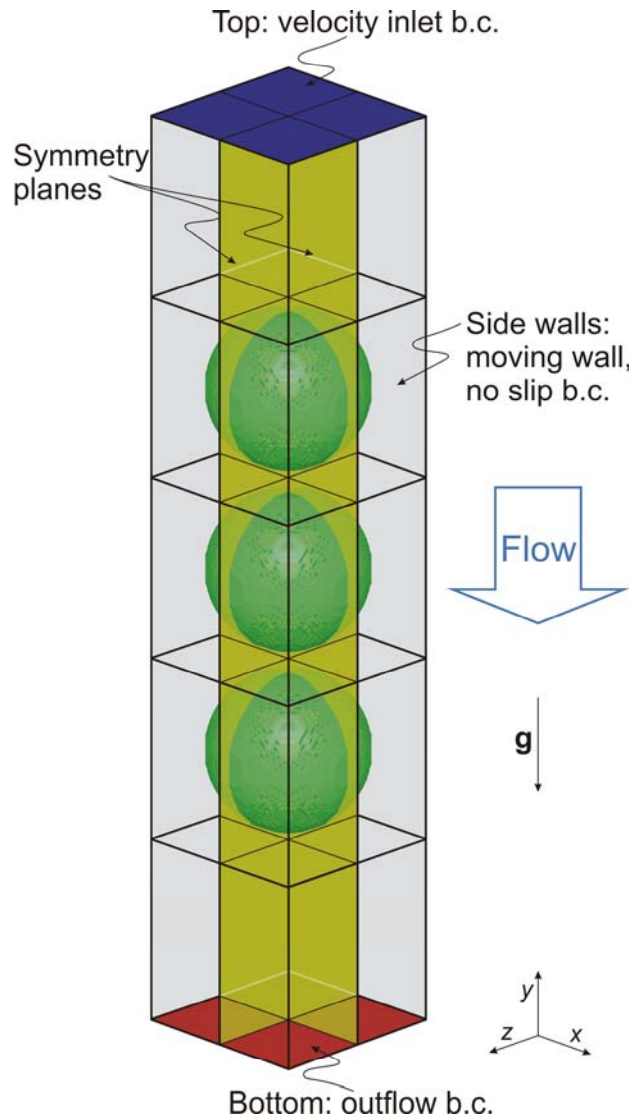


Figure 2: Sketch of computational domain, boundary conditions (b.c.) and initial bubble distribution used in the simulations with FLUENT. While in the figure the entire channel cross-section is displayed, only a quarter of it is actually solved for by use of symmetry planes. The size of the computational domain is therefore $1 \text{ mm} \times 10 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$.

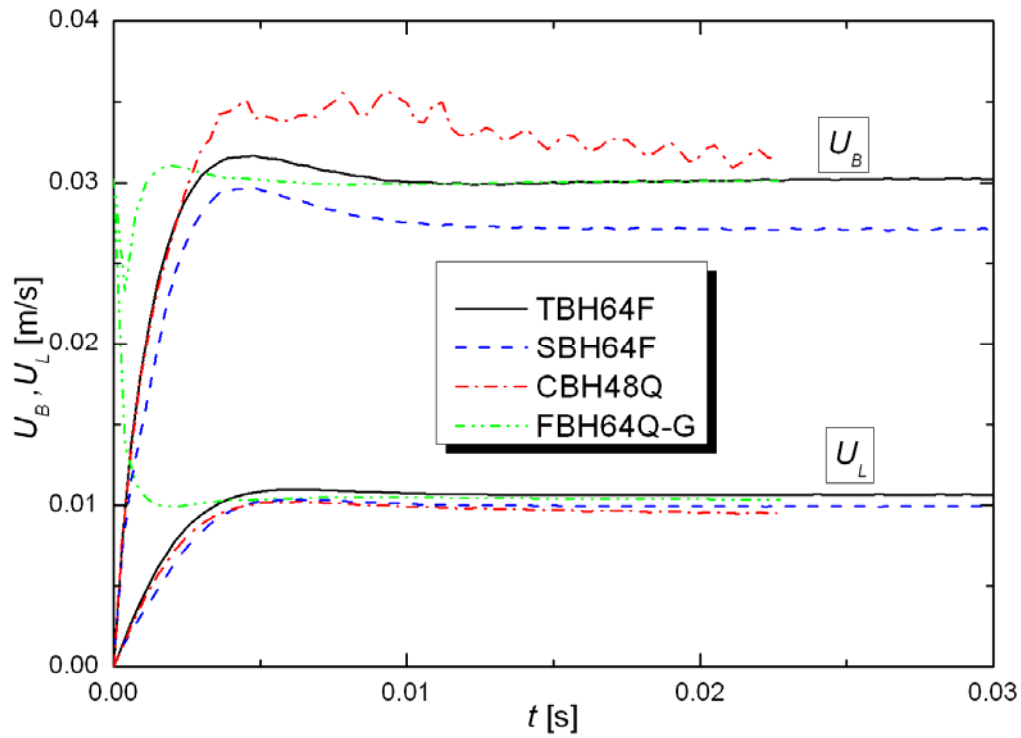


Figure 3: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX and FLUENT for test case BH ($\Delta\tilde{p} = 0$ Pa, $\varepsilon = 33\%$).

