

Večnivojsko modeliranje kemijskih in biokemijskih procesov v mikrofluidnih napravah

Filip Strniša

Za mikrofluidne naprave štejemo tiste pretočne naprave, ki se uporabljajo v kemiji oziroma kemijski proizvodnji, katerih vsaj ena dimenzija je manjša od enega milimetra. Zaradi te lastnosti je za njih značilno visoko razmerje med površino in volumnom, katerega posledica so boljša energijska učinkovitost, izboljššan nadzor procesa, izboljššan prenos toplote in snovi, ter zaradi njihovega majhnega volumna, manjša poraba topil. Modeliranje služi v kemijskem inženirstvu kot orodje za boljše razumevanje procesov, pomoč pri dimenzioniranju naprav in optimizaciji procesov ter kot pomoč pri vodenju procesov. Tradicionalni postopki modeliranja se v naši panogi praviloma poslužujejo makroskopskih metod, ki slonijo na predpostavki kontinuuma, torej zanemarjajo delčno sestavo snovi. Majhne karakteristične dimenzije mikrofluidnih naprav postavljajo upravičenost uporabe makroskopskih modelov pod vprašaj. Mezoskopska mrežna Boltzmannova metoda ima potencial za modeliranje mikrofluidnih naprav, saj z njenim statistično-mehanskim izvorom ne zanemari delčne sestave snovi, hkrati pa je primerna za opis mehanike fluidov in transportnih pojavov tudi v kompleksnih geometrijah. Mrežno Boltzmannovo metodo je smiselno razširiti v večnivojski model, da na ta način omilimo porabo računalniške moči – tako uporabimo mrežno Boltzmannovo metodo za opis procesov v kompleksnih geometrijah, preprostejša področja mikrofluidne naprave pa opišemo z makroskopskim modelom. V tej nalogi predstavljamo naše delo z mrežno Boltzmannovo metodo. Najprej jo uporabimo za opis prenosa snovi v mikrobioreaktorju s strnjenim slojem sferičnih delcev. Nadaljujemo s primerjavo različnih modelov trka mrežne Boltzmannove metode in z uporabo mrežne Boltzmannove metode za modeliranje toka binarne mešanice med seboj netopnih fluidov, s pomočjo katerega teoretično načrtujemo brezmembranski mikroločevalnik. Na koncu mrežno Boltzmannovo metodo razširimo še v večnivojski model za opis reaktivne mešanice plinov v katalizirani reakciji suhega reforminga metana.

Ključne besede: modeliranje, večnivojsko modeliranje, mrežna Boltzmannova metoda, mikrofluidne naprave, mikroreaktorji