

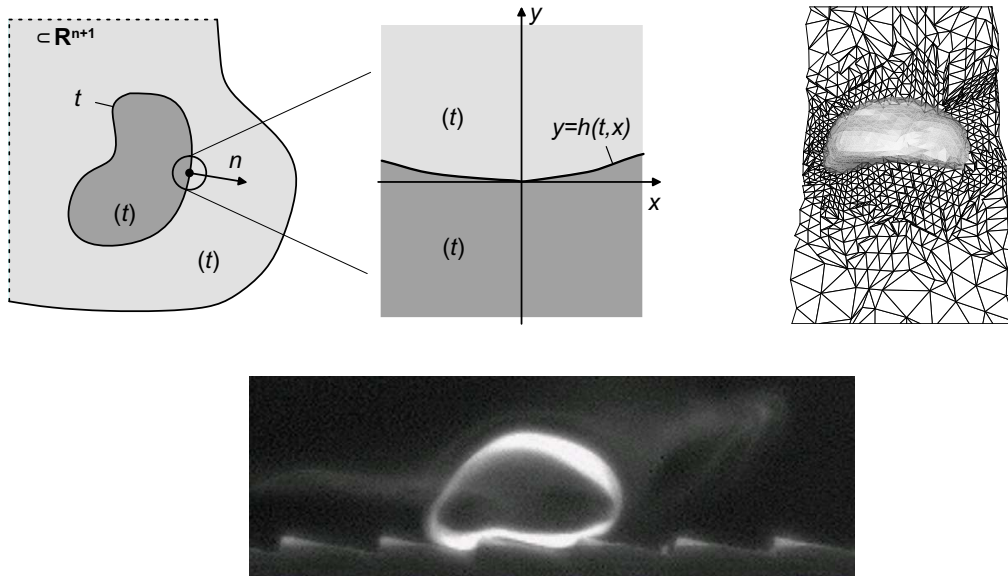
Antrag auf Einrichtung eines Schwerpunktprogramms

Transportprozesse an fluiden Grenzflächen

Kurztitel: Fluide Grenzflächen

Initiiert und eingereicht von

H. Abels (Mathematik), MPI Leipzig
E. Bänsch (Mathematik), Universität Erlangen-Nürnberg
D. Bothe (Mathematik), RWTH Aachen
S. Hardt (Prozesstechnik), Universität Hannover
R. Miller (Grenzflächenchemie), MPI Potsdam
A. Reusken (Mathematik), RWTH Aachen
M. Wörner (Verfahrenstechnik), KIT



Thema: Entwicklung und Analyse valider Modelle sowie genauer und effizienter numerischer Verfahren zur Durchdringung komplexer Grenzflächenphänomene

Koordinatoren:

D. Bothe, A. Reusken, RWTH Aachen

Aachen, den 14. November 2008

1 Zusammenfassung

In mehrphasigen Prozessen ist die Phasengrenzfläche als das den Kontakt der Bulkphasen vermittelnde Interface von herausragender Bedeutung für die Effektivität und Effizienz dieser Prozesse. Dabei spielen *geometrische Eigenschaften* der Grenzfläche wie Lage und Form (Krümmung), *physikalische Eigenschaften* wie (variable) Grenzflächenspannung und Grenzflächenviskositäten sowie *physiko-chemische* Eigenschaften aufgrund adsorbierter Spezies eine wesentliche Rolle. Zur Intensivierung solcher Prozesse ist ein tiefergehendes Verständnis notwendig, das über eine qualitative Beschreibung deutlich hinausgeht. Dazu sind *die verwendeten Modelle* hinsichtlich der eingebauten physiko-chemischen Phänomene *zu erweitern und zu verbessern* (“multiphase” und “multiphysics”), hinsichtlich ihrer *mathematischen Eigenschaften zu analysieren, numerisch zu lösen* und in ihrem *Gültigkeitsbereich (qualitativ und quantitativ) abzuschätzen*. Dazu sind neue Methoden zu entwickeln und zu erforschen. Die Bedeutung dieser Arbeiten beruht insbesondere auch darauf, dass eine messtechnische Erfassung der Transport- und Transformationsprozesse direkt an der Phasengrenzfläche unter echten Prozessbedingungen in der Regel nicht ausreichend möglich ist. Obwohl Mehrphasenströmungen schon seit langem Gegenstand experimenteller und numerischer Untersuchungen sind, sind viele fundamentale Fragen und Probleme der Modellierung, Analysis und Simulation offen. Die bisher gewonnenen experimentellen, numerischen und mathematisch-analytischen Resultate liefern erste Einblicke, bedürfen aber einer systematischeren Gesamtbetrachtung und einer gemeinsamen Weiterentwicklung. An dieser Stelle setzt das vorliegende Vorhaben zum Thema

Entwicklung und Analyse valider Modelle sowie genauer und effizienter numerischer Verfahren zur Durchdringung der sehr komplexen Grenzflächenphänomene

an. Dabei sollen insbesondere

- a) zusätzliche physikalische und physiko-chemische Phänomene modellmäßig erfasst und numerisch behandelt werden,
- b) über mathematische Analysen mehr Verständnis für die auftretenden Modelle und dadurch für die modellierten Prozesse und die wirksamen Mechanismen erzielt werden,
- c) über mathematische Analysen mehr Rigorosität in die Simulation von Zweiphasenströmungen eingebracht werden.

Diese Aufgabenstellungen liegen an den Schnittstellen zwischen Modellierung, Analysis und Numerik. Die angestrebten Ziele können nur durch eine überregionale, interdisziplinäre Zusammenarbeit anerkannter Experten auf den Gebieten Mathematische Modellierung, Analysis und Numerik sowie der Grenzflächenchemie und -physik und der Verfahrenstechnik erreicht werden. Dies kann unserer Meinung nach derzeit nur im Rahmen eines Schwerpunktprogramms sinnvoll angegangen werden, da eine derartige Breite zum Beispiel in einer Forschergruppe nicht zu erreichen ist. Hintergründe dieser *gerade jetzt* entstandenen Initiative sind einerseits neue bzw. in den letzten Jahren stark weiterentwickelte mathematische Methoden sowohl der Analysis als auch der Numerik zur Behandlung partieller Differentialgleichungen mit freien Rändern, gekoppelt mit zusätzlichen Transport- und Transformationsprozessen an der freien Phasengrenze und andererseits die in neuen Anwendungsfeldern wie etwa Mikroverfahrenstechnik im Vergleich zu klassischen Ingenieurprozessen nochmals enorm gesteigerte Bedeutung der Prozesse an und auf den Phasengrenzflächen.

Von den *grundlagenorientierten* Forschungsarbeiten zur Realisierung der für die Laufzeit des Schwerpunktprogramms angestrebten Ziele werden längerfristig kräftige Impulse in Richtung zukunftssträchtiger Anwendungsgebiete z.B. innerhalb der Mikroverfahrenstechnik, der Mikrofluidik und den Materialwissenschaften ausgehen.

2 Wissenschaftliches Programm

2.1 Einführung

Transportprozesse an fluiden Grenzflächen bilden die Grundlage vieler wichtiger Prozesse in Natur und Technik wie z.B. tropfendynamische Prozesse in Wolken, Transportprozesse an Zellmembranen, Grundoperationen der Verfahrenstechnik wie Extraktion, Destillation und Rektifikation, Dispergieren und Emulgieren, physikalische oder chemische Absorption, Kondensations- und Adsorptionsprozesse. Technische und ingenieurwissenschaftliche Anwendungen reichen hierbei von Drop-on-Demand-Systemen wie z.B. Tintenstrahldruckern über Beschichtungstechniken zur Oberflächenvergütung, Spin-Coating, Verbrennungsmotoren, Gasturbinen, Sprühverfahren, chemischen und biochemischen Prozessen in Blasensäulen und Bioreaktoren bis hin zu Mehrphasenströmungen in Pipelines, um nur einige zu nennen. Stofftransport über Phasengrenzen hinweg spielt neben technischen Anwendungen z.B. auch bei der Aufreinigung von Proteinen eine entscheidende Rolle, indem man Unterschiede im Partitionierungskoeffizienten in wässrigen Zweiphasensystemen ausnutzt [60].

In den genannten Prozessen ist die Phasengrenzfläche als das den Kontakt der Bulkphasen vermittelnde Interface stets von herausragender Bedeutung für die Effektivität und Effizienz. Die Bedeutung der Grenzflächen steigt mit zunehmender spezifischer Fläche, d.h. mit dem Anteil an Grenzfläche pro Volumen. Daher kommt auf kleinen Längenskalen dem Einfluss der Grenzflächen eine noch größere Bedeutung zu. Dies ist insbesondere für die Mikroverfahrenstechnik relevant, in der Mikroreaktoren genutzt werden, um aufgrund ihrer guten Stoff- und Wärmeübertragungseigenschaften ein- und mehrphasige Prozesse signifikant zu intensivieren [39], [43].

Als Ausblick auf neue Anwendungen sei die Belegung fluider Grenzflächen mit Nanopartikeln als Grundlage für neue Entwicklungen im Bereich der Materialwissenschaften genannt. Speziell erscheinen solche Anwendungen sehr viel versprechend, in denen adsorbierte Nanopartikel als Ausgangspunkt für neuartige nanostrukturierte Materialien dienen [14, 75]. Die Modellierung von mit Nanopartikeln belegten fluiden Grenzflächen steht allerdings noch ganz am Anfang und stellt eine spannende Herausforderung dar, die nur in interdisziplinärer Kooperation bewältigt werden kann. Ähnliches gilt auch für die besonders in den letzten Jahren stark vorangeschrittene mathematische Modellierung biologischer Zellen als fluide Partikel [67].

2.2 Thematik des Schwerpunktprogramms

Die Weiterentwicklung und Optimierung mehrphasiger Prozesse erfordert ein tiefgehendes und auch quantitatives Verständnis insbesondere des grenzflächennahen Transports. Hierzu werden Methoden und Werkzeuge des Computational Fluid Dynamics (CFD) eingesetzt. In zwei- oder mehrphasigen fluiden Systemen liegt die Hauptschwierigkeit hier in der Behandlung der Phasengrenzfläche und der dort ablaufenden Teilprozesse. Die Schwierigkeit liegt wesentlich darin begründet, dass die Grenzfläche in Form und Lage frei ist und damit bei der Lösung mit bestimmt werden muss. Dennoch wurden in der letzten Dekade zunehmend komplexe Systeme mit CFD-Methoden untersucht: aufbauend auf Front- und Volume-Tracking Verfahren wurden und werden vielfältige Zwei- und Mehrphasenströmungen, Systeme mit Wärme- und Stofftransfer, durch thermische oder chemische Marangoni-Effekte getriebene Strömungen, Systeme mit Phasenwechsel wie Erstarrungs- und Verdampfungsprozesse etc. simuliert. Dies kann interessante und wichtige Einblicke liefern, setzt aber valide Modelle sowie genaue und effiziente numerische Verfahren voraus. Hier soll das beantragte Schwerpunktprogramm ansetzen, indem die dringend erforderliche Rigorosität mathematischer Vorgehensweisen in die Bereiche Modellbildung, Analysis und Numerik der lokalen Prozesse an fluiden Grenzflächen eingebracht wird. Experimentelle Arbeiten sind insoweit mit hinzuzunehmen, wie dies der Modellierung und der Validierung der numerischen Simulationen dient. Die Durchdringung der sehr komplizierten Grenzflächenphäno-

mene erfordert die Zusammenarbeit von Ingenieuren, Physikern und Mathematikern.

Die Darstellung des Themas und der Struktur des Programms basieren auf folgender Aufteilung der grundlegenden Phänomene bei Grenzflächenströmungen:

(i) *Hydrodynamik von Zweiphasenströmungen.*

In Mehrphasenströmungen bestimmt die Hydrodynamik die Verteilung der fluiden Phasen, was alle weiteren Transportvorgänge entscheidend beeinflusst. Die mathematische Modellierung basiert auf den Bilanzgleichungen für Masse und Impuls.

An Phasengrenzflächen treten zusätzlich folgende Phänomene auf:

(ii) *Stoff- und Wärmeübergang.*

Strömungen transportieren weitere skalare Größen, etwa Temperatur oder (molare) Konzentrationen. In mehrphasigen Systemen kommt es dabei zum Austausch zwischen den Phasen, d.h. zum Transfer dieser Größen über die Phasengrenzfläche. Als Abgrenzung zum Phasenübergang (weiter unten) wird bei reinem Stoff- oder Wärmeübergang der Austausch von Masse und Impuls vernachlässigt.

(iii) *Marangoni-Effekte und Transport auf der Phasengrenze.*

Lokale Gradienten der Grenzflächenspannung bewirken Kapillarspannungen, die Marangoni-Konvektion entlang der Grenzfläche auslösen können. Dieser Effekt kann so stark ausgeprägt sein, dass er die gesamte Strömungsdynamik dominiert; siehe z.B. [54]. Veränderungen der Grenzflächenspannung werden hierbei durch thermische Effekte oder durch grenzflächenaktive Substanzen (Surfactants) verursacht.

(iv) *Phasenübergang.*

Phasenübergang ist dadurch charakterisiert, dass Masse über die Grenzfläche hinweg transferiert wird. Dies resultiert in einer Normalgeschwindigkeit der Phasengrenze, die verschieden von denen der anliegenden Bulkphasen ist.