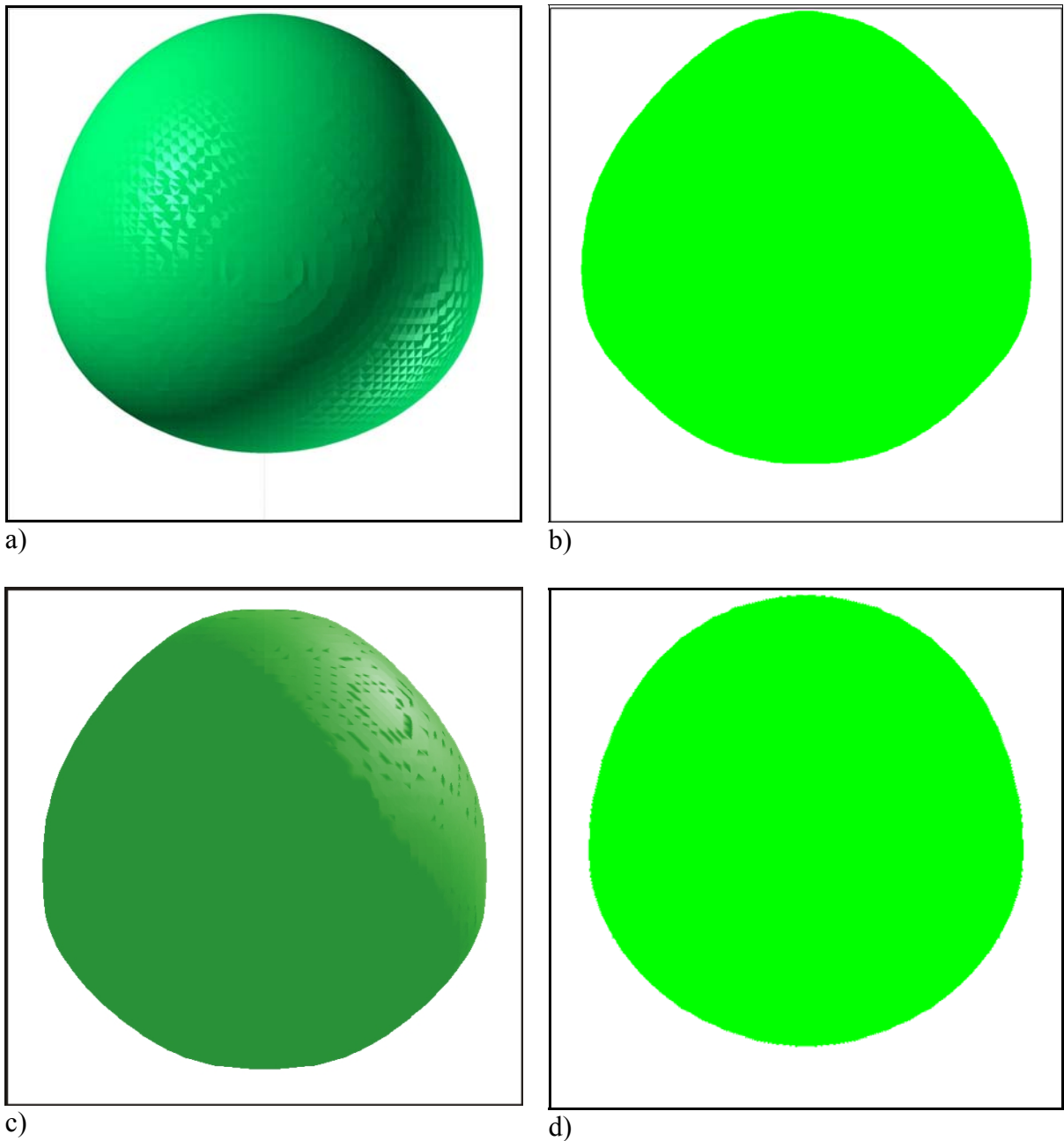


Figure 4: Lateral view of steady bubble shape computed for case BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) by a) TURBIT-VOF (case TBH64F), b) STAR-CD (case SBH64F), c) FLUENT (case FBH64Q-G) and d) CFX (case CBH48Q-T). For FLUENT only the bubble in the middle is shown.

