

Numerische Untersuchung von Taylor- Blasen in einem quadratischen Minikanal: Hydrodynamik und Stofftransport

Dr.-Ing. Martin Wörner

Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Reaktorsicherheit
(zukünftig: Institut für Kern- und Energietechnik)

*Seminarvortrag am Institut für Technische Chemie und Polymerchemie
Universität Karlsruhe, 25. Januar 2008*

Wissenschaftliche Institute: 22

Forschungsbereiche: 5

- Energie
- Gesundheit
- Struktur der Materie
- Erde und Umwelt

– Schlüsseltechnologien

Programme: 10

- Nukleare Sicherheitsforschung
- Nano- und Mikrosysteme
- Rationelle Energieumwandlung
- Nachhaltigkeit und Technik
- ...

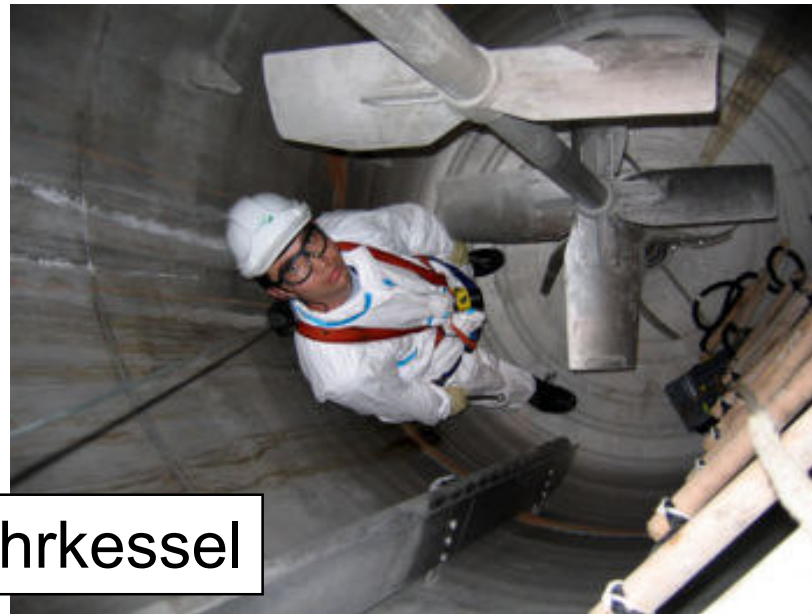
Numerische Simulation von Taylor-Blasen im Minikanal

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerisches Verfahren**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
- **Ergebnisse**
 - Beschreibung des physikalischen Problems
 - Hydrodynamik und Validierung
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Verweilzeitverteilung der Flüssigphase
- **Zusammenfassung und Ausblick**

- Konventionelle Mehrphasen-Reaktoren



Rührkessel



Blasensäule

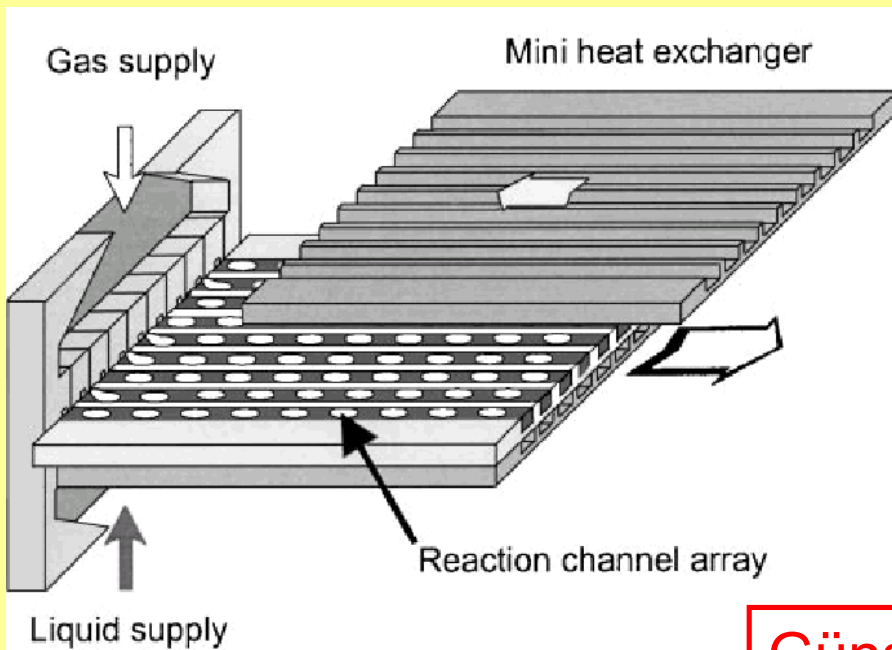
- Nachteile der konventionellen Reaktoren
 - Häufig chargenweiser Betrieb
 - Keine Abstimmung auf die chemische Reaktion im Detail möglich
 - Ungleichmäßige Vermischung der Reaktionspartner und ungleichmäßige Temperaturverteilung
 - Probleme beim Scale-up vom Labor- und Pilotmaßstab auf die Produktionsgröße
- Folgen
 - Eingeschränkte Produktqualität
 - Bildung unerwünschter Nebenprodukte
 - Übermäßiger Energieverbrauch



- **Prozessintensivierung durch Miniaturisierung**

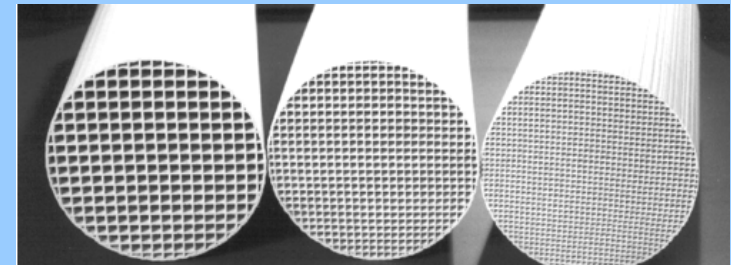
Mikro-Blasensäule

(Institut für Mikrotechnik Mainz, IMM)

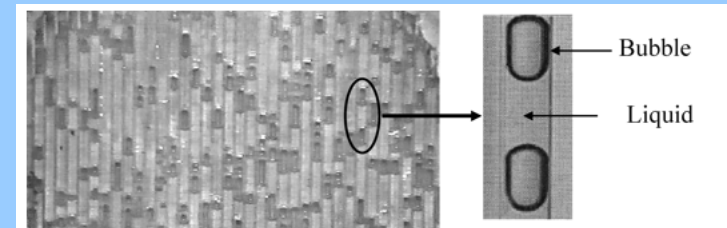


Kanäle: $300\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$
 $50\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$

Monolith-Reaktor

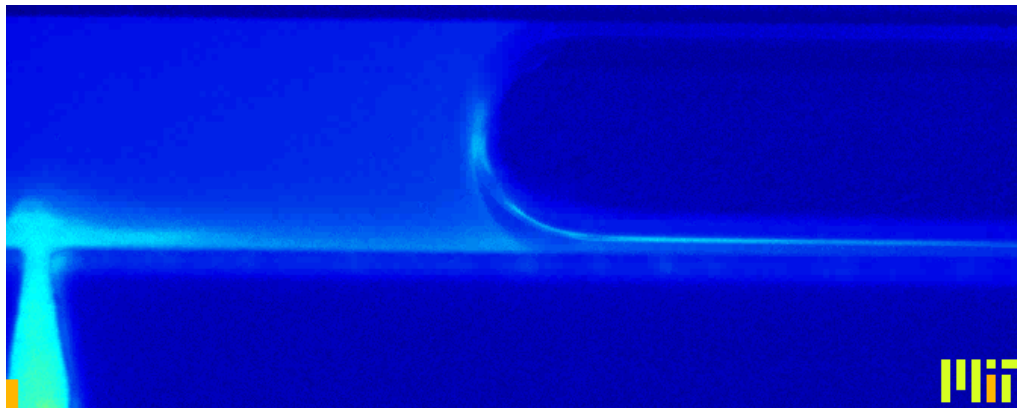


Quadr. Kanäle 1–5 mm



Günstigste Strömungsform in beiden Apparaten ist die Taylor-Strömung oder "bubble train flow (BTF)"

- Vorteile der Taylor-Strömung in kleinen Kanälen
 - Großes Verhältnis Phasengrenzfläche zu Volumen
⇒ effiziente Stoffübertragung
 - Segmentierung der Flüssigkeit
⇒ reduzierte axiale Dispersion
 - Gute Durchmischung der Flüssigkeit
 - Wandnormaler konvektiver Transport bei laminarer Strömung



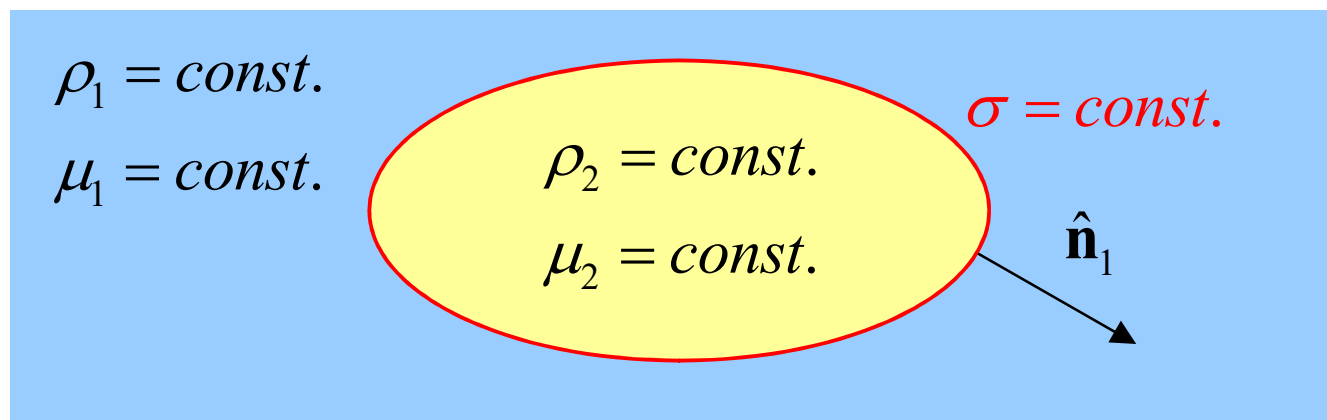
Kanalquerschnitt:
 $400 \mu\text{m} \times 280 \mu\text{m}$

*Film von Günther et al.
Langmuir 21 (2005) 1547-1555*

- Vorteile der miniaturisierten Apparate
 - Kontinuierlicher Betrieb
 - „Numbering-up“ statt „scale-up“
 - Abstimmung auf optimale hydrodynamische und thermische Bedingungen der konkreten Reaktion erscheint möglich ⇒
 - Verbesserte Ausbeute
 - Weniger Nebenprodukte
 - Gleichmäßigere Produktqualität
 - Notwendig ist Verständnis der lokalen, instantanen Phänomene
- Ziel unserer Arbeiten:
Einblick in lokale Strömungsphänomene durch detaillierte numerische Simulation der Strömung im Einzel-Kanal

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerisches Verfahren**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
- **Ergebnisse**
 - Abbildung des physikalischen Problems
 - Hydrodynamik und Validierung
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Verweilzeitverteilung
- **Zusammenfassung und Ausblick**

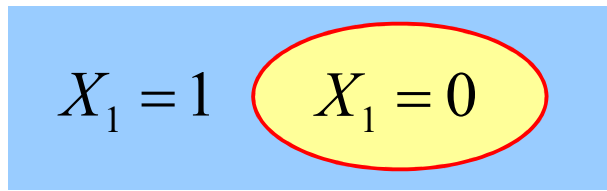
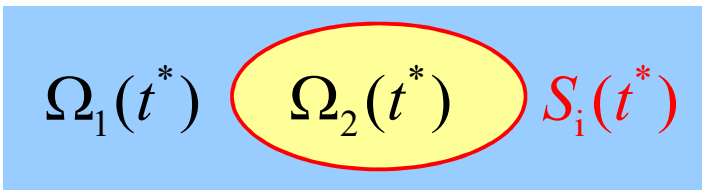
- Beschreibung im Rahmen der Kontinuumsmechanik
- Betrachtung von zwei Fluiden mit folgenden Eigenschaften
 - Nicht mischbar, kein Phasenübergang
 - Inkompressibel
 - Newton'sches Stoffgesetz mit konstanter Viskosität
 - Phasengrenzfläche ist unendlich dünn
 - Oberflächenspannung ist konstant



$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho_1^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot \rho_1^* \mathbf{v}_1^* &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_1^* \mathbf{v}_1^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho_1^* \mathbf{v}_1^* \mathbf{v}_1^*) &= -\nabla^* p_1^* + \nabla^* \cdot \mu_1^* \left(\nabla^* \mathbf{v}_1^* + (\nabla^* \mathbf{v}_1^*)^T \right) + \rho_1^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \right\} \mathbf{x}^* \in \Omega_1(t^*)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho_2^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot \rho_2^* \mathbf{v}_2^* &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_2^* \mathbf{v}_2^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho_2^* \mathbf{v}_2^* \mathbf{v}_2^*) &= -\nabla^* p_2^* + \nabla^* \cdot \mu_2^* \left(\nabla^* \mathbf{v}_2^* + (\nabla^* \mathbf{v}_2^*)^T \right) + \rho_2^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \right\} \mathbf{x}^* \in \Omega_2(t^*)$$

$$\mathbf{v}_1^* = \mathbf{v}_2^* = \mathbf{v}_i^*, \quad (p_1^* - p_2^* + H^* \sigma^*) \hat{\mathbf{n}}_1 = (\mathbb{T}_1^* - \mathbb{T}_2^*) \cdot \hat{\mathbf{n}}_1, \quad \mathbf{x}^* \in S_i(t^*) \quad \text{Grenzfläche}$$

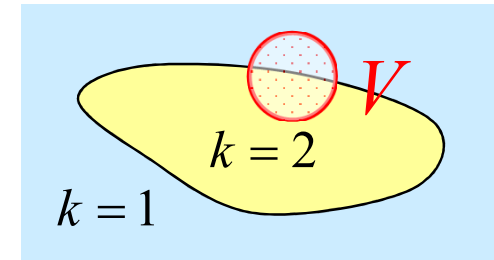


X_1 = Indikatorfunktion von Phase 1 (Flüssigkeit)
 $X_2 = 1 - X_1$

(dimensionsbehaftete Größen sind durch * gekennzeichnet)

Mittelung über Volumen V :

$$\alpha_k \equiv \frac{1}{V} \iiint_V X_k dV = \frac{V_k}{V}, \quad \overline{\mathbf{v}_k^*} = \frac{1}{V_k} \iiint_{V_k} X_k \mathbf{v}_k^* dV, \quad k=1,2$$