Die Struktur des Antrags hinsichtlich des Stands des Wissens und des Arbeitsprogramms richtet sich nach dieser Aufteilung in die Phänomene (i)-(iv). Dabei sollen Fragenkomplexe aus folgenden Gebieten angegangen werden:

- Modellierung/Analysis: Weiterentwicklung und Analyse von Modellen mit scharfer oder diffuser Phasengrenze und deren Zusammenhänge, Modellierung von Marangoni-Effekten, Modelle für Phasenübergänge in fluiden Systemen, Analysis mathematischer Modelle für Transportprozesse an fluiden Phasengrenzen hinsichtlich Wohlgestelltheit, Stabilität, qualitative Eigenschaften, Charakterisierung von Grenzflächeninstabilitäten, etc.
- Numerische Simulation: Entwicklung und Analyse numerischer Verfahren zur Behandlung inkompressibler Zweiphasenströmungen, z.B. Verfahren zur Diskretisierung der Kapillarkräfte, Verfahren zur numerischen Behandlung von Transportgleichungen auf bewegten Phasengrenzen, Diskretisierungsmethoden für Wärme- und Stofftransportprozesse über Phasengrenzen, adaptive Methoden, effiziente Zeitintegrationsmethoden.
- Experimente zur Validierung der Simulationen und als Input für die Modellierung. Insbesondere soll ein mehrstufiges Experiment mit Taylor-Blasen in einem Mikrokanal als Leitmaßnahme zum Einsatz kommen.

2.3 Stand der Forschung

Die Angaben zum Wissensstand folgen der Aufteilung von oben. Die aufgeführten Modelle haben exemplarischen Charakter, da die Modellierung insbesondere der Bedingungen an der Phasengrenzfläche nicht abgeschlossen ist. Vorarbeiten der Antragsteller sind in die Darstellung eingearbeitet, wobei entsprechende Literaturverweise fettgedruckt sind.

(i) Hydrodynamik von Zweiphasenströmungen

Modellierung/Analysis. Das kontinuumsmechanische Modell für Zweiphasenströmungen mit *scharfer* Phasengrenzfläche führt im einfachsten Fall dichtebeständiger Newton'scher Fluide auf die zweiphasigen Navier-Stokes-Gleichungen. Diese lauten

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{S}) = \rho \mathbf{g} \quad (1)$$

mit dem Spannungstensor

$$\mathbf{S} = -p \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D}, \quad \mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top).$$

Die Gleichungen gelten in $\Omega_+(t) \cup \Omega_-(t)$, wobei $\Omega_\pm(t)$ diejenigen Teilgebiete bezeichnen, die zur Zeit t von einem der Fluide ausgefüllt sind. Die Dichte ρ und Viskosität μ hängen von der jeweiligen Phase ab, z.B. $\rho = \rho_+$ in $\Omega_+(t)$ und $\rho = \rho_-$ in $\Omega_-(t)$. Die beiden Phasen werden durch eine freie Phasengrenzfläche $\Sigma(t)$ getrennt, an der mindestens einer der Stoffparameter eine Sprungunstetigkeit besitzt. An dieser Phasengrenze gelten die Sprungbedingungen (oder Transmissionsbedingungen)

$$[[\rho(\mathbf{u} - \mathbf{u}_\Sigma)]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0, \quad [[\rho \mathbf{u} \otimes (\mathbf{u} - \mathbf{u}_\Sigma) - \mathbf{S}]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma + \nabla_\Sigma \sigma. \quad (2)$$

Darin bezeichnet \mathbf{u}_Σ die Phasengrenzgeschwindigkeit, $\nabla_\Sigma \sigma$ den Grenzflächengradienten der Oberflächenspannung σ und $\kappa = -\operatorname{div}_\Sigma \mathbf{n}_\Sigma$ ist die Summe der (lokalen) Hauptkrümmungen von Σ . Dabei ist \mathbf{n}_Σ das Einheitsnormalenfeld auf der Phasengrenze mit einer fest gewählten (beliebigen) Orientierung. Die Notation $[[\phi]]$ steht für den Sprung einer physikalischen Größe beim Durchgang durch die Grenzfläche. Ohne Phasenübergang und ohne tangentialen Schlupf an der Phasengrenze vereinfachen sich die Sprungbedingungen zu

$$[[\mathbf{u}]] = 0, \quad [[-\mathbf{S}]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma + \nabla_\Sigma \sigma. \quad (3)$$

Dieses Modell ist grundlegend für alle weiteren Transportprozesse an den Phasengrenzen, da diese in der Regel durch Überlagerung von konvektivem und molekularem Anteil entstehen.

Die zweiphasigen Navier-Stokes Gleichungen mit Grenzflächenspannung sind mathematisch in [22–24, 77, 78] studiert worden. Dort wurde die Existenz von Lösungen für kleine Zeiten bei glatten Anfangsdaten sowie globale Existenz für Anfangsdaten nahe einem Equilibrium bewiesen. Stabilität von sphärischen Tropfen für eine Zweiphasenströmung ist nicht bekannt. (Im Fall, dass die zweite Phase ein Vakuum ist, siehe z.B. [73].) Für allgemeine Anfangskonfigurationen kann aufgrund möglicher Tropfenkoaleszenz oder Tropfenzerfall nicht erwartet werden, dass eine globale reguläre Lösung existiert. Hier sind geeignete schwache Formulierungen des Modells notwendig. Eine solche schwache Formulierung wurde in [2] erarbeitet, wobei bisher nur die Existenz von maßwertigen Lösungen gezeigt werden konnte; siehe [3] für eine Diskussion.

Neben dieser Beschreibung der Grenzschicht als *scharfe* zwei-dimensionale Fläche werden aktuell auch “Diffuse Interface Models” (DIM) verwendet, die eine partielle Durchmischung der makroskopisch nicht mischbaren Phasen auf einer kleinen Längenskala berücksichtigen [8]. Im Fall *gleicher* Dichten liefert dies

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \operatorname{div}(\mu(c) \mathbf{D}) + \rho \mathbf{g} - \varepsilon \operatorname{div}(\nabla c \otimes \nabla c) && \text{in } \Omega \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 && \text{in } \Omega \\ \rho \left(\frac{\partial c}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) c \right) &= \operatorname{div}(m(c) \nabla w) && \text{in } \Omega \\ w &= \varepsilon^{-1} f'(c) - \varepsilon \Delta c && \text{in } \Omega, \end{aligned} \quad (4)$$

wobei c die Massenkonzentration einer der beiden Fluide, w das chemische Potential, $m(c)$ die Mobilität und $\varepsilon > 0$ die Grenzschichtdicke ist. Das System besitzt schwache Lösungen für kurze Zeiten, die in 2D global existieren, regulär und eindeutig sind und für große Zeiten gegen

stationäre Punkte der Oberflächenenergie konvergieren; siehe [1]. Das Model erlaubt Lösungen über topologische Singularitäten hinaus. In [56] wurde ein diffuses Grenzschichtmodell für unterschiedliche Dichten hergeleitet. Dies führt auf ein wesentlich komplizierteres System partieller Differentialgleichungen, in dem u.a. $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$ nicht gilt und der Druck in die Gleichung für w eingeht; bzgl. der Existenz schwacher Lösungen siehe [4].

In [5] wurde die Existenz schwacher Lösungen für ein scharfes Grenzschichtmodell bewiesen, welches als ein möglicher asymptotischer Limes des DIM hergeleitet werden kann. Hier ist anzumerken, dass das Grenzsystem wesentlich von der Skalierung der Mobilität $m = m_\varepsilon > 0$ abhängt. Für die Skalierungen $m_\varepsilon = \varepsilon^2$ bzw. $m_\varepsilon = \varepsilon$ wurde in [56, 74] formal eine Konvergenz gegen das klassische scharfe Grenzschichtmodell gezeigt. Eine rigorose Analysis ist offen.

Numerik. Numerische Simulationen der Hydrodynamik von Zweiphasenströmungen beruhen

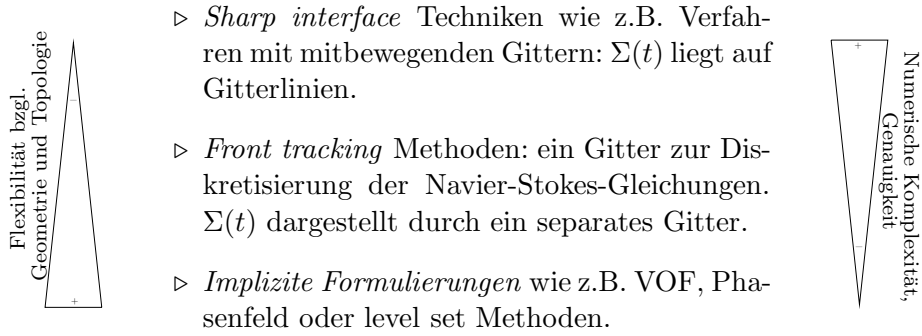


Abbildung 1: Hierarchie von Methoden zur numerischen Behandlung der Phasengrenze.

weitestgehend auf dem Modell (1)-(3), in dem das Geschwindigkeitsfeld stetig ist; siehe z.B. [76, 79, 80], [36, 38]. Grundproblematik ist hier die Beschreibung der freien Oberfläche mit dem Spannungsfeld zwischen einer numerisch möglichst günstigen und einfachen Formulierung der Dynamik der Phasengrenze einerseits und der genauen geometrischen Auflösung andererseits. So sind z.B. *sharp interface* Modelle gut geeignet, relevante Größen wie Krümmung präzise aufzulösen, siehe [10, 13], [33, 48], stoßen aber auf fast unlösbare Probleme bei Wechseln der Phasentopologie. Es existiert deshalb eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden, die auf die jeweiligen Anwendungssituationen zugeschnitten sind. Grob kann man zwischen Methoden des expliziten *trackings* der Phasengrenze und solchen, die diese implizit erfassen, unterscheiden; siehe Abbildung 1. Wichtigste Vertreter der letzteren Verfahrensklasse sind *level set* [72] und *VOF-Methoden* [46], die auf einer Einfeldformulierung mit einer Indikatorfunktion ϕ für die Phasenzugehörigkeit basieren:

$$\begin{aligned}
 \rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \operatorname{div}(\mu(\phi) \mathbf{D}) + \rho(\phi) \mathbf{g} + (\sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma + \nabla_\Sigma \sigma) \delta_\Sigma \quad \text{in } \Omega \\
 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } \Omega \\
 \phi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi &= 0 \quad \text{in } \Omega,
 \end{aligned} \tag{5}$$

wobei ϕ die Phasenindikatorfunktion oder die Level-Set-Funktion bezeichnet. Die Dichte $\rho(\phi)$ und Viskosität $\mu(\phi)$ sind stückweise konstant in den beiden Phasen. Entscheidend ist der auf der Phasengrenze lokalisierte Kraftterm $(\sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma + \nabla_\Sigma \sigma) \delta_\Sigma$; hierbei ist δ_Σ eine Familie von Dirac-Distributionen mit Träger $\Sigma(t)$.

In den letzten Jahren wurde intensiv an den bei level-set Methoden auftretenden Schwierigkeiten gearbeitet: Volumenerhaltung, präzise Erfassung der Krümmungsterme, Reparametrisierung etc.; siehe z.B. [25, 66]. Über die genauen Ursachen sogenannter *parasitären Strömungen* (*spurious velocities*) ist noch wenig bekannt, vgl. [32]. Weitere offene Fragen liegen u.a. in genauen

Diskretisierungen der Kapillarkräfte, geeigneter Behandlung der unstetigen Druckfunktion, genauen und stabilen Zeitdiskretisierungen, Adaptivität, numerische Behandlung von Koaleszenz.

Die meisten Arbeiten zur numerischen Simulation von Zweiphasenströmungen verwenden das Modell (1)-(3) mit *scharfer* Phasengrenze. Numerische Verfahren zur Behandlung eines DIM mit gleichen Dichten werden z.B. in [52] und für ein einfaches Modell im Fall unterschiedlicher Dichten in [26, 51] vorgestellt. Konvergenz von Finite-Element-Verfahren gegen schwache Lösungen wird in [30, 50] untersucht.

(ii) Stoff- und Wärmeübergang.

Modellierung/Analysis. Wärmetransport wird im einfachsten Fall durch folgendes Modell beschrieben:

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla \theta &= k \Delta \theta & \text{in } \Omega = \Omega_+(t) \cup \Omega_-(t), \\ \llbracket k \nabla \theta \rrbracket \cdot \mathbf{n}_\Sigma &= 0 & \text{auf } \Sigma(t), \\ \llbracket \theta \rrbracket &= 0 & \text{auf } \Sigma(t). \end{aligned} \quad (6)$$

Hier ist θ die Temperatur, c_p die spezifische Wärme und k die Wärmeleitfähigkeit. Die Stoffgrößen c_p und k hängen von der jeweiligen Phase ab, z.B. $k = k_+$ in $\Omega_+(t)$ und $k = k_-$ in $\Omega_-(t)$. Falls Dichteschwankungen aufgrund temperaturabhängiger Dichte zu berücksichtigen sind, müssen die Navier-Stokes-Gleichungen entsprechend modifiziert werden; z.B. durch einen Quellterm auf Basis der Boussinesq-Approximation.

Ein Standardmodell zur Beschreibung des Transports einer gelösten chemischen Komponente (in verdünnter Lösung) mit molarer Konzentration $c(t, \mathbf{x})$ ist:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c &= D \Delta c & \text{in } \Omega = \Omega_+(t) \cup \Omega_-(t), \\ \llbracket D \nabla c \rrbracket \cdot \mathbf{n}_\Sigma &= 0 & \text{auf } \Sigma(t), \\ c_+ &= H c_- & \text{auf } \Sigma(t). \end{aligned} \quad (7)$$

Die Diffusionskoeffizienten $D = D_\pm$ sind im einfachsten Fall konstant. Man beachte, dass nach der letzten Gleichung (das Henry'sche Gesetz) die Konzentration an der Grenzfläche unstetig ist. Im einfachsten Fall, dass c (bzw. θ) ein passiver Skalar ist, d.h. ohne Rückwirkungen auf die Impulsbilanz, sollte die Analysis mit den verfügbaren Methoden und Techniken gelingen, ist aber noch nicht ausgeführt worden. Der Fall nicht passiver Skalare ist offen.