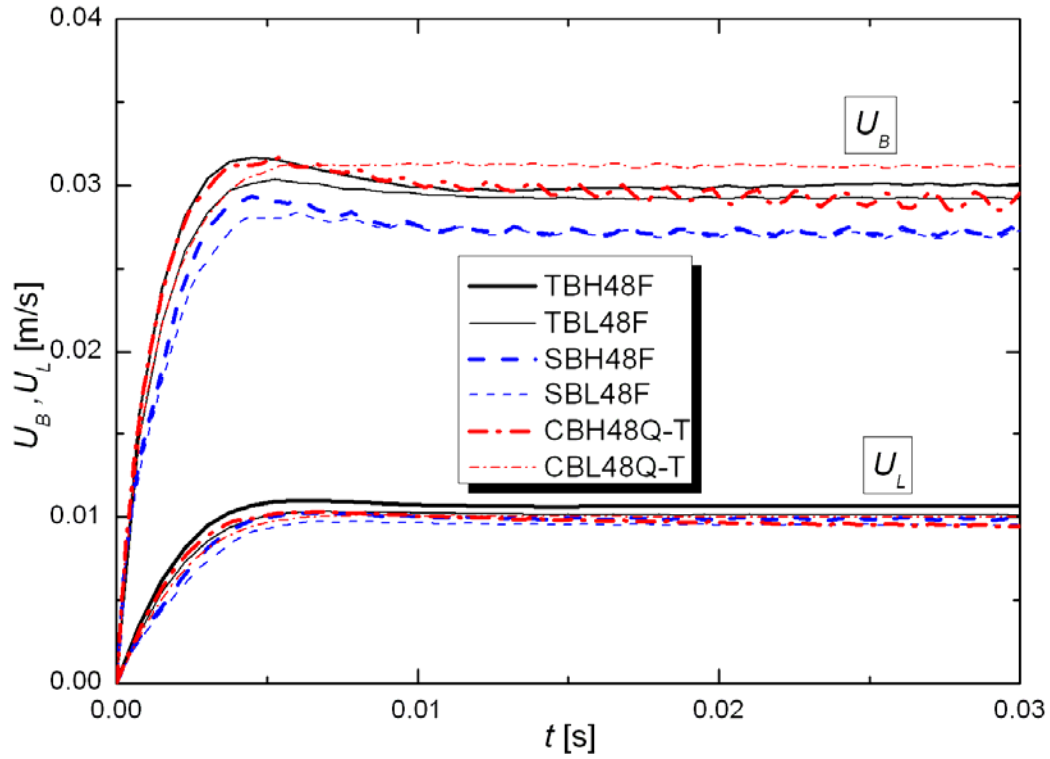


Figure 5: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by TURBIT-VOF, STAR-CD and CFX for test case BH ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) and BL ($\Delta\tilde{p} = 0 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 30\%$) on grid $48 \times 48 \times 48$. The time step width used for TURBIT-VOF and STAR-CD is $0.757 \mu\text{s}$ while for CFX it is $7.57 \mu\text{s}$.

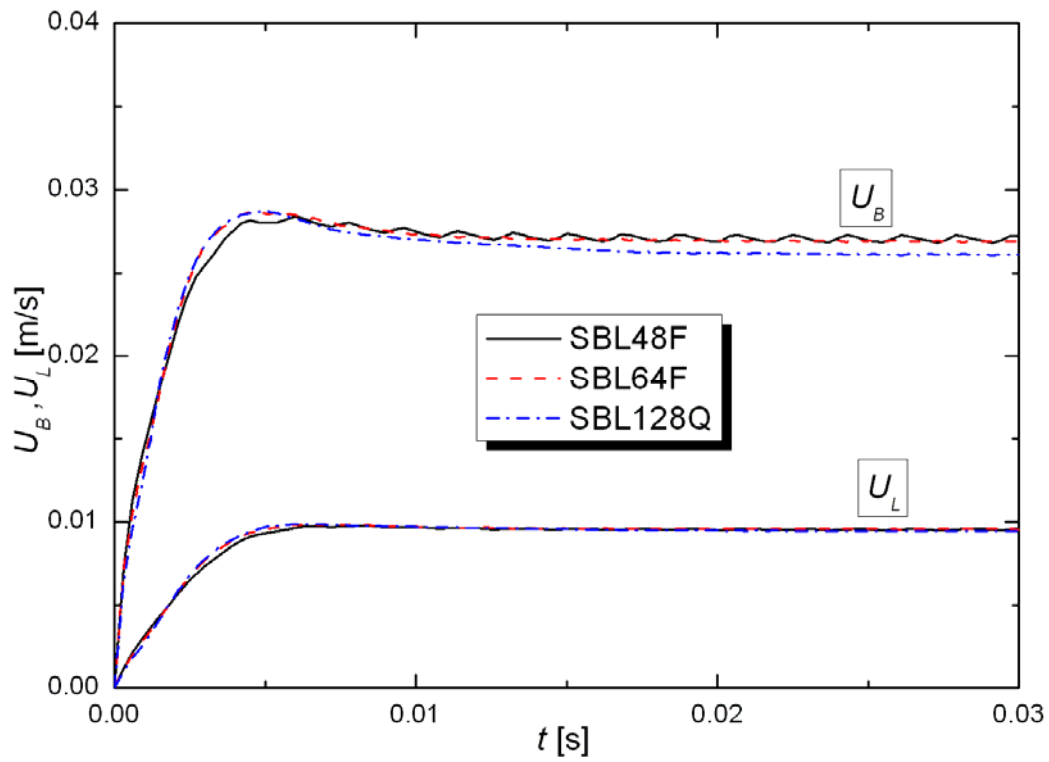


Figure 6: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by STAR-CD for test case BL ($\Delta\bar{p} = 0$ Pa , $\varepsilon = 30\%$) on three different grids.

