

Analyse der Morphologie-Transport-Beziehungen in strukturierten porösen Medien

Motivation

Für die Quantifizierung von Umsatzgrad, Selektivität etc. von Festbettreaktoren werden zuverlässige und effiziente Berechnungsverfahren benötigt, die auf – zumeist empirischen – Modellannahmen basieren.

Offene Fragen bzgl. der Modellierung des Zusammenhangs zwischen Morphologie und Hydrodynamik (Konvektion, Diffusion, Dispersion) bestehen wenn

- o stark inhomogene poröse Medien (Wandgängigkeit) oder
- o hierarchisch aufgebaute poröse Medien

eingesetzt werden.

Das Wissen um solche Transportprozesse eröffnet Wege zur Optimierung mikrostrukturierter Reaktorsysteme.

Für die detaillierten Berechnungen werden numerische Verfahren unter Nutzung modernster Hardware (GPGPUs/CUDA) angewandt.

Ziele

Untersuchung der hydrodynamischen Eigenschaften, d. h. Permeabilität und Dispersion, in einem repräsentativem Volumenelement eines porösen Mediums mit mono-, bi- und multimodaler Partikelgrößenverteilung.

Detaillierte Berechnung der auf Porenebene ablaufenden Transportprozesse mit Hilfe der Lattice-Boltzmann Methode sowie der Finite Volumen Methode.

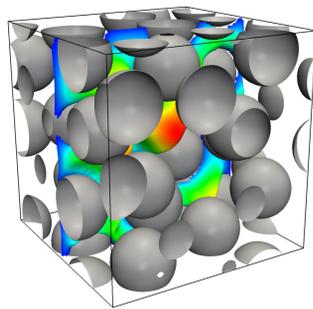
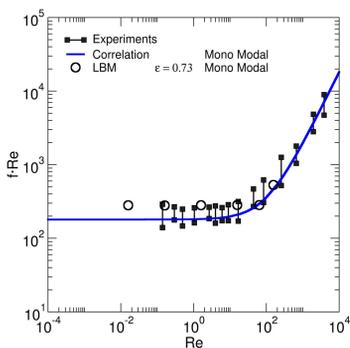
Untersuchung der Wandgängigkeit in Abhängigkeit vom Spaltmaß-zu-Kugeldurchmesser-Verhältnis durch Bewertung der Geschwindigkeits- und Verweilzeitverteilungen.

Bewertung des Potentials von Grafikkarten (GPGPUs) zur numerischen Berechnung.

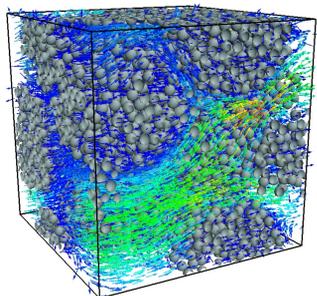
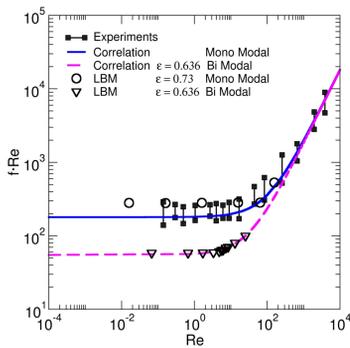
Ausblick

Berechnung realer, mit Computertomographie eingescannter, poröser Schüttungen für repräsentative Volumenelemente mit verschiedenen Partikelgrößenverteilungen unter Einsatz der verifizierten Methodik.

