Kopplung von CFD und Populationsbilanz zur Simulation der Tropfengrößenverteilung in gerührten Systemen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

A. Walle[1], J. Heiland[2], M. Schäfer[1], V. Mehrmann[2]

[1] *TU Darmstadt, Fachgebiet für Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau*
[2] *TU Berlin, Fachgebiet Mathematik*

ProcessNet Jahrestreffen der Fachausschüsse CFD und Mischvorgänge
Dortmund, 21.-23. Februar 2011

Agenda

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Motivation und Zielsetzung

Populationsbilanz

Direkte quadratische Momentenmethode (DQMOM)

Implementierung in FASTEST-3D

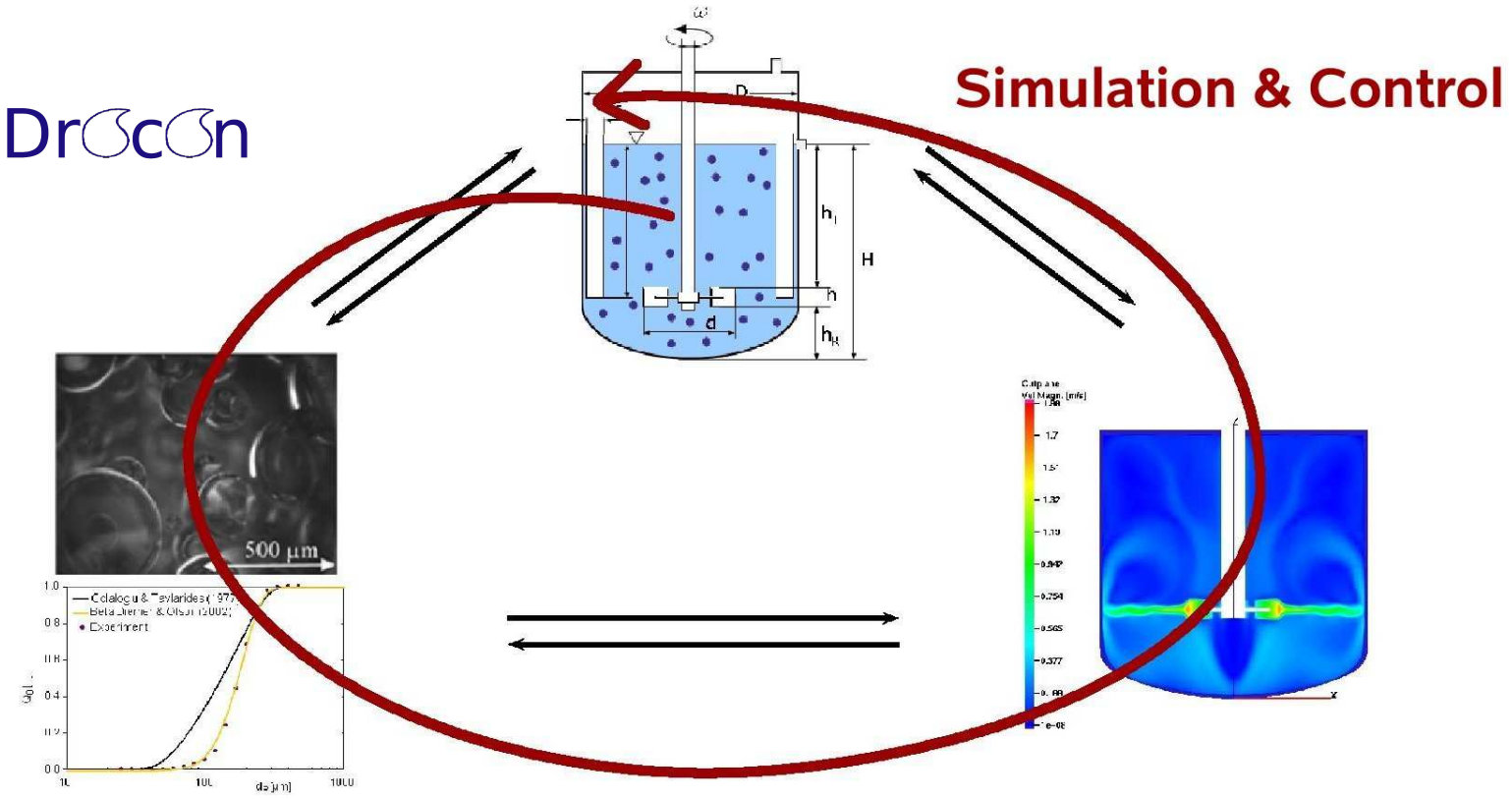
Ergebnisse

Zusammenfassung und Ausblick

Motivation und Zielsetzung (1)

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

DFG-Projekt: Modelling, Simulation and Control of Drop Size Distributions in Stirred Liquid/Liquid Systems



Motivation und Zielsetzung (2)
Simulation von Tropfengrößenverteilungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Motivation

- In vielen verfahrenstechnischen Anwendungen: Gerührte Systeme
- Bestimmender Prozessparameter: Tropfengröße (⇒**Populationsbilanz**)

Motivation und Zielsetzung (2)

Simulation von Tropfengrößenverteilungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Motivation

- In vielen verfahrenstechnischen Anwendungen: Gerührte Systeme
- Bestimmender Prozessparameter: Tropfengröße (⇒**Populationsbilanz**)

→ Vorhersage und Kontrolle der Tropfengrößenverteilung!

- Genaue Kenntnis der umgebenden Strömung
- Berechnung der Populationsbilanz (⇒**kommerzielle Software?**)

Motivation und Zielsetzung (2)

Simulation von Tropfengrößenverteilungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Motivation

- In vielen verfahrenstechnischen Anwendungen: Gerührte Systeme
- Bestimmender Prozessparameter: Tropfengröße (⇒**Populationsbilanz**)

→ Vorhersage und Kontrolle der Tropfengrößenverteilung!

- Genaue Kenntnis der umgebenden Strömung
- Berechnung der Populationsbilanz (⇒**kommerzielle Software?**)

→ Vorteile der CFD nutzen!

- Weniger Aufwand/Kosten als experimentelle Untersuchungen
- Lösen der Populationsbilanz als zusätzliche skalare Transportgleichung

fnb

Motivation und Zielsetzung (2)

Simulation von Tropfengrößenverteilungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Motivation

- In vielen verfahrenstechnischen Anwendungen: Gerührte Systeme
- Bestimmender Prozessparameter: Tropfengröße (⇒**Populationsbilanz**)

→ Vorhersage und Kontrolle der Tropfengrößenverteilung!

- Genaue Kenntnis der umgebenden Strömung
- Berechnung der Populationsbilanz (⇒**kommerzielle Software?**)

→ Vorteile der CFD nutzen!