Volumengemittelte Grundgleichungen in Ein-Feld-Formulierung

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot \alpha_1 \mathbf{v}_m^* = \nabla^* \cdot \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho_2^*}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^*$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}_m^* = -\nabla^* \cdot \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\rho_1^* - \rho_2^*)}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^*$$

$$\frac{\partial \rho_m^* \mathbf{v}_m^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\rho_m^* \mathbf{v}_m^* \mathbf{v}_m^* + \mathbb{D}_i^*) = -\nabla^* p_m^* + \nabla^* \cdot \left[\mu_m^* \left(\nabla^* \mathbf{v}_m^* + (\nabla^* \mathbf{v}_m^*)^T \right) + \mathbb{T}_i^* \right] + \rho_m^* \mathbf{g}^* + a_i^* \sigma^* \kappa^* \hat{\mathbf{n}}_i^*$$

$$\rho_m^* \equiv \alpha_1 \rho_1^* + \alpha_2 \rho_2^*, \quad \mu_m^* \equiv \alpha_1 \mu_1^* + \alpha_2 \mu_2^*, \quad \mathbf{v}_m^* \equiv \frac{\alpha_1 \rho_1^* \overline{\mathbf{v}_1^*} + \alpha_2 \rho_2^* \overline{\mathbf{v}_2^*}}{\alpha_1 \rho_1^* + \alpha_2 \rho_2^*}, \quad \mathbf{v}_r^* \equiv \frac{\overline{\mathbf{v}_2^*}}{\rho_2^*} - \frac{\overline{\mathbf{v}_1^*}}{\rho_1^*}$$

$$\mathbb{D}_i^* \equiv \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho_1^* \rho_1^*}{\rho_r^*} \mathbf{v}_r^* \mathbf{v}_r^* \quad \mathbb{T}_i^* \equiv \alpha_2 \mu_2^* \left(\nabla^* \frac{\alpha_1 \rho_1^*}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^* + \left(\nabla^* \frac{\alpha_1 \rho_1^*}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^* \right)^T \right) - \alpha_1 \mu_1^* \left(\nabla^* \frac{\alpha_2 \rho_2^*}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^* + \left(\nabla^* \frac{\alpha_2 \rho_2^*}{\rho_m^*} \mathbf{v}_r^* \right)^T \right)$$

Dimensionslose Grundgleichungen in Ein-Feld-Formulierung

$$f \equiv \alpha_1, \quad \mathbf{x} \equiv \frac{\mathbf{x}^*}{L_{\text{ref}}^*}, \quad \mathbf{v}_m \equiv \frac{\mathbf{v}_m^*}{U_{\text{ref}}^*}, \quad t \equiv \frac{t^* U_{\text{ref}}^*}{L_{\text{ref}}^*}, \quad \rho_m \equiv \frac{\rho_m^*}{\rho_1^*}, \quad \mu_m \equiv \frac{\mu_m^*}{\mu_1^*}, \quad P \equiv \frac{p^* + \mathbf{f}_{\text{pd}}^* \cdot \mathbf{x}^*}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f \mathbf{v}_m = 0 \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0 \quad \text{Annahme: } \mathbf{v}_r = 0$$

$$\frac{\partial \rho_m \mathbf{v}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m) = -\nabla P + \frac{\nabla \cdot \left[\mu_m \left(\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T \right) \right]}{Re_{\text{ref}}} + \left[f + (1-f) \frac{\rho_2^*}{\rho_1^*} \right] Fr_{\text{ref}} \hat{\mathbf{e}}_g + \frac{Eu_{\text{ref}}}{L_{\text{axial}}} \hat{\mathbf{e}}_{\text{axial}} + \frac{a_i \kappa \hat{\mathbf{n}}_i}{We_{\text{ref}}}$$

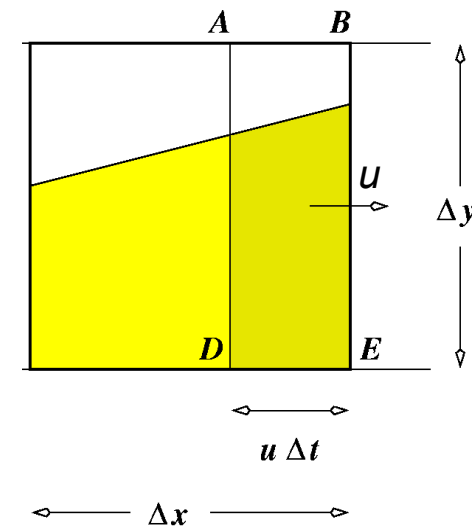
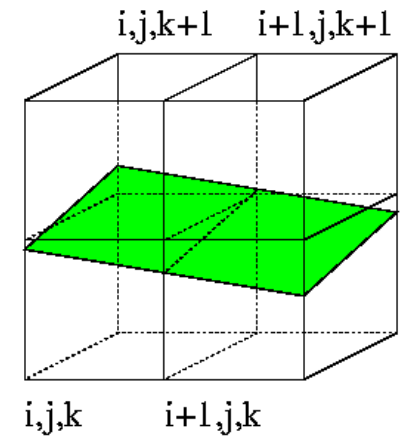
$$Re_{\text{ref}} \equiv \frac{\rho_1^* L_{\text{ref}}^* U_{\text{ref}}^*}{\mu_1^*}, \quad Fr_{\text{ref}} \equiv \frac{g^* L_{\text{ref}}^*}{U_{\text{ref}}^{*2}}, \quad Eu_{\text{ref}} \equiv \frac{\Delta p_{\text{axial}}^*}{\rho_1^* U_{\text{ref}}^{*2}}, \quad We_{\text{ref}} \equiv \frac{\rho_1^* L_{\text{ref}}^* U_{\text{ref}}^{*2}}{\sigma^*}$$

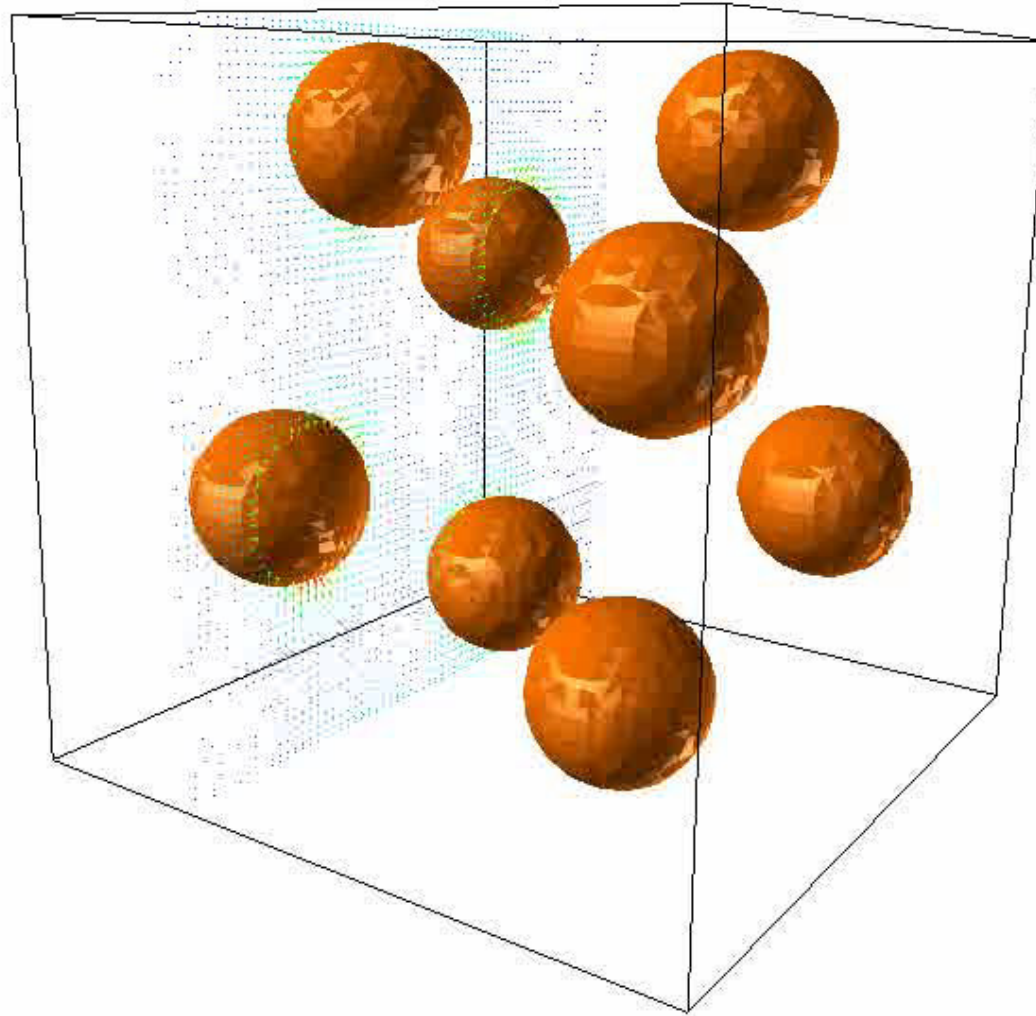
Keine anderen Grundgleichungen als für makroskopische Strömungen, aber bei Mikroströmungen andere Gewichtung der Terme!

- Eigenentwicklung von FZK/IRS (Doktorarbeit W. Sabisch)
- Diskretisierung im Raum
 - Finite-Volumen Formulierung
 - Strukturiertes, kartesisches, versetztes Gitter
 - Zentrale Differenzen-Approximationen 2. Ordnung
- Lösungsstrategie für die Navier-Stokes-Gleichung
 - Projektionsmethode
 - Lösung der Druck-Poisson-Gleichung mit CG-Verfahren
 - Explizites Runge-Kutta Zeitintegrationsverfahren 3. Ordnung
- Lösung der f -Gleichung mit Volume-of-Fluid Methode

- $f_{i,j,k}$ = Volumenfraktion von Phase 1 in einer Gitterzelle ($0 \leq f_{i,j,k} \leq 1$)
- In Zellen mit $0 < f_{i,j,k} < 1$ wird die Phasengrenzfläche lokal als Ebene angenähert
- Position und Orientierung der Ebene wird aus diskreter Verteilung von f in benachbarten Gitterzellen „rekonstruiert“
- „Geometrische“ Berechnung der konvektiven Flüsse von f
- Vorteil: sehr gute Massenerhaltung

0.493	0.493	0.177	0.0
1.0	1.0	0.925	0.177
1.0	1.0	1.0	0.493
1.0	1.0	1.0	0.493



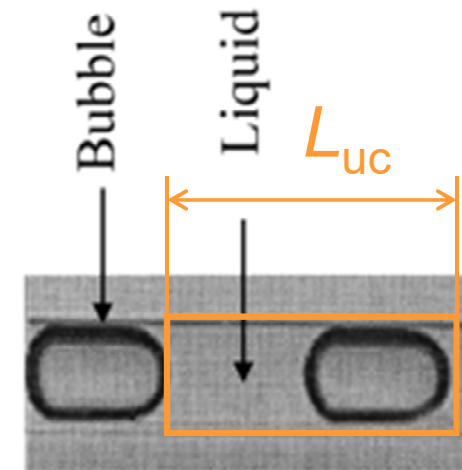


Doktorarbeit M. Ilic (2006)

- **Einleitung und Motivation**
- **Numerisches Verfahren**
 - Grundgleichungen
 - Rechenprogramm TURBIT-VOF
- **Ergebnisse**
 - Beschreibung des physikalischen Problems
 - Hydrodynamik und Validierung
 - Stofftransport mit und ohne chemische Reaktion
 - Verweilzeitverteilung
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Charakterisierung der idealisierten Taylor-Strömung

- Blasen sind lang gestreckt und füllen nahezu den ganzen Querschnitt aus (Taylor-Blasen)
- Die Blasen haben identische Form und bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit durch den Kanal
- Die idealisierte Strömung wird vollständig beschrieben durch eine **Einheitszelle der Länge L_{uc}** bestehend aus Blase und „Slug“ der Flüssigkeit



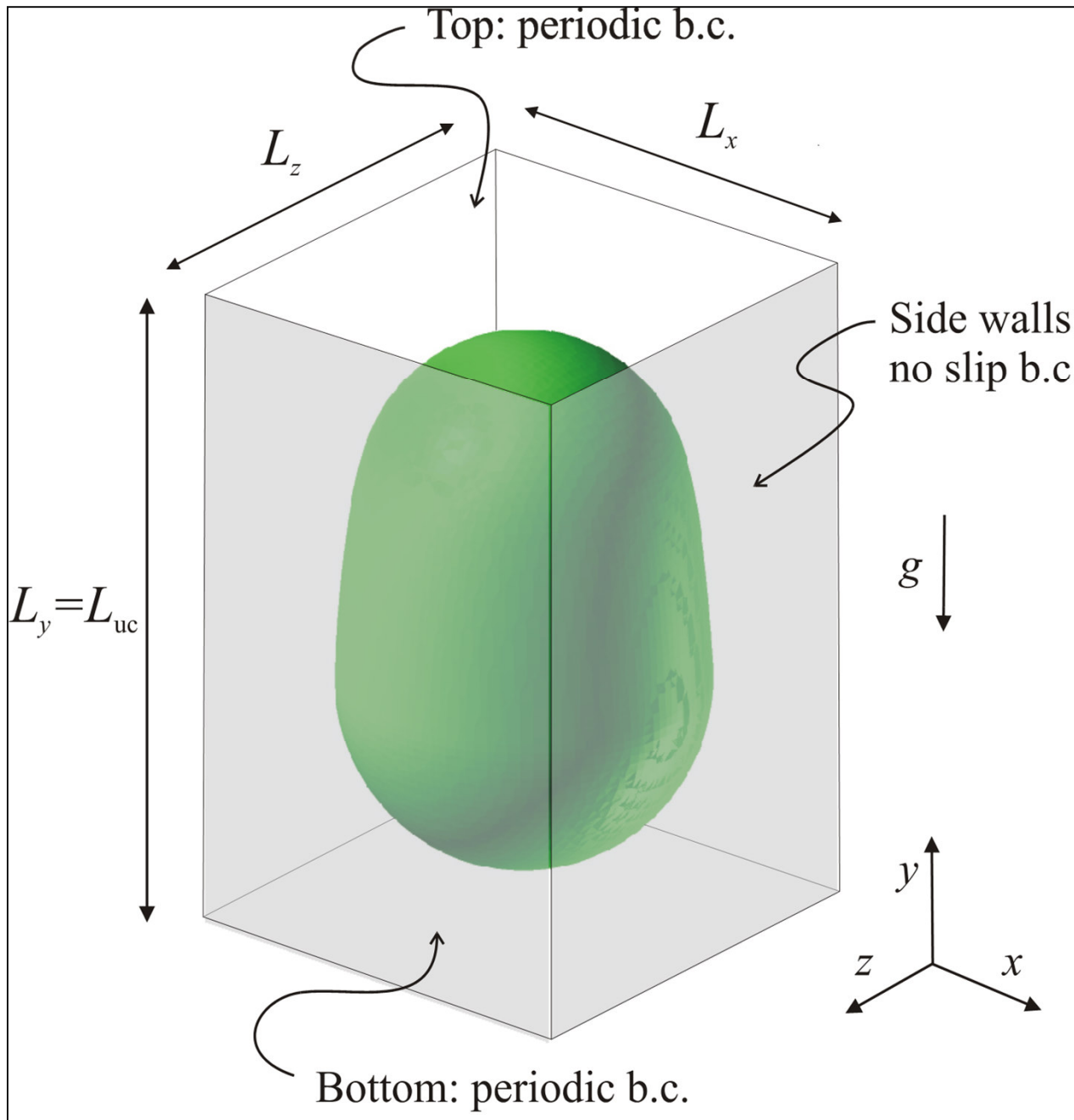
Experimente von Thulasidas et al.*

- Quadratischer vertikaler Kanal
 - Querschnittsfläche: $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ ($D_h = 2 \text{ mm}$)
- Luftblasen in Silikonöl
 - Silikonöl unterschiedlicher Viskosität
 - Weiter Bereich der Kapillar-Zahl $Ca_B \equiv \mu_L U_B / \sigma = We / Re$
- Aufprägung des Volumenstroms von Luft und Öl
- Länge der Einheitszelle (L_{UC}), Gasanteil in der Einheitszelle (ε) und Druckverlust stellen sich ein