Numerik. Die Sprungunstetigkeit der Konzentration chemischer Komponenten an der Grenzfläche erfordert numerisch eine besondere Behandlung. Aktuelle numerische Studien zu dieser Thematik findet man z.B. in [64]. Erste Ergebnisse numerischer Simulationen von Zweiphasenströmungen mit Stofftransport findet man in [17], [18], [49] und [64]. Bei der numerischen Behandlung von Wärme- und Stofftransportprozessen über fluide Phasengrenzen hinweg stellen parasitäre Ströme ein ernsthaftes, weitgehend ungelöstes Problem dar.

Die hohen Werte der Schmidt-Zahlen in Flüssigkeiten bewirken in Verbindung mit der Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen die Ausbildung sehr dünner Konzentrationsgrenschichten an der Grenzfläche, die wesentlich dünner als die viskose Grenzschicht sind. Eine vollständige Auflösung dieser solutalen Grenzschicht ist, vor allem in 3D, mit den zur Zeit verfügbaren Methoden nicht möglich. Rigorose mathematische Analysen der eingesetzten numerischen Verfahren hinsichtlich Genauigkeit und Stabilität fehlen.

(iii) Marangoni-Effekte und Transport auf der Phasengrenze.

Modellierung/Analysis. Marangoni-Effekte entstehen durch lokale Unterschiede in der Grenzflächenspannung. Im Modell (1) - (3) bzw. (5) wird dies durch die an der Phasengrenze lokalisierte

Tangentialkraft $\nabla_{\Sigma}\sigma$ widergespiegelt. Änderungen der Grenzflächenspannung entstehen durch

- (a) *Thermische Effekte*: $\sigma = \sigma(\theta|_{\Sigma})$.
- (b) *Übergangskomponenten*: $\sigma = \sigma(c|_{\Sigma})$.
- (c) *Adsorbierte, grenzflächenaktive Substanzen (Surfactants)*: $\sigma = \sigma(\Gamma)$.

Der Fall (a) wird durch die Modellgleichungen (1), (2), (3) und (6) mit temperaturabhängigem σ , der Fall (b) durch (1), (2), (3) und (7) mit konzentrationsabhängigem σ beschrieben. Zum thermischen Marangoni-Effekt gibt es kaum rigorose mathematische Publikationen. In [6] wird ein viskoses Fluid mit freier Oberfläche unter nicht-uniformem Temperaturfluss studiert und die Existenz stationärer Lösungen in 2D gezeigt. Die instationären Gleichungen werden in [81] behandelt. Für große Prandtl-Zahl und kleine Marangoni-Zahl wird dort die zeitlich lokale Existenz starker Lösungen der Grenzflächenströmung in 3D bewiesen. In [85] wird die Existenz einer globalen Lösung für Anfangszustände nahe einer Gleichgewichtslage bewiesen.

Variante (b) ist ein Spezialfall von (c), in dem Surfactants an der Phasengrenze adsorbieren und *auf* der Grenzfläche transportiert werden. Der Transport dieser zusätzlichen, flächenspezifischen Surfactantkonzentration Γ kann (im einfachsten Fall unlöslicher Spezies) durch folgende Konvektions-Diffusionsgleichung modelliert werden:

$$\partial_{t,n}\Gamma + \operatorname{div}_{\Sigma}(\Gamma\mathbf{u}_{\Sigma}) - \Gamma\kappa V_{\Sigma} = D_{\Sigma}\Delta_{\Sigma}\Gamma \quad \text{auf } \Sigma(t). \quad (8)$$

Hierbei bezeichnet $\partial_{t,n}$ die Bahnableitung entlang einer nur durch die Normalkomponente der Phasengrenzgeschwindigkeit hervorgerufenen Bahn, $V_{\Sigma} = \mathbf{u}_{\Sigma} \cdot \mathbf{n}_{\Sigma}$ ist die Normalgeschwindigkeit der Grenzfläche und $\Delta_{\Sigma} = \operatorname{div}_{\Sigma}\nabla_{\Sigma}$ der Laplace-Beltrami-Operator zur Fläche $\Sigma = \Sigma(t)$. Im Fall löslicher Surfactants ist die Transportgleichung (8) mit Speziesgleichungen vom Typ (7) gekoppelt. In diesem Fall stellt (8) eine dynamische Randbedingung für die Transportgleichungen in den Bulkphasen dar. Hinzu kommt dann entweder ein Verteilungsgleichgewicht analog zum o.g. Henry'schen Gesetz oder eine kinetische Beziehung zur Beschreibung der Sorptionsvorgänge. Die Analysis dieser Modellklassen steht im Wesentlichen aus. Als erster Schritt zum Nachweis der zeitlich lokalen Wohlgestelltheit wurde in [19] das Modellproblem der fast planaren Phasengrenze untersucht. Die Belegung der Phasengrenze mit Surfactant kann weitere Effekte haben, z.B. viskose Eigenschaften der Grenzfläche bewirken. Dies führt auf erheblich kompliziertere Transmissionsbedingungen in der Impulsbilanz und erschwert die Analysis erheblich; siehe [20].

Numerik. Zur Behandlung von Surfactants muss eine Transportgleichung wie (8) auf der sich bewegenden Phasengrenze $\Sigma(t)$ gelöst werden und die Kopplung dieser Gleichung mit der Strömungsdynamik berücksichtigt werden. Eine erste numerische Methode zur Diskretisierung der Laplace-Beltrami-Gleichung auf einer *stationären* Mannigfaltigkeit findet man in [27]; siehe [21] für Erweiterungen. Erste Ergebnisse numerischer Simulation von Zweiphasenströmungen mit Surfactants findet man in [49]. Numerische Simulationen eines zweidimensionalen Zweiphasenproblems mit Surfactants und Stofftransport findet man in [69, 84] und in [7]. In [63] wird ein neues Verfahren vorgestellt, das sich relativ einfach mit einer Level Set Methode kombinieren lässt. Die mathematische Analyse numerischer Methoden zur Behandlung von Transportgleichungen auf instationären Mannigfaltigkeiten (ggf. mit Singularitäten) ist fast komplett offen. Erste Ergebnisse hierzu findet man in [28].

(iv) Phasenübergang.

Modellierung/Analysis. Unter der Annahme, dass die Temperatur nahe am Gleichgewichtszustand ist, kann Phasenübergang im einfachsten Fall durch die folgenden Gleichungen an der

Grenzschicht beschrieben werden (siehe z.B. [53]):

$$\llbracket q \cdot \mathbf{n}_\Sigma \rrbracket = lJ, \quad J = \frac{2\rho_+\rho_-}{\rho_+ + \rho_-}(V - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_\Sigma) \quad \text{auf } \Sigma(t) \quad (9)$$

$$\llbracket \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}_\Sigma \rrbracket = -\sigma\kappa\mathbf{n}_\Sigma + J^2 \frac{\rho_+ - \rho_-}{2\rho_+\rho_-} \mathbf{n}_\Sigma \quad \text{auf } \Sigma(t) \quad (10)$$

$$l\theta = -\frac{\rho_+ - \rho_-}{2\rho_+\rho_-} \mathbf{n}_\Sigma \cdot \frac{1}{2}(\mathbf{S}_+ + \mathbf{S}_-)\mathbf{n}_\Sigma + \frac{\rho_+ + \rho_-}{2\rho_+\rho_-} \sigma\kappa \quad \text{auf } \Sigma(t) \quad (11)$$

hierbei ist J der Massenfluss (Stefan-Strom) und l die latente Wärme. Im Fall $\rho_+ = \rho_-$ ist (11) die klassische Gibbs-Thomson Bedingung. Hier sind seitens der Modellierung viele Fragen offen. Insbesondere für den Fall der scharfen Grenzfläche existieren bereits im Fall ohne strömungsmechanische Effekte viele verschiedene Modelle; vgl. etwa die Diskussion in [9]. Strittig sind die Quellterme in der Energiebilanz auf der Grenzschicht, wobei deren Effekt unklar ist. Eine der wenigen mathematischen Arbeiten ist [47], in der die zweiphasigen Navier-Stokes-Gleichungen mit Grenzflächenspannung und Wärmeleitung mit Gas-Flüssig-Phasenübergang im Fall gleicher Dichten untersucht werden. Ein DIM mit Phasenübergang wurde in [15] hergeleitet und dafür Existenz von starken Lösungen, lokal in der Zeit, bewiesen.

Numerik. Zur Numerik von Zweiphasenströmungen mit Phasenübergang existieren bislang erst vereinzelte Arbeiten. Beispielsweise wird in VOF-Ansätzen die Phasengrenze innerhalb eines Zeitschritts um einen aus dem Massenstrom berechneten Betrag zusätzlich zum rein konvektiven Transport verschoben. Kürzlich wurde gezeigt, wie in relativ allgemeiner Weise der Phasenwechsel durch Quellterme in der Kontinuitätsgleichung berücksichtigt werden kann [42]. Es existieren unseres Wissens nach aber keinerlei grundlegende Untersuchungen zur Konsistenz, Konvergenz und Stabilität derartiger numerischer Verfahren.

2.4 Wissenschaftliche Ziele

Die in den vorigen Abschnitten beschriebenen vier Phänomenklassen sind nur teilweise und nur qualitativ verstanden. Deshalb soll in diesem Schwerpunktprogramm ein quantitatives Verständnis in Form von validierten Modellen und numerischen Simulationen entwickelt werden. Dazu sind *die verwendeten Modelle* hinsichtlich der berücksichtigten physiko-chemischen Phänomene *zu erweitern und zu verbessern*, hinsichtlich ihrer *mathematischen Eigenschaften zu analysieren* und *numerisch zu lösen*, wobei *neue Methoden zu entwickeln und erforschen* sind. Um rigorose Aussagen erhalten zu können, soll der Fokus auf Elementarprozessen an einzelnen Fluidpartikeln, wie z.B. Einzeltropfen und Fallfilme, bzw. deren Grenzflächen liegen.

Die zentralen Ziele dieses Schwerpunktprogramms sind:

a. *Die modellmäßige Erfassung zusätzlicher physikalischer und physiko-chemischer Phänomene und die Entwicklung numerischer Verfahren zur Behandlung der sich ergebenden Modelle.* Z.B.:

- Verbesserte Kopplungsbedingungen der Phasen bei Stoff- und Wärmeübergang.
- Beeinflussung der Grenzflächenspannung durch Temperatur und Surfactants.
- Modellierung von Adsorptions- und Desorptionseffekten.
- Beschreibung der Beeinflussung des Stoffübergangs durch Surfactants.
- Realitätsnahe Modelle zur Beschreibung von Phasenübergängen mit vollständigen Kopplungen und sinnvolle Vereinfachungen.
- Modellierung der Dynamik von an einer Grenzfläche adsorbierten Nanopartikeln.

Um solche neu entwickelten Modelle oder Modellerweiterungen zu untersuchen, sind numerische Simulationen der Modelle ein wichtiges Hilfsmittel. Diese Simulationen können nicht routinemäßig durchgeführt werden und geeignete numerische Methoden sollen im Rahmen des Schwerpunktprogramms entwickelt und zur Simulation der neuen Modelle eingesetzt werden.

b. *Über mathematische Analysen mehr Verständnis für die auftretenden Modelle und dadurch für die modellierten Prozesse und die wirksamen Mechanismen erzielen.* Zum Beispiel:

- Eigenschaften fluider Partikel mit komplexer Grenzflächenrheologie.
- Eigenschaften (Wohlgestelltheit, Stabilität, Energie-Abschätzungen) von Modellen für Systeme mit Topologieänderungen. Entwicklung geeigneter schwacher Formulierungen.
- Neue Effekte bei diffusen Grenzschichtmodellen, die z.B. durch Diffusion erzeugt werden, sowie deren Abhängigkeit von den Modellparametern.
- Charakterisierung von Grenzflächeninstabilitäten bei Systemen mit Stoff- oder Wärmeübergang. Beeinflussung der Stabilität fluider Partikel durch Surfactants.
- Identifikation der relevanten dimensionslosen Parameter. Bestimmung unterschiedlicher dynamischer Regimes der Modelle.

c. *Über mathematische Analysen mehr Rigorosität in die Simulation von Zweiphasenströmungen einbringen.* Zum Beispiel:

- Analyse der Stabilität und Genauigkeit von Zeitintegrationsverfahren für das gekoppelte Geometrie-Strömungsproblem (ggf. mit Stoff- und Wärmetransport).
- Fehleranalysen von Methoden zur Diskretisierung von Transportgleichungen auf sich bewegenden Mannigfaltigkeiten.
- Entwicklung von Fehlerschätzern für adaptive Methoden für die vorliegende Problemklasse.
- Analyse numerischer Verfahren zur Behandlung von Strömungsgleichungen mit unstetigen Lösungen.
- Fehleranalyse der numerischen Implementierung von Kapillarkräften.

Aus diesen Analysen werden sich verbesserte oder neue Simulationsmethoden ergeben.

Zur Validierung der numerischen Simulationen und um die Modellierung zu untermauern, sollen geeignete *Experimente mit aufgenommen werden.*

2.5 Arbeitsprogramm und thematische Abgrenzung

Die Beschreibung des Arbeitsprogramms richten sich nach der Darstellung in Abschnitt 2.3. Der nachfolgend mehrfach verwendete Begriff “Analyse” steht jeweils für “Modellentwicklung und Analysis”.

