

Projekt dotyczy badania zjawiska modulacji turbulencji przez krople zawarte w stężonych i średnio-stężonych emulsjach. Otóż obecność kropeł fazy rozproszonej wpływa na charakter mikroprzepływów wewnątrz i na zewnątrz kropeł, co z kolei powoduje również zmianę ich kształtu i ewentualnie rozpad. Lepkość gęstych emulsji jest wysoka i zmienia się na skutek tych zjawisk. Działa to w rezultacie na charakter przepływu i rozkład prędkości płynącej emulsji. Nie jest to jednak efekt jedyny, bowiem ruchy małych kropeł wpływają również na przebieg mieszania fazy ciągłej oraz transport masy między fazą rozproszoną a fazą ciągłą. Wymienione zjawiska oddziałują również na sposób kontaktowanie reagentów, a zatem i na przebieg złożonych reakcji chemicznych. Celem projektu jest teoretyczna interpretacja związku efektów zjawisk zachodzących w skali mikro- i nano-kropeł, łącznie z wymienionymi wyżej efektami obserwowanymi w skali makro, opracowanie stosownych modeli matematycznych i ich walidacja poprzez przeprowadzenie badań doświadczalnych.

Proponowane badania łączą zaawansowane podejście teoretyczne i metody modelowania (opis teoretyczny obserwowanych zjawisk i CFD) z eksperymentem. Badania doświadczalne przebiegu reakcji chemicznych w płynie zawartym między kroplami emulsji umożliwią testowanie różnych modeli mikroprzepływów wokół i wewnątrz kropeł, w tym proponowanych w niniejszym projekcie oraz modelowanie ich wpływu na kontaktowanie reagentów. Ponieważ struktura emulsji wpływa na jej lepkość, cennych informacji zwłaszcza w przypadku gęstych emulsji dostarczą badania reologiczne. Przeprowadzone też zostaną badania struktury przepływu dla zawiesin mniej stężonych, przy użyciu anemometru laserowego. Badane będą ewolucje rozkładu rozmiarów i kształtu kropeł metodą laserową oraz przy użyciu mikroskopii elektronowej. Przyjęta metoda modelowania pozwoli śledzić jak zmienia się rozkład rozmiarów kropeł w wyniku działania naprężeń burzliwych, wiązać lepkość emulsji z rozkładem rozmiarów kropeł i ich stężeniem oraz określać, jak to wpływa na przepływ i generowane przez przepływ naprężenia. Symulacje będą przeprowadzone z wykorzystaniem CFD: metoda „volume of fluid” (VOF) będzie stosowana w celu symulacji deformacji kropeł, ich rozpadu, wewnętrznych i zewnętrznych mikroprzepływów, oddziaływania sąsiednich kropeł oraz wyznaczania współczynników wnikania, wewnętrznego i zewnętrznego, podczas gdy modele RANS będą stosowane do symulacji przepływów emulsji w dużej skali, mieszania i reakcji chemicznych. Modele własne będą wprowadzone do środowiska CFD w postaci funkcji definiowanych przez użytkownika (UDF); będą to modele reologii zależnej od rozkładu rozmiarów i właściwości kropeł, rdzenie rozpadu, bilanse populacji, stałe czasowe mieszania oraz schematy „zamknięcia” dla burzliwych przepływów emulsji i szybkich reakcji chemicznych.

Złożone reakcje chemiczne będą używane w projekcie jako układy reakcji testowych do charakteryzowania energetycznej efektywności mieszania w układach wielofazowych. Wykorzystując reakcje testowe można będzie charakteryzować stopień wymieszania (stopień segregacji, stałe czasowe mieszania, szybkość międzyfazowej wymiany masy) i wykorzystać te informacje do walidacji modeli teoretycznych oraz poprawy metod prowadzenia złożonych procesów w reaktorach chemicznych i mieszalnikach.

Wyniki pracy oprócz znaczenia naukowego mogą mieć zatem potencjalne znaczenie praktyczne, pozwolą bowiem na selektywne prowadzenie procesów chemicznych, poprzez projektowanie takich sposobów ich prowadzenia, które minimalizują wytwarzanie szkodliwych dla otoczenia produktów ubocznych. Usuwanie tych zanieczyszczeń jest kosztowne, stąd wyniki pracy mogą służyć do obniżki kosztów produkcji i ochrony środowiska.