* Thulasidas, Abraham, Cerro, *Chem. Eng. Sci.* 50 (1995) 183-199

Abbildung des Problems in TURBIT-VOF

- Betrachtung einer Einheitszelle (eine Blase, ein Slug)
- Einfluss der vor- und nachfolgenden Blasen wird durch periodische Randbedingungen abgebildet
 - Aufspaltung des Druckes in linear abfallenden und variierenden Anteil
- Die Strömung wird angetrieben vom Auftrieb und einem vorgegebenen axialen Druckgradienten
 - Volumenstrom von Gas und Flüssigkeit stellen sich ein
- Der Gasgehalt der Einheitszelle und deren Länge wird zu Beginn der Simulation vorgegeben
 - Untersuchung des Einflusses von L_{uc} / D_h



- $L_x = L_z = D_h = 2 \text{ mm}$
- Gasgehalt in der Einheitszelle in allen Simulationen $\varepsilon = 33\%$
- Alle Simulationen starten aus Ruhezustand
- $L_{ref} = 2 \text{ mm}$
- $U_{ref} = 2,64 \text{ cm/s}$
- $t_{ref} = L_{ref} / U_{ref} = 0,757 \text{ s}$

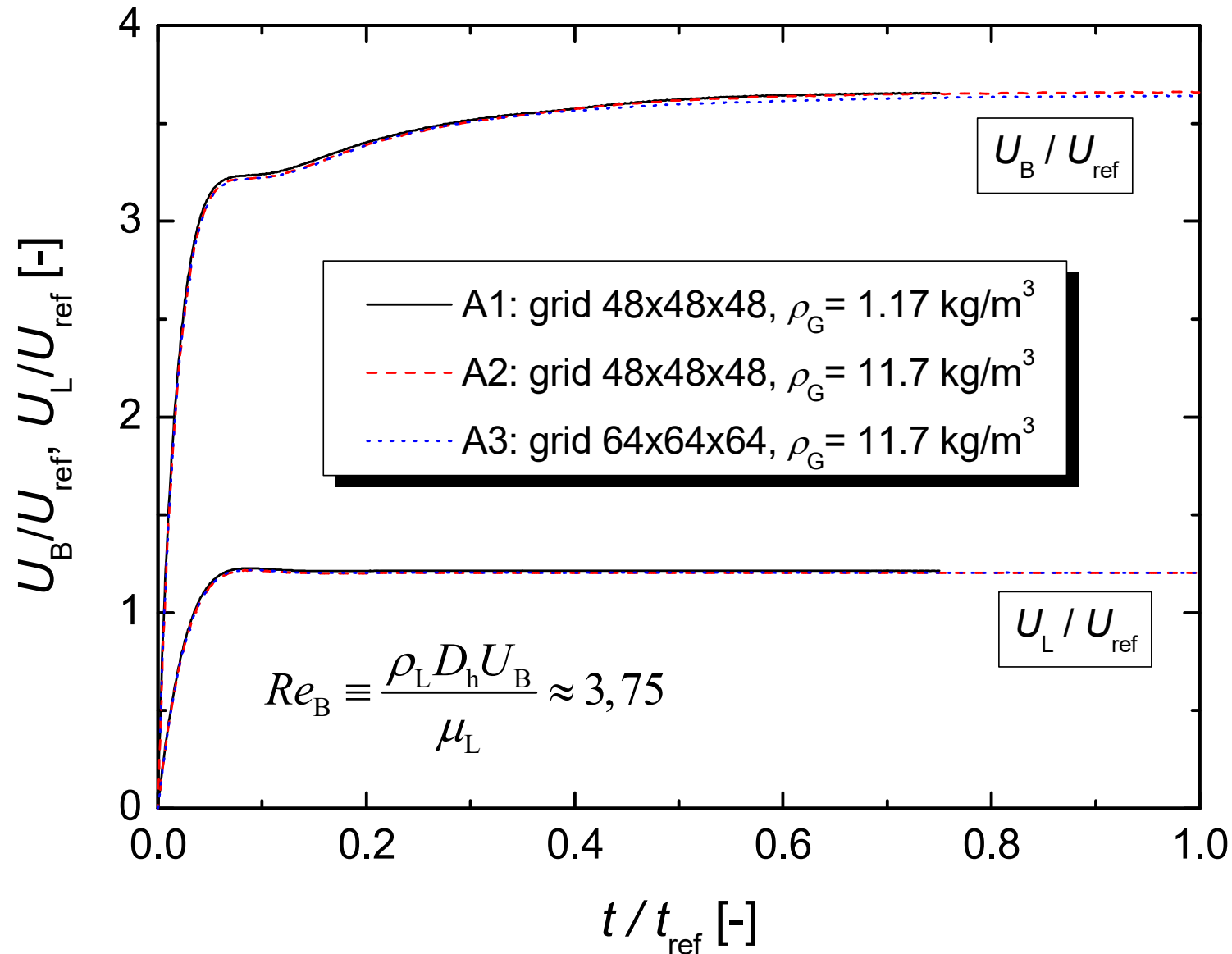
- Stoffwerte im Experiment von Thulasidas et al.

ρ_L	ρ_G	μ_L	μ_G	σ
957 kg/m ³	1,17 kg/m ³	0,048 Pa s	1,84×10 ⁻⁵ Pa s	0,022 N/m

- Simulationen für $L_{uc} / D_h = 1$

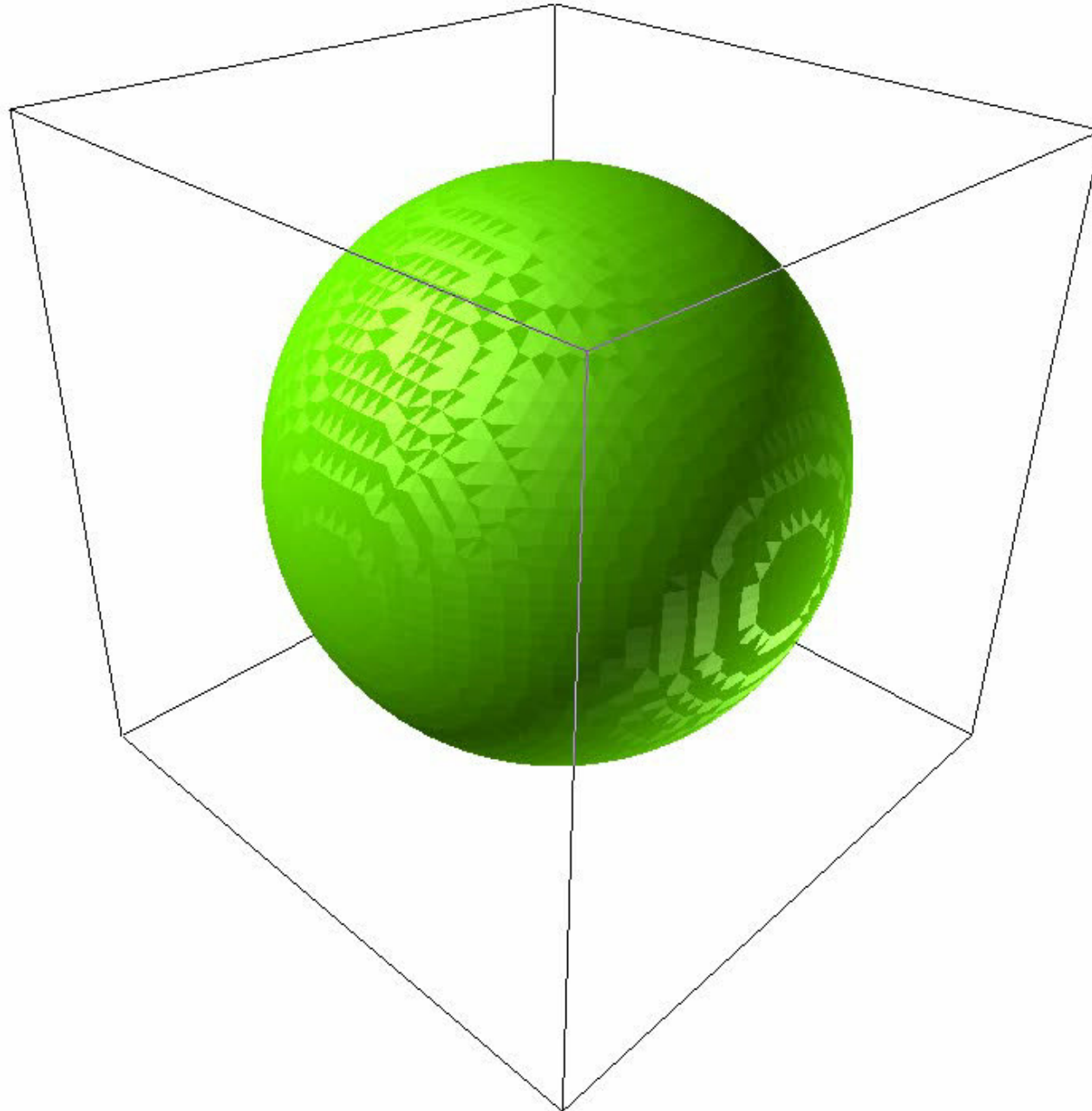
Fall	ρ_G [kg/m ³]	μ_G [m Pa s]	Gitter	$\Delta t / t_{ref}$ [-]
A1	1,17	0,0184	48 × 48 × 48	2,5 × 10 ⁻⁶
A2	11,7	0,184	48 × 48 × 48	2,5 × 10 ⁻⁵
A3	11,7	0,184	64 × 64 × 64	1,0 × 10 ⁻⁵

ρ_G und μ_G sind um Faktor 10 höher als bei Luft

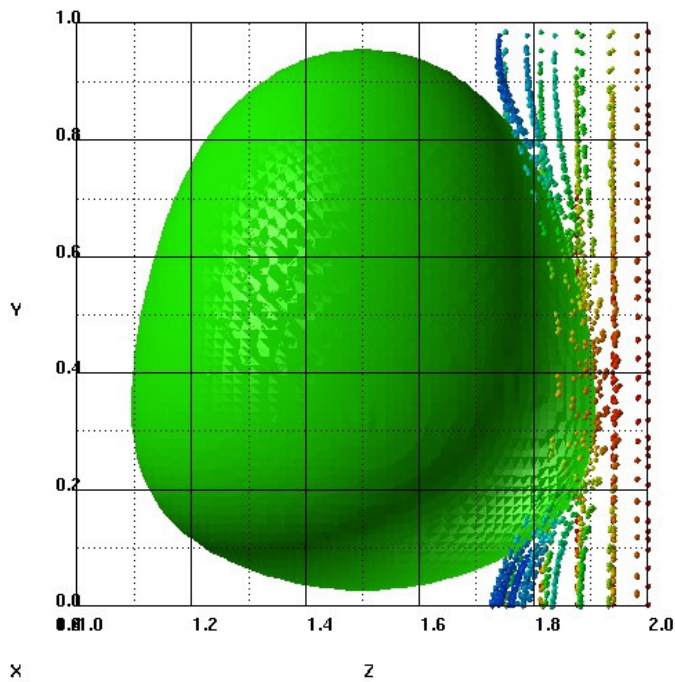


Variation von L_{uc} / D_h

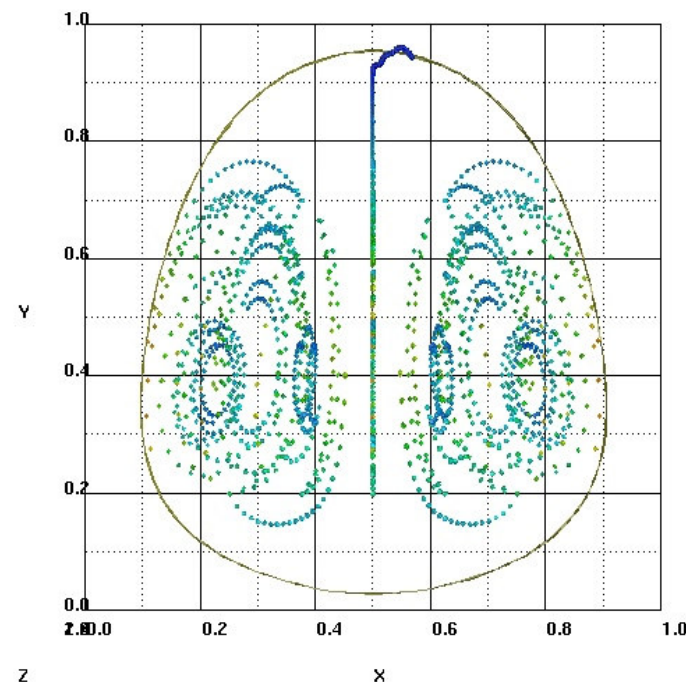
Fall	L_{uc} / D_h	Gebiet [-]	Gitter
A2	1	1 × 1 × 1	48 × 48 × 48
B	1,125	1 × 1,125 × 1	48 × 54 × 48
C	1,25	1 × 1,25 × 1	48 × 60 × 48
D	1,375	1 × 1,375 × 1	48 × 66 × 48
E	1,5	1 × 1,5 × 1	48 × 72 × 48
F	1,625	1 × 1,625 × 1	48 × 78 × 48
G	1,75	1 × 1,75 × 1	48 × 84 × 48
H	2	1 × 2 × 1	48 × 96 × 48