Ad (i) (Hydrodynamik einer Zweiphasenströmung).

Modellierung/Analysis. Offene Fragen für das *Sharp-Interface-Modell* umfassen:

- Rigorose Analyse der Stabilität und des asymptotischen Verhaltens des klassischen scharfen Grenzschichtmodells.
- Analyse von Modellen mit modifizierten Interface-Bedingungen anstelle stetiger Geschwindigkeit; z.B. Schlupf der Phasen am Interface.

- Analyse von Modellen mit Grenzflächenviskositäten und -elastizität.
- Analyse von Zweiphasenströmungen mit nicht-Newtonschem Fließverhalten und in rotierenden Systemen (z.B. beim Spin-Coating-Verfahren).
- Schwache Formulierungen, die Topologieänderungen zulassen.
- Gibt es Tropfenkollision mit endlicher Energie in diesem Modell?

Bemerkung zum letzten Punkt: In [44, 45] wurde gezeigt, dass eine starre Kugel, die sich in einem Newtonschen Fluid bewegt, sowohl in 2D als auch in 3D nicht mit einer ebenen Wand kollidieren kann, sofern die Gesamtenergie des Systems endlich ist.

Offene Fragen für das *Diffuse-Interface-Modell* umfassen:

- Rigorose Analyse des scharfen Interface Limes $\varepsilon \rightarrow 0$.
- Genaue Analyse des qualitativen Verhaltens von Lösungen des diffusen Grenzschichtmodells, z.B. genauere Asymptotik für $t \rightarrow \infty$, Stabilität von stationären Lösungen, Interaktion zwischen einzelnen Tropfen.
- Aufbau thermodynamisch konsistenter diffuser Grenzschichtmodelle im Fall unterschiedlicher Dichten mit guten analytischen und numerischen Eigenschaften.

Numerik. Bei der Analyse numerischer Verfahren ist hier dringend mehr mathematische Rigorosität erforderlich. Insbesondere sollen folgende Fragenkomplexe angegangen werden:

- *Behandlung der Phasengrenze.* Für die unterschiedlichen Arten der Repräsentation der freien Oberfläche (z.B. level set, sharp interface, tracking, Abb. 1) werden systematische numerisch-analytische Untersuchungen hinsichtlich Konvergenzordnung und Volumenerhaltung der Diskretisierungen benötigt.
- *Diskretisierungsverfahren.* Parasitäre Strömungen limitieren die Genauigkeit der numerischen Resultate. Um diese zu minimieren, ist es notwendig, die *Kapillarkräfte mit hinreichender Genauigkeit zu diskretisieren* und die *unstetige Druckfunktion mit angepassten numerischen Verfahren* zu behandeln. In der Literatur findet man eine Reihe unterschiedlicher Methoden, rigorose Fehlerschranken sind kaum bekannt. Eine erste Diskretisierungsfehleranalyse findet man in [37]. Für das Testproblem eines ruhenden Tropfens ohne Gravitation wird die diskrete Drucklösung, die nach dem Laplace-Young'schen Gesetz stückweise konstant sein sollte, in den Abb. 2 und 3 gezeigt. Im linken Bild sieht man das Ergebnis mit einem für das einphasige Problem sehr bewährten Finite Elemente Verfahren. Im rechten Bild wurde ein neu entwickeltes Diskretisierungsverfahren eingesetzt [37, 38]. Weitere wichtige Themen sind die Stabilität der Zeitdiskretisierung und die Vermeidung von Restriktionen der Zeitschrittweite durch Kapillarkräfte. *Bessere Zeitintegrationsmethoden* sollen entwickelt werden. Bei dem numerisch sehr komplexen gekoppelten System der Navier-Stokes-Gleichungen und der Gleichung für die Phasenindikatorfunktion (5) ist Adaptivität im Ort (lokale Gitterverfeinerung in einer Umgebung der Phasengrenze) erforderlich; siehe [36]. Rigorose Fehlerschätzungsmethoden zur *Steuerung der Adaptivität* sind nicht bekannt. Zudem ist bisher völlig ungeklärt, wie sich zeitabhängige Gitter für Sattelpunktprobleme auswirken; siehe dazu auch [11, 12, 16].
- *Effiziente iterative Lösungsverfahren.* Bei Gas-Flüssig-Systemen müssen beim Lösen des diskretisierten Problems die großen Unterschiede in den Stoffparametern (Dichte, Viskosität) berücksichtigt werden. Hier müssen geeignete Vorkonditionierungsmethoden entwickelt werden. Erste Ergebnisse in diese Richtung (für Stokes-Probleme) findet man in [61, 62, 65].

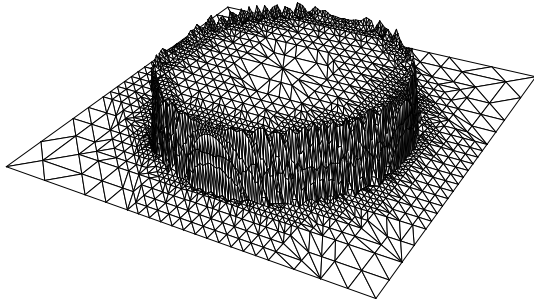


Abbildung 2: FE Drucklösung mit einem Standardverfahren

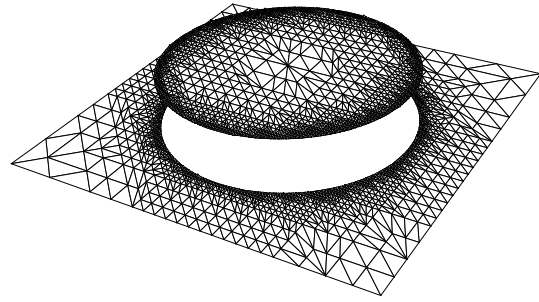


Abbildung 3: FE Drucklösung mit einem neu entwickelten Verfahren

- *Koaleszenz*. Die Koaleszenz von Tropfen oder Blasen wird numerisch oft in unphysikalischer Weise beschleunigt, sobald der Abstand zweier sich annähernder Grenzflächen die Ausdehnung einer Gitterzelle unterschreitet; vgl. [41]. Eine Aufklärung und Behebung dieses Effekts steht noch aus.

Ad (ii) (Stoff- und Wärmeübergang).

Modellierung/Analysis. Offene Fragen umfassen:

- Analyse von *Sharp-Interface-Modellen* mit Rückkopplung auf die Impulsbilanz, z.B. in Form der zweiphasigen Navier-Stokes Gleichungen mit temperatur- oder konzentrationsabhängigen Dichten. Analyse von Situationen mit Abweichung vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht an der Phasengrenze.
- Entwicklung und Analyse von *Diffuse-Interface-Modellen* mit Wärmeübergang und Boussinesq-Approximation sowie von Modellen mit Stofftransport und -transfer.

Numerik. Folgende Themen sollen im Vordergrund stehen:

- *Behandlung der Unstetigkeit an der Phasengrenze*. Im realistischen Fall, dass der Henry-Koeffizient von Temperatur und Druck abhängt, werden komplett neue Ansätze gebraucht.
- *Diskretisierung der Konzentrationsgrenzschichten*. An der Phasengrenze bilden sich sehr dünne Konzentrationsgrenzschichten aus. Wie man diese mit effizienten (adaptiven) Methoden lösen kann, ist nicht bekannt und soll erforscht werden.
- *Kopplung der Transportgleichung mit der Strömungsdynamik*. Bei Abhängigkeit der Grenzflächenspannung vom Konzentrationsfeld besteht eine Rückkopplung auf die Hydrodynamik. Es ist zu erforschen, wie diese Kopplung effizient und stabil behandelt werden kann.

Ad (iii) (Marangoni-Effekte und Transport auf der Phasengrenze).

Modellierung/Analysis. Es fehlen Ergebnisse in folgende Richtungen:

- Analyse von Modellen für thermischen/solutalen Marangoni-Effekt; vgl. 2.3 (iii), a) & b). Resultate für Gebiete, Stabilität von stationären Lösungen.
- Modellierung und Analyse der Beeinflussung des Stoffübergangs durch Surfactants.

- Analyse von Modellen für fluide Grenzflächen mit Surfactants; vgl. 2.3 (iii), c). Resultate für Gebiete, Stabilität von stationären Lösungen. Modelle mit endlicher Sorptionskinetik, (nichtlineare) Verteilungsgleichgewichte bei Löslichkeit des Surfactant in beiden Phasen. Modelle für Surfactants mit Grenzflächenmasse und -viskosität.
- Einfluss des Surfactants auf Partikel-Partikel-Wechselwirkung (“Grenzflächenelastizität”).
- Entwicklung und Analyse von DIM-Modellen mit variabler Grenzflächenspannung.

Numerik. Folgende Themen sollen u.a. bearbeitet werden:

- *Numerische Behandlung variabler Oberflächenspannung.*
- *Transportgleichungen auf der Phasengrenze.* Entwicklung und Analyse von Verfahren zur Lösung der Surfactant-Transportgleichung auf der sich bewegenden Phasengrenze $\Sigma(t)$.
- *Kopplung zwischen Surfactant-Transportgleichung, Strömungsdynamik und Stofftransport.* Eine Kopplung dieser Gleichung mit der Strömungsdynamik entsteht durch eine Abhängigkeit der Grenzflächenspannung σ in (1) von der Surfactantkonzentration Γ . Eine Kopplung mit einer Stofftransportgleichung in den Bulkphasen ergibt sich bei der Modellierung von Adsorptions- und Desorptionseffekte. Wie diese Kopplungen numerisch effizient und stabil behandelt werden können, ist nicht bekannt und soll erforscht werden.

Ad (iv) (Phasenübergang).

Schwierigkeiten und Forschungsbedarf setzen in “Modellierung/Analysis” und “Numerik” an unterschiedlichen Stellen ein. In der Numerik sind schon im Bereich der Hydrodynamik und des Stoff- oder Wärmeübergangs durch bewegte, deformierbare Grenzflächen schwierige Forschungsaufgaben zu bewältigen, die für alles weitere fundamental sind. In den numerischen Projekten sollen daher Probleme mit Phasenübergängen zunächst ausgenommen werden. An dieser Stelle soll die Analysis eine Vorreiterrolle übernehmen, da bereits die Modellierung solcher Phasenübergangsprozesse bei fluiden Grenzflächen erheblichen Forschungsbedarf erkennen lässt.

Modellierung/Analysis. Zunächst sollte Ordnung in die Vielzahl der in der natur- und ingenieurwissenschaftlichen Literatur angegebenen Modelle gebracht werden, um physikalisch und mathematisch rigorose Modelle zu identifizieren, die für numerische Simulationen geeignet sind. Grundlegend ist dann weiter die Analyse des freien Randwertproblems (1), (2), (3), (6) mit zusätzlichem Stefan-Strom gemäß der Transmissionsbedingungen (11) in Bezug auf:

- Wohlgestelltheit: Existenz starker bzw. schwacher Lösungen, Eigenschaften schwacher Lösungen wie Regularität, Eindeutigkeit und qualitative Eigenschaften der Grenzfläche.
- Qualitatives Verhalten für große Zeiten, Stabilität von stationären Lösungen (Tropfen).

Hierbei können sicherlich die beim Stefan-Problem ohne strömungsmechanische Effekte in den letzten Jahren gelungenen Fortschritte und verwendete Techniken helfen, siehe z.B. [29, 57, 68, 71]. Es sei bemerkt, dass die Dynamik der Grenzschicht bei Zweiphasenströmungen mit Phasenübergang grundlegend anders ist, da das Interface nicht mehr materiell ist. Weitere Fragen:

- Wie sollten DIM-Modelle mit Phasenübergang aussehen? Ist die Annahme der Inkompressibilität gerechtfertigt? Wie lauten entsprechende Modelle für kompressible Flüssigkeiten? Wie kann man die Schwierigkeiten mit nicht-gleichen Dichten überwinden?
- Erhält man das o.a. Grundmodell als geeigneten Skalierungslimes, in dem die Grenzschichtdicke gegen Null geht? Wis lautet das Grenzsystem für kleine Machzahlen?

Als Erweiterungen sind denkbar: volle Kontinuitätsgleichung anstelle der Boussinesq-Approximation, variable Grenzflächenspannung, Phasenübergang in Mehrkomponenten-Systemen etc.

Konzipierung eines Validierungsexperiments als Leitmaßnahme

Zur Validierung der Arbeiten zur Numerik und Modellierung soll ein mehrstufiges Experiment konzipiert und zur Durchführung (in 2-3 Projekten) ausgeschrieben werden. Das Experiment soll sukzessive weitere physiko-chemische Phänomene beinhalten:

1. Hydrodynamik: Realisierung und Vermessung einer inkompressiblen laminaren Zweiphasenströmung, sowohl 2D (Rotationssymmetrie) als auch 3D.
2. Stoff- oder Wärmetransport zwischen den Bulkfluiden: Realisierung und Vermessung der Effekte, z.B. Einfluß der Strömungsdynamik auf den Stofftransfer.
3. Marangoni-Effekte: Realisierung variabler Grenzflächenspannung und Vermessung der Effekte.
4. Surfactants: Einbringen von grenzflächenaktiven Substanzen; Einfluss auf die Strömung.

