ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΤΗΣ ΑΝΑΜΙΞΗΣ ΣΕ ΜΙΚΡΟ-ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΗ ΒΟΗΘΕΙΑ ΚΑΤΑΝΟΜΩΝ ΤΟΥ ΧΡΟΝΟΥ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ

Α.Γ. Κανάρης και Α.Α. Μουζά
Εργαστήριο Τεχνολογίας Χημικών Εγκαταστάσεων, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ
Η βελτίωση της ανάμιξης είναι ιδιαίτερης σημασίας στην τεχνολογία των *μ*-αντιδραστήρων επειδή επηρεάζει την έκταση των αντιδράσεων. Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι να μελετηθεί με χρήση κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (*CFD*) η επίδραση της καμπυλότητας του *μ*-αγωγού και του αριθμού *Reynolds* των αντιδρώντων ρευστών στο βαθμό ανάμιξης και κατ' επέκταση στη λειτουργία ενός πρότυπου *μ*-αναμίκτη/αντιδραστήρα. Αποδεικνύεται ότι η ανάμιξη βελτιώνεται όταν αυξάνεται η καμπυλότητα του αγωγού και ο αριθμός *Re*. Σημειώνεται επίσης η αύξηση της ταχύτητας αυξάνει την απόδοση της αντίδρασης παρόλη τη μείωση του χρόνου παραμονής επειδή ενισχύονται οι δευτερεύουσες εγκάρσιες ροές και βελτιώνεται η ανάμιξη.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ
Με τον όρο *μ-αντιδραστήρες* (*micro-reactors*) αναφερόμαστε σε συσκευές των οποίων οι χαρακτηριστική διάσταση είναι μικρότερη από 1mm. Οι *μ*-αντιδραστήρες εμφανίζουν διάφορα πλεονεκτήματα έναντι των συμβατικών [1] όπως:

- ευκολία στο "στήσιμο" της διάταξης και η δυνατότητα σύνδεσής της με συμβατικό εξοπλισμό,
- εύκολος έλεγχος των συνθηκών λειτουργίας,
- καλύτερη απαγωγή θερμότητας και αυξημένη ασφάλεια, καθώς είναι δυνατή η λειτουργία τους σε κρίσιμες συνθήκες (πχ εκρηκτικά μίγματα) ή η χρήση τοξικών ουσιών,
- ταχύτερη μεταφορά των ερευνητικών αποτελεσμάτων στην παραγωγή καθώς δεν χρειάζεται το ενδιάμεσο στάδιο της πιλοτικής μονάδας,
- δυνατότητα τοποθέτησής τους εν σειρά ή εν παραλλήλω.
- δυνατότητα λειτουργίας σε πιέσεις και θερμοκρασίες που για λόγους ασφαλείας δεν χρησιμοποιούνται στις συμβατικές συσκευές,
- μικρή κατανάλωση πρώτων υλών και χαμηλή κατανάλωση ενέργειας καθώς και
- εύκολη προσαρμογή της μονάδας σε κλιμακούμενη ζήτηση.

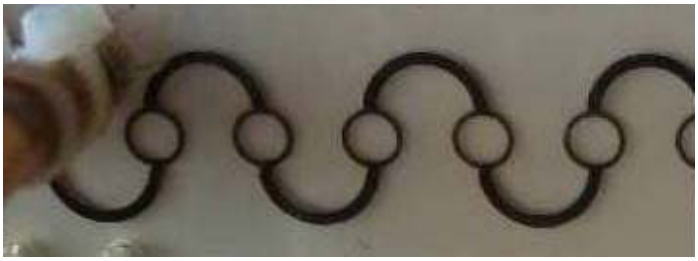
Επειδή η χαρακτηριστική διάσταση του αγωγού είναι μικρή, η ροή είναι συνήθως στρωτή. Συνεπώς η μοριακή διάχυση, η οποία αφενός είναι αργή και αφετέρου είναι ανάλογη της έκτασης της διεπιφάνειας μεταξύ των δύο φάσεων, αποτελεί τον κύριο μηχανισμό ανάμιξης. Η ανάμιξη είναι σημαντική παράμετρος κατά τον σχεδιασμό *μ*-αντιδραστήρων, καθότι η βελτίωση της ποιότητας της ανάμιξης οδηγεί σε αύξηση της διεπιφάνειας μεταξύ των αντιδρώντων και κατ' επέκταση σε αύξηση της απόδοσης της αντίδρασης. Στη βιβλιογραφία (π.χ, [1-5]) δίνονται πληροφορίες για τους *μ*-αναμίκτες και τις αρχές λειτουργίας τους.

Γενικά και με βάση τον τρόπο ανάμιξης διακρίνουμε δύο είδη μ-αναμικτών, τους ***ενεργητικούς*** και τους ***παθητικούς***. Οι παθητικοί μ-αναμίκτες είναι απλοί στην κατασκευή, αρκετά αξιόπιστοι, ενώ συγχρόνως έχουν μικρό κόστος [1]. Στις συσκευές αυτού του τύπου η ανάμιξη ενισχύεται από τη γεωμετρία του αγωγού (π.χ. προσθήκη κυκλικών τμημάτων, τεχνικές δημιουργίας πολυστρωματικής ροής, διαχωρισμός και επανένωση της ροής κλπ) [5]. Όπως αναφέρουν οι Jeon & Shin [6] ο προσεκτικός σχεδιασμός των μ-καναλιών μπορεί να βελτιώσει σημαντικά τον βαθμό ανάμιξης σε τέτοιου είδους συσκευές. Κατά την τελευταία δεκαετία, έχουν δημοσιευθεί πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες που αφορούν προσδιορισμό του βαθμού ανάμιξης σε διάφορα είδη καμπύλων αγωγών, για χαμηλούς αριθμούς *Reynolds*, αντίστοιχους με αυτούς συναντώνται στη λειτουργία των μ-συσκευών [7]. Ο αριθμός *Dean*, *K*, είναι ο χαρακτηριστικός αδιάστατος αριθμός που χρησιμοποιείται για τη μελέτη της ροής σε καμπύλους αγωγούς και ορίζεται ως:

$$K = Re\sqrt{W/R} \tag{1}$$

όπου *Re* ο αριθμός *Reynolds*, *W* το πλάτος του καναλιού και *R* η ακτίνα καμπυλότητάς του. Στη βιβλιογραφία [8] αναφέρεται ότι όταν ο *K* υπερβαίνει την τιμή 150, η διαμόρφωση των μ-καναλιών προκαλεί χαοτική συναγωγή (*chaotic convection*) στο εσωτερικό τους με τη δημιουργία εναλλασσόμενης ροής κατά *Dean* (*alternating Dean flow*), ενώ για χαμηλότερους αριθμούς *K* η αποτελεσματικότητα της ανάμιξης μειώνεται δραστικά.

