



Multiphase Flow in a Confined Geometry with Dissipative Particle Dynamics
D.C. Visser

Samenvatting

Het onderzoek beschreven in dit proefschrift is gericht op het modelleren van meefasenstroming met behulp van Dissipative Particle Dynamics (DPD). DPD is een op deeltjes gebaseerde mesoscopische simulatietechniek die voldoet aan de Navier-Stokes vergelijkingen. DPD is bijzonder nuttig om de complexe dynamiek van het grensvlak tijdens een mengproces te modelleren. Een van de voordelen van de DPD techniek hierbij is de natuurlijke manier waarop fasegedrag voortvloeit uit de afstotende interactie tussen de deeltjes van ongelijke vloeistoffen. Het is ook relatief gemakkelijk om complexe moleculen in de DPD techniek te creëren, wat het mogelijk maakt om het gedrag van bijvoorbeeld oppervlakreactieve stoffen bij het grensvlak te bestuderen en hun invloed op het mengproces. Alvorens DPD daadwerkelijk gebruikt kon worden voor het modelleren van meefasenstroming, was echter verdere ontwikkeling en validatie van de techniek nodig. In het eerste deel van het proefschrift wordt hiertoe een nieuwe methode beschreven en getest om wanden correct te modelleren in DPD. Daarnaast wordt er een methode geïntroduceerd en gevalideerd die het mogelijk maakt verschillende viscositeiten in één systeem te modelleren. In het tweede deel van het proefschrift wordt de DPD techniek vervolgens toegepast voor het modelleren van de stroming in een 'lid-driven cavity' en het bestuderen van de menging van twee vloeistoffen met en zonder aanwezigheid van oppervlakreactieve stoffen.

Om de stroming in een eindig systeem te kunnen modelleren, is het nodig om wanden te definiëren. Een dergelijke wand moet ondoordringbaar zijn voor de vloeistofdeeltjes, moet de wandsnelheid op juiste wijze opleggen en mag de eigenschappen van het aangrenzende medium niet veranderen. De wanden die zijn gebruikt in eerdere DPD studies waren niet of slechts in beperkte mate in staat om aan alle drie deze voorwaarden te voldoen. Daarom is een nieuwe methode ontwikkeld voor het implementeren van vaste wanden in DPD. De methode, beschreven in hoofdstuk 2, maakt gebruik van parallelle tweeling systemen om de wand op te zetten door middel van een 'back-to-back' plaatsing.

Deze nieuwe benadering genereert automatisch een continue deeltjes- en snelheidsverdeling

over de wand evenals een juiste interactie tussen de deeltjes aan

vi Samenvatting

weerszijden van de wand, vergelijkbaar met periodieke grenzen. Een duidelijk voordeel van deze aanpak is dat er geen extra wanddeeltjes nodig zijn om de muur te bouwen. Dit maakt deze methode zeer efficiënt. Daarnaast is een verbeterd reflectie mechanisme gedefinieerd om de wand ondoordringbaar te maken. Deze 'bounce-forward' reflectie plaatst deeltjes die de muur invliegen op een meer natuurlijke manier terug in het systeem dan de veelgebruikte 'bounce-back' reflectie. De back-to-back plaatsing van de parallelle systemen in combinatie met de bounce-forward reflectie vormt een afdoende methode om wanden in DPD te creëren zonder de eigenschappen van het aangrenzende medium aan te tasten. De introductie van periodieke randvoorwaarden voor gekromde grenzen maakt de nieuwe wandmethode tevens toepasbaar voor nietvlakke wanden.

In een meefasensysteem zullen vloeistoffen verschillen in viscositeit. De viscositeit van een vloeistof, en van vloeistoffen onderling, heeft een sterke invloed op het dynamisch gedrag en de menging van vloeistoffen. Het kunnen omgaan met viscositeitsverschillen is daarom van essentieel belang voor het realistisch modelleren van meefasenstroming. Het was bekend dat de viscositeit van een DPD vloeistof kan worden geregeld met de wrijvingsfactor, een modelparameter die de kracht van de wrijving tussen deeltjes karakteriseert. In een meefasensysteem moet voor elke vloeistof een wrijvingsfactor worden gedefinieerd