Eine konkrete Möglichkeit für ein solches Experiment fußt auf dem Einsatz von Taylor-Blasen in einem Mikro- oder Mini-Kanal. Dieses Experiment wird im Anhang A ausführlicher vorgestellt, charakteristisch sind die folgenden Punkte. In Abhängigkeit von der Form des Kanals ist die Strömung rotationssymmetrisch oder voll dreidimensional. Die Dicke des Flüssigkeitsfilms, das Geschwindigkeitsfeld und das Konzentrationsfeld einer Stoffübergangskomponente können gemessen werden. Thermische Marangoni-Effekte können durch definierte Beheizung des Kanals erzeugt werden. Zudem ist die Koaleszenz aufeinander folgender Blasen gezielt zu erreichen. Zusätzlich zu diesen Vorteilen ist die Heranziehung von Taylor-Blasen als Validierungsexperiment auch dadurch motiviert, dass die Taylor-Strömung in Mikrokanälen von großer Relevanz für aktuelle Anwendungen in der Mikroverfahrenstechnik [40], [55] und der Mikroanalytik [58] ist. Ein solches Experiment könnte von mehreren Arbeitsgruppen in Deutschland durchgeführt werden. Erste Ergebnisse numerischer Simulationen voll dreidimensionaler zeitabhängiger Taylor-Strömungen in nicht kreisförmigen Kanälen findet man in [34, 83].

Der SPP ist offen für andere experimentelle Projekte, die nicht an diesem Leitexperiment arbeiten. Diese müssen nicht auf Mikrosysteme bezogen sein. Entscheidendes Kriterium neben dem inhaltlichen Bezug ist, dass die Möglichkeit zu einer klaren Verzahnung mit einem (oder mehreren) Projekt(en) aus den Bereichen Modellierung/Analysis oder Numerik gegeben ist. Bevorzugt werden in diesem Fall Verbundprojekte, die ein experimentelles Teilprojekt mit einem Teilprojekt im Bereich Modellierung/Analysis oder Numerik verbinden. Hier ist es beispielsweise denkbar, dass in einem Teilprojekt Methoden der Modellierung und Simulation eingesetzt werden, um experimentelle Messtechniken eines zweiten Teilprojektes hinsichtlich der Konzeption und der Auswertung weiterzuentwickeln, mit der gemeinsamen Zielsetzung die Aufklärung eines Grenzflächenphänomens. Exemplarisch seien hier experimentelle Untersuchungen an Einzeltropfen genannt, wie sie etwa in den Arbeiten [31], [35], [59] zur Bestimmung von Grenzflächeneigenschaften durchgeführt werden. Bei diesen Experimenten erfolgt die Auswertung der Messungen standardmäßig unter Vernachlässigung der Strömung im (wachsenden oder oszillierenden) Tropfen. Eine modellbasierte Auswertung könnte hier deutliche Fortschritte bewirken.

Im Rahmen dieses SPPs nicht gefördert werden sollen Projekte,

- in denen feste Oberflächen untersucht werden,
- in denen fluide Systeme untersucht werden, in deren Beschreibung die Grenzfläche aber nicht explizit mit ihren lokalen Eigenschaften auftritt,

- in denen Interfaces auftreten, die nur trennende Flächen und keine physikalischen Phasengrenzen darstellen,
- die bzgl. der Modellierung nicht auf kontinuumsmechanischen Ansätzen aufbauen.

2.6 Struktur und Umsetzung des Schwerpunktprogramms

Aus dem Arbeitsprogramm ergibt sich in natürlicher Weise eine Aufteilung der geplanten Forschungsaktivitäten in die Bereiche

- Modellierung/Analysis
- Numerische Simulation
- Experimente/Anwendungen,

die in etwa gleich stark gewichtet sein sollen. Während der Laufzeit des Schwerpunktprogramms soll es neben den Gesamtkolloquien auch jährliche Treffen der projektbearbeitenden Mitarbeiter in diesen Teilbereichen geben, da auf diesen Gebieten in den einzelnen Projekten vergleichbare Schwierigkeiten auftreten werden, z.B. in der Analysis bzgl. der Behandlung freier Ränder oder in der Numerik bei der Behandlung der Oberflächenspannung, bei der Problematik der Volumenerhaltung oder bei der Entwicklung effizienter Zeitintegrationsmethoden.

Die gemeinsame Klammer, die alle drei Bereiche umfasst, sind die mathematischen Modelle der Grenzflächenprozesse: sowohl für die Analysis wie auch für die numerische Simulation stellt das mathematische Modell das Fundament dar. Da für wichtige Grenzflächenphänomene (z.B. Einfluss einer Übergangskomponente auf die Oberflächenspannung, Modelle für Adsorption, DIM Alternativen) keine Standardmodelle existieren, ist die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen allen Bereichen Grundvoraussetzung. Darüber hinaus sollen die numerisch arbeitenden Gruppen gemeinsam einen Benchmark-Test für die unterschiedlichen Methoden, Techniken und Werkzeuge entwickeln; vgl. [48]. Dieser soll sich an dem Taylor-Blasen Validierungsexperiment orientieren, so dass zusätzlich ein Vergleich zwischen numerischen Resultaten und experimentellen Daten erfolgen kann.

Insgesamt ist der SPP aufgrund seiner klar mathematisch/theoretischen Ausrichtung im Fach Mathematik angesiedelt. Hierin besteht ein Alleinstellungsmerkmal des vorliegenden Vorhabens im Umfeld der thematisch verwandten, bereits geförderten Maßnahmen.

In der Laufzeit des SPPs sind insbesondere folgende konkrete Aktivitäten geplant.

- In 2007 hat an der RWTH der internationale Workshop “Two-phase incompressible flows: modeling aspects and methods for numerical simulation” stattgefunden (www.igpm.rwth-aachen.de/workshop07). Eine Folgeveranstaltung ist für den Sommer 2009 geplant. Diese Aktivität soll im Rahmen des Schwerpunktprogramms fortgesetzt werden.
- Ab dem 2. Förderjahr findet jährlich ein Doktorandenseminar statt. In diesem Seminar sollen Forschungsergebnisse der laufenden Projekte vorgestellt werden. Dabei werden die Arbeiten nach den Clustern Modellierung/Analysis, Numerik, Experiment sortiert. Für jeden Forschungscluster wird es ein verantwortliches Programmausschussmitglied geben. Der Programmausschuss achtet darauf, dass die Projekte in Richtung der zentralen Ziele des Schwerpunktprogramms konvergieren.
- Jährliche Sommerschulen zu Querschnittsthemen sollen durchgeführt werden. Hierfür werden Projektleiter ebenso wie gezielt einzuladende Experten herangezogen.

Der SPP soll offen sein für Verbundprojekte mit Partnern aus dem benachbarten Ausland. Es bestehen z.B. Kontakte aus dem Kreis der Initiatoren mit Kollegen (P. Anderson, TU Eindhoven; J.A.M. Kuipers und D. Lohse, Twente), die in den Niederlanden führend auf dem Gebiet der Modellierung und Simulation von Transportprozessen an fluiden Grenzflächen sind.

3 Abgrenzung zu anderen laufenden Programmen

Das zentrale Thema dieses Antrages zur Entwicklung und mathematischen Analyse valider Modelle sowie genauer und effizienter numerischer Verfahren zur Durchdringung der sehr komplexen Grenzflächenphänomene wird und wurde in keinem von der DFG geförderten Programm untersucht. Es gibt folgende Abgrenzungen zu anderen verwandten laufenden Programmen:

DFG-SPP 1141: Analyse Modellbildung und Berechnung von Strömungsmischern mit und ohne chemische Reaktion. Die Arbeiten in diesem SPP konzentrieren sich auf *einphasige* Strömungsmischvorgänge. Im hier beantragten Schwerpunktprogramm stehen dagegen *mehrphasige* Systeme im Vordergrund.

DFG-SPP 1164: Nano- und Mikrofluidik. Dieses Schwerpunktprogramm beschäftigt sich mit Phänomenen und Mechanismen, die im Übergangsbereich zwischen molekularer Bewegung und der Strömung von Kontinua auftreten. Im Mittelpunkt stehen Strömungen auf sehr kleinen Skalen und damit zusammenhängende Mikro-Effekte. Themen aus den Bereichen Mathematische Analyse oder Numerik für fluide Grenzflächen werden in diesem SPP nicht bearbeitet.

DFG-SPP 1273: Kolloidverfahrenstechnik. In diesem Schwerpunktprogramm werden die physikalisch-chemischen Eigenschaften von Kolloiden untersucht. Kolloide sind Systeme aus festen oder fluiden Partikeln, die charakteristische Abmessungen kleiner als 1 Mikrometer aufweisen. Zentral in diesem SPP steht die Strukturbildung in kolloiden Systemen. Effekte an fluiden Phasengrenzen werden nicht detailliert untersucht.

DFG-SPP 1369: Polymer-Solid Contacts: Interfaces and Interphases. Zentrales Forschungsthema dieses Schwerpunktprogramms ist das Verhalten von Polymeren an der Phasengrenze mit einer *festen* anderen Phase. Es werden keine Flüssig-Flüssig oder Flüssig-Gas-Systeme betrachtet. Außerdem spielen Transportprozesse an der Phasengrenze eine untergeordnete Rolle.

SFB 540: Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in fluiden mehrphasigen Reaktionssystemen. In diesem SFB liegt der Forschungsschwerpunkt bei der Entwicklung einer neuen Methodik der modellgestützten experimentellen Analyse. Ein Hauptziel ist die Bereitstellung eines abgesicherten und möglichst breit einsetzbaren Arbeitsprozesses zur systematischen Modellierung kinetischer Phänomene in fluiden mehrphasigen Reaktionssystemen. In Teilbereichen dieses Sonderforschungsbereiches werden Transportprozesse in Einzeltropfen- und Fallfilmsystemen untersucht. Grenzflächenphänomene werden nur am Rande betrachtet.

DFG-Forschergruppe 563: Micro-Macro Modelling and Simulation of Liquid-Vapour Flows. In dieser Forschergruppe werden kompressible Flüssig-Gas-Strömungen untersucht. Inkompressible Zweiphasensysteme oder Transportprozesse an der Phasengrenze werden nur am Rande betrachtet.

Exzellenzcluster 259: Smart Interfaces. Das Forschungsprogramm des Clusters ist explizit auf die Interaktion zwischen einer fluiden Phase und einer festen Oberfläche ausgerichtet. Das Programm ist in fünf Forschungsgebiete aufgeteilt, von denen nur der Bereich "Near-Wall Multiphase Flows" auch fluide Grenzflächen beinhaltet. Dabei steht die Interaktion der fluiden Grenzfläche mit einer festen Oberfläche (Problem der Kontaktlinie) im Vordergrund, die im hier beantragten SPP nicht untersucht wird.

Die Forschung in dem vor kurzem ausgelaufenen DFG-SPP 1105 “Nichtgleichgewichtsprozesse in Flüssig-Flüssig-Systemen” konzentrierte sich auf die Beschreibung des Transports über Flüssig-Flüssig-Phasengrenzflächen bei Prozessen der Stoffwandlung. Bei den Modellierungsuntersuchungen standen experimentelle Arbeiten im Vordergrund. Die Entwicklung numerischer Verfahren waren in diesem Schwerpunktprogramm nur in geringem Umfang aufgenommen, vor allem mit molekulardynamischen Ansätzen. Eine mathematische Analysis der Modelle oder eine rigorose Fehleranalyse numerischer Methoden war nicht enthalten.

Natürlich werden Erkenntnisse aus diesen verwandten Programmen, wie z.B. im Bereich der Modellierung von Strömungsprozessen in der Mikrofluidik im SPP 1164 oder auf dem Gebiet der Entwicklung numerischer Verfahren für Zweiphasenströmungen in der Forschergruppe 563 und im SFB 540, im hier beantragten SPP benutzt. Insbesondere wird auch ein wissenschaftlicher Austausch mit dem EXC 259 angestrebt.

4 Voraussichtliche Teilnehmer

Die Schwerpunkte und das Forschungsprogramm sowie die Strukturierung des Gesamtantrags wurden in einem Rundgespräch im Februar 2008 in Aachen spezifiziert und bei einem weiteren Treffen der Steuerungsgruppe ausgearbeitet. Die folgende, sicherlich nicht vollständige Liste umfasst potenzielle Antragsteller.

- H. Abels, MPI Leipzig (Analysis)
- P. Anderson, TU Eindhoven (Computational/Chemical Engineering)
- E. Bänsch, Universität Erlangen (Numerik)
- M. Behr, RWTH Aachen (Computational/Mechanical Engineering)
- D. Bothe, RWTH Aachen (Modellierung, Analysis, Computational Engineering)
- R. Denk, Konstanz (Analysis)
- G. Dziuk, Universität Freiburg (Analysis, Numerik)
- K. Eckert, TU Dresden (Physikalische Fluidmechanik)
- J. Escher, Universität Hannover (Analysis)
- H. Garcke, Universität Regensburg (Modellierung, Analysis)
- M. Griebel, Universität Bonn (Numerik, Scientific Computing)
- S. Hardt, Universität Hannover (Mikroverfahrenstechnik)
- V. Heuveline, Universität Karlsruhe (Numerik, Scientific Computing)
- M. Hieber, TU Darmstadt (Analysis)
- R. Klein, Freie Universität Berlin (Computational Engineering, Numerik)
- M. Kraume, TU Berlin (Verfahrenstechnik)
- D. Kröner, Universität Freiburg (Numerik)
- H. Kuipers, Universiteit Twente (Chemical Engineering)
- R. Miller, MPI Potsdam (Grenzflächenchemie)
- A. Münch, Humboldt-Universität Berlin (Modellierung, Analysis)
- J. Prüss, MLU Halle-Wittenberg (Analysis)
- R. Rannacher, Universität Heidelberg (Numerik)
- A. Reusken, RWTH Aachen (Numerik)
- M. Schäfer, TU Darmstadt (Computational Engineering, Numerik)
- M. Schlüter, Universität Bremen (Verfahrenstechnik)
- B. Schweizer, Universität Dortmund (Analysis)
- M. Sommerfeld, MLU Halle-Wittenberg (Verfahrenstechnik)
- P. Stephan, Universität Darmstadt (Technische Thermodynamik)
- L. Tobiska, Universität Magdeburg (Numerik)
- S. Turek, Universität Dortmund (Numerik)

A. Voigt, TU Dresden (Numerik)
B. Weigand, Universität Stuttgart (Thermodynamik)
G. Wittum, Universität Frankfurt (Scientific Computing)
M. Wörner, Forschungszentrum Karlsruhe (Verfahrenstechnik)

Weitere mögliche Antragstellungen werden insbesondere aus dem Kreis jüngerer ambitionierter Nachwuchswissenschaftler erwartet.