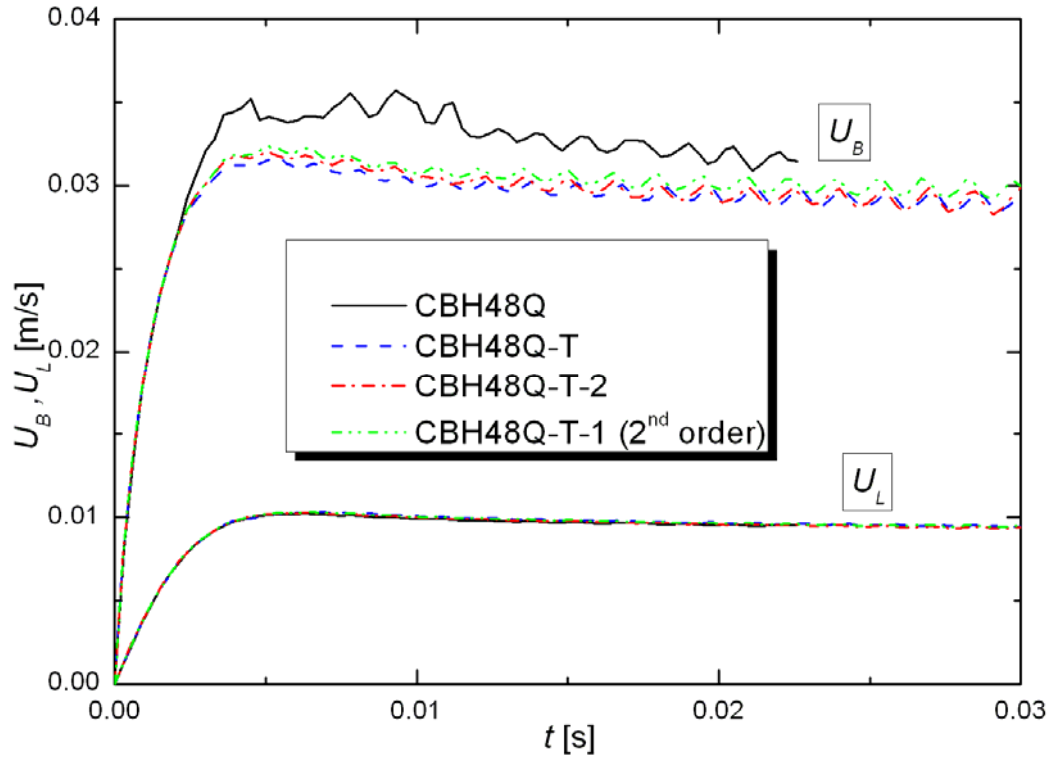


Figure 7: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by CFX for test case BH ($\Delta\tilde{p} = 0$ Pa , $\varepsilon = 33\%$) using different values for the time step width. The time step width of case CBH48Q-T-2 is five times and that of cases CBH48Q-T and CBH48Q-T-1 is ten times higher than for case CBH48Q, where $\Delta t = 0.75 \mu\text{s}$ is used.

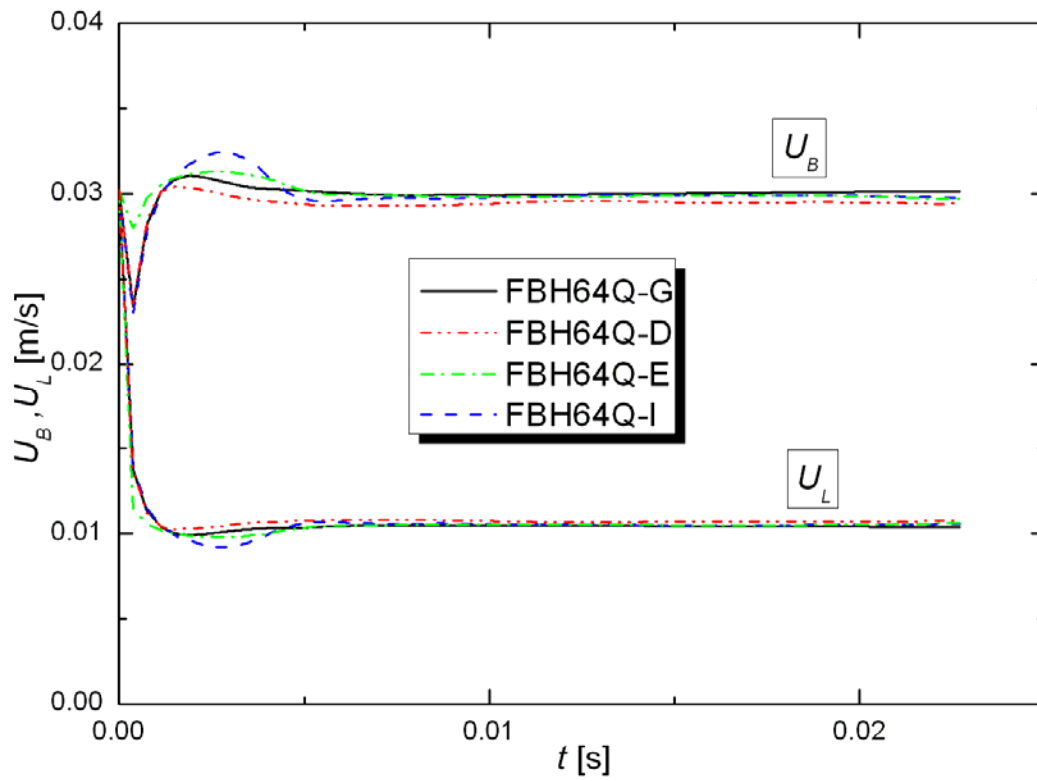


Figure 8: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by FLUENT using different schemes for solution of the volume fraction equation for buoyancy-driven flow.