Σε προηγούμενη εργασία [9] μελετήθηκε πειραματικά με οπτική μέθοδο η ανάμιξη σε πρότυπο μ-αναμίκτη (***Σχήμα 1***), ο οποίος συνδυάζει καμπυλότητα, τεχνικές διαχωρισμού και επανένωσης της ροής και βαθμίδες ανάβασης και κατάβασης. Αποδείχθηκε ότι οι τρεις αυτοί παράγοντες ενισχύουν την αποτελεσματικότητα της ανάμιξης επειδή συνεισφέρουν στη δημιουργία δευτερεύουσας ροής στο εσωτερικό του μ-αναμίκτη. Μια άλλη μέθοδος παρακολούθησης του βαθμού ανάμιξης είναι η κατασκευή των κατανομών του χρόνου παραμονής (*Residence Time Distributions*) ενός ιχνηθέτη που εισάγεται στιγμιαία στη ροή (*pulse tracer*) [10]. Η διερεύνηση των παραγόντων που επηρεάζουν το βαθμό ανάμιξης αποτελεί το πρώτο βήμα κατά το σχεδιασμό μ-αντιδραστήρων, όπως άλλωστε προτείνεται και στη σχετική βιβλιογραφία (π.χ. [11]).



Σχήμα 1: Ο πρότυπος μ-αναμίκτης [9].

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι να μελετηθεί με χρήση κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (*Computational Fluid Dynamics*, *CFD*) η επίδραση της καμπυλότητας του μ-αγωγού και του αριθμού *Re* των αντιδρώντων ρευστών στο βαθμό ανάμιξης και κατ' επέκταση στη λειτουργία του πρότυπου μ-αναμίκτη/αντιδραστήρα. Για την παρακολούθηση της ανάμιξης κατασκευάζονται οι κατανομές του χρόνου παραμονής που θεωρείται ότι εισάγονται στιγμιαία στη ροή. Διερευνάται αριθμητικά η επίδραση της καμπυλότητας του τμημάτων του αγω-

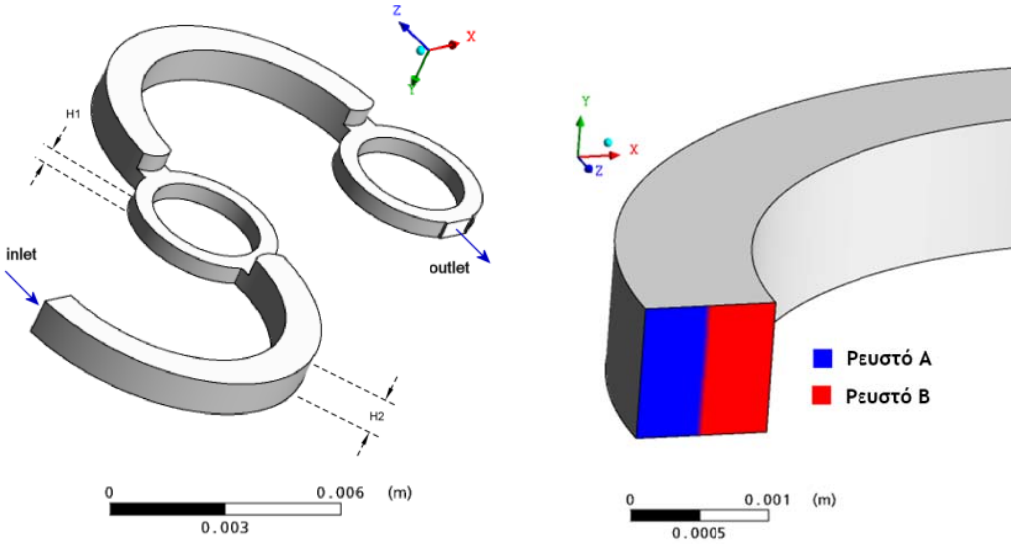
γού καθώς και του *Re* στην αποτελεσματικότητα των *μ*-αναμικτών, καθώς και στην αντίστοιχη πτώση πίεσης.

2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

2.1 Ταυτοποίηση και επιλογή παραμέτρων

Για την υπολογιστική διαδικασία κατασκευάστηκε ένα τμήμα του προαναφερθέντος παθητικού *μ*-αναμίκτη που αποτελείται από ένα *μ*-κανάλι με επαναλαμβανόμενα καμπύλα τμήματα (***Σχήμα 2α***). Το τμήμα του *μ*-αναμίκτη περιλαμβάνει επίσης τις βαθμίδες ανάβασης και κατάβασης που υπάρχουν και στην αρχική διάταξη [9] και είναι γνωστό ότι προωθούν την ανάμιξη. Δύο ιδεατά ρευστά (Ρευστό Α & Ρευστό Β) που προσομοιάζουν τις φυσικές ιδιότητες του νερού θεωρείται ότι εισέρχονται στον αγωγό, ενώ κάθε υγρό καταλαμβάνει αρχικά το ήμισυ του τμήματος εισόδου (***Σχήμα 2β***).

Τα άυλα σωματίδια εγχέονται στιγμιαία στο Ρευστό Β ενώ καταγράφεται ως συνάρτηση του χρόνου ο αριθμός των σωματιδίων, *C(t)*, που εξέρχονται από τον αγωγό. Όπως προτείνεται στη βιβλιογραφία [10, 12] ο βαθμός της ανάμιξης μπορεί να μελετηθεί από την παρακολούθηση της κατανομής του χρόνου παραμονής (*RTD*) των άυλων σωματιδίων που προστίθενται στη ροή.



(α) (β)

Σχήμα 2: α) Τρισδιάστατη απεικόνιση της *μ*-συσκευής. β) Είσοδος των ρευστών.