Kugelpackungen

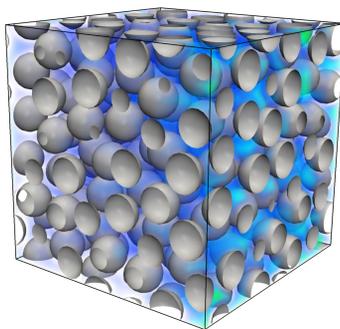


Geschwindigkeit in periodischer mono-modaler Kugelpackung

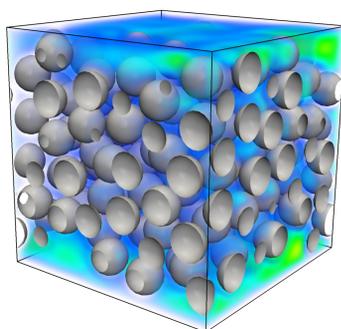


Geschwindigkeit in periodischer bi-modaler Kugelpackung

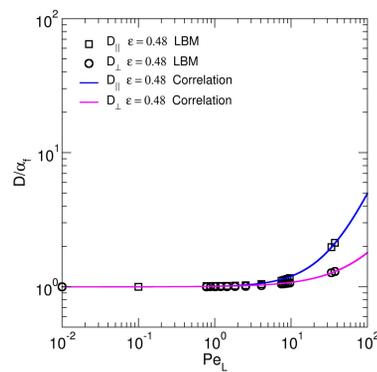
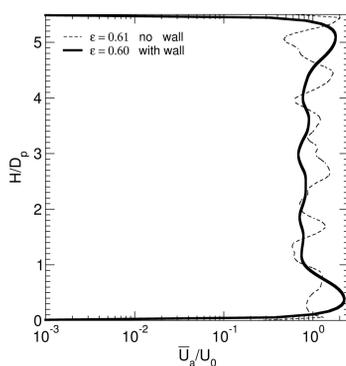
Wandgängigkeit



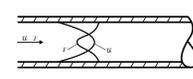
Poröses Medium ohne Wandgängigkeit



Poröses Medium mit Wandgängigkeit



Dispersion

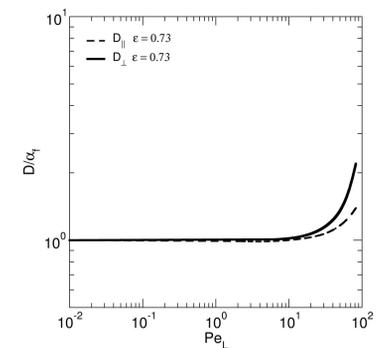
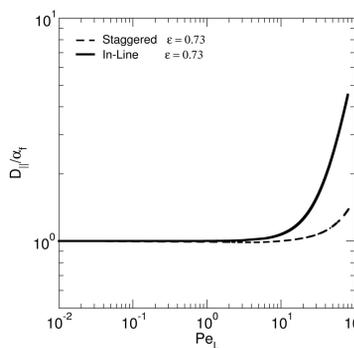
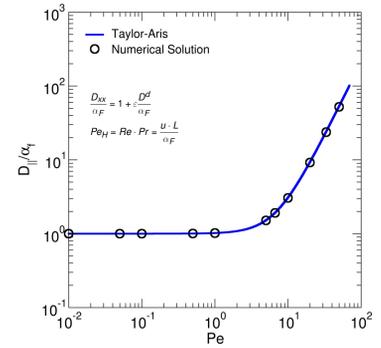
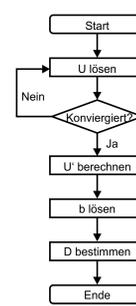


Fluidgeschwindigkeit und Wärmeverteilung

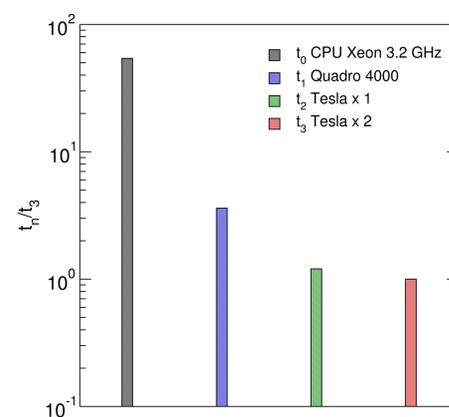
$$u' = u - \langle u \rangle$$

$$u' + u \cdot \nabla b = \alpha_F \nabla^2 b$$

$$D^d = -\frac{1}{V_F} \int u' b \cdot dV$$



Vergleich der Rechenzeit



Nvidia Tesla K20



Zusammenarbeit und Förderung

Die Projekte Br•1864/11-1 und Br•1864/10-2 sind eine Zusammenarbeit mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Turek) und dem Institut für Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Weber). Beide Projekte werden durch die DFG finanziell gefördert.