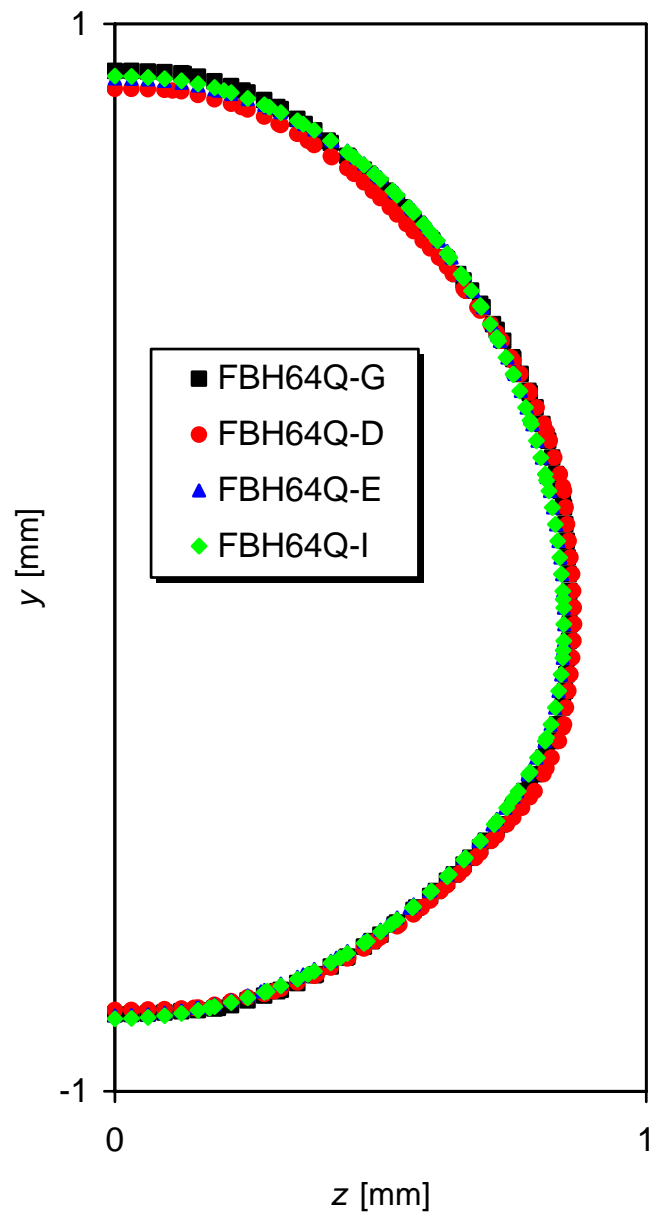


Figure 9: Comparison of FLUENT results for the bubble shape obtained by the different VOF schemes for buoyancy driven flow. The symbols for the Euler-explicit scheme (case FBH64Q-E) are hardly visible because they are mostly below the ones for the implicit scheme (case FBH64Q-I). (Only the shape of the bubble in the middle is displayed).

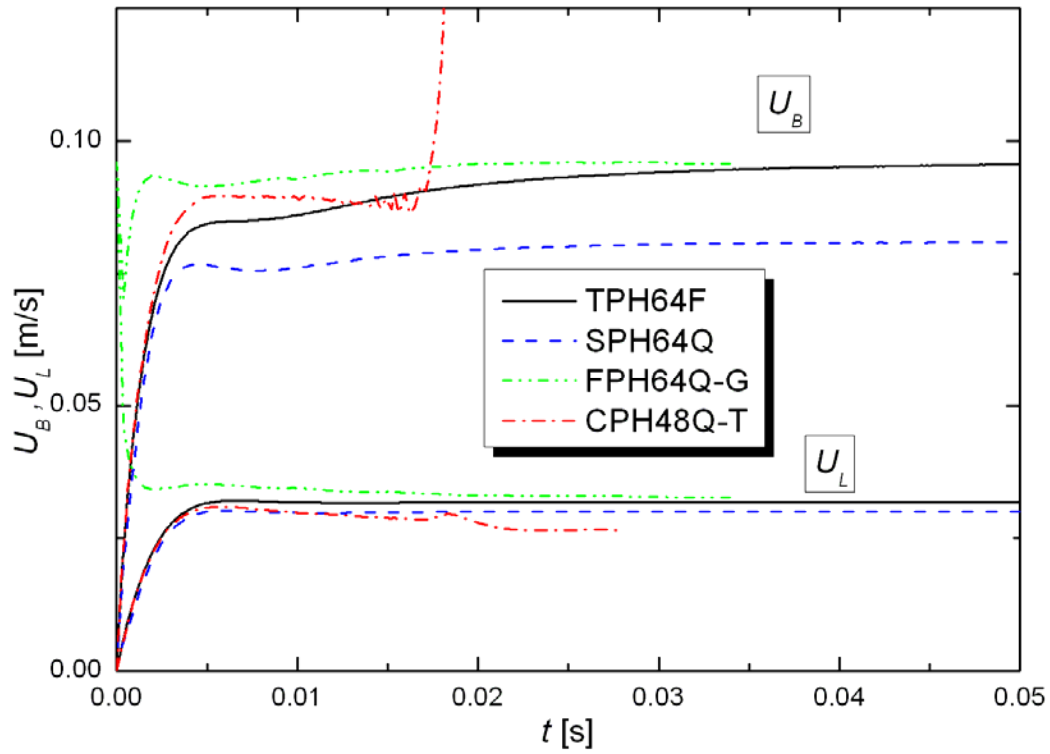


Figure 10: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by TURBIT-VOF, STAR-CD, CFX and FLUENT for test case PH ($\Delta\tilde{p} = -18\text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$).