Οι κύριοι παράγοντες που είναι γνωστό ότι επηρεάζουν την αποτελεσματικότητα της ανάμιξης σε αυτού του είδους τις *μ*-συσκευές είναι:

- τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού, δηλαδή:
  - η ακτίνα καμπυλότητας, (R_1), το ύψος (H_1) και το πλάτος (W_1) του μικρού κυκλικού τμήματος,
  - η ακτίνα καμπυλότητας, (R_2), το ύψος (H_2) και το πλάτος (W_2) του μεγαλύτερου ημικυκλικού τμήματος, και
- ο αριθμός *Re* του μίγματος των δύο ρευστών.

Σταθερές θεωρούνται οι παρακάτω γεωμετρικές παράμετροι του αγωγού:

- η διατομή του μεγαλύτερου ημικυκλικού τμήματος (δηλαδή $W_2=H_2=1$ mm) και
- η διατομή του μικρού κυκλικού τμήματος ($W_1=H_1=0.5$ mm).

Με βάση τα παραπάνω επιλέχθηκαν οι ακόλουθες ***σχεδιαστικές παράμετροι***:

- $D_1=2R_1$,
- $D_2=2R_2$ και
- ο αριθμός *Re* των ρευστών στην είσοδο, $Re = u\, d_h \rho / \mu$

όπου u είναι η μέση ταχύτητα εισόδου των ρευστών, ρ και μ η πυκνότητα και το δυναμικό ιξώδες και d_h η υδραυλική διάμετρος του αγωγού. Δεδομένων των σχετικών διαστάσεων του αγωγού (συγκεκριμένα, $W_2=H_2=2W_1=2H_1$) αποδεικνύεται εύκολα ότι η μέση ταχύτητα του ρευστού καθώς και η τιμή του *Re* παραμένουν σταθερά σε όλη τη διάταξη.

Όπως προαναφέρθηκε, εξαιτίας των μικρών χαρακτηριστικών διαστάσεων του αγωγού ο αριθμός *Re* είναι πάντα χαμηλός, η ροή είναι στρωτή και κατά συνέπεια η μοριακή διάχυση είναι ο κύριος μηχανισμός ανάμιξης. Τα χαρακτηριστικά μήκη ανάμιξης σε αυτού του είδους τις συσκευές είναι της τάξης μερικών εκατοστών [13], με αποτέλεσμα να απαιτούνται μεγάλου μήκους αγωγοί ώστε να επιτευχθεί πλήρης ανάμιξη. Σημειώνεται ότι, αν και ο αριθμός *Re* παραμένει σταθερός, δύο τιμές του αριθμού *Dean*, *K*, σχετίζονται με κάθε γεωμετρία:

$$K_1=Re(W_1/R_1)^{0.5} \text{ και } K_2=Re(W_2/R_2)^{0.5}$$

οι οποίες αντιστοιχούν στο στενότερο και στο πλατύτερο τμήμα του αγωγού.

2.2 Σχεδιασμός προσομοιώσεων

Για την εξέταση της επίδρασης των σχεδιαστικών παραμέτρων στην αποτελεσματικότητα της μ-συσκευής, εκτελείται ένας αριθμός προσομοιώσεων που αντιστοιχεί σε συγκεκριμένες τιμές των σχεδιαστικών παραμέτρων. Οι επιλογή των τιμών των παραμέτρων γίνεται με τη βοήθεια μιας τεχνικής σχεδιασμού πειραμάτων (*Design of Experiments, DOE*). Οι τεχνικές *DOE* επιτρέπουν στο σχεδιαστή να εξάγει όσο το δυνατό περισσότερες πληροφορίες από έναν περιορισμένο αριθμό πειραμάτων [14]. Στην παρούσα μελέτη, όπου εξετάζονται τρεις σχεδιαστικές παράμετροι, ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός τριών επιπέδων (δηλαδή, τρεις τιμές για κάθε μεταβλητή) θα απαιτούσε 27 σχεδιαστικά σημεία (προσομοιώσεις). Χρησιμοποιώντας όμως μια τεχνική *DOE*, π.χ. τη μέθοδο *Box-Behnken*, ο αριθμός των προσομοιώσεων που απαιτούνται μειώνεται σε 13.

Στη συνέχεια εκτελείται μια σειρά πειραμάτων (ή, εν προκειμένω, αριθμητικών προσομοιώσεων) για την προκαθορισμένη ομάδα σχεδιαστικών σημείων, ώστε να σχεδιαστεί μια επιφάνεια απόκρισης για την μετρούμενη μεταβλητή, δηλαδή μια συνάρτηση $\eta(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, όπου $x_1, x_2, \ldots, x_n$ είναι οι σχεδιαστικές μεταβλητές που έχουν συγκεκριμένο πεδίο ορισμού. Όταν χρησιμοποιείται πολυώνυμο δευτέρου βαθμού η επιφάνεια απόκρισης δίνεται από την εξίσωση:

$$\eta = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j x_j + \sum_{j=1}^{n} a_{jj} x_j^2 + \sum\sum_{i \neq j}^{n} a_{ij} x_i x_j \qquad (2)$$

όπου a_{ii} είναι οι συντελεστές του πολυωνύμου, οι οποίοι προσδιορίζονται χρησιμοποιώντας τις τιμές της μετρούμενης μεταβλητής που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις για τη συγκεκριμένη ομάδα σχεδιαστικών σημείων. Η συνάρτηση αυτή, η, αναφέρεται επίσης και ως "τετραγωνικό μοντέλο" (*quadratic model*) [15]. Τα σχεδιαστικά σημεία που επιλέχθηκαν βάσει της τεχνικής σχεδιασμού κατά *Box-Behnken* παρουσιάζονται στον ***Πίνακα 1***.

Η βέλτιστη λύση, δηλαδή οι τιμές των παραμέτρων που αντιστοιχούν στην αποτελεσματικότερη ανάμιξη, μπορούν να προσδιορισθούν χρησιμοποιώντας τη Μεθοδολογία Επιφάνειας

Απόκρισης (*Response Surface Method*, *RSM*). Η μέθοδος αυτή συνδυάζει τεχνική σχεδιασμού πειραμάτων (*DOE*), ανάλυσης παλινδρόμησης (*regression analysis*) και ανάλυσης μεταβλητότητας (*analysis of variance*, *ANOVA*) [15].