5 Schätzung des Mittelbedarfs

Für das beantragte Schwerpunktprogramm wird eine Förderung von sechs Jahren angestrebt, wobei eine Aufteilung in drei Bewilligungsabschnitte zu je zwei Jahren vorgesehen ist.

Der Bedarf an Personalmitteln hängt von der Zahl der letztlich bewilligten Einzelanträge ab. Entsprechend der angestrebten Verzahnung der Bereiche Modellierung/Analysis, Numerische Simulation und Experimente sind auch gemeinsame Projektanträge von (im Normalfall zwei) Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Bereichen erwünscht. Je nach Projektumfang ist dabei die Beantragung von einer oder zwei Stellen TV-L 13 denkbar. Insgesamt wird für die Projektarbeit ein Umfang an Personalmitteln von ca. 18 Mitarbeiterstellen (TV-L 13) angestrebt. Zur Unterstützung bei der Methodenimplementierung und bei der Durchführung von Experimenten sind 9 Stellen (ca. 80 h/Monat) für studentische Hilfskräfte vorgesehen. Hinzu kommt eine halbe Mitarbeiterstelle TV-L 13 zur Unterstützung der Koordinatoren des Schwerpunktprogramms (Organisation Workshops, Doktorandenseminar, Sommerschule, Betreuung Preprint-Serie). Die genaue Aufgabenstellung wird in einem Antrag für ein Koordinatorenprojekt angegeben. Damit ergibt sich ein jährlicher Bedarf an Personalmitteln von ca. 1.170.000 Euro.

Darüber hinaus besteht ein zusätzlicher Mittelbedarf für Reisekosten, Teilnahme an Tagungen, Doktorandenseminaren, Sommerschulen und Besuche anderer Arbeitsgruppen. Pro Projekt werden ca. 4.500 Euro (jährlich) veranschlagt. Für die Organisation und Durchführung des Workshops, der Sommerschule und des Doktorandenseminars ist von einem Mitteleinsatz von etwa 30.000 Euro pro Jahr auszugehen. Insgesamt ergibt sich ein Mittelbedarf von ca. 110.000 Euro per anno.

Für Versuchsaufbauten, Messtechnik und Versuchsdurchführung bei den Validierungsexperimenten im Rahmen des Leitexperiments mit Taylor-Blasen werden ca. 100.000 Euro pro Jahr veranschlagt. Für Ergänzungsausstattungen für Versuchsaufbauten etc. bei anderen experimentellen Projekten wird von insgesamt 40.000 Euro pro Jahr ausgegangen.

Hieraus resultiert ein jährlicher Mittelbedarf von ca. 1.420.000 Euro für das beantragte Schwerpunktprogramm.

6 Gründe für die Förderung dieses Programms

Der Bedarf nach neuen bzw. weiterentwickelten mathematischen Modellen für Transportprozesse an fluiden Grenzflächen, deren Analyse und numerische Simulation ist durch aktuelle Entwicklungen z.B. in Bereichen wie Mikroverfahrenstechnik oder Biochemie gerade in der letzten Dekade weiter angestiegen. Dabei geht es darum, bei der Beschreibung der Prozesse lokal an der Phasengrenzfläche mehr relevante physiko-chemische Phänomene zu erfassen, die wirkenden Mechanismen zu verstehen sowie diese akkurat und effizient numerisch zu berechnen. Nur dadurch lassen sich solche Transportprozesse und Grenzflächenphänomene prädiktiv beschreiben, was die Voraussetzung für eine erfolgreiche Optimierung darstellt.

Durch deutliche Fortschritte seitens der Analysis freier Randwertprobleme in den letzten zwei Dekaden besteht aktuell die Möglichkeit, zunehmend komplexere Modelle mit weiteren

physiko-chemischen Prozessen am Interface hinsichtlich ihrer grundlegenden Eigenschaften (z.B. Wohlgestelltheit, Stabilität, Energie-Abschätzungen) zu untersuchen. Hier kann die mathematische Analysis helfen, die Modellierung voranzutreiben, indem z.B. neue Modelle mit diffusem Interface entwickelt werden, die Topologieänderungen erlauben oder im Rahmen der Modelle mit scharfem Interface bei Systemen mit Phasenübergang offene Fragen hinsichtlich der Bedingungen am Interface aus Sicht der resultierenden analytischen Eigenschaften studiert werden.

Die Entwicklungen im Numerikbereich haben inzwischen den Stand erreicht, dass zuverlässige effiziente Simulationsmethoden zur approximativen Lösung dreidimensionaler laminarer inkompressibler *einphasiger* Navier-Stokes-Gleichungen in (kommerziellen) Paketen zur Verfügung stehen. Außerdem sind inzwischen viele dieser Methoden durch rigorose mathematische Analysen untermauert worden. Erste Bausteine zur numerischen Behandlung der inkompressiblen *zweiphasigen* Navier-Stokes-Gleichungen mit Grenzflächenspannung in einfachen Geometrien, gekoppelt mit den einfachsten Modellen zur Beschreibung von Transportprozessen an der freien Phasengrenze sind erst vor kurzem entwickelt worden. Dabei sind Techniken aus anderen Forschungsgebieten, etwa Level-Set Techniken, die zur Darstellung geometrischer Objekte entwickelt wurden, eingeflossen, die auf die neue Anwendung adaptiert und weiterentwickelt werden müssen. Viele dieser Bausteine basieren auf ad-hoc Ansätzen und entbehren Analysen hinsichtlich Genauigkeit, Stabilität und Effizienz. Detailliertere Modelle zur Beschreibung von Transportprozessen an fluiden Phasengrenzen, wobei zum Beispiel auch Konzentrationsgrenzschichten an der Phasengrenze und eine realistischere Kopplung zwischen Transport und Hydrodynamik berücksichtigt werden, haben eine enorme numerische Komplexität und können mit den jetzigen numerischen Verfahren nicht simuliert werden. Daher ist gerade jetzt ein guter Zeitpunkt, die Numerik mehrphasiger Strömungen rigoros anzugehen.

Wir erwarten,

- dass neue Meilensteine bei der Grundlagenforschung im Bereich der Modellierung, Analysis und Simulation von fluiden Grenzflächen erreicht werden: neue Modelle zur Erfassung zusätzlicher physikalischer und physiko-chemischer Phänomene; mathematische Analysen der resultierenden freien Randwertprobleme mit neuen bzw. weiterentwickelten Techniken sowohl für starke als auch schwache Lösungskonzepte, für qualitative Untersuchungen und rigorose asymptotische Analysen; neue bzw. verbesserte und validierte numerische Verfahren zur Simulation von Zweiphasenströmungen; mehr Rigorosität in der Numerik von Zweiphasenströmungen.
- eine neue Qualität der interdisziplinären Zusammenarbeit zwischen Mathematikern (Angewandte Analysis und Numerik), Ingenieuren (Computational Engineering, Verfahrenstechnik, Fluidmechanik) und Physikern (Grenzflächenrheologie) auf den umrissenen Forschungsgebieten durch den hier zwingend erforderlichen wissenschaftlichen Austausch.
- kräftige Impulse in Richtung zukunftssträchtiger Anwendungsgebiete z.B. innerhalb der Mikroverfahrenstechnik, der Mikrofluidik und den Materialwissenschaften. Ein tiefergehendes Verständnis der Grenzflächenphänomene ist wichtige Voraussetzung z.B. zur
 - Modellierung, Optimierung und Steuerung neuer Prozesse in der Mikroverfahrenstechnik, etwa “Lab-on-a-Chip” Prozesse.
 - Modellierung und Steuerung von Prozessen mit an fluiden Grenzflächen adsorbierten Nanopartikeln.
 - Oberflächenbeschichtung und -vergütung.
 - Optimierung/Redesign von Grundoperationen der Verfahrenstechnik wie Extraktion, Rektifikation, Emulgieren etc.

- Modellierung und Steuerung von Mehrphasenreaktoren z.B. in der chemischen Verfahrenstechnik.
- Modellierung, Optimierung und Steuerung des Transports von Fluiden bei Mikro-Gravitation.

7 Literatur

(Namen von Initiatoren sind fettgedruckt)

- [1] **Abels**, H., *On a diffuse interface model for two-phase flows of viscous, incompressible fluids with matched densities*, Arch. Rat. Mech. Anal., DOI 10.1007/s00205-008-0160-2.
- [2] **Abels**, H., *On generalized solutions of two-phase flows for viscous incompressible fluids*, Interfaces Free Bound., **9** 31–65 (2007).
- [3] **Abels**, H., *On the notion of generalized solutions of two-phase flows for viscous incompressible fluids*, RIMS Kôkyûroku Bessatsu, **B1**, 1–15 (2007).
- [4] **Abels**, H. *Existence of weak solutions for a diffuse interface model for viscous, incompressible fluids with general densities*. Preprint, Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, No. 5/2008.
- [5] **Abels**, H., und M. Röger. *Existence of weak solutions for a non-classical sharp interface model for a two-phase flow of viscous, incompressible fluids*. Preprint, Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, No. 71/2008.
- [6] Abergel, F., und C. Dupaix, *Existence of smooth, stationary interfaces for Marangoni-type flow*. Nonl. Anal., Theory Meth. Appl. **27** (11) 1329–1350 (1996).
- [7] Alke, A., **Bothe**, D., *VOF-simulation of fluid particles influenced by soluble surfactant*, in Proc. 6th Int. Conf. Multiphase Flow, Leipzig, Germany (2007).
- [8] Anderson, D. M., G. B. McFadden, und A. A. Wheeler. *Diffuse-interface methods in fluid mechanics*, Annual review of fluid mechanics, **30**, 139–165. Annual Reviews, Palo Alto, CA, 1998.
- [9] Anderson, D. M., Paolo Cermelli, Eliot Fried, Morton E. Gurtin, und Geoffrey B. McFadden, *General dynamical sharp-interface conditions for phase transformations in viscous heat-conducting fluids*, J. Fluid Mech., **581**, 323–370 (2007).
- [10] **Bänsch**, E., *Numerical methods for the instationary Navier–Stokes equations with a free capillary surface*. Habilitationsschrift, Universität Freiburg (1998)
- [11] **Bänsch**, E. und B. Höhn: *Numerical simulation of a silicon floating zone with a free capillary surface*, In: Proceedings of the SCCE II, vol. 1 Springer (1999).
- [12] **Bänsch**, E., A. Schmidt, *Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection*. Interfaces and Free Boundaries, **2** 95–115 (2000).
- [13] **Bänsch**, E., *Finite element discretization of the Navier–Stokes equations with a free capillary surface*, Numer. Math. **88**, 203–235 (2001).
- [14] Bigioni, T. P., X. Lin, T. T. Nguyen, E. I. Corwin, T. A. Witten, und H. M. Jaeger, *Kinetically driven self assembly of highly ordered nanoparticle monolayers*, Nature **5** 265–270 (2006).
- [15] Blesgen, T., *A Generalization of the Navier-Stokes Equations to Two-Phase Flows*, J. Physics D (Applied Physics) **32** 1119–1123 (1999).
- [16] Boschert, S., A. Schmidt, K. G. Siebert, E. **Bänsch**, K-W. Benz, G. Dziuk, T. Kaiser: *Simulation of Industrial Crystal Growth by the Vertical Bridgman Method*. In: Key Technology for the Future. Joint Projects between Universities and Industry. Springer (2003).
- [17] **Bothe**, D., Koebe M., Wielage, K., Prüss, J., Warnecke, H.-J., *Direct numerical simulation of mass transfer between rising gas bubbles and water*. In: Bubbly Flows: Analysis, Modelling and Calculation (M. Sommerfeld Ed.), Heat and Mass Transfer, 159–174, Springer 2004.
- [18] **Bothe**, D., Kröger M., Alke, A., Warnecke, H.-J., *VOF-based simulation of reactive mass transfer across deformable interfaces*, Progress in CFD (erscheint 2008).
- [19] **Bothe**, D., Prüss, J., Simonett, G., *Well-posedness of a two-phase flow with soluble surfactant*. In: Nonlinear Elliptic and Parabolic Problems (M. Chipot, J. Escher, eds.), 37–61, Birkhäuser 2005.