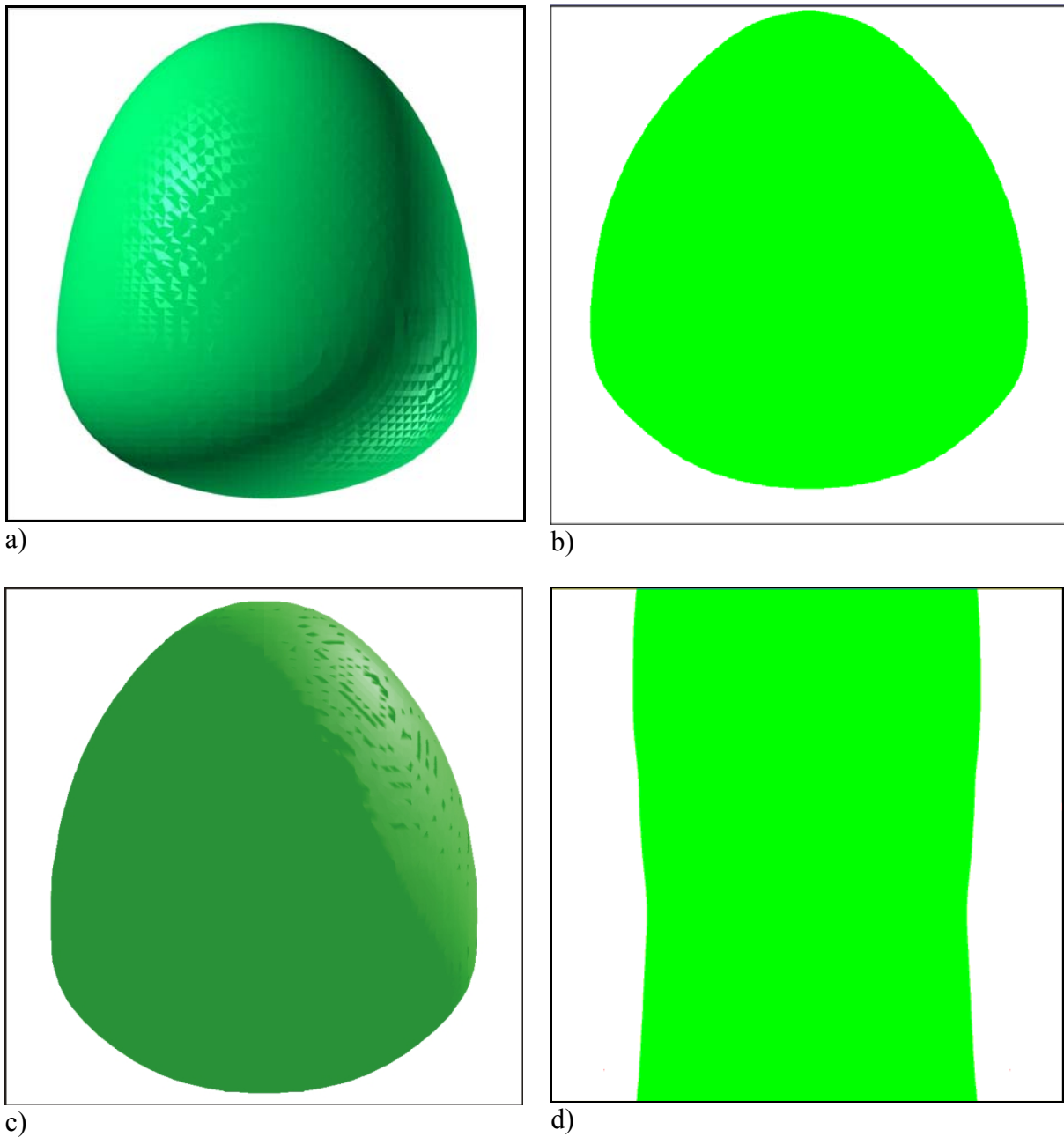


Figure 11: Lateral view of steady bubble shape computed for case PH ($\Delta\tilde{p} = -18 \text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) by a) TURBIT-VOF (case TPH64F), b) STAR-CD (case SPH64Q), c) FLUENT (case FPH64Q-G) and d) CFX (case CPH48Q-T). For FLUENT only the bubble in the middle is shown.