2.3 Διαδικασία υπολογισμών με χρήση κώδικα CFD

Για την προσομοίωση της ροής χρησιμοποιείται ο κώδικας Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής *ANSYS CFX® 12.1*. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό της αποτελεσματικότητας της ανάμιξης στη μ-συσκευή. Στις προσομοιώσεις, ο κώδικας *CFD* χρησιμοποιεί μέθοδο σύγκλισης υψηλής ανάλυσης (*high resolution advection scheme*) για τη διακριτοποίηση των εξισώσεων ορμής, και τον αλγόριθμο *SIMPLE* για τη σύζευξη πίεσης-ταχύτητας [16].

Πίνακας 1: Σχεδιαστικά σημεία για τις προσομοιώσεις και οι αντίστοιχοι αριθμοί *Re*, K_1 και K_2

DOE#	D_1 *(mm)*	D_2 *(mm)*	*Re*	K_1	K_2
1	3.5	8	100	53.5	50.0
2	5.5	8	100	42.6	50.0
3	3.5	10	100	53.5	44.7
4	5.5	10	100	42.6	44.7
5	3.5	9	50	26.7	23.6
6	5.5	9	50	21.3	23.6
7	3.5	9	150	80.2	70.7
8	5.5	9	150	64.0	70.7
9	4.5	8	50	23.6	25.0
10	4.5	10	50	23.6	22.4
11	4.5	8	150	70.7	75.0
12	4.5	10	150	70.7	67.1
13	4.5	9	100	47.1	47.1

Οι προσομοιώσεις διεξάγονται σε συστοιχία υπολογιστών υψηλής απόδοσης (*high performance cluster*, *HPC*) για παράλληλη επεξεργασία, η οποία αποτελείται από δεκαοκτώ επεξεργαστές 64-bit και 16 GB RAM. Η συστοιχία τρέχει μια παραμετροποιημένη διανομή *Gentoo Linux* για βελτιστοποιημένη απόδοση. Για κάθε προσομοίωση κατασκευάζεται ένα υπολογιστικό μοντέλο της μ-συσκευής χρησιμοποιώντας τις παραμετρικές δυνατότητες του λογισμικού *ANSYS Workbench® 12.1*. Για να αποδοθεί αποτελεσματικά η πολύπλοκη γεωμετρία του καναλιού της μικροσυσκευής, το πλέγμα που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση προτιμάται να είναι μη-δομημένο. Η μελέτη της εξάρτησης της λύσης από την πυκνότητα του πλέγματος (*grid dependence study*) για κάθε ομάδα τιμών των σχεδιαστικών παραμέτρων, έδωσε τελικά μεγέθη πλεγμάτων από 130,000 έως 1,000,000 εξάεδρα κελιά. Μια λεπτομέρεια από ένα τυπικό πλέγμα παρουσιάζεται στο ***Σχήμα 3***. Λόγω του εύρους των αριθμών *Re* που εξετάζονται εφαρμόζεται απευθείας αριθμητική προσομοίωση (*Direct Numerical Simulation*, *DNS*) για όλες τις περιπτώσεις.

Αρχικά, κάθε προσομοίωση εκτελείται για μόνιμη κατάσταση μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση των ισοζυγίων μάζας και ορμής. Στη συνέχεια, τα άυλα σωματίδια θεωρούνται ότι εγχέοναι στη ροή τη χρήση μιας χρονικής συνάρτησης και η προσομοίωση επανεκτελείται σε μη-μόνιμη (*transient*) κατάσταση, χρησιμοποιώντας όμως ως αρχικές συνθήκες τα αποτελέσματα της αντίστοιχης προσομοίωσης σε μόνιμη κατάσταση. Η παρακολούθηση των σωματιδίων γίνεται

με τη μέθοδο ιχνηλάτισης κατά *Langrange*. Η αποτελεσματικότητα της ανάμιξης αξιολογείται από τη μορφή που έχει η συνάρτηση του χρόνου παραμονής (*RTD*) των σωματιδίων. Το χρονικό βήμα (*time step*) για κάθε προσομοίωση είναι κατάλληλα προσαρμοσμένο ώστε να περιορίσει τον απαραίτητο αριθμό βημάτων υπολογισμού που απαιτούνται στις χρονοβόρες προσομοιώσεις μη-μόνιμης κατάστασης. Σε κάθε χρονικό βήμα υπολογίζεται ο αριθμός των άυλων σωματιδίων, *C(t)*, που εξέρχονται της *μ*-συσκευής. Η συνάρτηση κατανομής του χρόνου παραμονής, *E(t)*, ορίζεται ως το ποσοστό των σωματιδίων που εξέρχονται από τον αγωγό και δίνεται από τη σχέση:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^\infty C(t)dt} \approx \frac{C(t_i)}{\sum_{i=0}^{\infty} C(t_i)\Delta t_i} \tag{3}$$

όπου Δt_i είναι το χρονικό βήμα που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις. Για την αποτελεσματικότερη σύγκριση της απόδοσης της ανάμιξης σε διαφορετικές γεωμετρίες ή/και συνθήκες ροής προτείνεται να χρησιμοποιείται μια ανηγμένη συνάρτηση, *E(θ)*, στη θέση της *E(t)* [10]. Οι δύο συναρτήσεις συσχετίζονται όπως φαίνεται στην ***Εξ.* (4)**:

$$E(\theta) = t_m E(t) \tag{4}$$

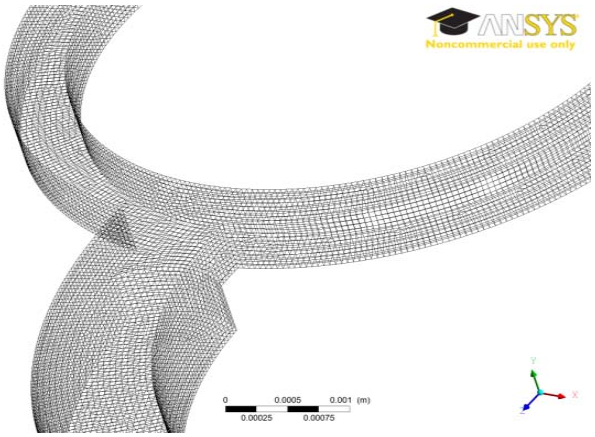
όπου t_m είναι ο μέσος χρόνος παραμονής:

$$t_m = \frac{\int_0^\infty tC(t)dt}{\int_0^\infty C(t)dt} \approx \frac{\sum_{i=0}^{\infty} t_i C(t_i)\Delta t_i}{\sum_{i=0}^{\infty} C(t_i)\Delta t_i} \tag{5}$$