- Weniger Aufwand/Kosten als experimentelle Untersuchungen
- Lösen der Populationsbilanz als zusätzliche skalare Transportgleichung

→ Implementation der Populationsbilanz direkt in FASTEST-3D

fnb

Populationsbilanz (1)
Anzahldichtefunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Die Populationsbilanz wird durch eine differentielle Bilanzgleichung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$ beschrieben.

Populationsbilanz (1)
Anzahldichtefunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Die Populationsbilanz wird durch eine differentielle Bilanzgleichung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$ beschrieben.

Wieviele Tropfen mit Merkmal ξ sind zur Zeit t am Ort x?

Populationsbilanz (1)
Anzahldichtefunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Die Populationsbilanz wird durch eine differentielle Bilanzgleichung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$ beschrieben.

Wieviele Tropfen mit Merkmal ξ sind zur Zeit t am Ort x?

Generelle Formulierung:

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_{\xi,x} \cdot \Phi_N(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \Phi_{N,x}(\xi, x, t) + \nabla_\xi \cdot \Phi_{N,\xi}(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

fnb

Populationsbilanz (1)
Anzahldichtefunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Die Populationsbilanz wird durch eine differentielle Bilanzgleichung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$ beschrieben.

Wieviele Tropfen mit Merkmal ξ sind zur Zeit t am Ort x?

Generelle Formulierung:

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_{\xi,x} \cdot \Phi_N(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \Phi_{N,x}(\xi, x, t) + \nabla_\xi \cdot \Phi_{N,\xi}(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

keine Änderung in ξ	$\Rightarrow$	$\nabla_\xi \cdot \Phi_{N,\xi}(\xi, x, t) = 0$
Vernachlässigung diffusiver Bewegung	$\Rightarrow$	$\Phi^D{}_{N,x} = 0$
Tropfen haben Fluid-Geschwindigkeit	$\Rightarrow$	$w_x = u$

Populationsbilanz (1)
Anzahldichtefunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Die Populationsbilanz wird durch eine differentielle Bilanzgleichung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$ beschrieben.

Wieviele Tropfen mit Merkmal ξ sind zur Zeit t am Ort x?

Generelle Formulierung:

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_{\xi,x} \cdot \Phi_N(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \Phi_{N,x}(\xi, x, t) + \nabla_\xi \cdot \Phi_{N,\xi}(\xi, x, t) + S(\xi, x, t)$$

keine Änderung in ξ $\Rightarrow$ $\nabla_\xi \cdot \Phi_{N,\xi}(\xi, x, t) = 0$

Vernachlässigung diffusiver Bewegung $\Rightarrow$ ${\Phi^D}_{N,x} = 0$

Tropfen haben Fluid-Geschwindigkeit $\Rightarrow$ $w_x = u$

Angepasste Formulierung:

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot (u \cdot f(\xi, x, t)) + S(\xi, x, t)$$

fnb

Populationsbilanz (2)

Reynolds-Mittelung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachtete Anwendung: Rührer ⇒turbulente Strömung

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot (u \cdot f(\xi,x,t)) + S(\xi,x,t)$$

Populationsbilanz (2)

Reynolds-Mittelung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachtete Anwendung: Rührer ⇒turbulente Strömung

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot (u \cdot f(\xi,x,t)) + S(\xi,x,t)$$

Ansatz: $f = \overline{f} + f' \qquad u = \overline{u} + u'$

$$\frac{\partial (\overline{f}+f')}{\partial t} = -\nabla \cdot ((\overline{u}+u') \cdot (\overline{f}+f')) + S(\xi,x,t)$$

fnb

Populationsbilanz (2)

Reynolds-Mittelung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachtete Anwendung: Rührer ⇒turbulente Strömung

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot (u \cdot f(\xi,x,t)) + S(\xi,x,t)$$

Ansatz: $f = \overline{f} + f' \qquad u = \overline{u} + u'$

$$\frac{\partial (\overline{f}+f')}{\partial t} = -\nabla \cdot ((\overline{u}+u') \cdot (\overline{f}+f')) + S(\xi,x,t)$$

Mittelung der Differentialgleichung

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\overline{uf}) - \nabla \cdot (\overline{u'f'}) + \overline{S}$$

fnb

Populationsbilanz (2)

Reynolds-Mittelung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Betrachtete Anwendung: Rührer ⇒turbulente Strömung

$$\frac{\partial f(\xi,x,t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot (u \cdot f(\xi,x,t)) + S(\xi,x,t)$$

Ansatz: $f = \overline{f} + f' \qquad u = \overline{u} + u'$

$$\frac{\partial (\overline{f}+f')}{\partial t} = -\nabla \cdot ((\overline{u}+u') \cdot (\overline{f}+f')) + S(\xi,x,t)$$

Mittelung der Differentialgleichung

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\overline{uf}) - \nabla \cdot (\overline{u'f'}) + \overline{S}$$

Modellierung des Schwankungsterms $(\overline{u'f'}) \Rightarrow \nabla \cdot (\overline{u'f'}) = -\nabla \cdot (c_t \nabla \overline{f})$

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\overline{uf}) + \nabla \cdot (c_t \nabla \overline{f}) + \overline{S}$$

fnb

Populationsbilanz (3)
Quellterme

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$S(V,x,t) = S^{coal}(V,x,t) - D^{coal}(V,x,t) + S^{break}(V,x,t) - D^{break}(V,x,t)$$

Populationsbilanz (3)
Quellterme

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$S(V,x,t) = S^{coal}(V,x,t) - D^{coal}(V,x,t) + S^{break}(V,x,t) - D^{break}(V,x,t)$$

- $S^{coal}(V,x,t) = \int_0^V R_{coal}(V',V'',y) f(V',x,t) f(V'',x,t) dV'$
- $D^{coal}(V,\xi,t) = -f(V,x,t) \int_0^{V_{max}-V} R_{coal}(V,V',y) f(V',x,t) dV'$
- $S^{break}(V,\xi,t) = \int_V^{V_{max}} n(V',y) \gamma(V,V',y) R_{break}(V',y) f(V',x,t) dV'$
- $D^{break}(V,\xi,t) = -R_{break}(V,y) f(V',x,t) dV'$

Populationsbilanz (3)
Quellterme

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$S(V,x,t) = S^{coal}(V,x,t) - D^{coal}(V,x,t) + S^{break}(V,x,t) - D^{break}(V,x,t)$$

- $S^{coal}(V,x,t) = \int_0^V R_{coal}(V',V'',y) f(V',x,t) f(V'',x,t) dV'$
- $D^{coal}(V,\xi,t) = -f(V,x,t) \int_0^{V_{max}-V} R_{coal}(V,V',y) f(V',x,t) dV'$
- $S^{break}(V,\xi,t) = \int_V^{V_{max}} n(V',y) \gamma(V,V',y) R_{break}(V',y) f(V',x,t) dV'$
- $D^{break}(V,\xi,t) = -R_{break}(V,y) f(V',x,t) dV'$

$$R_{coal},\ y(x,t),\ n(V',y),\ \gamma(V,V',y),\ R_{break}$$

fnb

Populationsbilanz (3)
Quellterme

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$S(V,x,t) = S^{coal}(V,x,t) - D^{coal}(V,x,t) + S^{break}(V,x,t) - D^{break}(V,x,t)$$

