

# Mehrkomponenten-Gasdynamik in mikroporösen Medien

In vielen technischen Anwendungen stellen Membranen oder poröse Feststoffe ein gezieltes Hindernis für den Transport von Gasen dar. In der chemischen Technik sollen sie zudem eine große spezifische Kontaktfläche zwischen Gas und Feststoff ermöglichen. Die Miniaturisierung bestehender Prozesse in der Mikroverfahrenstechnik, das Streben nach Effizienzsteigerung in der chemischen Technik oder die Weiterentwicklung von Gassensoren erhöhen ständig den Anspruch an die mathematischen Modelle zur Beschreibung der komplexen physikalischen Vorgänge in Mikrostrukturen. Denn nur so können die Produktentwicklungsprozesse durch numerische Simulationen gezielt unterstützt werden.

Gasbewegungen im Inneren mikroporöser Medien oder in Mikrokanälen sind geprägt von den sehr kleinen Abmessungen der Transportöffnungen und dem daraus resultierenden stark erhöhten Wandeinfluss. Unterschreiten die Abmessungen der Poren oder Kanäle zudem die mittlere freie Weglänge der Moleküle, sind die konventionellen Grundgleichungen der Fluidodynamik nur noch eingeschränkt gültig. Die Herausforderung liegt hier darin, die Gesetze der Gasbewegung im so genannten Knudsenbereich so in ein aerodynamisches Modell zu integrieren, dass auch der Übergangsbereich zwischen makroskopischen und mikroskopischen Strömungsformen richtig vorhergesagt wird.

In Gemischen mehrerer Gase muss die gegenseitige Beeinflussung der Gaskomponenten ebenso berücksichtigt werden wie die Tatsache, dass neben Druckunterschieden auch Konzentrationsdifferenzen eine Bewegung verursachen können. Oft stellt ein poröses Medium eine Reaktionszone dar oder grenzt die Reaktionszone gegenüber der Umgebung ab. In diesen Fällen beeinflussen sich die ablaufenden chemischen Reaktionen und die Transportprozesse gegenseitig und können nicht unabhängig voneinander untersucht werden. Einen weiteren Aspekt stellen instationäre Vorgänge dar. Überall dort, wo eine Anwendung zeitlich veränderlichen Bedingungen ausgesetzt ist, muss die Zeitabhängigkeit der Transport- und Umwandlungsprozesse ebenfalls durch das Modell wiedergegeben werden können.

Letztlich ist es das Ziel, alle relevanten physikalischen und chemischen Prozesse in einem einzigen Simulationswerkzeug zu berücksichtigen. Dies führt zu einer simultanen Lösung der die Prozesse beschreibenden, stark gekoppelten partiellen Differentialgleichungen mit Hilfe geeigneter numerischer Verfahren.