και *θ* είναι ο αδιάστατος χρόνος:

$$\theta = t/t_m \tag{6}$$

Τελικά, συνδυάζοντας τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις *CFD*, οι καμπύλες της *E(θ)* ως προς *θ* κατασκευάζονται για όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν. Το σχήμα των καμπυλών *RTD* είναι ενδεικτικό της αποτελεσματικότητας της ανάμιξης. Συγκεκριμένα, η ύπαρξη οξείας κορυφής (**λεπτόκυρτη** κατανομή) υποδηλώνει **μικρό βαθμό** ανάμιξης, ενώ μία **πλατύκυρτη** κατανομή αντιστοιχεί σε **καλή ανάμιξη** [12].

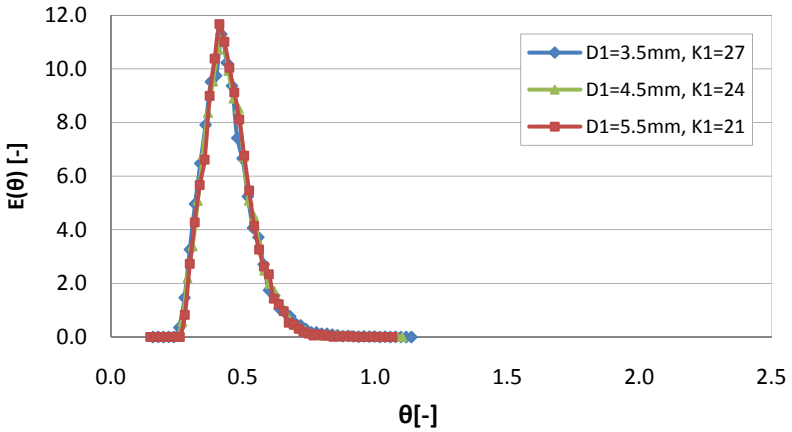


Σχήμα 3: Λεπτομέρεια ενός πλέγματος για τις προσομοιώσεις της *μ*-συσκευής.

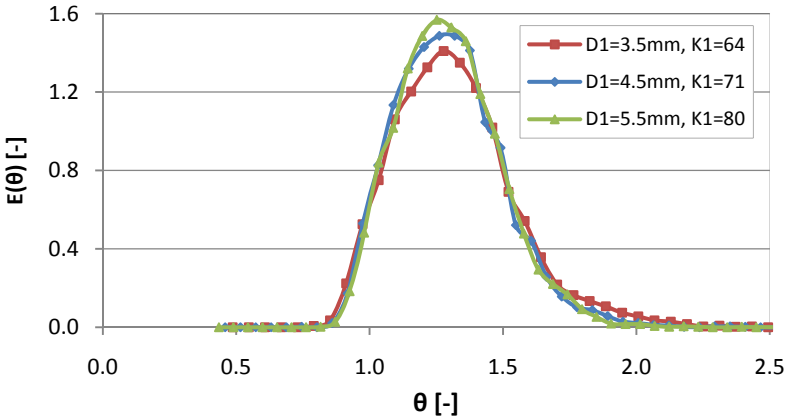
3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα μελέτη εξετάστηκε η επίδραση τριών σχεδιαστικών παραμέτρων – συγκεκριμένα, του αριθμού *Reynolds* (*Re*) καθώς και της καμπυλότητας των αγωγών, που εκφράζεται από τις διαμέτρους D_1 και D_2. Η επίδραση αυτών των παραμέτρων εκτιμήθηκε με τη διενέργεια σχετικών αριθμητικών προσομοιώσεων. Αν και ο αριθμός των προσομοιώσεων που υπαγορεύεται από την τεχνική σχεδιασμού πειραμάτων θεωρείται επαρκής για την εκτίμηση της μέγιστης τιμής της καμπύλης κατανομής *RTD*, διενεργήθηκαν ορισμένες συμπληρωματικές προσομοιώσεις για να καταστεί δυνατή μια καλύτερη σύγκριση και ευκολότερη εξήγηση των συμπερασμάτων που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις με τη χρήση τεχνικών *DOE*.

Στο ***Σχήμα 4*** παρουσιάζεται η επίδραση της D_1 (με άλλα λόγια, της καμπυλότητας) καθώς και του αριθμού Dean, K_1, του μικρού κυκλικού τομέα της μ-συσκευής, στο σχήμα των καμπυλών *RTD*. Είναι προφανές ότι το σχήμα της καμπύλης *RTD*, ή μ' άλλα λόγια η απόδοση της ανάμιξης πρακτικά δεν επηρεάζεται από την τιμή της D_1 δεδομένου ότι οι τιμές K_1 δεν διαφοροποιούνται σημαντικα ια τις τιμές του αριθμού *Re* που εξετάστηκαν. Ωστόσο, είναι φανερό ότι για *Re=150* (***Σχήμα 4β***) επιτυγχάνονται ελαφρώς καλύτερα αποτελέσματα, για τη μικρότερη τιμή του K_1 ή αντίστοιχα τη μεγαλύτερη καμπυλότητα του αγωγού (D_1=3.5 mm).



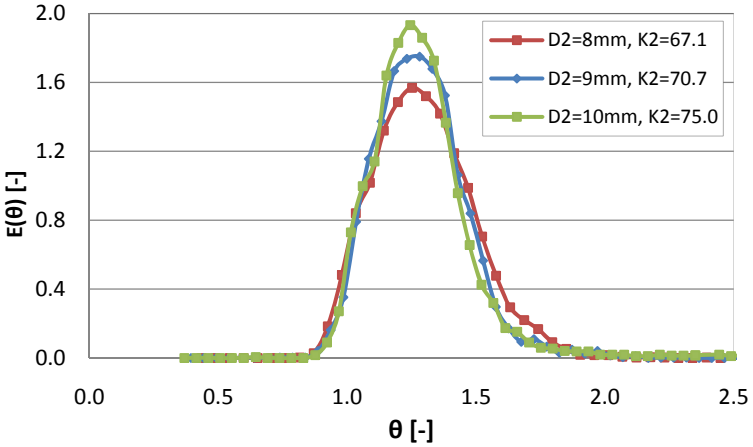
(α)



(β)

Σχήμα 4: Επίδραση της D_1 στην αποτελεσματικότητα της ανάμιξης για D_2=8mm. α) *Re*=50, K_2=25, β) *Re*=150, K_2=75.