- $S^{coal}(V,x,t) = \int_0^V R_{coal}(V', V'', y) f(V', x, t) f(V'', x, t) dV'$
- $D^{coal}(V,\xi,t) = -f(V,x,t) \int_0^{V_{max}-V} R_{coal}(V, V', y) f(V', x, t) dV'$
- $S^{break}(V,\xi,t) = \int_V^{V_{max}} n(V', y) \gamma(V, V', y) R_{break}(V', y) f(V', x, t) dV'$
- $D^{break}(V,\xi,t) = -R_{break}(V, y) f(V', x, t) dV'$

$$R_{coal},\ y(x,t),\ n(V',y),\ \gamma(V,V',y),\ R_{break}$$

→ **Welche Anwendung wird betrachtet?**

fnb

Populationsbilanz (4)
Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$
- Ortsunabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$
- Ortsunabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten
- Vernachlässigung des Eigenschaftsvektors $y(x, t)$

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$
- Ortsunabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten
- Vernachlässigung des Eigenschaftsvektors $y(x, t)$

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$
- Ortsunabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten
- Vernachlässigung des Eigenschaftsvektors $y(x, t)$

Kopplung mit CFD $\rightarrow$ Berücksichtigung der Ortsabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten

$\epsilon(x, t)$, $k(x, t)$, $u(x, t)$

fnb

Populationsbilanz (4)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

- Flüssig/flüssig Systeme $\Rightarrow$nur eine innere Koordinate (z.B. $\xi = V$)
- Binärer Bruch $\Rightarrow n(V', y) = 2$
- Ortsunabhängigkeit der Koaleszenz- und Bruchraten
- Vernachlässigung des Eigenschaftsvektors $y(x, t)$

Populationsbilanz (5)

Modellierung von Tropfenbruch und -koaleszenz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

C. A. Coulaloglou und L. L. Tavlarides (1977)

$$R_{coal} = \left(c_{c,1} \frac{\epsilon^{\frac{1}{3}}}{[1+\Phi_d]} (V^{\frac{2}{3}} + V'^{\frac{2}{3}})(V^{\frac{2}{9}} + V'^{\frac{2}{9}})^{\frac{1}{2}} \right) e^{\left(-c_{c,2} \frac{\mu_c \rho_c \epsilon}{\sigma^2 [1+\Phi_d]^3} \left(\frac{V^{\frac{1}{3}} V'^{\frac{1}{3}}}{V^{\frac{1}{3}} + V'^{\frac{1}{3}}} \right)^4 \right)}$$

$$\gamma(V, V') = \frac{1}{\frac{V'}{6}\sqrt{2\pi}} e^{\left(\frac{(V - \frac{1}{2}V')^2}{2(\frac{V'}{6})^2} \right)}$$

$$R_{break} = \left(c_{b,1} \frac{\epsilon^{\frac{1}{3}}}{1+\Phi_d} V^{-\frac{2}{9}} \right) e^{\left(-\frac{c_{b,2}\sigma(1+\Phi_d)^2}{\rho_d \epsilon^{\frac{2}{3}} V^{\frac{5}{9}}} \right)}$$

Konstanten: $c_{c,1}$, $c_{c,2}$, $c_{b,1}$, $c_{b,2}$
Fluideigenschaften: ϵ, μ, ρ

fnb

DQMOM (1)

Idee Momentenmethode

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Eine kontinuierliche Funktion (z.B. $f(\xi, x, t)$) kann durch eine Verteilung beschrieben werden, die wiederum durch ihre Momente charakterisiert wird.

$$f(\xi, x, t) \rightarrow P(m_1(x,t), m_2(x,t), \dots)$$

DQMOM (1)

Idee Momentenmethode

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Eine kontinuierliche Funktion (z.B. $f(\xi, x, t)$) kann durch eine Verteilung beschrieben werden, die wiederum durch ihre Momente charakterisiert wird.

$$f(\xi, x, t) \rightarrow P(m_1(x,t), m_2(x,t), \dots)$$

Anstatt also die Funktion selbst zu berechnen, können die Momente berechnet werden, um die Verteilung zu bestimmen.

$$m_k(x,t) = \int_0^\infty \xi^k(x,t) \cdot f(\xi, x, t) d\xi$$

DQMOM (1)

Idee Momentenmethode

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Eine kontinuierliche Funktion (z.B. $f(\xi, x, t)$) kann durch eine Verteilung beschrieben werden, die wiederum durch ihre Momente charakterisiert wird.

$$f(\xi, x, t) \rightarrow P(m_1(x,t), m_2(x,t), \dots)$$

Anstatt also die Funktion selbst zu berechnen, können die Momente berechnet werden, um die Verteilung zu bestimmen.

$$m_k(x,t) = \int_0^\infty \xi^k(x,t) \cdot f(\xi, x, t) d\xi$$

Aufstellen der Transportgleichung für die Momente $m_k(x,t)$ anstatt für $f(\xi, x, t)$

DQMOM (1)

Idee Momentenmethode

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Eine kontinuierliche Funktion (z.B. $f(\xi, x, t)$) kann durch eine Verteilung beschrieben werden, die wiederum durch ihre Momente charakterisiert wird.

$$f(\xi, x, t) \rightarrow P(m_1(x,t), m_2(x,t), \dots)$$

Anstatt also die Funktion selbst zu berechnen, können die Momente berechnet werden, um die Verteilung zu bestimmen.

$$m_k(x,t) = \int_0^\infty \xi^k(x,t) \cdot f(\xi, x, t) d\xi$$

Aufstellen der Transportgleichung für die Momente $m_k(x,t)$ anstatt für $f(\xi, x, t)$

$\Rightarrow$Reduzieren der Dimension um die interne Koordinate!