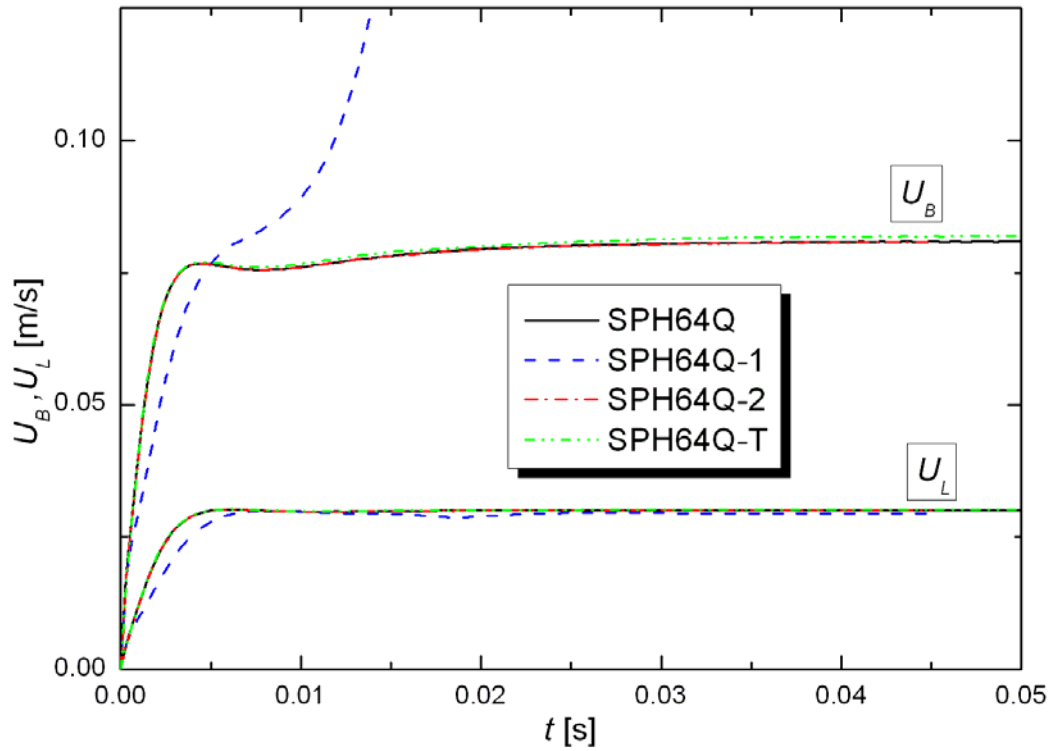


Figure 12: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by STAR-CD for test case PH ($\Delta\tilde{p} = -18\text{ Pa}$, $\varepsilon = 33\%$) for different schemes in the volume fraction and momentum equation and for different time step width.

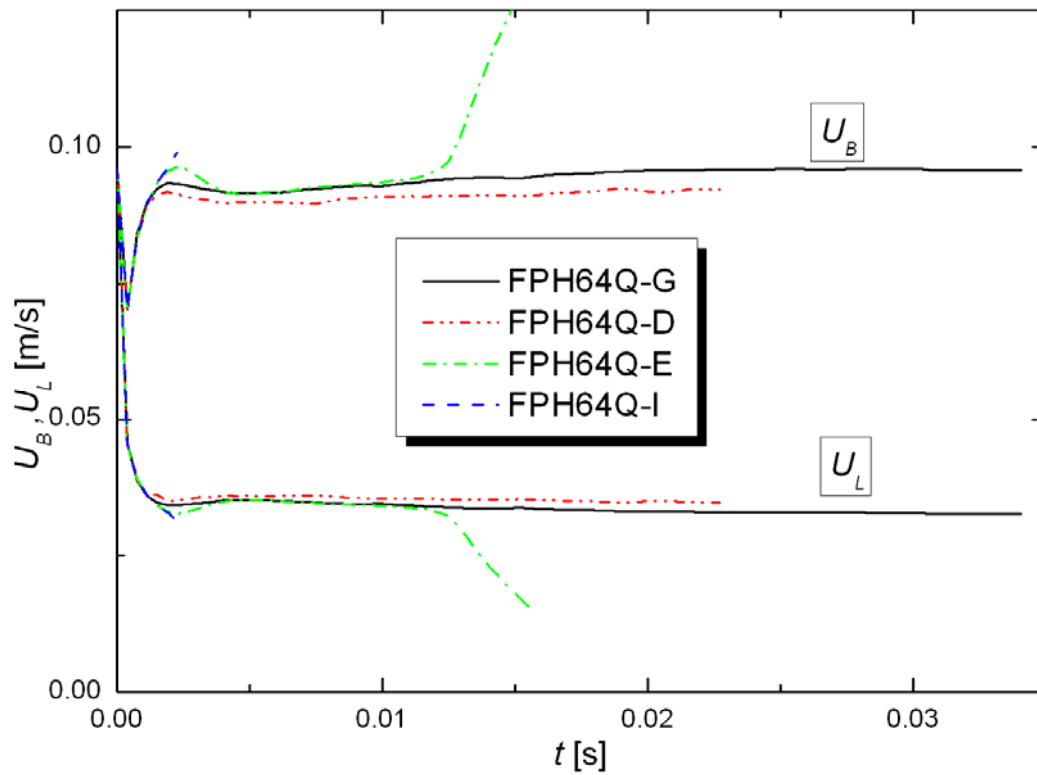


Figure 13: Temporal evolution of bubble velocity and mean liquid velocity computed by FLUENT using different schemes for solution of the volume fraction equation for buoyancy and pressure driven flow.