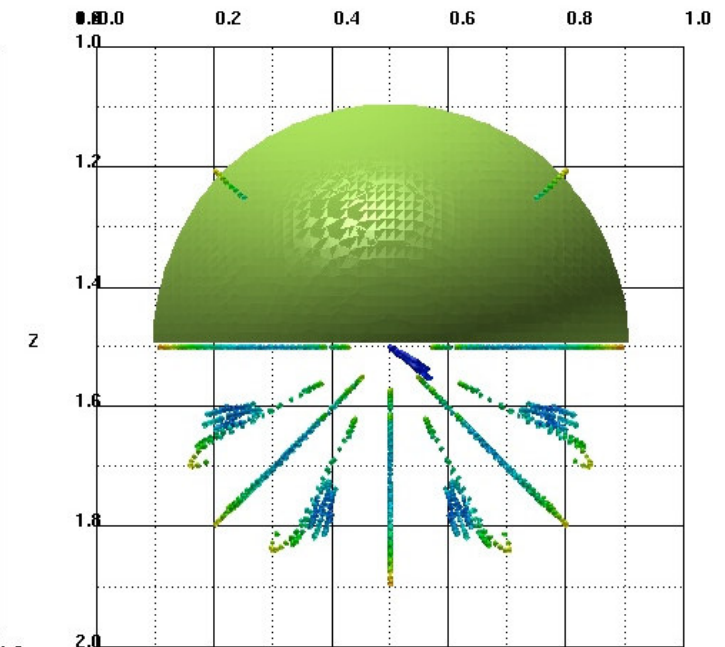
Fall A3



Seitenansicht



Seitenansicht



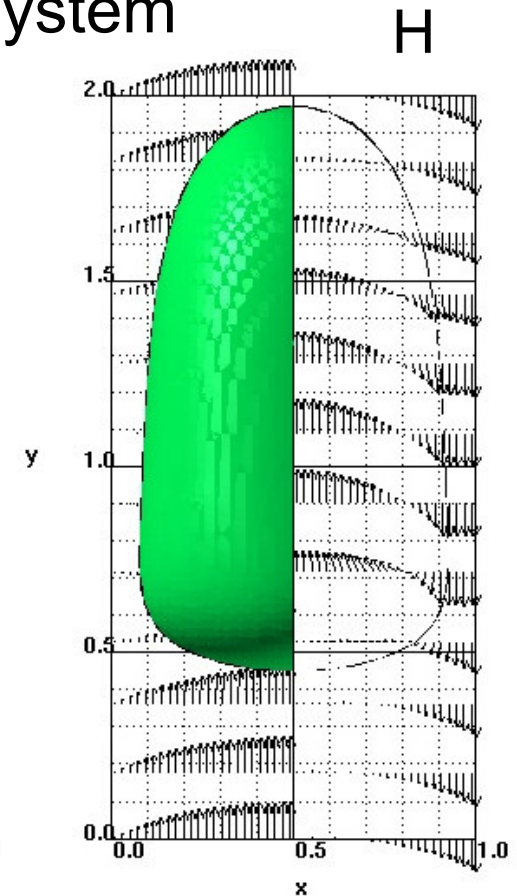
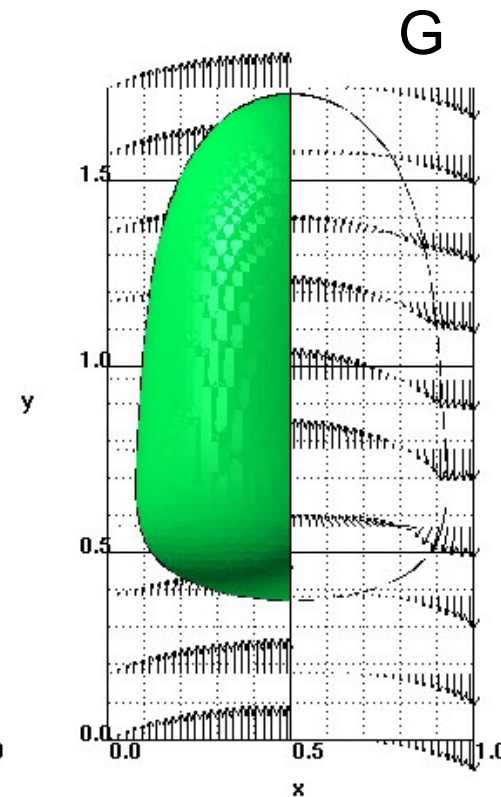
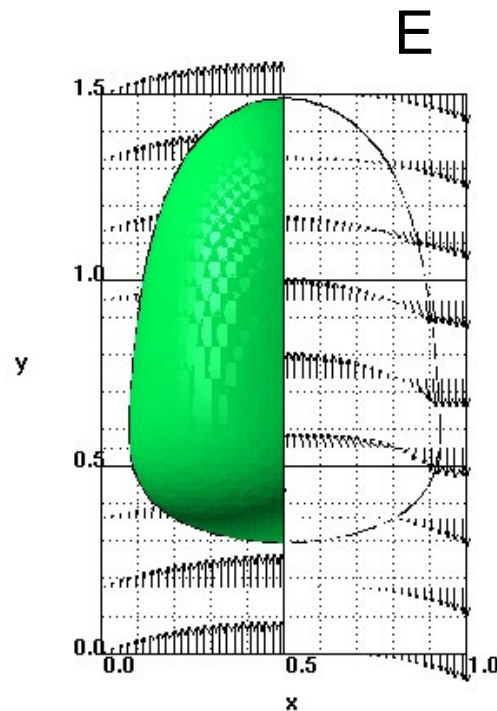
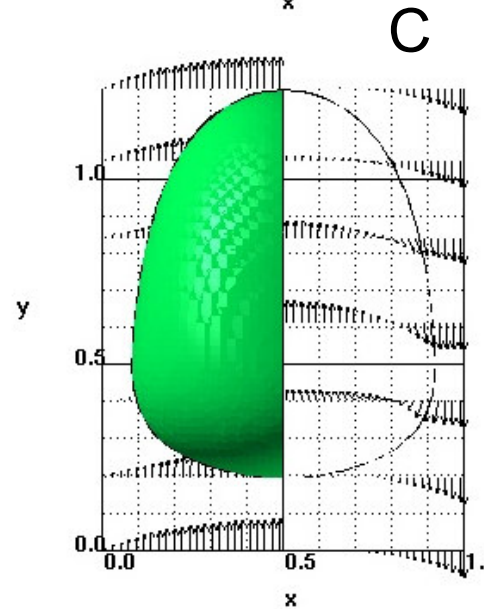
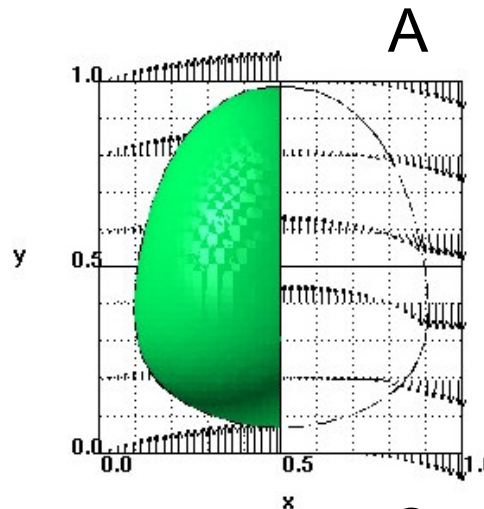
Draufsicht

- Blase ist rotationssymmetrisch
- Ein großer Wirbel innerhalb der Blase
- Geringe Strömung in Umfangsrichtung innerhalb der Blase

Geschwindigkeitsfeld in vertikaler Mittelebene*

Rechte Hälfte: mit Blase mitbewegtes Bezugssystem

Linke Hälfte: ortsfestes Bezugssystem



* in y-Richtung ist nur jeder 8. Vektor dargestellt

Vergleich mit dem Experiment*

Dimensionsloser Blasendurchmesser

Dimensionsloses U_B

Relativgeschw.

Fall	L_{uc}/D_h	Ca_B	D_B / D_h	U_B/J_{ges}	$(U_B - J_{ges})/J_{ges}$
A	1	0,204	0,81	1,80	0,445
C	1,25	0,207	0,84	1,75	0,430
E	1,5	0,215	0,85	1,75	0,430
G	1,75	0,238	0,85	1,78	0,438
H	2	0,253	0,85	1,8	0,445

Experimentelle Daten* als Funktion der Kapillar-Zahl $Ca_B \equiv \mu_L U_B / \sigma$

0,2 – 0,25

0,82 – 0,86

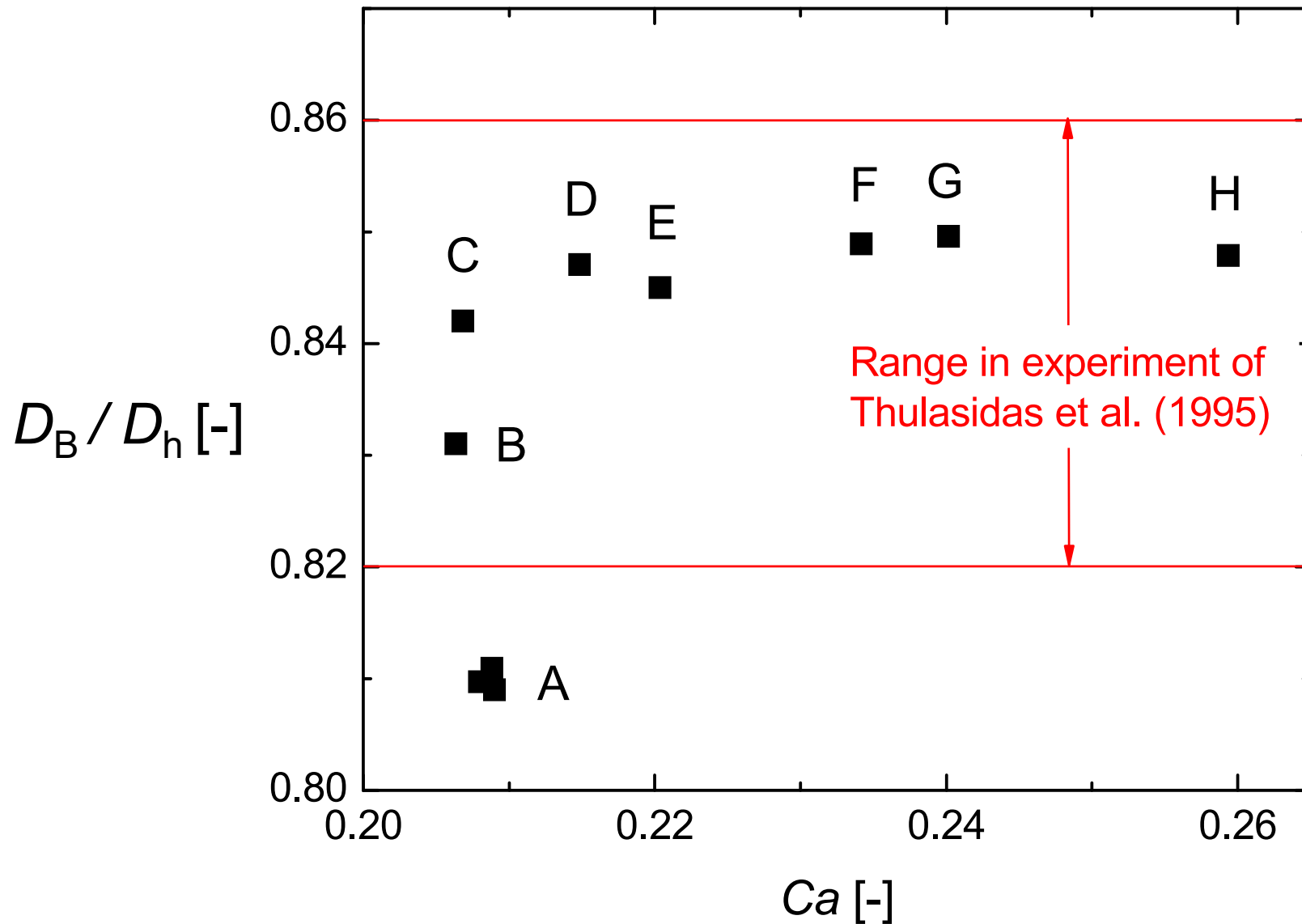
1,68 – 1,84

0,435–0,475

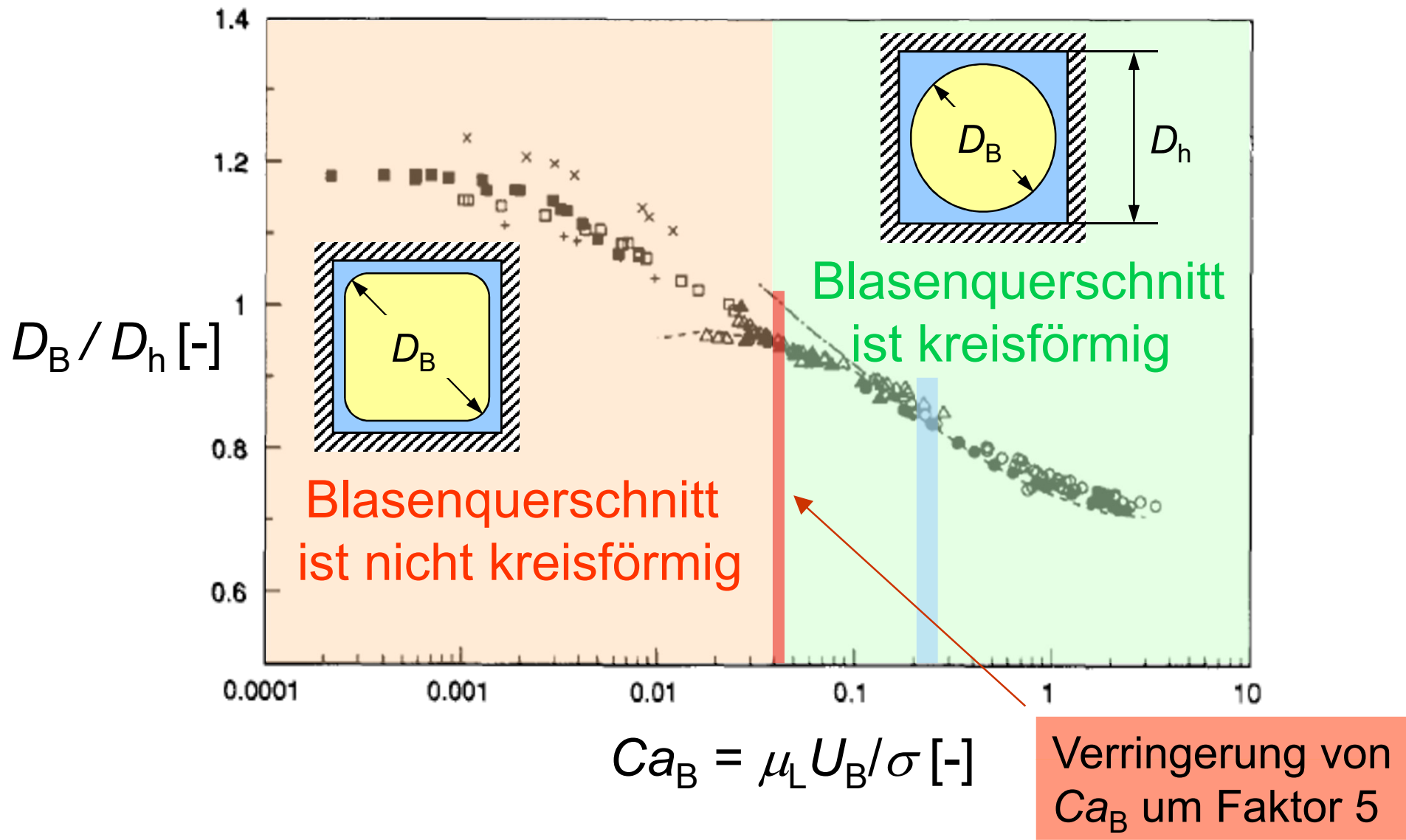


* Thulasidas, Abraham, Cerro, Chem. Eng. Sci. 50 (1995) 183-199

Dimensionsloser Blasendurchmesser



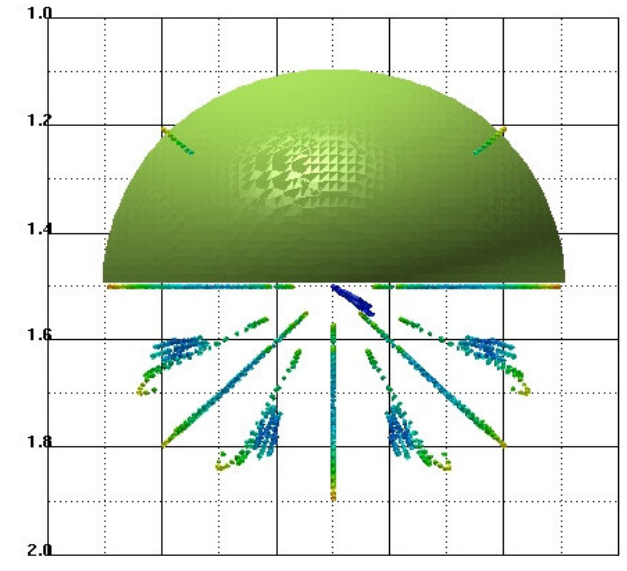
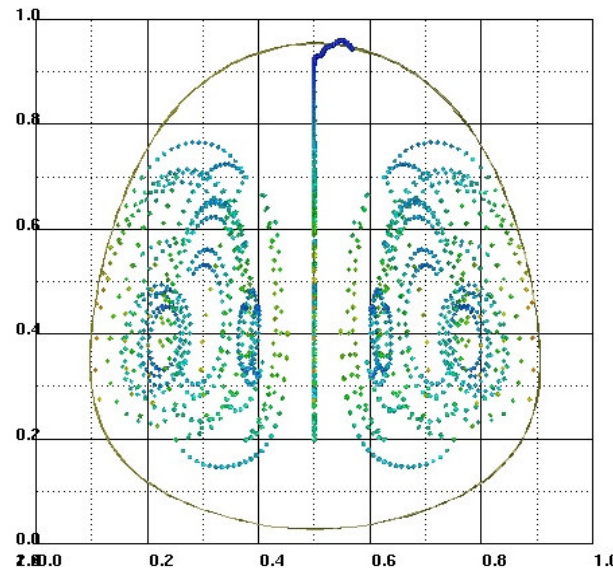
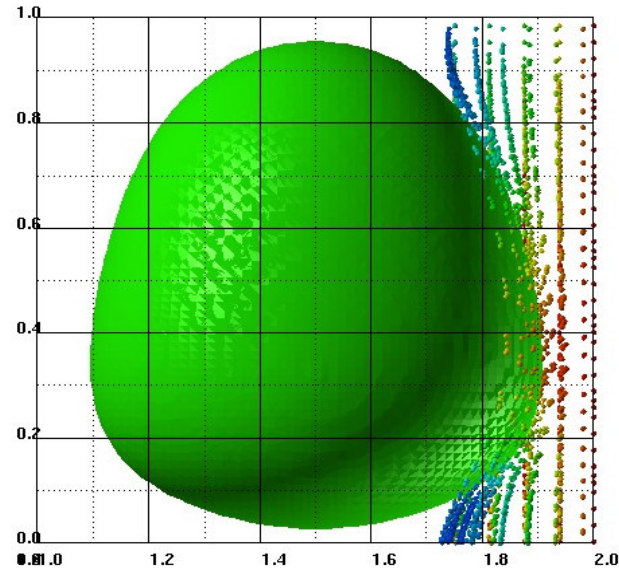
Einfluss der Kapillar-Zahl