die resulteert in de viscositeit van die vloeistof. De moeilijkheid is nu om de wrijvingsfactor tussen deeltjes van ongelijke vloeistoffen te definiëren. In hoofdstuk 3 tonen we aan dat deze wrijvingsfactor tussen ongelijke deeltjes een significant effect heeft op het stromingsgedrag. Een fysische eigenschap waaraan deze wrijvingsfactor kan worden gerelateerd ter specificatie ontbreekt echter. Drie methoden worden beschreven in hoofdstuk 3 waarmee de wrijvingsfactor tussen ongelijke deeltjes berekend kan worden. Eén van deze methoden maakt alleen gebruik van de wrijvingsfactor van de afzonderlijke vloeistoffen en is van meest praktisch nut. De methoden zijn gevalideerd voor Poiseuille stroming van twee onmengbare vloeistoffen. De verkregen resultaten zijn consistent met theorie en tonen aan dat de geïntroduceerde methoden het mogelijk maken vloeistoffen van verschillende viscositeit te modelleren in één DPD systeem. Om de mogelijkheden van de DPD techniek met de nieuwe wandmethode te verkennen is de stroming van een onsamendrukbare, Newtonse vloeistof in een lid-driven cavity beschouwd voor verschillende Reynolds getallen in hoofdstuk 4. Een lid-driven cavity bestaat uit een rechthoekige box met een bewegende deksel. Zodra het deksel in beweging wordt gezet, komt het medium in de

vii
cavity ook in beweging. De met DPD berekende snelheidsprofielen, stroomlijnen en posities van de primaire vortex zijn vergeleken met een semi-analytische oplossing en met resultaten van andere computertechnieken. De overeenkomst is zeer goed en we kunnen concluderen dat de DPD techniek met de nieuwe wandmethode toepasbaar is voor het oplossen van stromingsproblemen in een eindig, door wanden omsloten systeem.

De ware kracht van de DPD techniek ligt in het modelleren van de stroming van complexe vloeistoffen en meerfasensystemen. In hoofdstuk 5 is DPD daarom toegepast om het effect van oppervlaktespanning op gedwongen menging te bestuderen. Hiertoe is de menging van twee op elkaar geplaatste vloeistoffen in een lid-driven cavity beschouwd. De vloeistoffen zijn aanvankelijk in rust en gescheiden door een horizontaal grensvlak. Zodra de stroming in de lid-driven cavity in gang wordt gezet, zullen de vloeistoffen gaan mengen en zal het grensvlak gaan vervormen. Allereerst worden de DPD berekeningen gevalideerd bij een laag Reynolds getal voor twee vloeistoffen zonder oppervlaktespanning. De vervorming van het grensvlak voorspelt met DPD komt goed overeen met de resultaten afgeleid van een semi-analytische oplossing, experimentele resultaten en CFD berekeningen. Vervolgens wordt de DPD techniek toegepast om de menging van twee vloeistoffen in een lid-driven cavity met oppervlaktespanning te bestuderen voor verschillende Reynolds getallen. Een systeem met oppervlaktespanning streeft naar een minimaal oppervlak tussen de fasen. Hierdoor is de menging van de twee vloeistoffen met oppervlaktespanning veel trager. Zodra de oppervlaktespanning de viskeuze krachten begint te overheersen, mengen de vloeistoffen niet verder en bereikt de grenslaag een constante vorm.

Het vermogen van oppervlakteaactieve stoffen, ook wel surfactants genoemd, om de oppervlaktespanning te verlagen, is van essentieel belang in het mengproces van onmengbare fasen. Begrijpen hoe surfactants zich gedragen op een bewegend en vervormend grensvlak, en hoe dit de menging beïnvloed, kan helpen de selectie en ontwikkeling van de juiste surfactant voor een gegeven toepassing te verbeteren. In hoofdstuk 6 hebben we de DPD techniek toegepast om het gedrag van surfactants te onderzoeken tijdens het mengen van twee onmengbare vloeistoffen in een lid-driven cavity. De DPD simulaties laten zien dat de surfactant deeltjes zich gelijkmatig verspreiden over een grensvlak tussen twee vloeistoffen in rust. De gedwongen stroming in een lid-driven cavity voert de surfactant deeltjes echter mee langs het grensvlak in stroomafwaartse richting. Dit leidt tot een ongelijkmatige verdeling van de surfactant deeltjes wat de

viii Samenvatting

eigenschappen van het grensvlak beïnvloed. In gebieden met een hoge surfactant lading is de oppervlaktespanning lager en is het grensvlak gemakkelijker te vervormen dan in gebieden met een lage surfactant lading. De DPD simulaties laten ook zien dat de surfactant deeltjes de stroming over het grensvlak onderdrukken. Deze resultaten tonen opnieuw de kracht van de DPD techniek in het modelleren van de complexe verschijnselen op de grensvlakken in een meefasenstroming.