DQMOM (2)
Idee Quadratur

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Numerische Integration $\Rightarrow$Quadratur

$$\int_b^a f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot f(x_i)$$

DQMOM (2)
Idee Quadratur

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Numerische Integration $\Rightarrow$Quadratur

$$\int_b^a f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot f(x_i)$$

Anwendung auf die Momente

$$m_k = \int_0^\infty \xi^k f(\xi, x, t) d\xi \approx \sum_{\alpha=1}^{N} \xi_\alpha^k w_\alpha$$

DQMOM (2)
Idee Quadratur

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Numerische Integration $\Rightarrow$Quadratur

$$\int_b^a f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot f(x_i)$$

Anwendung auf die Momente

$$m_k = \int_0^\infty \xi^k f(\xi, x, t) d\xi \approx \sum_{\alpha=1}^{N} \xi_\alpha^k w_\alpha$$

Diskrete Darstellung der Anzahldichtefunktion $f(\xi, x, t)$

$$f(\xi, x, t) \approx \sum_{\alpha=1}^{N} w_\alpha \delta(\xi - \xi_\alpha)$$

- Stützstellen ξ_α
- Gewichte w_α

DQMOM (3)

Anwendung auf die Bilanzgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$\frac{\partial \overline{f(\xi,x,t)}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\overline{u} \cdot \overline{f(\xi,x,t)}) + \nabla \cdot (c_t \nabla \overline{f(\xi,x,t)}) + \overline{S(\xi,x,t)}$$

$$\frac{\partial f(\xi)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i \cdot f(\xi)) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial f(\xi)}{\partial x_i}) + S_\xi$$

fnb

DQMOM (3)
Anwendung auf die Bilanzgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$\frac{\partial \overline{f(\xi,x,t)}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\overline{u} \cdot \overline{f(\xi,x,t)}) + \nabla \cdot (c_t \nabla \overline{f(\xi,x,t)}) + \overline{S(\xi,x,t)}$$

$$\frac{\partial f(\xi)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i \cdot f(\xi)) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial f(\xi)}{\partial x_i}) + S_\xi$$

Einsetzen von $f(\xi,x,t) \approx \sum_{\alpha=1}^{N} w_\alpha \delta(\xi - \xi_\alpha)$

$\Rightarrow$für **ein** festes α:

$$\frac{\partial w_\alpha \delta(\xi-\xi_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i \cdot w_\alpha \delta(\xi-\xi_\alpha)) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha \delta(\xi-\xi_\alpha)}{\partial x_i}) = S_\xi(\xi)$$

fnb

DQMOM (4)
Anwendung auf die Bilanzgleichung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^k a_\alpha + k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^{k-1} b_\alpha = S_k + C_k$$

$$a_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha w_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha}{\partial x_i})$$

$$b_\alpha = \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha \zeta_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial x_i})$$

$$\zeta_\alpha = \xi_\alpha w_\alpha$$

$$S_k = \int_0^\infty \xi^k S_\xi(\xi) d\xi$$

$$C_k = k(k-1)\sum_{\alpha=1}^{N}\xi_\alpha^{k-2} C_\alpha$$

$$C_\alpha = w_\alpha \Gamma \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}$$

fnb

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_{k}+C_{k}$$

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_{k}+C_{k}$$

- Quadratur der Ordnung N für $f(\xi,x,t)$
- $2N$ Unbekannte a_α und b_α $\Rightarrow k=2N$

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_{k}+C_{k}$$

- Quadratur der Ordnung N für $f(\xi,x,t)$
- $2N$ Unbekannte a_α und b_α $\Rightarrow k=2N$

Für jedes Kontrollvolumen und jeden Zeitschritt muss diese Gleichung k-mal gelöst werden!

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^k a_\alpha + k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^{k-1} b_\alpha = S_k + C_k$$

$$S_k = \int_0^\infty \xi^k S_\xi(\xi)\,d\xi$$

$$C_k = k(k-1)\sum_{\alpha=1}^{N}\xi_\alpha^{k-2} C_\alpha$$

$$C_\alpha = w_\alpha \Gamma \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}$$

Implementierung in FASTEST-3D (1)

Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^k a_\alpha + k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_\alpha^{k-1} b_\alpha = S_k + C_k$$

Für jedes Kontrollvolumen und jeden Zeitschritt müssen diese Gleichungen k-mal gelöst werden!

$$S_k = \int_0^\infty \xi^k S_\xi(\xi)\,d\xi$$

$$C_k = k(k-1)\sum_{\alpha=1}^{N}\xi_\alpha^{k-2} C_\alpha$$

$$C_\alpha = w_\alpha \Gamma \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\partial \xi_\alpha}{\partial x_i}$$

fnb

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_k+C_k$$

$$a_{\alpha}=\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} w_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$b_{\alpha}=\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} \zeta_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$\zeta_{\alpha}=\xi_{\alpha} w_{\alpha}$$

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_k+C_k$$

$$a_{\alpha}=\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} w_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$b_{\alpha}=\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} \zeta_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$\zeta_{\alpha}=\xi_{\alpha} w_{\alpha}$$

Für jedes Kontrollvolumen und jeden Zeitschritt müssen diese DGL jeweils N-mal gelöst werden!

fnb

Implementierung in FASTEST-3D (1)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

In FASTEST-3D implementiert

Nach Momententransformation und Umformungen:

$$(1-k)\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k}a_{\alpha}+k\sum_{\alpha-1}^{N}\xi_{\alpha}^{k-1}b_{\alpha}=S_k+C_k$$

$$a_{\alpha}=\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} w_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial w_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$b_{\alpha}=\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (u_i)_{\alpha} \zeta_{\alpha}}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma\frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial x_i})$$

$$\zeta_{\alpha}=\xi_{\alpha} w_{\alpha}$$

Für jedes Kontrollvolumen und jeden Zeitschritt erhält man N Stützstellen ξ_{α} und N Gewichte w_{α}

fnb

Implementierung in FASTEST-3D (2)

Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

One-Way-Coupling

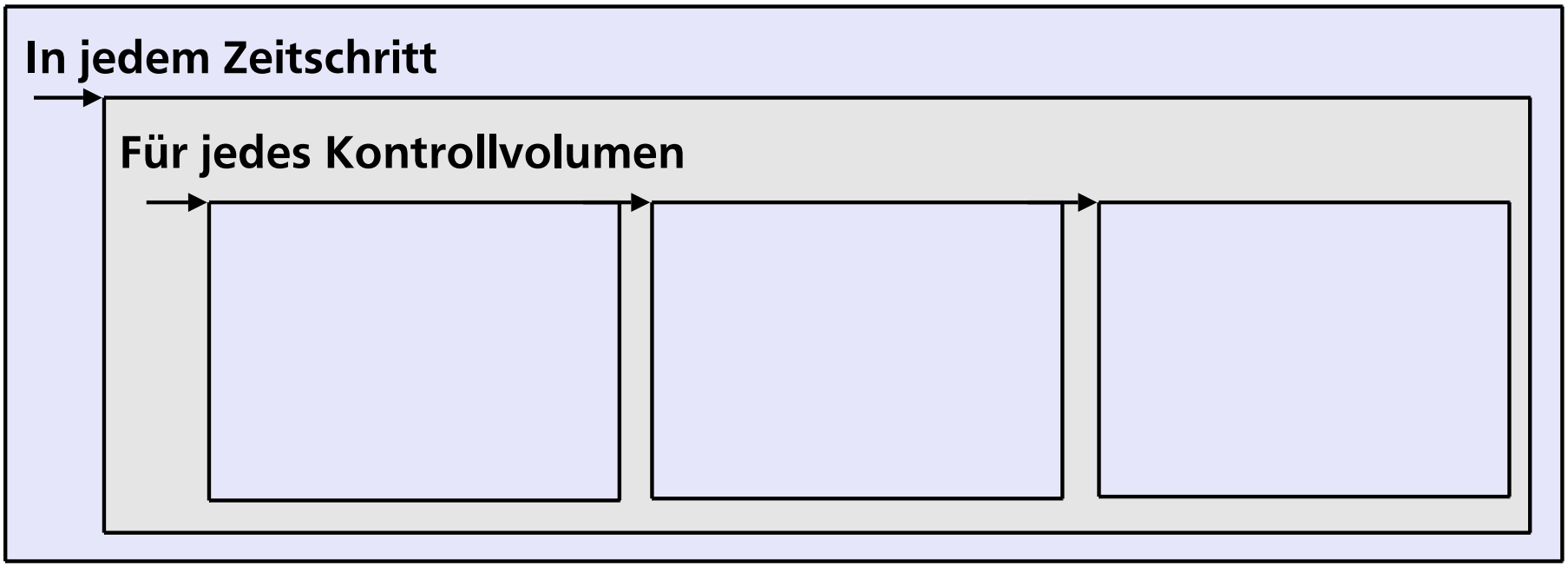
Strömung $\Rightarrow$ Populationsbilanz