- [20] **Bothe**, D., Prüss, J., *On the Two-Phase Navier-Stokes Equations with Boussinesq-Scriven Surface Fluid*, J. Math. Fluid Mech. **11** 1–18 (2008).
- [21] Demlow, A. und G. Dziuk, *An adaptive Finite Element method for the Laplace-Beltrami operator on implicitly defined surfaces*, SIAM J. Numer. Anal., **45** 421–442 (2007).
- [22] Denisova, I.V., *Evolution of compressible and incompressible fluids separated by a closed interface*, Interfaces Free Bound. **2** 283–312 (2000).
- [23] Denisova, I. V., und V. A. Solonnikov, *Solvability in Hölder spaces of a model initial-boundary value problem generated by a problem on the motion of two fluids*. Zap. Nauchn. Sem. Leningrad. Otdel. Mat. Inst. Steklov. (LOMI), **188** (Kraev. Zadachi Mat. Fiz. i Smezh. Voprosy Teor. Funktsii. 22) 5–44, 186, (1991).
- [24] Denisova, I. V., V.A. Solonnikov, *Classical solvability of the problem on the motion of two viscous incompressible fluids*. St. Petersburg Math. J. **7**(5), 755-786 (1996); translation from Algebra Anal. **7**(5), 101-142 (1995).
- [25] Di Pietro, D.A., S. Lo Forte, N. Parolini, *Mass preserving finite element implementations of the level set method*, Appl. Numer. Math., **56** 1179–1195 (2006).
- [26] Hang Ding, P., D.M. Spelt, and Chang Shu, *Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios*, J. Comput. Phys. **22** 62078–2095 (2007).
- [27] Dziuk, G., *Finite elements for the Beltrami Operator on arbitrary surfaces*. In: Partial differential equations and calculus of variations (Eds. S. Hildebrandt und R. Leis), Lecture Notes in Mathematics **1357**, 142–155 (1988).
- [28] Dziuk, G. und C.M. Elliott, *Finite elements on evolving surfaces*, IMA J. Numer. Anal., **27**, 262–292 (2007).
- [29] J. Escher, J. Prüss, and G. Simonett. Analytic solutions for a Stefan problem with Gibbs-Thomson correction. *J. Reine Angew. Math.*, 563:1–52, 2003.
- [30] Feng, X., *Fully discrete finite element approximations of the Navier-Stokes-Cahn-Hilliard diffuse interface model for two-phase fluid flows*, SIAM J. Numer. Anal. **44** 1049–1072 (2006).
- [31] Ferri, J.K., Gorevski, N., Kotsmar, C., Leser, M.E., **Miller**, R., Desorption kinetics of surfactants at fluid interfaces by novel coaxial capillary pendant drop experiments, Colloids and Surfaces A **319**, 13-20 (2008).
- [32] Ganesan, S., G. Matthies, L. Tobiska, *On spurious velocities in incompressible flow problems with interfaces*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., **196** 1193–1202 (2007).
- [33] Ganesan, S., L. Tobiska, *An accurate finite element scheme with moving meshes for computing 3D-axisymmetric interface flows*, Internat. J. Numer. Methods Fluids, **57** 119–138 (2008).
- [34] Ghidersa, B., **Wörner**, M., Cacuci, D.G., *Exploring the flow of immiscible fluids in a square vertical mini-channel by direct numerical simulation*, Chem. Eng. J. **101** 285–294 (2004).
- [35] Gorevski, N., **Miller**, R., Ferri, J.K., Nonequilibrium exchange kinetics in sequential non-ionic surfactant adsorption: theory and experiments, Colloids and Surfaces A **323**, 12-18 (2008).
- [36] Groß, S., V. Reichelt und A. **Reusken**, *A Finite Element based Level Set method for two-phase incompressible flows*, Comp. Visual. Sci., **9**, 239–257 (2006).
- [37] Groß, S., A. **Reusken**, *Finite element discretization error analysis of a surface tension force in two-phase incompressible flows*, SIAM J. Numer. Anal. **45**, 1679–1700 (2007).
- [38] Groß, S. und A. **Reusken**, *An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows*, J. Comp. Phys., **224** 40–58 (2007).
- [39] Günther, A. und K.F. Jensen, *Multiphase microfluidics: from flow characteristics to chemical and materials synthesis*, Lab-on-a-Chip **6** 1487–1503 (2006).
- [40] Günther, A., Khan S.A., Thalmann, M., Trachsel, F., Jensen, K.F., Transport and reaction in microscale segmented gas-liquid flow. Lab-on-a-Chip, **4** (2004) 278-286.
- [41] **Hardt**, S., *An extended VOF method for micro flows with short-range interactions between fluid interfaces*, Phys. Fluids **17** 100601-1-100601-9 (2007).
- [42] **Hardt**, S., and F. Wondra, *Evaporation Model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms*, J. Comput. Phys. **227** 5871–5895 (2008).

- [43] Hessel, V., S. **Hardt**, und H. Löwe, *Chemical Micro Process Engineering*, Wiley-VCH, Weinheim (2004).
- [44] Hillairet, M., *Lack of collision between solid bodies in a 2D incompressible viscous flow*, Comm. Partial Differential Equations, **32** 1345–1371 (2007).
- [45] Hillairet, M., und T. Takahashi, *Collision in 3d fluid structure interaction problems*, Preprint, Laboratoire MIP Université Paul Sabatier (2008).
- [46] Hirth, C.W., B.D. Nichols, *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries.*, J. Comp. Phys., **39** 201–225 (1981).
- [47] Hoffmann, K.-H., and V. N. Starovoitov, *Phase transitions of liquid-liquid type with convection*, Adv. Math. Sci. Appl. **8** 185–198 (1998).
- [48] Hysing, S., S. Turek, D. Kuzmin, N. Paroloni, E. Burman, S. Ganesan und L. Tobiska, *Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics*, Internat. J. Numer. Methods Fluids, to appear (2008).
- [49] James, A.J. und J. Lowengrub, *A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant*, J. Comp. Phys., **201** 685–722 (2004).
- [50] Kay, D., V. Styles, und R. Welford, *Finite element approximation of a Cahn-Hilliard-Navier-Stokes system*, Interfaces Free Bound. **10** 15–43 (2008).
- [51] Kay, D., und R. Welford, *Efficient numerical solution of Cahn-Hilliard-Navier-Stokes fluids in 2D*, SIAM J. Sci. Comput. **29** 2241–2257 (2007).
- [52] Kim, J., Kang, K., und J. Lowengrub, *Conservative multigrid methods for Cahn-Hilliard fluids*. J. Comput. Phys., **193** 511–543 (2004).
- [53] Krahl, R., M. Adamov, M. Lozano Avilés, E. **Bänsch**, *A model for two phase flow with evaporation*. In: Proceedings of 3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation, Pisa, Italy, 22.-24. (2004).
- [54] Krahl, R., J. Gerstmann, P. Behruzi, E. **Bänsch**, M. Dreyer: *Dependency of the Apparent Contact Angle on Non-Isothermal Conditions*, Physics of Fluids, in print (2008).
- [55] Kreutzer, M., F. Kapteijn, J.A. Moulijn, J.J. Heiszwolf, *Multiphase monolith reactors: chemical reaction engineering of segmented flow in microchannels*, Chem. Eng. Sci. **60** 5895-5916 (2005).
- [56] Lowengrub, J., und L. Truskinovsky. *Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions*, R. Soc. Lond. Proc. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci., **454** 2617–2654 (1998).
- [57] S. Luckhaus. *Solutions for the two-phase Stefan problem with the Gibbs-Thomson law for the melting temperature*. European J. Appl. Math. **1**, 101-111, 1990.
- [58] Malsch, D., M. Kielpinski, R. Merthan, J. Albert, G. Mayer, J.M. Köhler, H. Süße, M. Stahl, T. Henkel, *μ PIV-Analysis of Taylor flow in micro channels*, Chem. Eng. J. **135S** 166–172 (2008).
- [59] **Miller**, R., Fainermann, V.B., Kovalchuk, V.I., Bubble and Drop Pressure Tensiometry, pp. 814-828 in *Encyclopedia of Surface and Colloid Science* (A. Hubbard, Ed.). Marcel Dekker, New York 2002.
- [60] Münchow, G., F. Schönfeld, S. **Hardt**, und K. H. Graf, *Protein diffusion across the interface in aqueous two-phase systems*, Langmuir **24** 8547–8553 (2008).
- [61] Olshanskii, M. A., J. Peters und A. **Reusken**, *Uniform preconditioners for a parameter dependent saddle point problem with application to generalized Stokes interface equations*, Numer. Math. **105** 159–191 (2006).
- [62] Olshanskii, M. A. und A. **Reusken**, *Analysis of a Stokes interface problem*, Num. Math. **103** 129–149 (2006).
- [63] Olshanskii, M. A. und A. **Reusken**, *An Eulerian Finite Element method for elliptic equations on moving surfaces*, SIAM J. Numer. Anal., submitted (2008).
- [64] Onea A., **Wörner** M., Cacuci D.G., *A qualitative computational study of interfacial mass transfer in upward bubble train flow through square and rectangular mini-channels*, erscheint bei Chemical Engineering Science (2008).
- [65] Peters, J., V. Reichelt und A. **Reusken**, *Fast iterative solvers for discrete Stokes equations*, SIAM J. Sci. Comput., **27** 646–666 (2005).

- [66] Pijl, S.P. van der, A. Segal, C. Vuik, P. Wesseling, *A mass-conserving Level-Set method for modelling of multi-phase flows*, Int. J. Numer. Meth. Fluids, **47** 339–361 (2005).
- [67] Pozrikidis, C. (ed.), *Modeling and Simulation of Capsules and Biological Cells*, CRC Math. Biology and Medicine Series, Chapman & Hall, Boca Raton 2003.
- [68] J. Prüss, J. Saal, and G. Simonett. Existence of analytic solutions for the classical Stefan problem. *Math. Ann.*, 338(3):703–755, 2007.
- [69] Renardy, Y., M. Renardy und V. Cristini, *A new volume-of-fluid formulation for surfactants and simulations of drop deformation under shear at a low viscosity ratio*, European Journal of Mechanics. B. Fluids **21**, 49–59 (2001).
- [70] **Reusken**, A., *Analysis of an extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows*, Comp. Vis. Science, **11**, 293–305 (2008).
- [71] M. Röger. *Solutions for the Stefan problem with Gibbs-Thomson law by a local minimisation*. Interf. Free Bound. 6, 105-133, 2004.
- [72] Sethian, J.A., P. Smereka, *Level set methods for fluid interfaces*. Annu. Rev. Fluid Mech. **35** 341–347 (2003).
- [73] Solonnikov, V. A., *On the stability of nonsymmetric equilibrium figures of a rotating viscous incompressible liquid*, Interfaces Free Bound., **6** 461–492 (2004).
- [74] Starovoitov, V.N., *A model of the motion of a two-component fluid taking into account capillary forces*, Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz. **35** 85–92 (1994).
- [75] Stratford, K., R. Adhikari, I. Pagonabarraga, J. Desplat, und M. E. Cates, *Colloidal Jamming at Interfaces: a Route to Fluid-bicontinuous Gels*, Science **309** 2198–2201 (2005).
- [76] Sussman, M. K. M. Smith, M. Y. Hussaini, M. Ohta, R. Zhi-Wei, *A sharp interface method for incompressible two-phase flows*, J. of Comp. Phys. **221**, 469–505 (2007).
- [77] Tanaka, N., *Global existence of two-phase non-homogeneous viscous incompressible fluid*, Commun. Partial Differ. Equations **18** 41–81 (1993).
- [78] Tanaka, N., *Two-phase free boundary problem for viscous incompressible thermo-capillary convection*. Jap. J. Math., New Ser. **21** 1–42 (1995).
- [79] Tornberg, A.-K., B. Engquist, *Numerical approximation of singular source terms in differential equations*, J. Comput. Phys. **200** 462–488 (2004).
- [80] Tryggvason, G., B. Bunner, A. Esmaeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, Y.-J. Jan *A front tracking method for the computation of multiphase flows*, J. Comput. Phys. **169** 708–759 (2001).
- [81] Wagner, A., *Nonstationary Marangoni convection*, Appl. Math. **26** 195–220 (1999).
- [82] Weller, S. *Higher Order Time Discretization for Free Surface Flow*. Diplomarbeit, Univ. Erlangen (2008).
- [83] **Wörner**, M., Ghidersa, B., Onea, A., *A model for the residence time distribution of bubble-train-flow in a square mini-channel based on direct numerical simulation results*, Int. J. Heat Fluid Flow **28** 83–94 (2007).
- [84] Xu, J.-J., Z. Li, J. Lowengrub, H. Zhao, *A level-set method for interfacial flows with surfactant*, J. Comp. Phys. **212** 590–616 (2006).
- [85] Zadrzynska, E., *Free boundary problem for a viscous heat-conducting flow with surface tension*, Top. Meth. in Nonl. Anal. **19** 313–338 (2002).

Anhang A

Validierungs-Experiment mit Taylor-Blasen

Ein mögliches Validierungsexperiment, das die im Abschnitt 2.4 des Antrages formulierten Kriterien erfüllt, stellen Taylor-Blasen dar. Dieser Anhang erläutert, warum Taylor-Blasen im Hinblick auf den SPP als besonders geeignet erscheinen und skizziert, wie ein Validierungs-Experiment aussehen könnte.

1 Begriffe und Bedeutung der Taylor-Strömung

Unter einer Taylor-Blase versteht man eine langgestreckte Blase, die den Querschnitt eines Strömungskanals nahezu vollständig ausfüllt. Die Blase benetzt die Kanalwand nicht und ist überall von einem dünnen Flüssigkeitsfilm umgeben. Strömen in einem Kanal zahlreiche Taylor-Blasen hintereinander, so spricht man von Taylor-Strömung. Bei der Taylor-Strömung sind benachbarte Blasen durch Flüssigkeitspropfen getrennt. Die Taylor-Strömung in engen Kanälen ist für zahlreiche Anwendungen der Mikrofluidik von Interesse (z.B. Mikroverfahrenstechnik [1], Monolith-Reaktoren [2], Materialsynthese, Analyse von biologischen/chemischen Proben, ...). Häufig ist der Kanal-Querschnitt nicht kreisförmig sondern rechteckig. Überblickspapiere zur Taylor-Strömung sind [2] und [3].