Η επίδραση της D_2, δηλαδή της καμπυλότητας του μεγαλύτερου ημικυκλικού τμήματος, απεικονίζεται στο ***Σχήμα 5*** για *Re=150* και $K_1=64$ και για τρεις τιμές της D_2 (ή K_2). Είναι προφανές ότι η ανάμιξη ενισχύεται για D_2=8 mm, όταν δηλαδή το μικρό κυκλικό τμήμα έχει τη μεγαλύτερη καμπυλότητα – ή αντίστοιχα, τη μικρότερη τιμή του K_2.



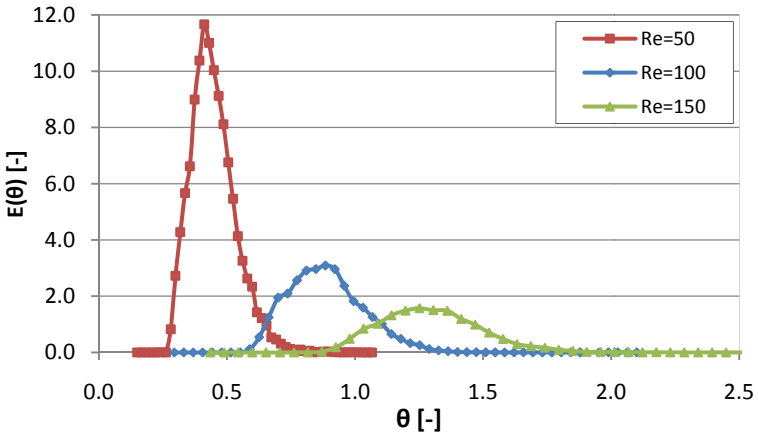
Σχήμα 5: Επίδραση της D_2 στην αποτελεσματικότητα της ανάμιξης (D_1=5.5 mm, *Re*=150).

Τέλος, η επίδραση του αριθμού *Re* στην απόδοση της ανάμιξης παρουσιάζεται στο ***Σχήμα 6***. Υπενθυμίζεται ότι μια καμπύλη με χαμηλή κορυφή – δηλαδή, μικρή τιμή της $E_p(\theta)$ – υποδηλώνει καλύτερη ανάμιξη. Είναι προφανές ότι η καμπύλη *RTD* γίνεται πλατύκυρτη καθώς αυξάνεται ο αριθμός *Re*, υποδεικνύοντας ότι έχει επιτευχθεί βελτίωση της ανάμιξης, παρότι για το ίδιο μήκος διαδρομής ο χρόνος επαφής μεταξύ των υγρών μικραίνει όταν αυξάνεται ο *Re*. Σε αυτή την περίπτωση, η βελτίωση της ανάμιξης αποδίδεται στην εμφάνιση εγκάρσιας δευτερεύουσας ροής που προκαλείται από την αύξηση του αριθμού *Re*. Τυπικές αναπαραστάσεις του πρότυπου ροής σε συγκεκριμένες περιοχές του μ-καναλιού δίδονται στο ***Σχήμα 7*** με τη μορφή επίπεδων ροϊκών γραμμών για δύο τιμές του αριθμού *Re*.

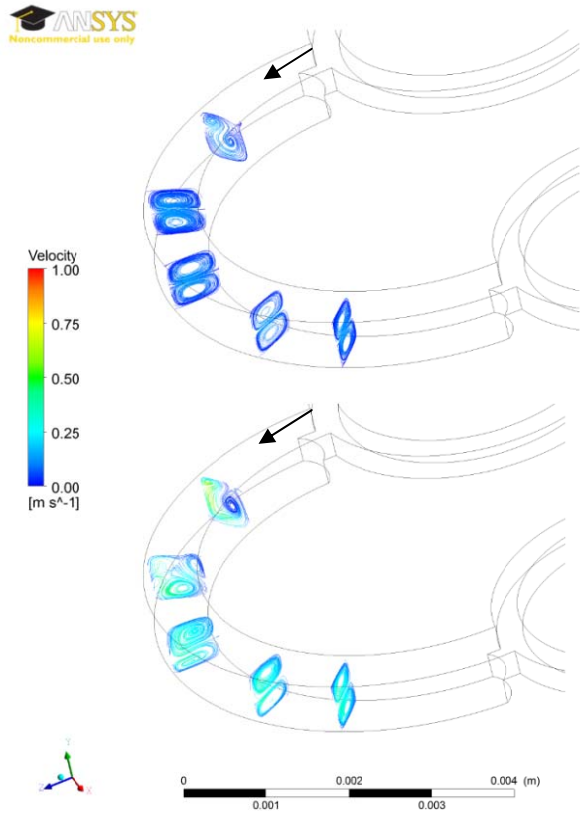
Είναι γνωστό ότι σε καμπύλους αγωγούς δημιουργούνται δευτερεύουσες ροές λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ φυγόκεντρων και των ιξωδών δυνάμεων. Ωστόσο, αυτές οι δευτερεύουσες ροές στις χαμηλές ταχύτητες αποσβένυνται γρήγορα, καθώς η φυγόκεντρος δύναμη είναι τετραγωνική συνάρτηση, ενώ οι ιξώδεις δυνάμεις γραμμική συνάρτηση της μέσης ταχύτητας του ρευστού. Έτσι, η αύξηση του αριθμού *Re* προκαλεί έντονες φυγόκεντρες δυνάμεις οι οποίες με τη σειρά τους οδηγούν στη δημιουργία δευτερευουσών ροών που οδηγούν σε αύξηση της διεπιφάνειας μεταξύ των ρευστών και ενίσχυση της ανάμιξης [17]. Τυπικά πρότυπα ροής παρουσιάζονται στο ***Σχήμα 7*** για *Re=150* και *Re=50*. Για την υψηλότερη τιμή του αριθμού *Re* που εξετάστηκε (*Re=150*) παρατηρείται σχηματισμός εντονότερων δινών, οι οποίες προάγουν την ανάμιξη.