Implementierung in FASTEST-3D (2)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

One-Way-Coupling

Strömung ⇒ Populationsbilanz

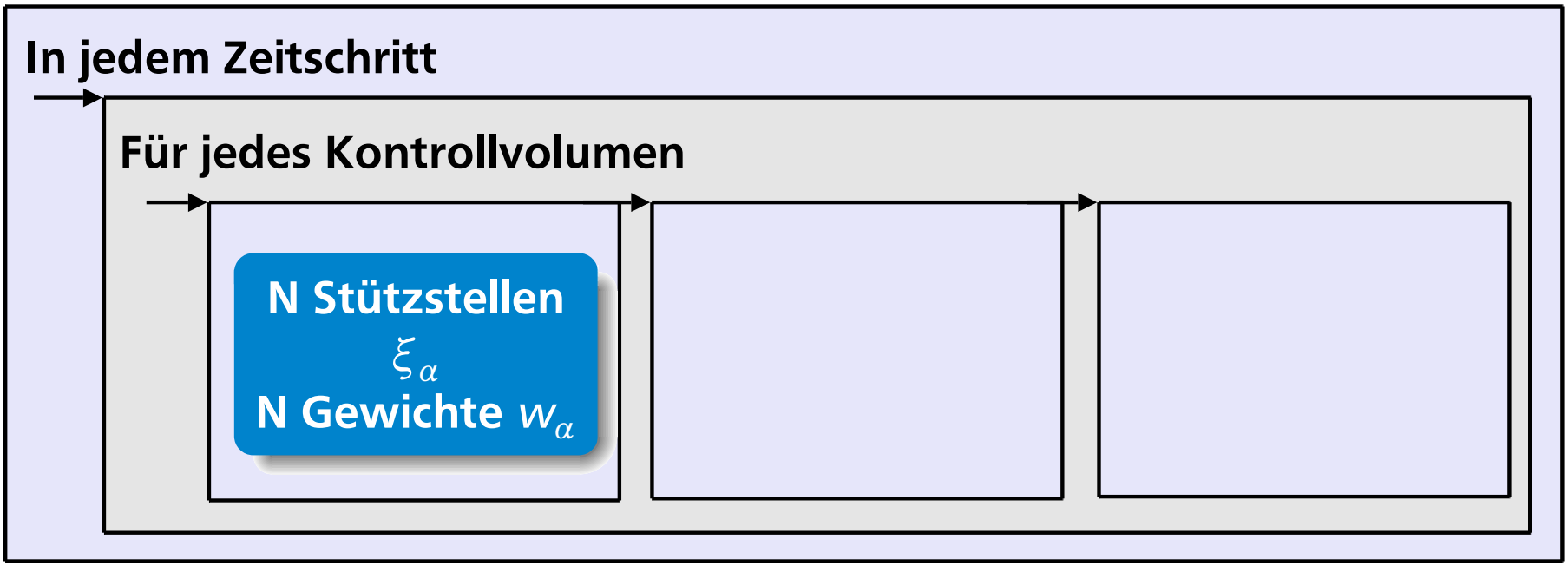


Implementierung in FASTEST-3D (2)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

One-Way-Coupling

Strömung ⇒Populationsbilanz

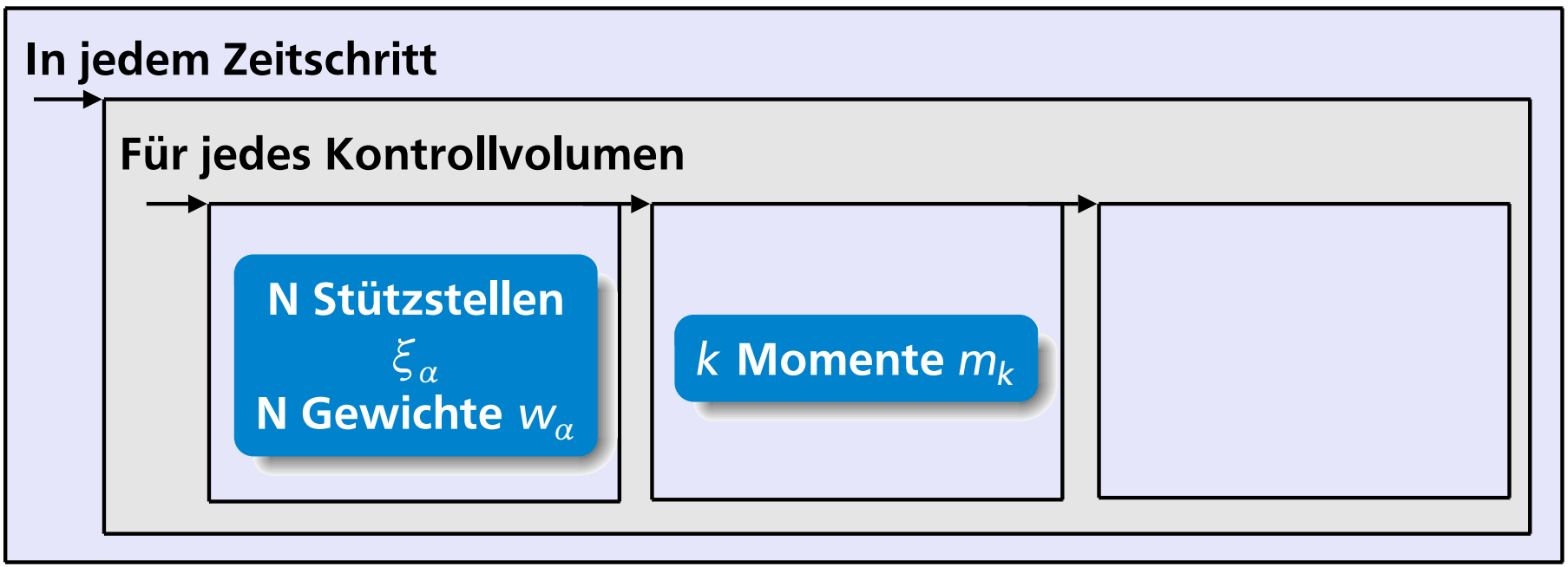


Implementierung in FASTEST-3D (2)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