Wesentliche Vorteile der Taylor-Strömung in Mini- und Mikrokanälen sind:

- Gute Wärme- und Stoffübertragung durch große spezifische Austauschfläche (Grenzfläche/Volumen)
- Segmentierung der Flüssigkeit und dadurch geringe axiale Dispersion
- Gute Vermischung innerhalb eines Flüssigkeitspropfens durch Rezirkulation
- Kurzer Diffusionsweg für den Stofftransport aus der Gasphase zur katalytisch beschichteten Wand

2 Hydrodynamik der Taylor-Strömung

Die Hydrodynamik von Taylor-Blasen in kleinen Kanälen wird wesentlich durch viskose Reibungskräfte und Oberflächenspannungskräfte bestimmt; bei höheren Geschwindigkeiten sind auch Trägheitskräfte von Bedeutung. Die relevanten dimensionslosen Kennzahlen sind die Kapillarzahl $Ca = \mu_L U_B / \sigma$ (Verhältnis der Reibungskräfte zu Oberflächenspannungskräften) und die Reynolds-Zahl $Re = \rho_L D_h U_B / \mu_L$. Dabei ist U_B die Blasen-Geschwindigkeit, D_h der hydraulische Durchmesser des Kanals, σ der Koeffizient der Oberflächenspannung, ρ_L die Dichte und μ_L die dynamische Viskosität der Flüssigkeit. Bei kreisförmigen Kanälen (Durchmesser d) ist die Dicke des Flüssigkeitsfilms (δ) entlang des Umfangs der Taylor-Blase konstant und wird über einen weiten Bereich von Ca gut durch die Beziehung $\delta d = 0,66 Ca^{2/3} / (1 + 3,33 Ca^{2/3})$ beschrieben. Die Front und das Ende der Blase sind bei kleinen Werten von Ca halbkugelförmig. Mit Zunahme von Ca nimmt die Krümmung des Meniskus auf der Kanalachse an der Front der Blase zu und am Ende ab. Für hohe Werte von Ca bildet sich am Blasenende eine Eindellung aus und die Krümmung des nacheilenden Meniskus wird negativ. Im Flüssigkeits-Slug tritt für $Ca > 0,7$ eine Bypass-Strömung auf und für $Ca < 0,7$ eine Rezirkulations-Strömung, siehe Abb. 1.

In der Verfahrenstechnik basieren zahlreiche Mehrphasenreaktoren auf dem Stofftransport aus der dispersen Gas-Phase durch die kontinuierliche Flüssigkeit zur katalytisch beschichteten Wand bzw. zu dispergierten Feststoffpartikeln. Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass für zahlreiche Anwendungen monolithische Mehrphasenreaktoren mit Taylor-Strömung wesentliche Vorteile gegenüber konventionellen Apparaten wie Rieselbett-Reaktoren und Blasensäulen aufweisen [2] [4]. Bei der Taylor-Strömung erfolgt der Stofftransport zum einen über den dünnen Flüssigkeitsfilm zum anderen über den Flüssigkeitspropfen. Welcher Stofftransportweg bei welchen hydrodynamischen und reaktionstechnischen Bedingungen dominiert ist weitgehend unverstanden.

Da die Taylor-Strömung maßgeblich durch Oberflächenspannungskräfte bestimmt ist, kann bereits eine geringe Zugabe von Tensiden einen großen Einfluss haben. Dabei treten die größten Konzentrationsgradienten an den Stagnationsringen an der Blasenfront auf (vergl. Abb. 1 rechts). Nach

[3] sind die Effekte bei variabler Oberflächenspannung aufgrund von oberflächenaktiven Substanzen weitgehend ungeklärt und es gibt Widersprüche zwischen theoretischen, numerischen und experimentellen Daten. Weiter wird in [3] festgestellt, dass für formierte Blasen und voll entwickelte Strömung die hydrodynamischen Vorgänge in reinen Systemen für kreisförmige Kanäle weitgehend verstanden sind. Forschungsbedarf gibt es dagegen für Kanäle mit nicht-kreisförmigem Querschnitt.

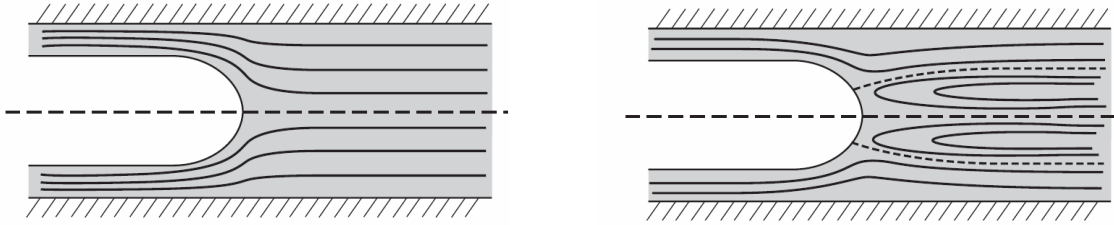


Abb. 1.: Strömungsmuster im Flüssigkeits-Slug in dem mit der Blase mit-bewegten Koordinatensystem: links Bypass-Strömung, rechts Rezirkulationsströmung (aus [2]).

Für quadratische Kanäle variiert die Dicke des Flüssigkeitsfilms über den Blasenumfang. Für $Ca > 0,04$ ist die Blase rotationssymmetrisch, für $Ca < 0,04$ dringt sie in die Kanälecken vor. Die Formänderung von Front und Ende der Blase mit Zunahme von Ca ist qualitativ ähnlich zu der im kreisförmigen Kanal.

3 Vorschläge für ein Validierungsexperiment mit Taylor-Blasen

Taylor-Blasen bieten den Vorteil, dass das Problem maßgeblich durch einen Kontrollparameter (die Kapillar-Zahl Ca) bestimmt ist. Ca kann durch Variation der Blasengeschwindigkeit um 1 bis 2 Größenordnungen variiert werden. Ein weiterer Bereich kann durch unterschiedlich viskose Flüssigkeiten abgedeckt werden. Für einen quadratischen Kanal kann so die Komplexität der Blasenform sehr einfach variiert werden. Die Form der Blase bei unterschiedlichen Werten von Ca stellt die wesentliche Messgröße zur Validierung der Hydrodynamik von Codes/numerischen Methoden dar.

Vorschläge für ein konkretes Experiment zur Hydrodynamik

- Orientierung des Kanals: vertikal (bei horizontaler Anordnung ist das Problem wegen der Schwerkraft nicht mehr symmetrisch wenn der hydraulische Durchmesser des Kanals im mm Bereich liegt)
- Form des Kanalquerschnitts
 - zunächst kreisförmig (in Rechnungen kann Rotationssymmetrie angenommen werden)
 - später quadratisch (Vordringen der Blase in die Ecken; Betrachtung von 1/4 oder 1/8 des Kanals ist aufgrund von Symmetrien und zur Begrenzung des Rechenaufwandes möglich)
- Bereich der Kapillar-Zahl: Variation von Ca über zwei Größenordnungen von ca. 0,01 bis 1 (unterer Bereich deckt das Vordringen der Blase in die Ecken des quadratischen Kanals ab, der obere Bereich deckt den Übergang von Rezirkulations-Strömung zu Bypass-Strömung im Flüssigkeits-Slug ab)
 - Realisierung des Ca Bereiches über zwei unterschiedlich viskose Flüssigphasen (niedrige Ca z.B. Wasser, hohe Ca Silikonöl oder eine Wasser-Glycerol-Mischung). Für kleine Ca sind numerische Probleme durch parasitäre Strömungen und den dünnen Flüssigkeitsfilm zu erwarten.
 - Die Messungen mit beiden Flüssigkeiten sollten im Bereich $Ca \approx 0.1$ überlappen um so den Einfluss von Re zu untersuchen (es ist $Re = Ca \cdot La$ mit der Laplace-Zahl $La = \sigma \rho_L D_h / \mu_L^2$). Re sollte im Bereich 0,1–100 liegen (Relevanz für die Mikrofluidik). Nach Auswahl einer Stoffpaarung und eines Bereiches für Ca führt die Festlegung eines Bereiches für Re auf eine Abschätzung für D_h .
- Abmessung des Kanalquerschnittes: Glaskapillaren mit rundem oder quadratischem Querschnitt und unterschiedlichen Abmessungen sind standardmäßig verfügbar. Der hydraulische Durchmesser sollte im Bereich von ca. 1 mm bis max. 5 mm liegen. Bei kleineren Kanälen wird die Messung der Filmdicke zu ungenau, bei größeren Kanälen werden die Blasen-Geschwindigkeit und die Reynolds-Zahl zu groß. Die konkreten Abmessungen des Kanal-Querschnitts müssen sich aber wie oben diskutiert aus der Wahl des Stoffsystems und den gewünschten Bereichen für (Ca ; Re) ergeben.

- Strömungsrichtung: Prinzipiell ist sowohl Aufwärts- als auch Abwärtsströmung denkbar. Aufwärtsströmung erscheint günstiger, da hier die Blase mit ihrer Spitze stabil in der Mitte des Kanals aufsteigt. Bei Abwärtsströmung wirken treibender Druckgradient und Auftriebskraft in entgegengesetzte Richtung. Dies hat unter Umständen zur Folge, dass die Position der abwärts gerichteten Spitze der Blase leicht von der Kanalachse abweicht und über der Zeit variiert.
- Einzel-Blase oder Taylor-Strömung: Beides ist möglich, erfordert aber für Codes unterschiedliche Herangehensweisen. Bei Einzelblasen bieten sich Simulationen im mit-bewegten System an, mit Vorgabe von Ein-/Austrittsbedingungen an den durchströmten Rändern des Rechengebietes. Bei der Taylor-Strömung bietet sich die Betrachtung einer Einheitszelle (eine Blase und ein Flüssigkeits-Slug) mit periodischen Randbedingungen an. Einzelblasen erscheinen hier günstiger, da sich eine Taylor-Strömung mit identischen Blasen und Flüssigkeits-Slugs möglicherweise nur schwer realisieren lässt.
- Messtechnik:
 - Blasenform: Die Dicke von Flüssigkeitsfilmen kann mit der „laser focus displacement“ Methode (LFD) gemessen werden [5]. Bewegt sich eine Taylor-Blase an der Messstelle vorbei, so kann das zeitabhängige LFD Signal umgerechnet werden in das Blasenprofil. Für quadratische Kanäle sollte die Filmdicke sowohl in der Mitte als auch in diagonaler Richtung gemessen werden. Zeitlich gemittelte Messungen beider Filmdicken bei der Taylor-Strömung in einem quadratischen Kanal ($D_h = 200 \mu\text{m}$) mit der „confocal laser scanning microscopy“ werden in [6] vorgestellt.
 - Geschwindigkeitsfeld: Messungen mit PIV bzw. μPIV . Dabei ist sicher zu stellen, dass die Zugabe der Tracer-Partikel keinen Einfluss auf die Blasenform und die Grenzflächeneigenschaften hat. Alternativ bieten sich LDA Messungen im Flüssigkeitsfilm und Flüssigkeitspfropfen an.

Vorschläge für den späteren Ausbau des Experiments

- Stoffübergang von der Gasphase in die Flüssigkeit: Das lokale momentane Konzentrationsfeld beim Übergang einer Komponente (z.B. Sauerstoff) aus einer Taylor-Blase in die Flüssigkeit (z.B. Wasser) kann mit Laser-induzierter Fluoreszenz (LIF) gemessen werden.
- Thermische Marangoni-Effekte: Diese können über die Beheizung/Kühlung einer Seitenwand (z.B. eines quadratischen Kanals) definiert erzeugt und aufgrund des kurzen Diffusionswegs von der Wand über den dünnen Flüssigkeitsfilm zum Interface in ihrer Wirkung unmittelbar untersucht werden.
- Grenzflächenaktive Substanzen: Grenzflächenaktive Substanzen können piezoelektrisch injiziert werden, doch ist unklar inwieweit dies definiert und reproduzierbar erfolgen kann, und welche Messtechnik zur Quantifizierung der Vorgänge auf der Phasengrenzfläche eingesetzt werden kann.
- Untersuchung von Koaleszenz-Vorgängen: Dies kann durch die aufeinanderfolgende Einbringung von zwei Blasen mit unterschiedlichem Volumen erfolgen. Die kleinere nachlaufende Blase nimmt im Kanal einen Bereich mit höherer mittlerer Geschwindigkeit ein und hat eine Übergeschwindigkeit relativ zur voreilenden Blase. Dies führt unter definierten Bedingungen zum Kontakt/zur Koaleszenz.

Literatur

- [1] Hessel, V., Angeli, P., Gavriilidis, A., Löwe, H.: Gas-liquid and gas-liquid-solid microstructured reactors. Contacting principles and applications. Ind. Eng. Chem. Res. 44 (2005) 9750-9769.
- [2] Kreutzer, M., Kapteijn, F., Moulijn, J.A., Heiszwolf, J.J.: Multiphase monolith reactors: chemical reaction engineering of segmented flow in microchannels. Chem. Eng. Sci. 60 (2005) 5895-5916.
- [3] Angeli, P., Gavriilidis, A.: Hydrodynamics of Taylor flow in small channels: a review. Proc. IMechE Part C: J. Mech. Eng. Sci. 222 (2008) 737-751.
- [4] Roy, S., Bauer, T., Al-Dahhan, M., Lehner, P., Turek, Th.: Monoliths as multiphase reactors: a review. AIChE Journal 50 (2004) 2918-2938.
- [5] Hazuku, T., Fukamachi, N., Takamasa, T., Hibiki, T., Ishii, M.: Measurement of liquid film in microchannels using a laser focus displacement meter. Exp. Fluids 38 (2005) 780-788.
- [6] Fries, D.M., Trachsel, F., von Rohr, P.R.: Segmented gas-liquid flow characterization in rectangular microchannels. Int. J. Multiph. Flow 34 (2008) 1108-1118.