Η μέγιστη τιμή της καμπύλης *RTD* μπορεί να υπολογιστεί μέσω της εξίσωσης επιφάνειας απόκρισης που παρουσιάζεται στην ***Εξ.* (2)**. Χρησιμοποιώντας δεδομένα από τις προσομοιώσεις *CFD* και το κατάλληλο στατιστικό πακέτο (π.χ., *Minitab 15*) υπολογίστηκαν οι συντελεστές του μοντέλου και διατυπώθηκε ένα πολυωνυμικό μοντέλο δευτέρου βαθμού (***Εξ.* (7)**) που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη των μέγιστων τιμών της καμπύλης *RTD*.

$$E_p(\theta) = a_0 + a_1 D_1 + a_2 D_2 + a_3 Re + a_{11} D_1^2 + a_{22} D_2^2 + a_{33} Re^2 + a_{12} D_1 D_2 + a_{13} D_1 Re + a_{23} D_2 Re \qquad (7)$$



Σχήμα 6: Επίδραση του *Re* στην αποτελεσματικότητα της ανάμιξης για D_1=5.5 mm και D_2=8.0 mm.



(*α*)

(*β*)

Σχήμα 7: Ροϊκές γραμμές μέσα στο ημι-κυκλικό τμήμα της μ-συσκευής: α) *Re*=50, β) *Re*=150. D_1=5.5mm, D_2=9mm.

Οι συντελεστές του μοντέλου δίνονται στον ***Πίνακα 2***. Η ***Εξ.* (7)** προβλέπει την τιμή του $E_p(\theta)$ με αβεβαιότητα ±5% (***Σχήμα 8α***). Σημειώνεται ότι τα αποτελέσματα των συμπληρωματικών προσομοιώσεων *CFD* που διεξήχθησαν συμφωνούν ικανοποιητικά με τις προβλέψεις του μοντέλου (***Εξ.* (7)**). Οι τιμές των σχεδιαστικών παραμέτρων που αντιστοιχούν στην περίπτωση της βέλτιστης ανάμιξης υπολογίστηκαν ελαχιστοποιώντας την ***Εξ.* (7)**. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον ***Πίνακα 3***.

Πίνακας 2: Συντελεστές του πολυωνυμικού μοντέλου για την πρόβλεψη της μέγιστης $E(\theta)$.

α_0	25.4770	α_{22}	-0.024127
α_1	-0.531248	α_{33}	0.001217
α_2	-0.113548	α_{12}	0.157850
α_3	-0.331695	α_{13}	-0.001158
α_{11}	-0.065975	α_{23}	-0.000294

Πίνακας 3: Τιμές των σχεδιαστικών παραμέτρων που αντιστοιχούν στη βέλτιστη ανάμιξη, καθώς και οι αντίστοιχες τιμές για $E(\theta)$ και ΔP.

D_1, *mm*	5.5
D_2, *mm*	8.0
Re	150
$E(\theta)$	1.57
ΔP, *Pa*	1791

Η πτώση πίεσης (ΔP) κατά μήκος του καναλιού, η οποία είναι πολύ σημαντική για το βέλτιστο σχεδιασμό της συσκευής, μπορεί να υπολογισθεί από την ***Εξ.* (8)**, η οποία προέκυψε από τα αποτελέσματα του κώδικα *CFD* χρησιμοποιώντας την ίδια τεχνική όπως και για την ***Εξ.* (7).**

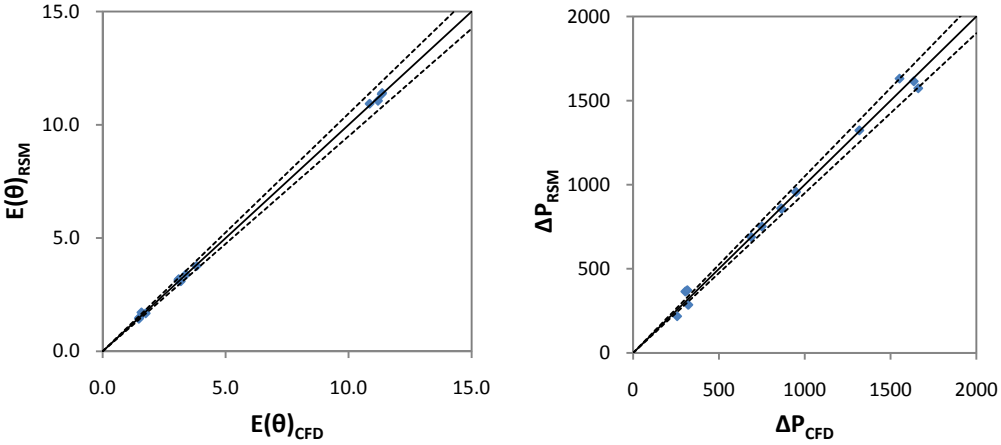
$$\Delta P = \beta_0 + \beta_1 D_1 + \beta_2 D_2 + \beta_3 Re + \beta_{11} D_1^2 + \beta_{22} D_2^2 + \beta_{33} Re^2 + \beta_{12} D_1 D_2 + \beta_{13} D_1 Re + \beta_{23} D_2 Re \qquad (8)$$

Οι συντελεστές του μοντέλου δίνονται στον ***Πίνακα 4***. Η ***Εξ.* (8)** προβλέπει την ΔP με αβεβαιότητα της τάξης του ±5% (***Σχήμα 8β***).