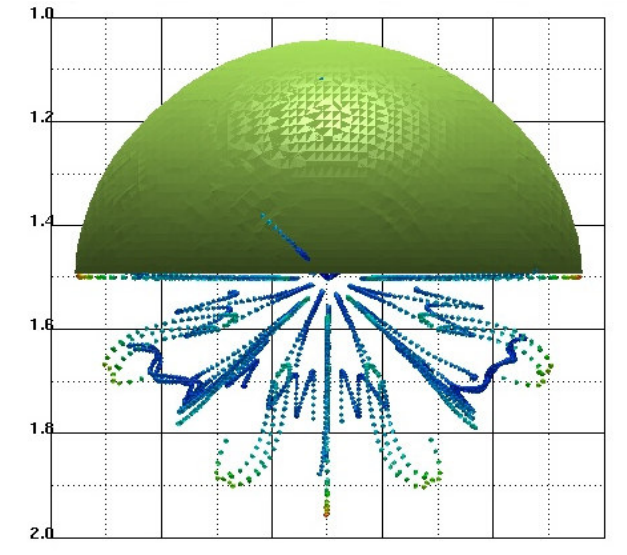
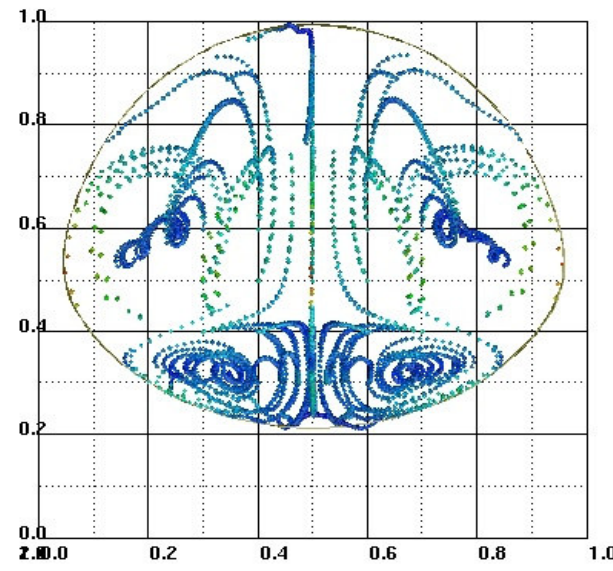
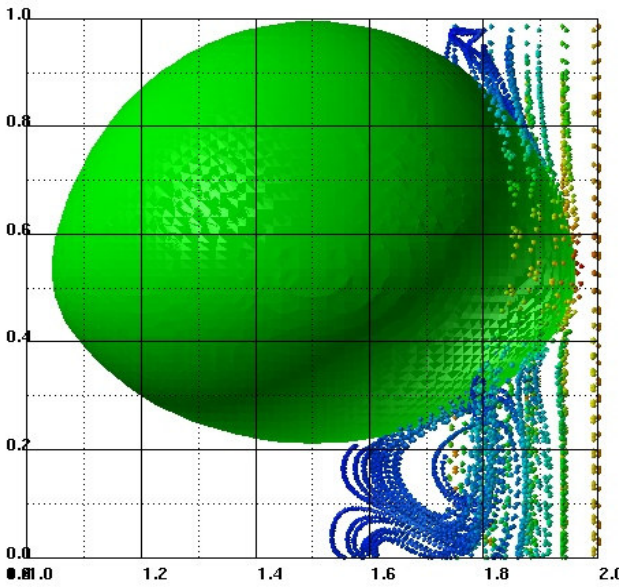
(Exp. Daten von Thulasidas, Abraham, Cerro, Chem. Eng. Sci. 50 (1995) 183-199)

Einfluss der Kapillar-Zahl*

$Ca_B = 0,205$



$Ca_B = 0,043$



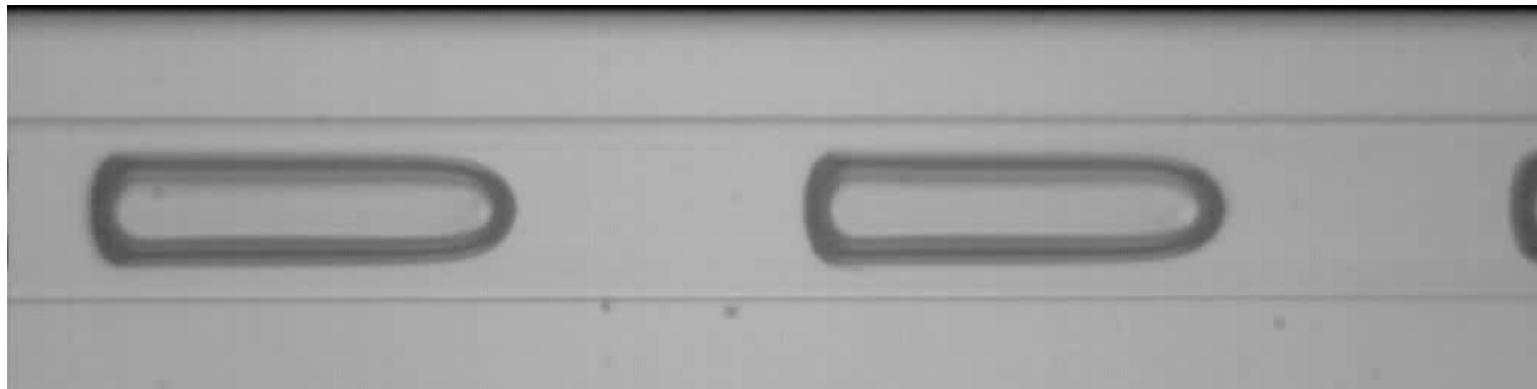
* Ghidersa, Wörner, Cacuci, Chem. Eng. J. 101 (2004) 285-294

- TURBIT-VOF ist beschränkt auf Einzelkanal mit rechteckigem Querschnitt und kartesisches Gitter
- Komplexere Untersuchungen für mehrere Kanäle, die über Ein- und Austrittsplenum gekoppelt sind, erfordern den Einsatz kommerzieller CFD-Programme
- Unterschiedliche VOF-Methoden in den Codes
 - Rekonstruktion der Phasengrenzfläche mit lokaler Approximation als beliebig orientierte Ebene (TURBIT-VOF, FLUENT)
 - Lösung der Volumenfraktionsgleichung mit Differenzenverfahren (CFX, STAR-CD, FLUENT als Option)
- Nur VOF-Methode mit Rekonstruktion liefert in allen Fällen physikalisch sinnvolle und konsistente Ergebnisse
 - gute Übereinstimmung der Ergebnisse von TURBIT-VOF und FLUENT

* Özkan, Wörner, Wenka, Soyhan, *Int. J. Num. Meth. Fluids* 55 (2007) 537-564

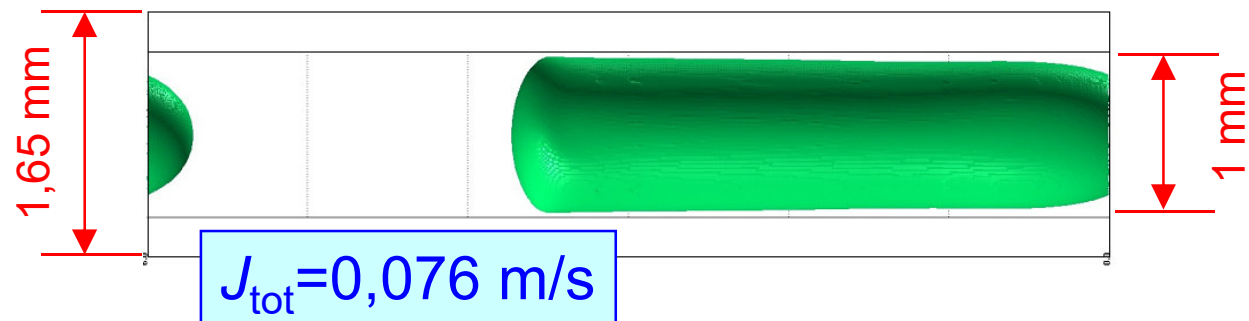
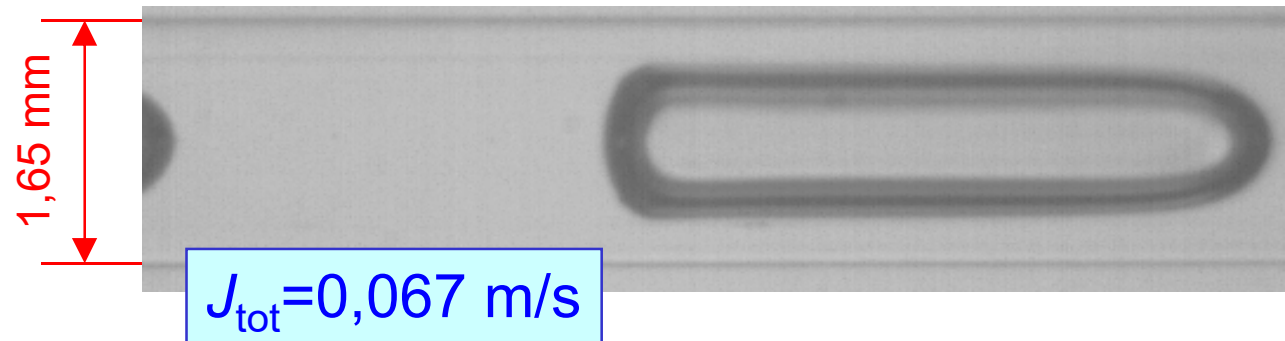
- Kooperation mit TU Dresden (Prof. R. Lange, Dr. T. Bauer)
- Experimente in Glaskapillare mit Querschnitt $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$
 - Beide Phasen strömen vertikal abwärts
 - Drei verschiedene Stoff-Paarungen
 - Squalan-Stickstoff, AMS-Stickstoff, Wasser-Stickstoff
 - Druckniveau 1- 40 bar
 - Weiter Bereich der Kapillar-Zahl Ca_B
 - Für kleine Werte von Ca_B sind Blasen nicht mehr rotationssymmetrisch

↑
1,65 mm
↓



Squalan - N₂
 $J_L = 0,017 \text{ m/s}$
 $J_G = 0,05 \text{ m/s}$

- Abschätzungen
 - Länge der Einheitszelle
 $L_{uc} = 6 \text{ mm}$
 - Gasgehalts in der Einheitszelle
 $\varepsilon = 40\%$
 - Druckdifferenz über die Einheitszelle
- Rechenaufwand
 - Rechengebiet:
 $1 \times 6 \times 1 \text{ mm}^3$
 - Gitter:
 $80 \times 480 \times 80$
 - Zeitschritte: ca. 20000



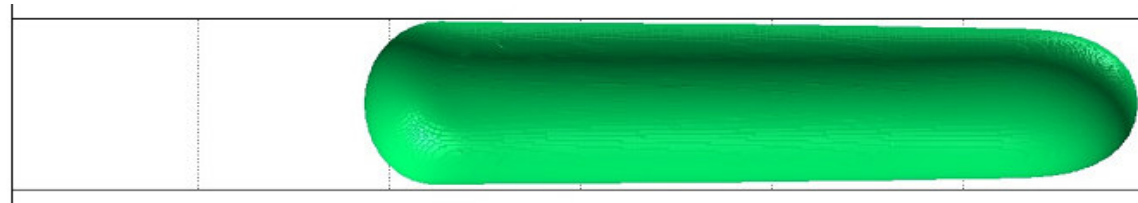
In der Simulation ist L_{uc} etwas zu klein, während das Blasenvolumen und J_{tot} etwas zu groß sind. Trotzdem stimmt die Blasenform gut überein.

Einfluss der Durchflussrate

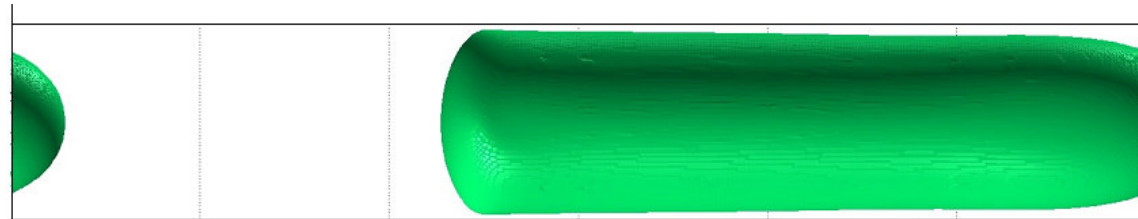
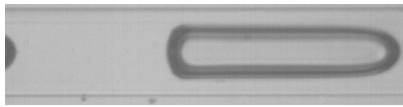
$$L_{uc} = 6 \text{ mm}, \varepsilon = 40 \%$$