One-Way-Coupling

Strömung ⇒ Populationsbilanz

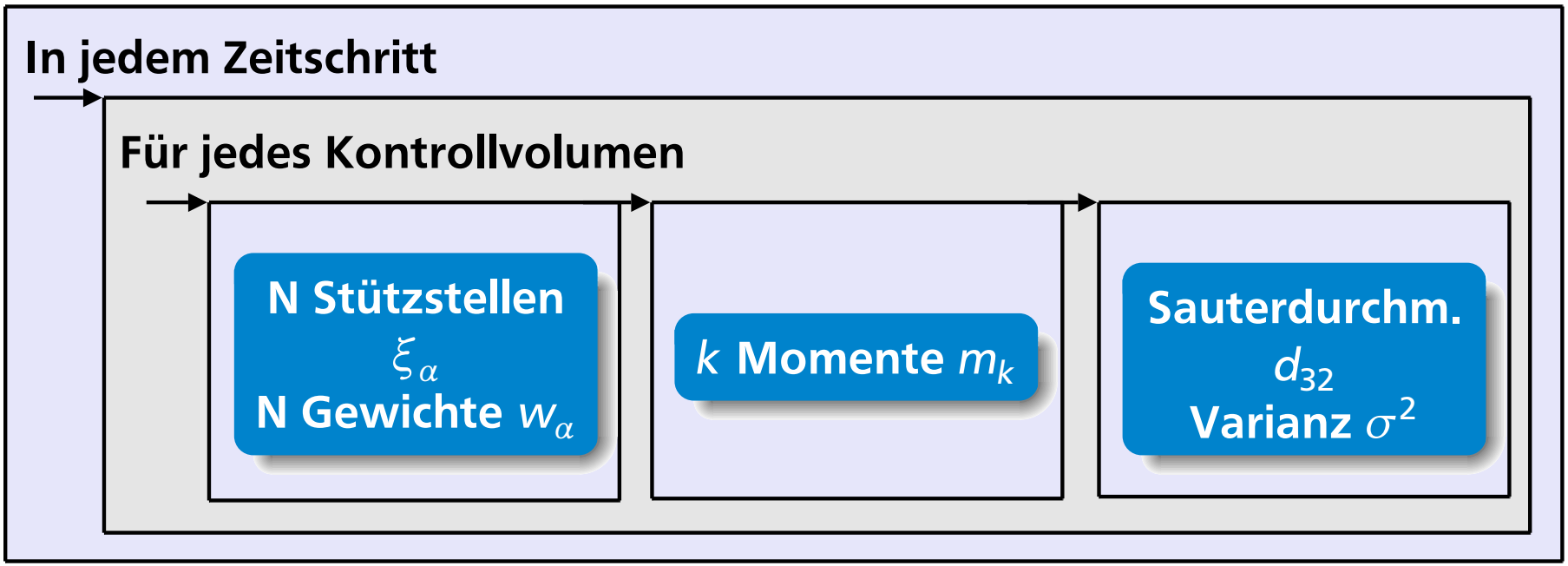


Implementierung in FASTEST-3D (2)
Berechnungsablauf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

One-Way-Coupling

Strömung ⇒ Populationsbilanz



Implementierung in FASTEST-3D (2)

Diskretisierung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$a_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha w_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha}{\partial x_i})$$

Implementierung in FASTEST-3D (2)
Diskretisierung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$a_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha w_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha}{\partial x_i})$$

Örtliche Diskretisierung - FVM

Konvektiver Term: Flux Blending UDS/CDS

Implementierung in FASTEST-3D (2)
Diskretisierung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$a_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha w_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha}{\partial x_i})$$

Örtliche Diskretisierung - FVM

Diffusiver Term: CDS

Implementierung in FASTEST-3D (2)
Diskretisierung der Populationsbilanz

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$a_\alpha = \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i)_\alpha w_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\Gamma \frac{\partial w_\alpha}{\partial x_i})$$

Zeitliche Diskretisierung

Zeitterm: θ-Verfahren Euler-implizit/Crank-Nicholson

Implementierung in FASTEST-3D (3)
Randbedingungen und Initialbelegung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Randbedingungen

- Neumann-Randbedingung
- Zero-Gradient
- ξ_α, w_α
- Wand/Inlet/Outlet/Symmetrie

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$$

Implementierung in FASTEST-3D (3)
Randbedingungen und Initialbelegung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Randbedingungen

- Neumann-Randbedingung
- Zero-Gradient
- ξ_α, w_α
- Wand/Inlet/Outlet/Symmetrie

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$$

Alternativen?

Implementierung in FASTEST-3D (3)
Randbedingungen und Initialbelegung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Randbedingungen

- Neumann-Randbedingung $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$
- Zero-Gradient
- ξ_α, w_α
- Wand/Inlet/Outlet/Symmetrie

Alternativen?

Initialbelegung

- d_{32}, σ^2, Φ aus Experimenten bekannt
- β-Verteilung $f_b = \frac{m_0}{B(p,q)} \frac{\xi^{p-1}(\xi_{max}-\xi)^{q-1}}{\xi_{max}^{p+q-1}}$