Στον ***Πίνακα 5*** παρουσιάζεται η πτώση πίεσης που αντιστοιχεί στο πάνω και κάτω όριο του εύρους τιμών των σχεδιαστικών παραμέτρων. Όπως ήταν αναμενόμενο, ο αριθμός *Re* παίζει τον σημαντικότερο ρόλο στην απαιτούμενη αντλητική ισχύ Από την άλλη πλευρά, οι D_1 και D_2 έχουν μικρότερη επίδραση στην πτώση πίεσης. Σε σύγκριση με τις τιμές που παρουσιάζονται στον ***Πίνακα 4***, αν η D_2 αυξάνονταν στο μέγιστο της τιμής της (D_2=10 mm) ενώ οι άλλες δύο σχεδιαστικές παράμετροι διατηρούν τις βέλτιστες τιμές τους, η ΔP μειώνεται κατά περίπου 10%, αλλά συγχρόνως μειώνεται δραστικά η απόδοση της ανάμιξης. Οι ***Εξ.* (7)** και ***Εξ.* (8)** μπορούν να βοηθήσουν το σχεδιαστή τέτοιων συσκευών να επιλέξει τις βέλτιστες τιμές των παραμέτρων για δεδομένη εφαρμογή λαμβάνοντας υπόψη αφενός το βαθμό ανάμιξης (ή αντίστοιχα την απόδοση της αντίδρασης) και αφετέρου το κόστος άντλησης.

Πίνακας 4: Συντελεστές του πολυωνυμικού μοντέλου για την πρόβλεψη της ΔP.

β_0	-235.896	β_{22}	37.52778
β_1	1048.667	β_{33}	0.03501
β_2	-479.417	β_{12}	-39.91670
β_3	2.085	β_{13}	1.19833
β_{11}	-79.472	β_{23}	-0.24833



(α) *(β)*

Σχήμα 8: Σύγκριση των αποτελεσμάτων του κώδικα *CFD* με την προβλεπόμενες τιμές των πολυωνυμικών μοντέλων α) $E(\theta)$ και β) ΔP.

Πίνακας 5: Τιμές της πτώσης πίεσης για τις οριακές περιπτώσεις.

Re	D_1=3.5 mm		D_1=5.5 mm	
	D_2=8.0 mm	D_2=10.0 mm	D_2=8.0 mm	D_2=10.0 mm
50	252	279	327	345
150	1303	1368	1571	1791

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σε αυτή την εργασία εξετάστηκε ένας πρότυπος μ-αντιδραστήρας που συνδυάζει καμπύλους αγωγούς και τεχνικές διαχωρισμού και επανασύνδεσης της ροής. Δεδομένου ότι σε ένα παθητικό μ-αντιδραστήρα ο ρυθμός της αντίδρασης γενικά επηρεάζεται σημαντικά από την έκταση της ανάμιξης, η επίδραση σχεδιαστικών παραμέτρων, όπως ο αριθμός *Re* και η καμπυλότητα του καναλιού διερευνάται με τη διενέργεια προσομοιώσεων υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (*CFD*). Η υψηλότερη απόδοση ανάμιξης παρατηρείται όταν τόσο το μικρότερο όσο και το μεγαλύτερο κυκλικό τμήμα έχουν την μεγαλύτερη καμπυλότητα - δηλαδή τη μικρότερη διάμετρο. Πιο συγκεκριμένα, η απόδοση της ανάμιξης επηρεάζεται περισσότερο από την καμπυλό-

τητα του μεγαλύτερου ημικυκλικού τμήματος του αγωγού. Όπως ήταν αναμενόμενο η αύξηση της ταχύτητας - και της τιμής του *Re* αντίστοιχα - βελτιώνει την απόδοση της ανάμιξης παρά το μικρότερο χρόνο παραμονής των ρευστών. Ωστόσο, η αύξηση της ταχύτητας συνοδεύεται αναπόφευκτα από αύξηση της πτώσης πίεσης, γεγονός που πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά τη βελτιστοποίηση του συστήματος.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] Hessel V., Löwe H., Schönfeld F., Micromixers—a review on passive and active mixing principles, *Chem Eng Sci* **60**:8-9 (2005) pp.2479-2501.

[2] Gavriilidis A., Angeli P., Cao E., Yeong K., Wan Y., Technology and applications of microengineered reactors, *Chem Eng Res Des* **80**:1 (2002) pp.3-30.

[3] Nguyen N. T. and Wu Z., Micromixers—a review, *J Micromech Microeng* **15** (2005).

[4] Hardt S., Drese K., Hessel V., Schönfeld F., Passive micromixers for applications in the microreactor and μ-TAS fields Microfluid, *Microfluid Nanofluid* **1** (2005) pp.108-118.

[5] Mansur E. A., Ye M., Wang Y., Dai Y., A state-of-the-art review of mixing in microfluidic mixers, *Chinese J Chem Eng* **16**:4 (2008) pp.503-516.

[6] Jeon W. and Shin C. B., Design and simulation of passive mixing in microfluidic systems with geometric variations, *Chem Eng J* **152**:2-3 (2009) pp.575-582.

[7] Baier T., Drese K. S., Schönfeld F., Schwab U., A μ-Fluidic Mixing Network, *Chem Eng Res Des* **28**:3 (2005) pp.362-366.

[8] Jiang F., Drese K., Hardt S., Küpper M., Schönfeld F., Helical flows and chaotic mixing in curved micro channels, *AIChE J* **50**:9 (2004) pp.2297-2305.

[9] Mouza A., Patsa C. M., Schönfeld F., Mixing performance of a chaotic micro-mixer, *Chem Eng Res Des* **86**:10 (2008) pp.1128-1134.

[10] Adeosun J. T. and Lawal A., Numerical and experimental studies of mixing characteristics in a T-junction microchannel using residence-time distribution, *Chem Eng Sci* **64**:10 (2009) pp.2422-2432.

[11] Aoki N., Hasebe S., Mae K., Mixing in microreactors: effectiveness of lamination segments as a form of feed on product distribution for multiple reactions, *Chem Eng J* **101**:1-3 (2004) pp.323-331.

[12] Cantu-Perez A., Bi S., Barrass S., Wood M., Gavriilidis A., "Residence Time Distributions in Laminated Microstructured Plate Reactors," *2nd Micro and Nano Flows Conf.* (2009).

[13] Sudarsan A. P. and Ugaz V. M., Fluid mixing in planar spiral microchannels, *Lab Chip* **6**:1 (2006) pp.74-82.

[14] Box G. E. P., Hunter J. S., Hunter W. G., *Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery*: Wiley-Interscience New York, 2005.

[15] Montgomery D. C. and Myers R. H., *Response surface methodology: Process and product optimization using designed experiments*: J. Wiley, 2002.

[16] ANSYS, "ANSYS® CFD® Release 12.1". 2010.

[17] Schönfeld F. and Hardt S., Simulation of helical flows in microchannels, *AiChE J* **50**:4 (2004) pp.771-778.