Strömung

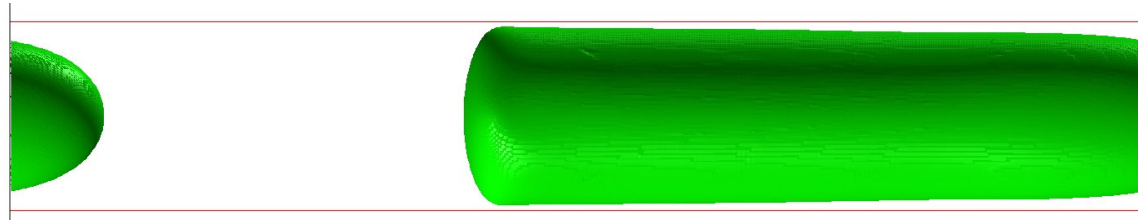
$$J_{tot} = 0,03 \text{ m/s}$$



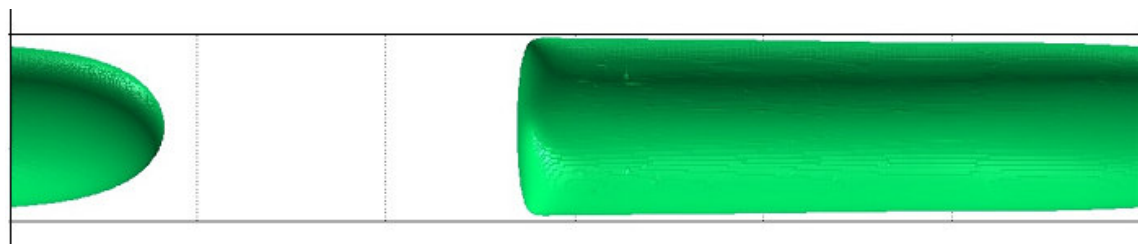
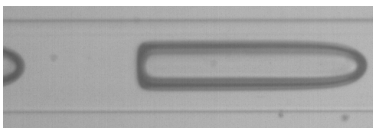
$$J_{tot} = 0,076 \text{ m/s}$$



$$J_{tot} = 0,108 \text{ m/s}$$



$$J_{tot} = 0,27 \text{ m/s}$$

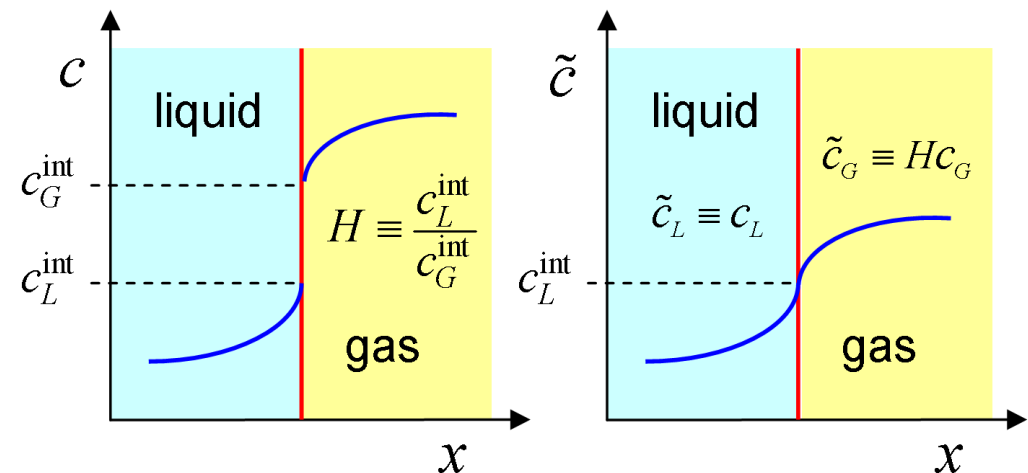


Zunahme von J_{tot}

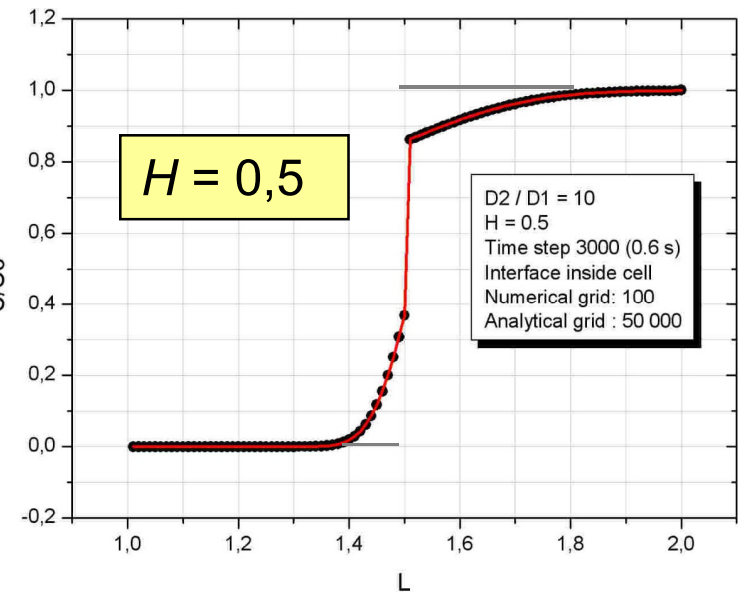
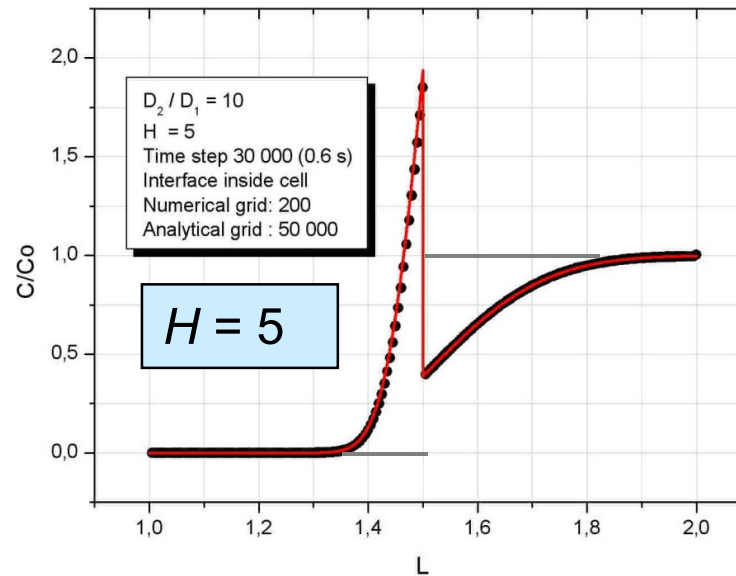
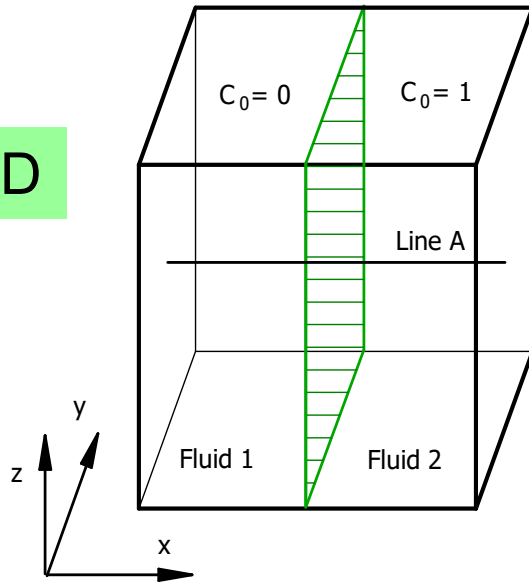
- Methodische Erweiterung von TURBIT-VOF
 - Doktorarbeit A. Onea (2006)
 - Transportgleichung für eine/mehrere chemische Spezies
 - Annahmen:
 - keine Rückwirkung auf die Hydrodynamik
 - Konzentrationen an der Phasengrenzfläche sind im Gleichgewicht $H \equiv \frac{c_L^{eq}}{c_G^{eq}}$

- Numerische Problematik

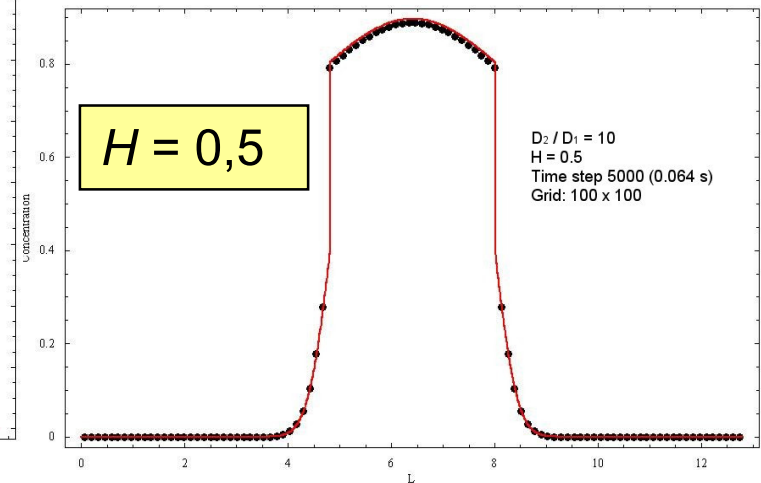
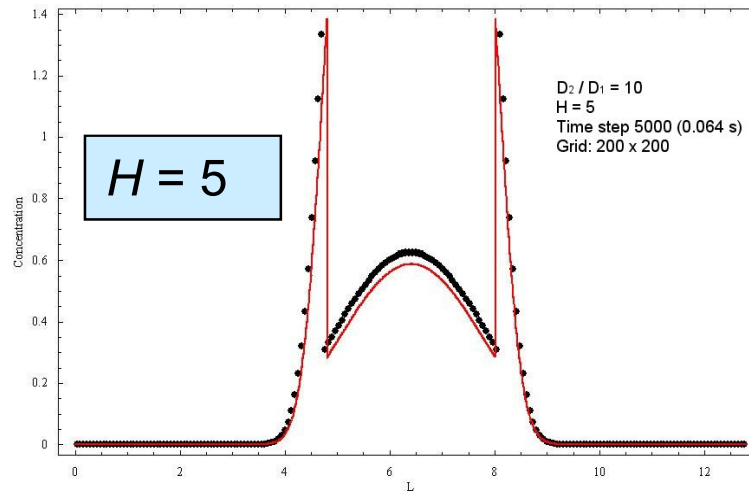
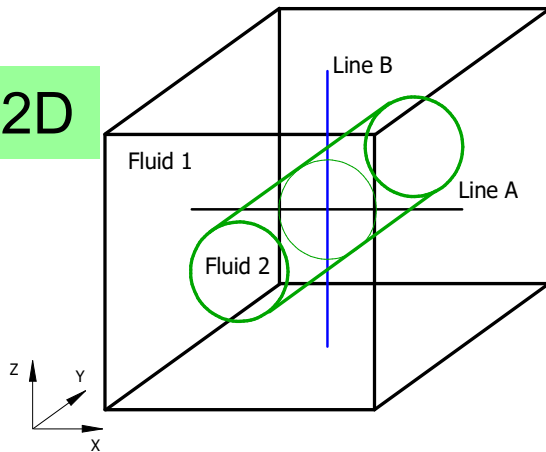
- Konzentration an Phasengrenzfläche ist i. A. unstetig
- Transformation von c in ein stetiges Feld \tilde{c} mit Hilfe der Henry-Zahl H



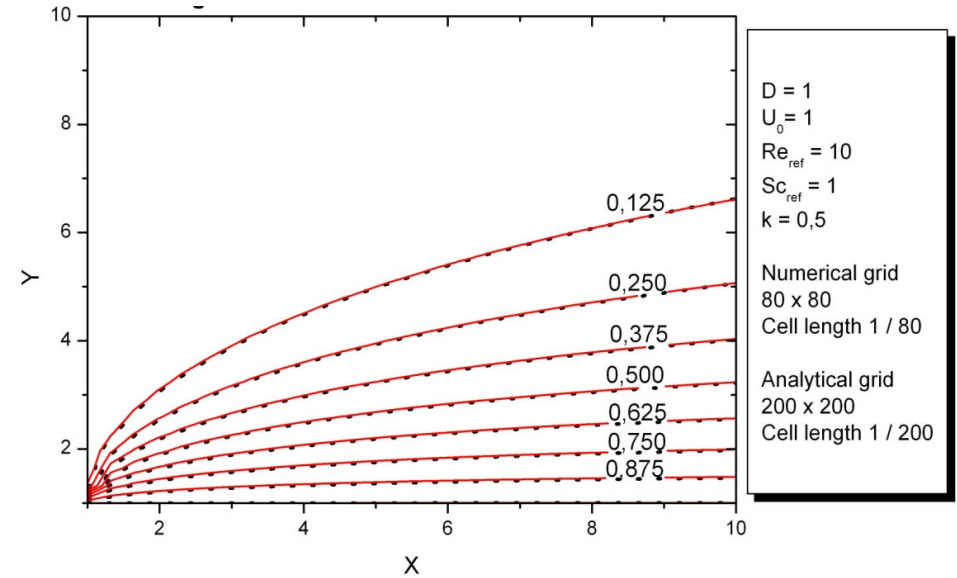
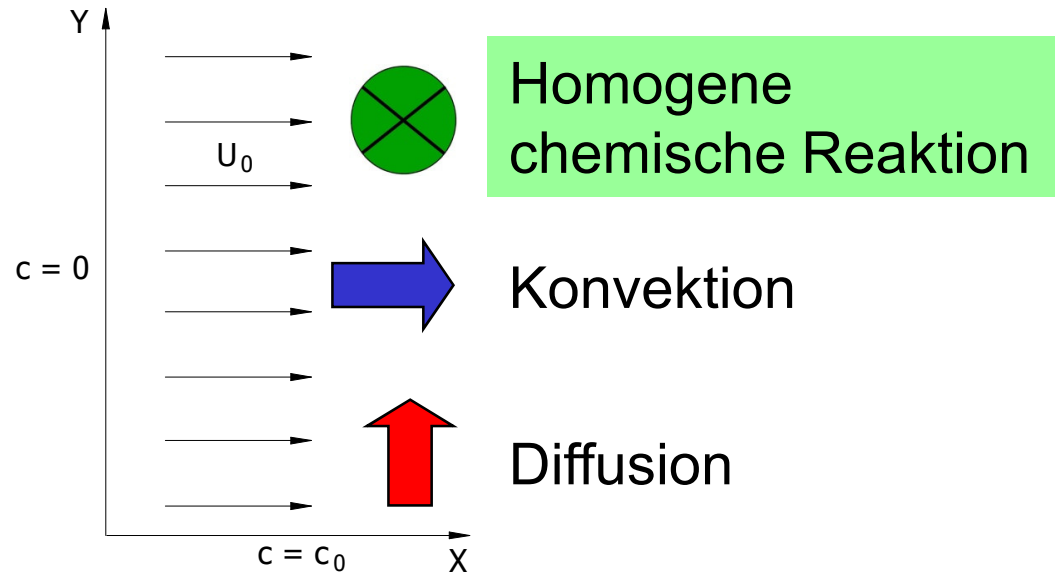
1D



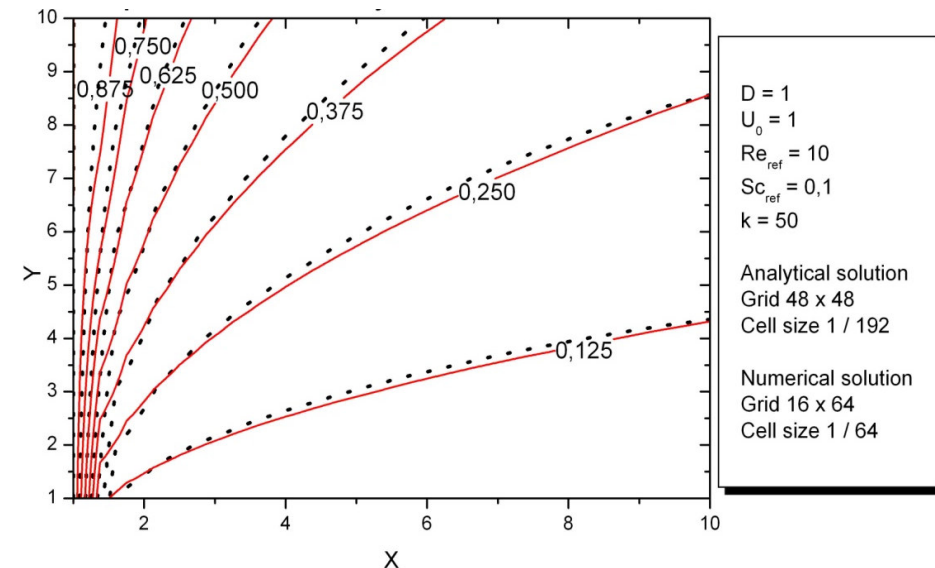
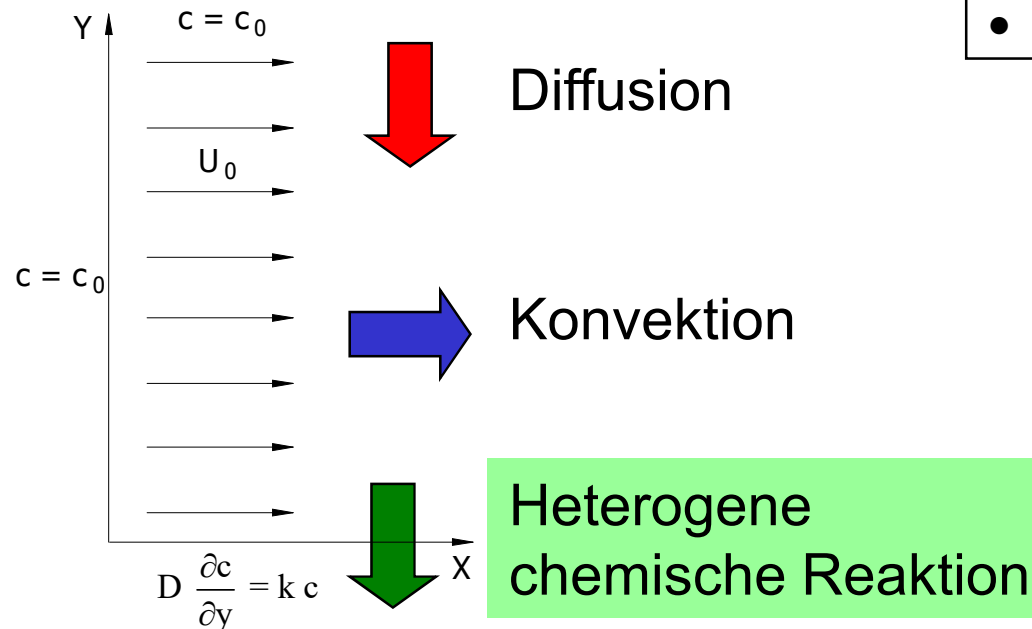
2D



