

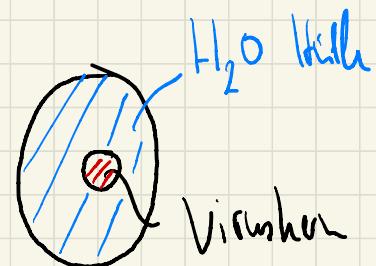
Particle Simulation

Jonathan James
2046213
H.A.C.L.
AhsPiH



Idee: Modellierung Teilchenanzahl

- Betrachtung der Teilchenanzahl von Aerosolen (mit SARS-CoV-2)
- Modell: Infiziert Person nimmt mit einstellbarem Intervall $V_{max} = 1,0 \frac{m^3}{s}$ in Umgebung (auf einer Rille) auf
- Aufbau eines Partikels
 - ↳ Kerngr. : $10\text{nm} - 1000\text{nm}$
 - ↳ Hüllegr. : $1000 - 5000\text{nm}$



SARS-CoV-2 Dichtz: $1000 \frac{kg}{m^3} = 1000 \frac{g}{dm^3}$

Wasser (H₂O) Dichtz: $1000 \frac{kg}{m^3} = 1000 \frac{g}{dm^3}$

Anm: $1g \approx 1 \text{ mikrogramm}$

• Einfluss auf Partikelbewegung

1) Inertial Reibung $\vec{F}_R = m_p \cdot \vec{v}$ (zufällig)

2) Gravitation $\vec{F}_G = m_p \cdot \vec{g}$ (Newton)



$$\vec{g} = (0, 0, 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2})$$

mit $m_p = m_{\text{Kern}} + m_{\text{Hülle}}$

3) Luftwiderstand $\vec{F}_L = \frac{6\pi \cdot \eta_{\text{Luft}} \cdot V_{\text{rel}} \cdot r_p}{C_c} \vec{v}$ (Stokes)

Annahme: Laminar Strömung (Widerstand durch innere Reibung)

η_{Luft} $\hat{=}$ dynam. Viskosität von Luft

\vec{V}_{rel} $\hat{=}$ relative Geschwindigkeit der Partikel

r_p $\hat{=}$ Radius des Partikels
 $\hat{=}$ mittlerer Körnungsdurchmesser

4) Windkraft $\vec{F}_W = \frac{\rho_L}{2} \cdot \vec{V}_W^2 \cdot A_{\text{ref}}$

ρ_L $\hat{=}$ Dichte von Luft

\vec{V}_W $\hat{=}$ Windgeschwindigkeit

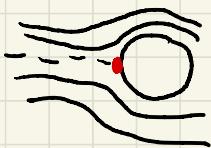
A_{ref} $\hat{=}$ Berücksichteter Partikel (πr^2)

\Rightarrow Idealität der Bernoulli für \vec{F}_w

Annahme: Inkompressible Strömung ($f_L = \text{const}$)

$$\hookrightarrow Ma < 0,3 \rightarrow v_{\text{wind}} < 102 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

- Kraft \vec{F}_w greift im Steigungswinkel an



$$\Rightarrow C_p = 1 - \left(\frac{c}{c_\infty} \right)^2 = 1, \quad (\text{da } c_{\text{strömung}} = 0)$$

$\Rightarrow p_{\text{wind}}$ wird vollst. in stat. Druck gewandelt

Es gilt: $p_{\text{wind}} = C_p \cdot \frac{y_L^2}{2} \cdot V_w^2$

$$\hookrightarrow p_w \cdot A_{\text{ref}} = \vec{F}_w // \quad (\text{richtig oben})$$

$$\Rightarrow \vec{F}_{\text{ges}} = \vec{F}_G + \vec{F}_w + \vec{F}_L$$

5) Verdunstung (Änderung Hintergrunddruckes)

$\hat{=}$ Konzentrationsänderung

$$d(\bar{v}) = ?$$

Annehmen:

- Partikel $\hat{=}$ starre Körper (Kugel)
- $T_{\text{Partikel}} = \text{const.}$ $T_{\infty} = \text{const.}$

Idee: $\frac{d}{dt} m_p = - j_{H_2O} \cdot A_p$

m_p $\hat{=}$ Masse des Partikels

j_{H_2O} $\hat{=}$ Stoffübergangskoeffizienten

A_p $\hat{=}$ Flächengeschwindigkeit des Partikels

Linke Seite der Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (m_p) &= \frac{d}{ds} (V_p \cdot j_{H_2O}) = \frac{d}{ds} \left(\frac{d^{\frac{3}{2}}}{6} j_{H_2O} \right) \\ &= \frac{d}{dt} d(s) \cdot \frac{d^{\frac{3}{2}}}{2} j_{H_2O} \end{aligned}$$