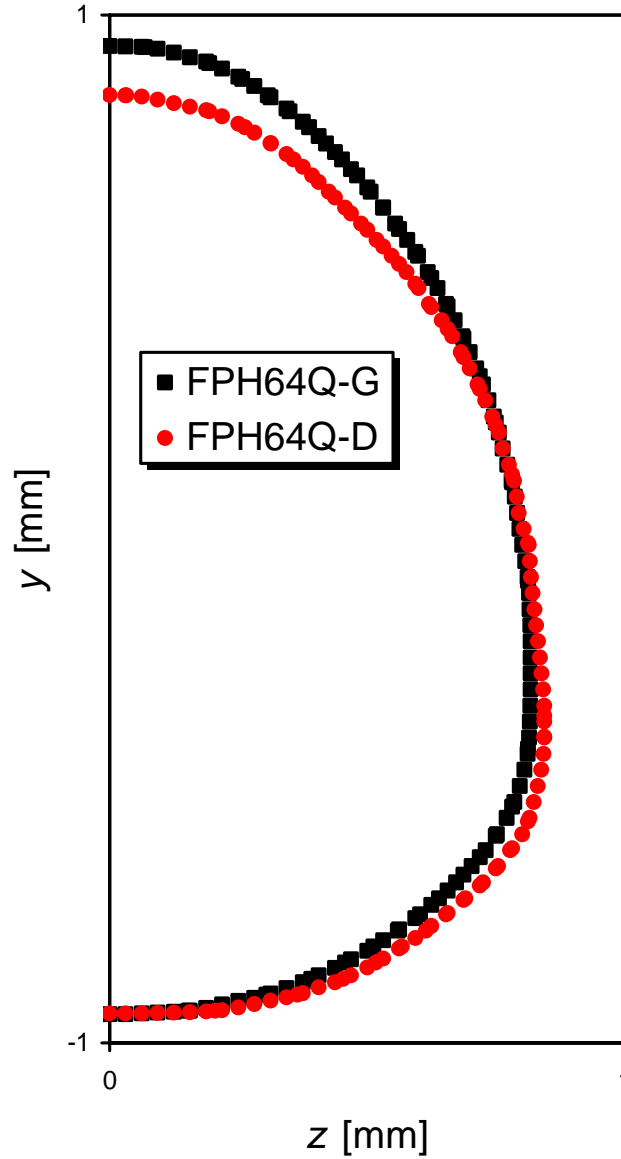


Figure 14: Comparison of FLUENT results for the bubble shape obtained by the different VOF schemes for buoyancy and pressure driven flow. While the results for case FPH64Q-D are for time step 3 000 and those for case FPH64Q-G are for time step 4 500, it was verified that the difference in shape for case FPH64Q-G at time steps 3 000 and 4 500 is very small. (Only the shape of the bubble in the middle is displayed).

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]	ε_0 [%]	Domain	Grid	Δt [μ s]	N_t [-]	U_B [cm/s]	U_L [cm/s]	D_B [mm]	$\log_{10}(\Delta\varepsilon /(\varepsilon_0 N_t))$ [-]	Remark
TURBIT-VOF	TBL48F	0.0	30.38	Full	48×48×48	1.892	20 000	2.917	1.011	1.670	-9.1	
	TBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	22 000	3.012	1.066	1.628	-9.2	
	TBH64F	0.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	94 000	3.023	1.066	1.711	-9.5	
	TPH48F	-18.0	33.07	Full	48×48×48	1.892	40 000	9.435	3.179	1.628	-9.4	
	TPH64F	-18.0	33.07	Full	64×64×64	0.757	100 000	9.409	3.171	1.629	-9.5	
STAR-CD	SBL48F	0.0	30.37	Full	48×48×48	0.750	80 000	2.699	0.956	1.713	-7.7	
	SBL64F	0.0	30.37	Full	64×64×64	0.750	119 600	2.691	0.954	1.712	-7.2	
	SBL128Q	0.0	30.37	Quarter	64×128×64	0.750	60 000	2.574	0.931	1.718	-7.7	
	SBH48F	0.0	33.07	Full	48×48×48	0.750	60 000	2.714	0.989	1.750	-7.7	
	SBH64F	0.0	33.05	Full	64×64×64	0.750	88 400	2.700	0.992	1.756	-6.5	
	SPH64Q	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	82 000	8.098	3.009	1.693	-7.5	
	SPH64Q-1	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	("Annular flow")			-7.7	Upwind for continuity eq.
	SPH64Q-2	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	0.750	60 000	8.089	3.009	1.699	-7.2	Upwind for momentum eq.
	SPH64Q-T	-18.0	33.05	Quarter	32×64×32	7.500	12 000	8.203	3.021	1.693	-7.0	Tenfold Δt
CFX	CBL48Q-T	0.0	30.07	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.117	0.999	1.658	-3.1	Tenfold Δt
	CBH48Q	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	0.750	38 100	3.143	0.951	1.704	-6.1	
	CBH48Q-T	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	6 000	2.796	0.931	1.700	-3.3	Tenfold Δt
	CBH48Q-T-1	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	3.000	0.948	1.708	-3.1	2 nd order time integration
	CBH48Q-T-2	0.0	33.08	Quarter	24×48×24	3.785	7 927	2.988	0.941	1.708	-3.4	Fivefold Δt
	CPH48Q-T	-18.0	33.08	Quarter	24×48×24	7.500	4 000	("Annular flow")			-3.1	Tenfold Δt
FLUENT	FBH64Q-G	-0.7	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	3.013	1.038	1.709	-8.3	Geo-reconstruct
	FBH64Q-D	1.4	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.943	1.073	1.727	-8.0	Donor-acceptor
	FBH64Q-E	0.8	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.969	1.060	1.689	-7.7	Euler-explicit
	FBH64Q-I	-1.0	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	2.974	1.057	1.689	-7.7	Implicit
	FPH64Q-G	-21.5	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	4 500	9.584	3.322	1.634	-8.5	Geo-reconstruct
	FPH64Q-D	-17.9	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	3 000	9.228	3.108	1.684	-7.7	Donor-acceptor
	FPH64Q-E	-	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	2 050	(Execution stop by code)			-	Euler-explicit
	FPH64Q-I	-	33.06	Quarter	32×160×32	7.570	300	(No converging solution)			-	Implicit

[#]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.

ÖZGEÇMİŞ

1980 yılında Sakarya’da doğumdu. 1999-2003 yılları arasında burslu olarak (Türkiye Eğitim Vakfı) Sakarya Üniversitesi Makine Mühendisliği bölümünde okumuş ve “İçten Yanmalı Pistonun Sonlu Elemanlar Yöntemiyle Analizi (S.E.M)” başlıklı bitirme teziyle lisans eğitimini tamamlamıştır. 2003 yılında Yüksek Lisans eğitimine Sakarya Üniversitesinde başlamış, 2005-2006 eğitim yılında Yüksek Lisans tezini hazırlamak üzere ERASMUS (AB öğrenci değişim desteği ve Bilim Adamı destekleme desteği) programıyla Forshungszentrum Karlsruhe Araştırma Merkezinde misafir araştırmacı ve Karlsruhe Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümünde misafir öğrenci olarak bir yıl bulunmuştur.