- TURBIT-VOF; — analytische Lösung (Crank, 1994) für 1D und numerische Lsg. von (Bothe et al., 2004) für 2D



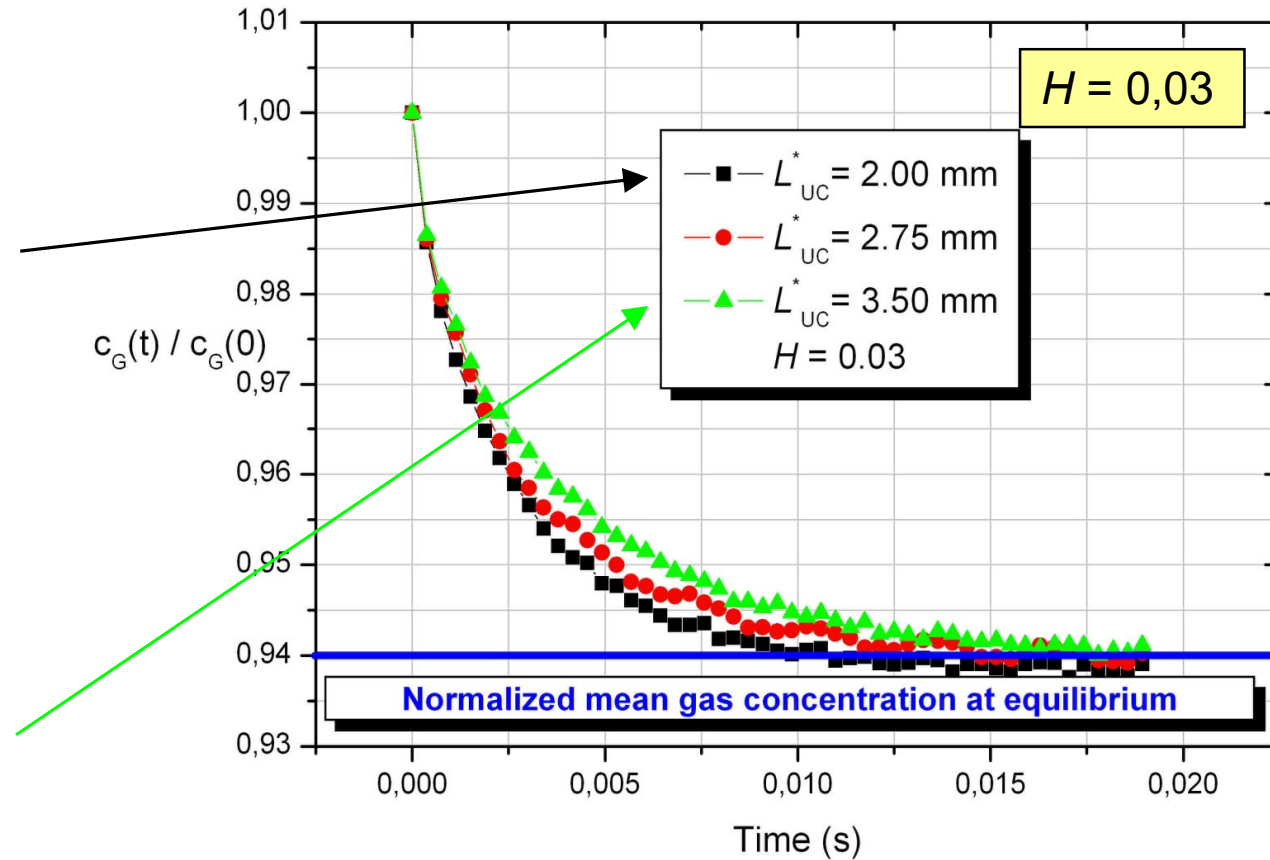
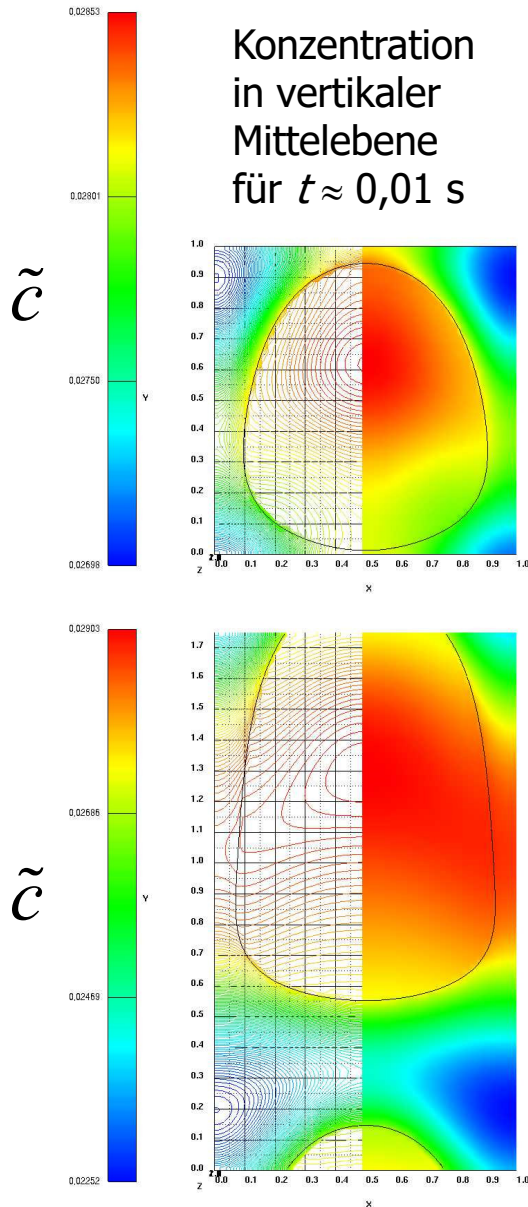
● TURBIT-VOF; — analytische Lösung (Apelblat, 1980)



- Betrachtung eines artifiziellen Systems
 - Hydrodynamik: Gasphase = Luft, Flüssigphase = Silikonöl
 - Diffusivität in der Gasphase $D_G = 19,16 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ (entspricht O_2)
 - Realistischer Wert für Diffusivität D_L in Flüssigkeit bewirkt
 - Sehr dünne Konzentrationsgrenzschicht auf der Flüssigkeitsseite der Phasengrenzfläche, die numerisch nicht aufgelöst werden kann
 - Sehr langsame Transportvorgänge und damit hohe Rechenzeiten
 - Diffusivität D_L wird um ca. den Faktor 30 000 erhöht

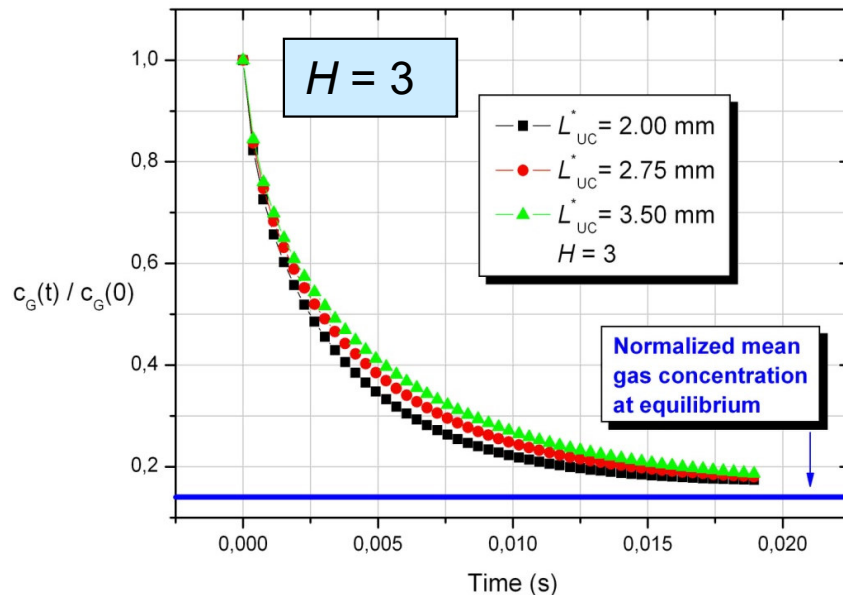
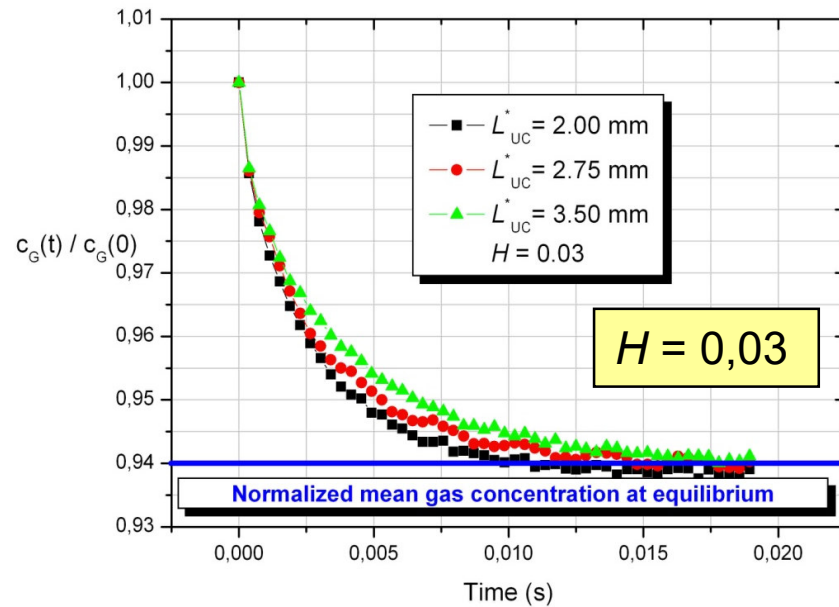
k_{hmg} [1/s]	k_{htg} [m/s]	H	D_L [m ² /s]	D_G [m ² /s]	Re_B	Sc
19800	1,32	0,03 and 3	62,24×10 ⁻⁶	19,16×10 ⁻⁶	10	0,8

- Betrachtung von zwei verschiedenen Werten der Henry-Zahl
 - $H = 0,03$ (Wert von O_2 für System Luft - Wasser)
 - $H = 3$ (Wert von Methylchlorid CH_3Cl für System Luft - Wasser)

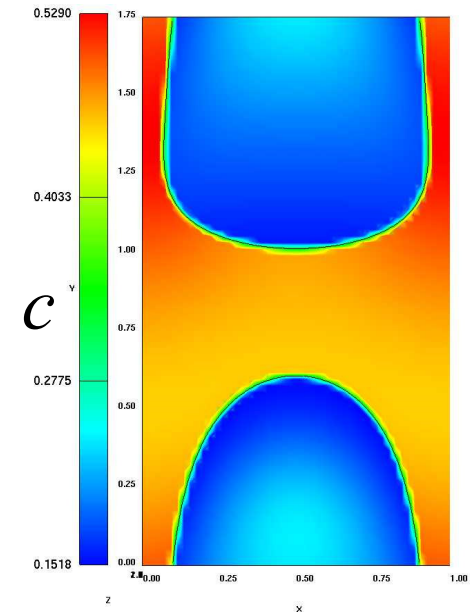
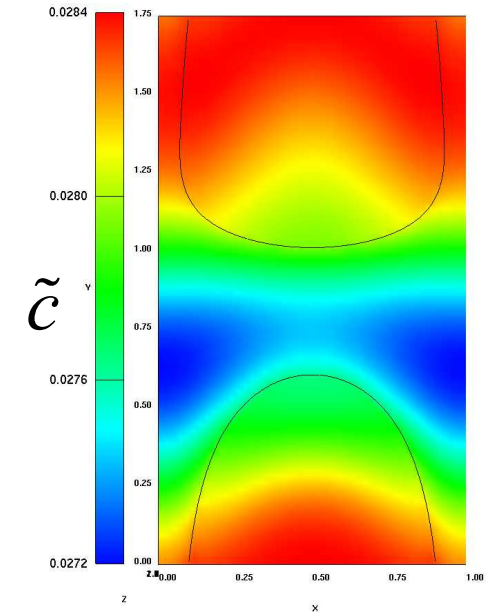


Normierte Konzentration in der Gasphase im Gleichgewichtszustand

$$\frac{c_G^{eq}}{c_G^0} = \frac{1}{1 + H(1/\varepsilon - 1)}$$



- Der Flüssigkeitsfilm ist gesättigt
- Der Stofftransport erfolgt hauptsächlich über Spitze und Ende der Blase in Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen von Bercic & Pintar (1997)
- Kurze Einheitszellen sind effektiver für den Stoffübergang



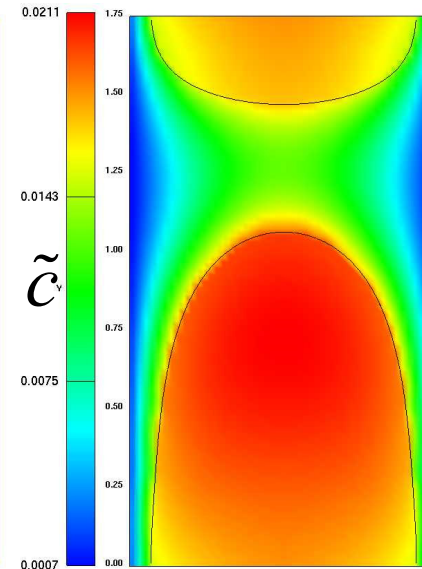
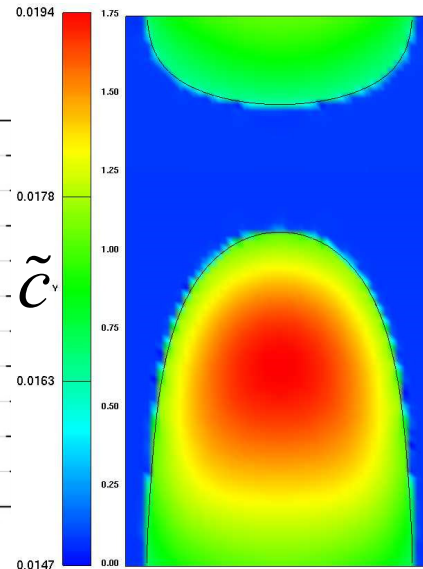
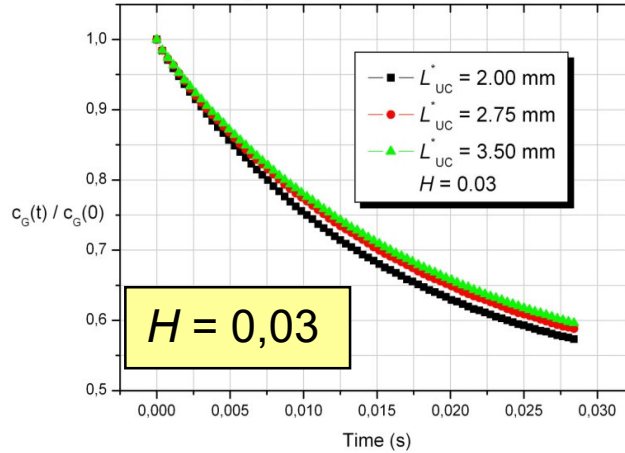
$$Da_{\text{hmg}} = \frac{k_{\text{hmg}} D_h^2}{D_L} = 1272.5$$

Homogene R.