Rechte Seite der Gleichung

$$j_{H_2O} = h_m(d) \cdot (y_{H_2O, p} - y_{H_2O, \infty})$$

Dichte von H_2O im Partikel \uparrow

Dichte von H_2O in Umgebung

$$h_m(d) = \frac{D}{L} \cdot Sh$$

$$D_T = D_0 \cdot \left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{1,8}$$

$\underbrace{\qquad}_{\text{bekannt (const.)}}$

Diffusionskoeffizial

$$Sh = 2 + 0,55 \cdot Re^{\frac{1}{2}} \cdot Sc^{\frac{1}{3}} \quad \text{Sherwood - Zahl}$$

$$Re = \frac{V_p \cdot d_p}{\nu_L}$$

Reynold - Zahl

$$Sc = \frac{\nu_L}{D}$$

Schmidt - Zahl

$\nu_L \hat{=} \text{kinematische Viskosität} = f(T_0)$

$D_0 \hat{=} \text{Diff.-Koeffizient bei } T=0^\circ\text{C (const.)}$

$d_p \hat{=} \text{Durchmesser Partikel}$

$V_p \hat{=} \text{Partikelgeschwindigkeit (absolut)}$

$$y_{H_2O, p} \cdot y_{H_2O, \infty} \Rightarrow \text{idelen Gasgesetz}$$

$$\rho_i = \frac{P}{RT}$$

$$\hookrightarrow y_{H_2O, p} = \frac{P_{H_2O, p}}{P_{H_2O, p} + P_{H_2O, \infty}}$$

$$\hookrightarrow y_{H_2O, \infty} = \frac{P_{H_2O, \infty}}{P_{H_2O, p} + P_{H_2O, \infty}}$$

$$\rho_i = \frac{\bar{P}}{M_i}$$

$$P_{H_2O, p} = X \cdot P_{H_2O}^0(T)$$

\uparrow Aktivitäts-Koeffizient

\rightarrow Gleichgewicht (li. \leftrightarrow re.)

$$\frac{d\pi}{2} \cdot y_{H_2O} \cdot \frac{dy_{H_2O}}{dx} = -h_m (y_{H_2O, p} - y_{H_2O, \infty}) \cdot \Delta T^2$$

$$\frac{dy_{H_2O}}{dx}$$

$$\Delta T$$

$$\Leftrightarrow d(\pi) = -\frac{1}{y_{H_2O}} (y_{H_2O, p} - y_{H_2O, \infty}) \cdot h_m$$

Blatt Numerische Simulation

→ Implementierung durch geschickte Strukturen, die auf unterschiedliche Typen

Modellhierarchie:

$$\vec{y} \approx \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

fundamentals

$$\vec{y} \approx \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \\ y_{m+1} \end{bmatrix}$$

≈ Zustandsgröße:

$$\vec{y} = A \vec{y} + \vec{b}$$

1) Euler: $\vec{y} = \vec{y} + dt \cdot f(\vec{y}, t)$

2) Runge²: $\vec{y} = \vec{y} + h_2$

3) Runge⁴: $\vec{y} = \vec{y} + \frac{(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)}{6}$

- Ziel:
- Überprüfen, ob Kontrollwerte spezifiziert sind
 - Gesuchte Funktionen zur reibungslosen Verarbeitung unter
 - Allgemeine Parameterwerte
für Funktionsoptionen verwandt

Schallweiterausbreitung

Quelle: Diplomarbeit Sarah Isabelle Wolff, KIT 2010

$$dt_1 \leq 0,0005 \cdot \frac{m_p}{|F_Q|}$$

$$dt_2 \leq \frac{f_p}{100 |V_p|}$$

→ der kleinere Wert wird übernommen
schriftlich simulation numrich
inhaber

Programmablauf (Oberblick)

1) Initialisierung Programmkonfiguration

↳ Teilchen (Partikel)

> Initial Geschwindigkeit

> Initial Position

> Initial Auflösen (Größe, Temperatur)

↳ Simulation

> Schrittweite

> Laufzeit

> Berechnungsmethode

2) Simulation

... berechnen für jede Teilchen

↳ Verdunstung (Konvektion Stoffübergang)

↳ Bewegung

- ① Berechnung aller Kräfte
- ② Berechnung von Position + Geschwindigkeit durch numerische Integrationsverfahren