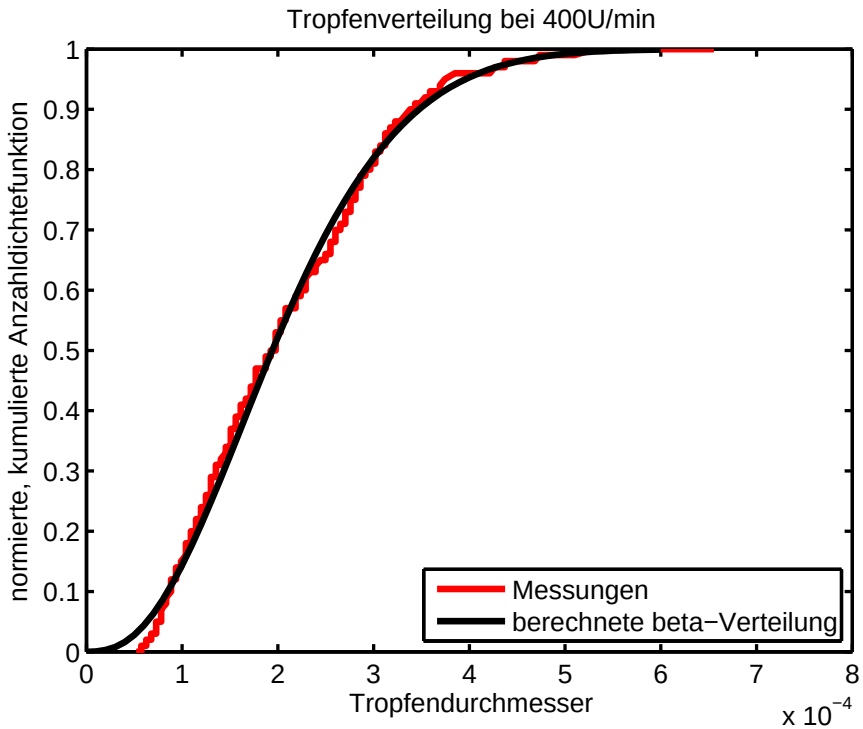
- $d_{32} = \frac{m_3}{m_2}$
- $\sigma^2 = \frac{m_2}{m_0} - \frac{m_1^2}{m_0^2}$
- $\Phi = \frac{\pi}{6} m_3$

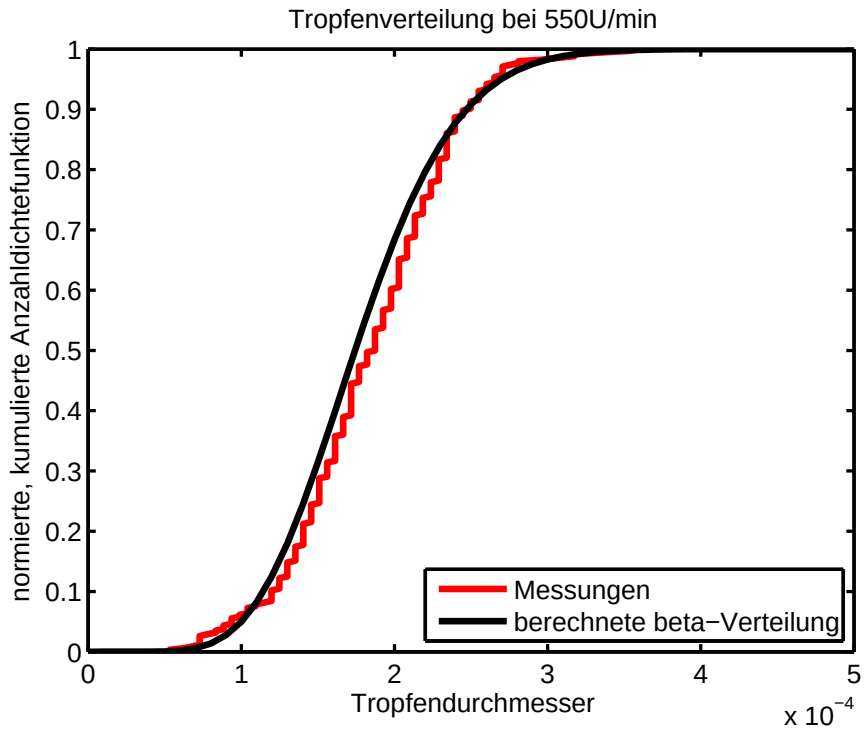
$\Rightarrow$ 3 Gleichungen für die 3 Unbekannten m_0, p und q

$\Rightarrow$ Daraus Berechnung der Momente $m_r = m_0 \xi_{max}^r \frac{p^{[r]}}{(p+q)^{[r]}}$

$\Rightarrow$ Initiale Stützstellen und Gewichte bestimmen (PD-Algorithmus Gordon 1967)

Ergebnisse (1)
Initialbelegung für U/min=400 und U/min=550



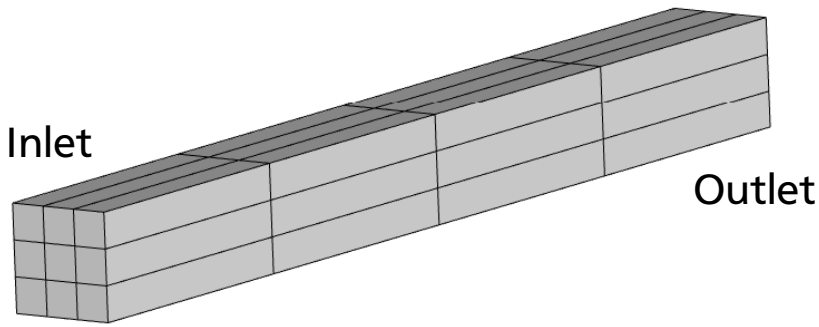


Ergebnisse (2)
Sauterdurchmesser

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Setup:

- 4x9 Kontrollvolumen
- RANS
- 1 Zeitschritt 10^{-5}s Euler-explizit

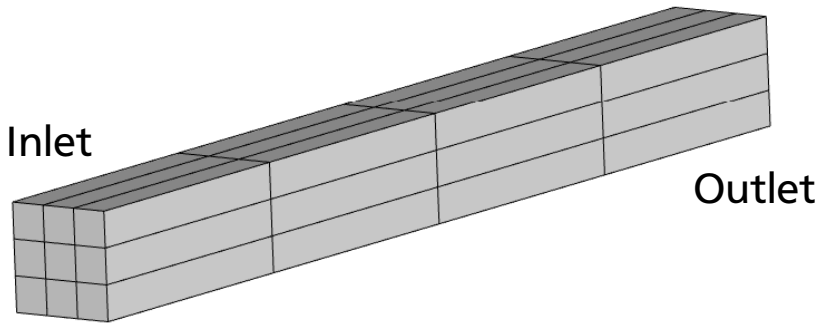


Ergebnisse (2)
Sauterdurchmesser

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Setup:

- 4x9 Kontrollvolumen
- RANS
- 1 Zeitschritt 10^{-5}s Euler-explizit



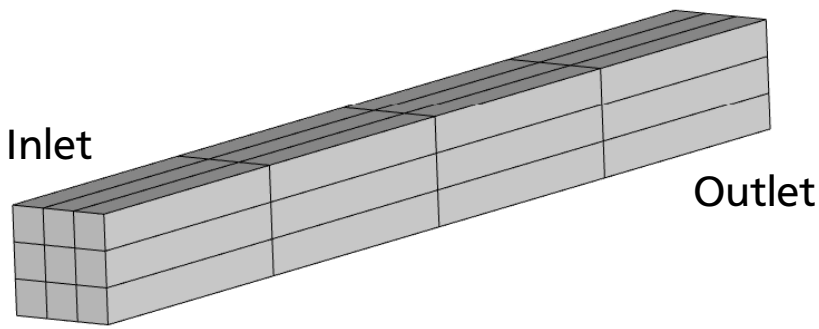
nach Initialisierung

Ergebnisse (2)
Sauterdurchmesser

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

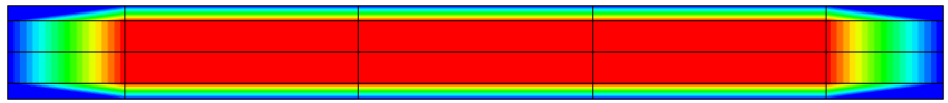
Setup:

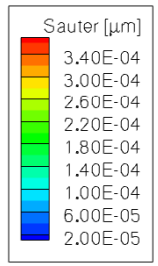
- 4x9 Kontrollvolumen
- RANS
- 1 Zeitschritt 10^{-5}s Euler-explizit



nach Initialisierung

nach 1 Zeitschritt



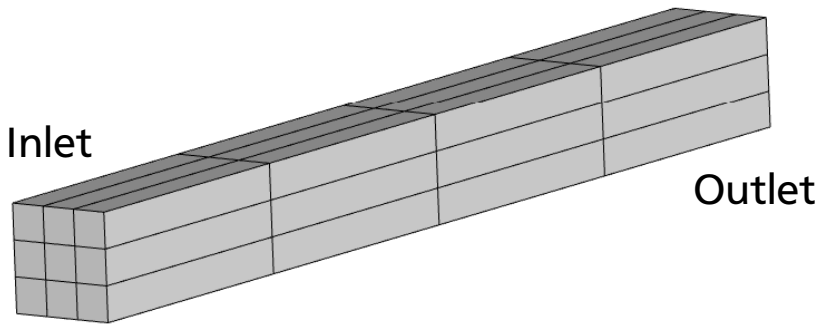


Ergebnisse (2)
Sauterdurchmesser

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

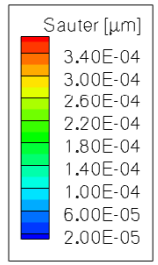
Setup:

- 4x9 Kontrollvolumen
- RANS
- 1 Zeitschritt 10^{-5}s Euler-explizit



nach Initialisierung

nach 1 Zeitschritt



Momentan noch überproportional hoher Zeitaufwand

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

- ✔ Populationsbilanz für gerührte flüssig/flüssig Systeme mit DQMOM hinsichtlich der inneren Koordinate ξ diskretisiert

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

- ✔ Populationsbilanz für gerührte flüssig/flüssig Systeme mit DQMOM hinsichtlich der inneren Koordinate ξ diskretisiert
- ✔ Diskretisierte Populationsbilanz in den Strömungslöser FASTEST-3D implementiert

fnb

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

- ✔ Populationsbilanz für gerührte flüssig/flüssig Systeme mit DQMOM hinsichtlich der inneren Koordinate ξ diskretisiert
- ✔ Diskretisierte Populationsbilanz in den Strömungslöser FASTEST-3D implementiert
- ✔ Örtliche Diskretisierung: FVM

fnb

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

- ✔ Populationsbilanz für gerührte flüssig/flüssig Systeme mit DQMOM hinsichtlich der inneren Koordinate ξ diskretisiert
- ✔ Diskretisierte Populationsbilanz in den Strömungslöser FASTEST-3D implementiert
- ✔ Örtliche Diskretisierung: FVM
- ✔ Zeitliche Diskretisierung: θ-Methode

Zusammenfassung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Abgeschlossene Arbeiten

- ✔ Populationsbilanz für gerührte flüssig/flüssig Systeme mit DQMOM hinsichtlich der inneren Koordinate ξ diskretisiert
- ✔ Diskretisierte Populationsbilanz in den Strömungslöser FASTEST-3D implementiert
- ✔ Örtliche Diskretisierung: FVM
- ✔ Zeitliche Diskretisierung: θ-Methode
- ✔ Erste Testfälle gerechnet

Ausblick (1)
Kopplung mit Matlab

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

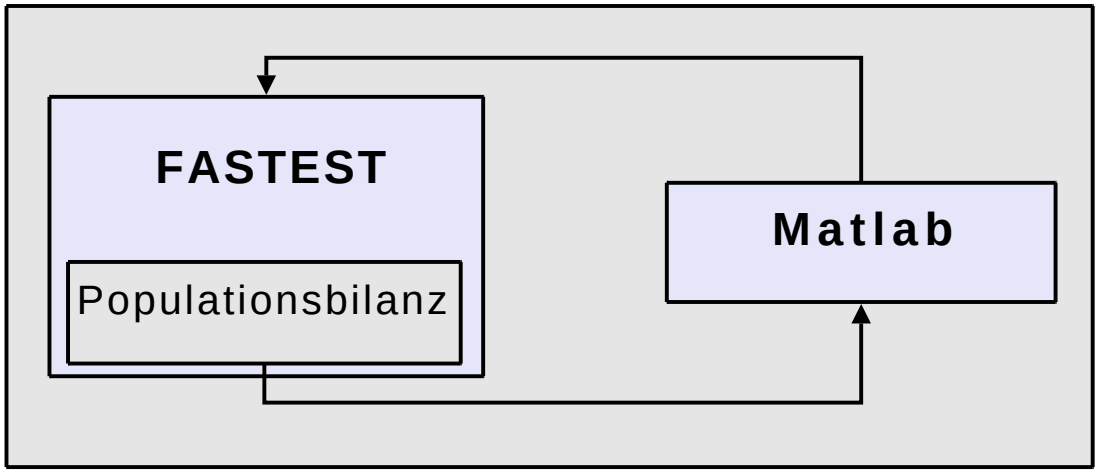
Kontrolle der Tropfengrößenverteilung über Anpassung der Drehgeschwindigkeit

Ausblick (1)
Kopplung mit Matlab

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Kontrolle der Tropfengrößenverteilung über Anpassung der Drehgeschwindigkeit

Nutzen der Matlab-Control-Toolbox



Ausblick (2)
Testfälle

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Effiziensteigerung

- Andere Löser für LGS
- Anderer Ansatz für numerische Integration

Ausblick (2)
Testfälle

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Effiziensteigerung

- Andere Löser für LGS
- Anderer Ansatz für numerische Integration

Parallelisierung

- Reduzieren der Rechenzeit
- Einsatz für reale Testfälle

Ausblick (2)
Testfälle

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Effiziensteigerung

- Andere Löser für LGS
- Anderer Ansatz für numerische Integration

Parallelisierung

- Reduzieren der Rechenzeit
- Einsatz für reale Testfälle

Mehrphasige Simulation

- Einphasige Betrachtung nur bis $\Phi = 0.1$ gültig?
- Höhere Dispersphasenanteile große technische Bedeutung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!