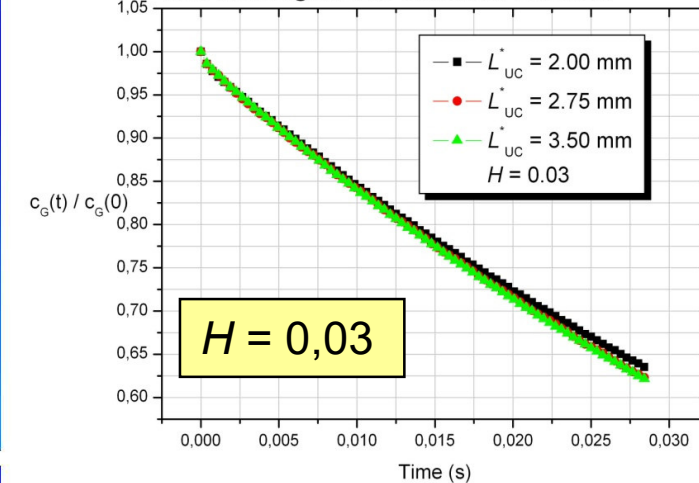
Heterogene R.

$$Da_{\text{htg}} = \frac{k_{\text{htg}} D_h}{D_L} = 42.4$$

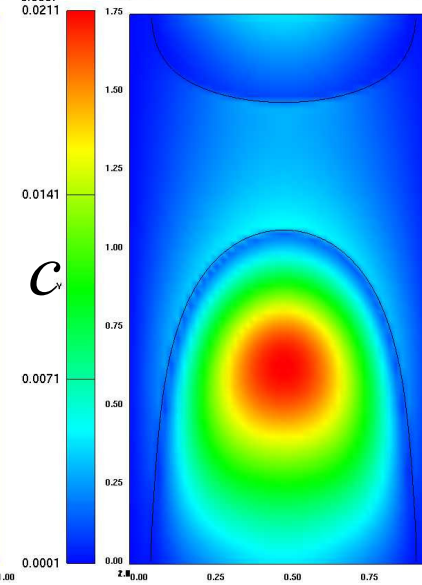
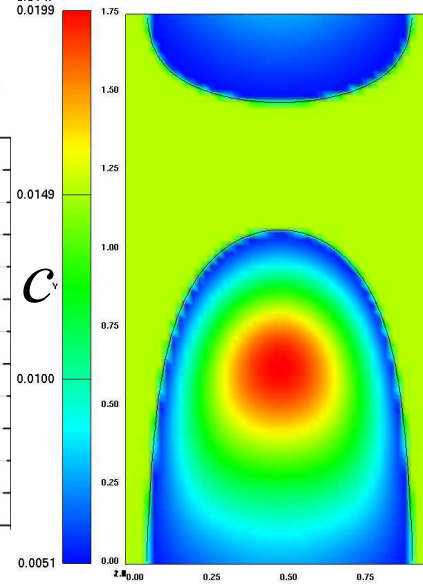
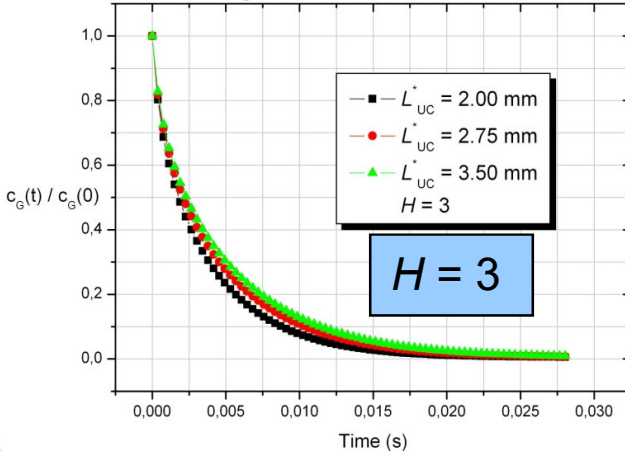
Influence of unit cell length on mass transfer with homogeneous chemical reaction



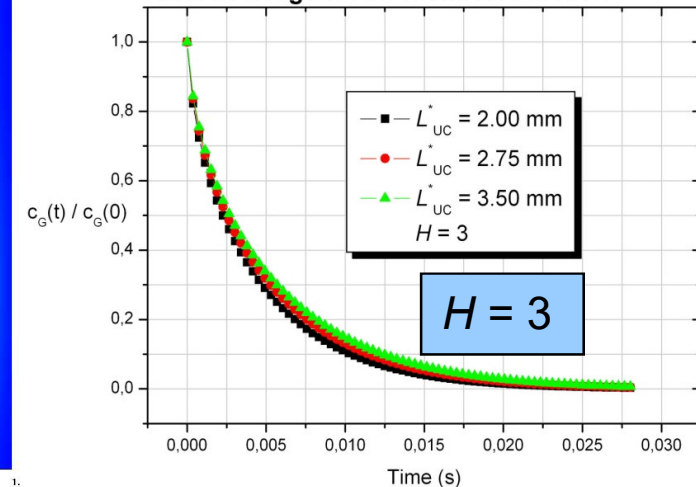
Influence of unit cell length on mass transfer with heterogeneous chemical reaction



Influence of unit cell length on mass transfer with homogeneous chemical reaction



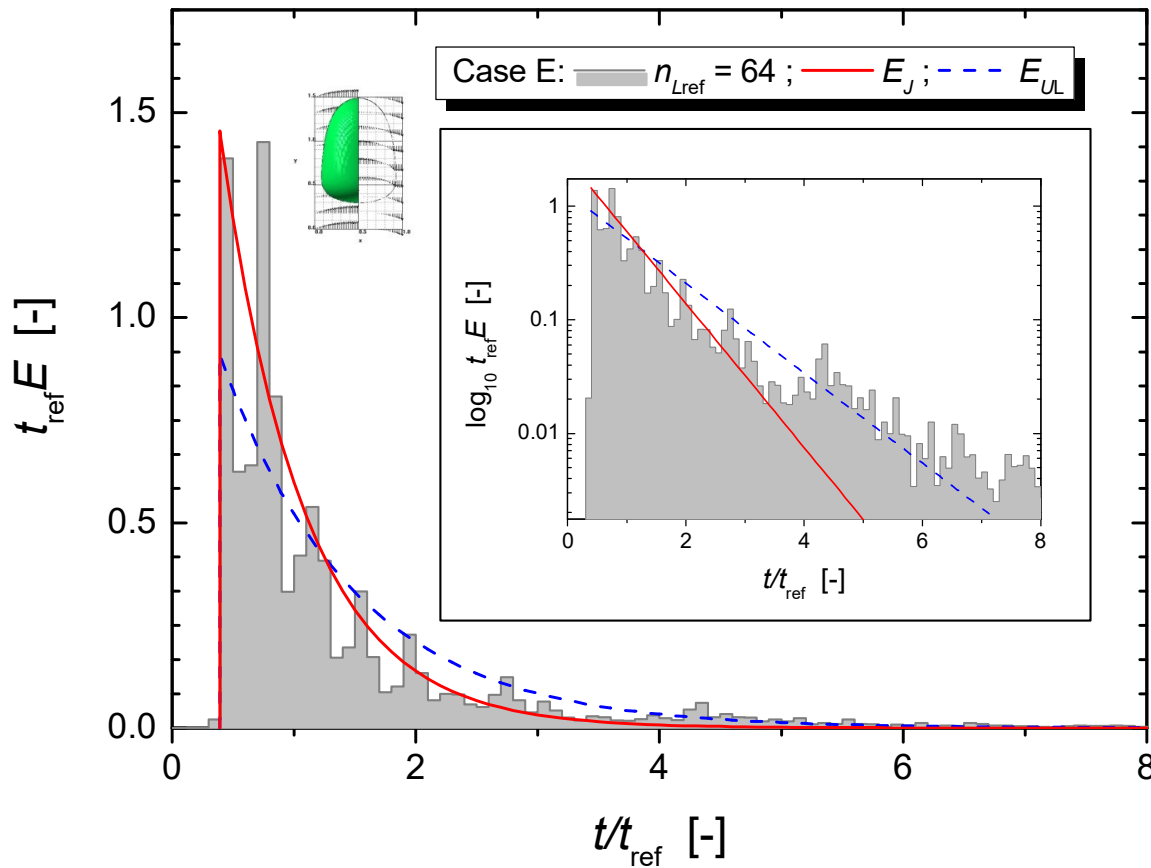
Influence of unit cell length on mass transfer with heterogeneous chemical reaction



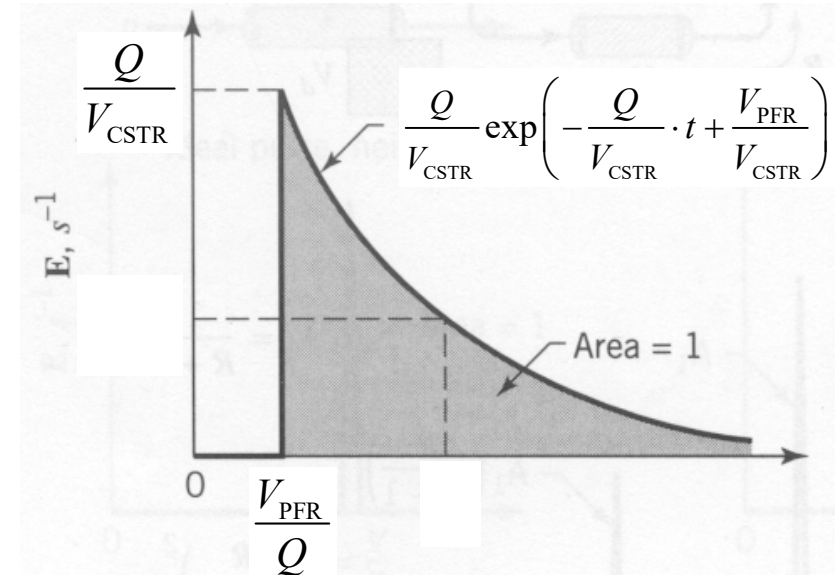
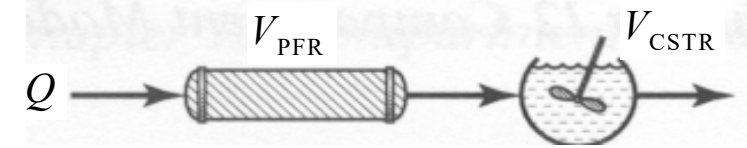
- Ein chemischer Reaktor hat zwei essentielle Aufgaben
 - Vermischung der Edukte
 - Bereitstellung von ausreichender Reaktionszeit
- Jede chemische Reaktion hat eine charakteristische Zeitskala (Reaktionsgeschwindigkeit)
- Ist die Verweilzeit der Edukte im Reaktor zu klein, so ist die Ausbeute des Reaktionsproduktes gering
- Ist die Verweilzeit der Edukte zu groß so entstehen unerwünschte Nebenprodukte (geringe Selektivität)
- Experimentelle Bestimmung der Verweilzeitverteilung
 - Tracer-Zugabe am Eintritt und Konzentrationsmessung am Austritt des Reaktors
 - Für Mikroreaktoren ist Methode mit großen Ungenauigkeiten behaftet, da i. A. das Reaktorvolumen kleiner ist als das des Zulaufs und das Messvolumen im Ablauf

- Auswertung der Verweilzeitverteilung („residence time distribution“, RTD) der Flüssigphase als Post-Processing:
 - Verwendung des zuvor berechneten voll entwickelten Strömungsfeldes zu einem bestimmten Zeitpunkt
- Initialisierung virtueller Partikel in regelmäßigem Abstand in Gitterzellen, die vollständig mit Flüssigkeit gefüllt sind
- Berechnung der Partikel-Bahnlinien und Bestimmung der Zeit, die jedes Partikel braucht um sich in axialer Richtung um die Länge der Einheitszelle L_{uc} weiterzubewegen
- Wichtung und Normierung der Häufigkeitsverteilung aller Partikel liefert die Verweilzeitverteilung

Ausgewertete RTD der Einheitszelle (grau hinterlegt)



Ersatzmodell



$$E_J = \begin{cases} 0 & \text{für } t < L_{uc} / U_B \\ \frac{J}{L_{uc}} \exp\left(-\frac{J}{L_{uc}} \cdot t + \frac{J}{U_B}\right) & \text{für } t \geq L_{uc} / U_B \end{cases}$$

*Wörner, Ghidersa, Onea, *Int. J. Heat Fluid Flow* 28 (2007) 83-94

- Praktische Anwendung des Modells
 - Empirische Beziehung $U_B = U_B (J_L, J_G, \dots)$
 - Empirische Beziehung für Länge der Einheitszelle $L_{uc} = L_{uc}(J_L, J_G, \dots)$
 - Anzahl der Einheitszellen im Reaktor: $n_{uc} \equiv L_{Reaktor} / L_{uc}$
 - Bestimmung der Verweilzeitverteilung für den Reaktor durch n_{uc} - fache Faltung der RTD für die Einheitszelle



RTD-Modell für
die Einheitszelle



RTD des Reaktors mit n_{uc} Einheitszellen

- Verifikation des Modells anhand RTD-Messungen für Einzelkanal und Monolithreaktor (Projektantrag in Vorbereitung)

- Numerische Simulation von Taylor-Blasen im Minikanal
 - Entwicklung eines Codes auf Basis der Kontinuumsgleichungen
 - Volume-of-Fluid Methode mit Rekonstruktion der Phasengrenzfläche
 - lokale Approximation der Phasengrenzfläche als Ebene
 - VOF-Methoden ohne Rekonstruktion in kommerziellen CFD Codes sind ungeeignet
 - Validierung für quadratischen vertikalen Mini-Kanal
 - Indirekt anhand Literaturdaten für $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ Kanal
 - Direkt durch 1:1 Nachrechnung von Experimenten im $1\text{ mm} \times 1\text{ mm}$ Kanal
 - Großer Einfluss der Kapillar-Zahl auf Blasenform und Strömung
 - Qualitative Untersuchungen zu Stofftransport und chemischer Reaktion
 - Auswertung der Verweilzeitverteilung der Flüssigkeit für die Einheitszelle und Entwicklung eines analytischen Modells

- Detaillierte Simulation von:
 - Hydrodynamik der Blasenströmung
 - Stofftransport mehrerer Spezies
 - (Einfache) chemische Reaktion mit Wärmetönung
 - Wärmetransport und Rückkopplung auf die Hydrodynamik
- Ermittlung optimaler hydrodynamischer Parameter für gegebene chemophysikalische Parameter
- Konkret: Fischer-Tropsch Synthese in Monolith-Reaktoren

