

Modellierung und Simulation von Mischvorgängen in einem Rührer - Bachelorarbeit -

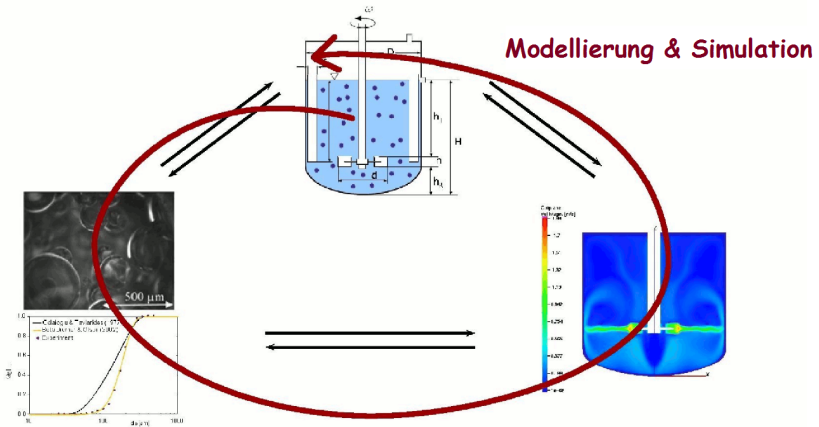
Manuel Baumann

Dies Mathematicus 2011

25. November 2011

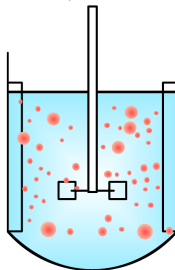
Gliederung

- 1 Motivation: Mischvorgänge in einem Rührer
- 2 Mathematische Modellierung
 - Die Navier-Stokes Gleichungen
 - Modellierung der dispersen Phase
- 3 Numerische Methoden
 - Ein 2D-Rührermodell
 - Die Finite-Differenzen-Methode
- 4 Numerische Tests



Ziel:

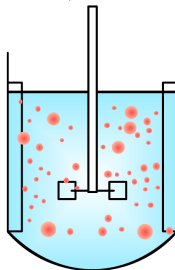
- Modellierung und Simulation der dispersen Phase (rot) während des Mischvorgangs in einem Rührer



- Beschreibung des Strömungsverhaltens im Rührer mit den Navier-Stokes Gleichungen
- Modellierung der dispersen Phase durch eine Populations-Bilanz Gleichung

Ziel:

- Modellierung und Simulation der dispersen Phase (rot) während des Mischvorgangs in einem Rührer



- Beschreibung des Strömungsverhaltens im Rührer mit den **Navier-Stokes Gleichungen**
- Modellierung der dispersen Phase durch eine **Populations-Bilanz Gleichung**

Mathematische Beschreibung des **Strömungsverhaltens** sowie der **Tropfenverteilung** der dispersen Phase durch ein System aus gekoppelten partiellen Differentialgleichungen:

Zusammenfassung

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{U} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} + \nabla P + \frac{2}{3} \nabla k - \operatorname{div}(\nu^* (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)) = 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \vec{U} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} k + \vec{U} \cdot \nabla k - \frac{\nu_T}{2} \|\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T\|_F^2 - \operatorname{div}(\nu_T \nabla k) + \epsilon = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \epsilon + \vec{U} \cdot \nabla \epsilon - \frac{c_1}{2} k \|\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T\|_F^2 - \operatorname{div}\left(\frac{c_\epsilon}{c_\mu} \nu_T \nabla \epsilon\right) + c_2 \frac{\epsilon^2}{k} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m^{(l)} + \operatorname{div}(\vec{U} m^{(l)}) - \operatorname{div}(\nu_T \nabla m^{(l)}) = S^{(l)}. \quad (5)$$

Die Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) Gleichungen

Beschreibung des Strömungsverhaltens inkompressibler Newton Fluide in turbulenten Strömungen durch die RANS Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{U} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} + \nabla P + \frac{2}{3} \nabla k - \operatorname{div}(\nu^* (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)) = 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \vec{U} = 0. \quad (2)$$

Dabei werden die folgenden physikalischen Größen eingeführt:

- $\vec{U} : \Omega \times T \rightarrow \mathbb{R}^{2,3}$ mittlere Geschwindigkeit,
- $P : \Omega \times T \rightarrow \mathbb{R}$ mittlerer Druckwert,
- ν^* beinhaltet die turbulente kinematische Viskosität.

Dieses System kann durch das k - ϵ Turbulenzmodell **abgeschlossen** werden.

Die *Anzahl-Dichtefunktion* $Q : \Omega_e \times \Omega \times [0, T_{end}] \rightarrow \mathbb{R}$ beschreibt die Tropfenanzahl der dispersen Phase, so dass:

$$N_{drops}(t) = \int_{\Omega} \int_{\Omega_e} Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p d\vec{x}.$$

Hierbei ist $\Omega_e = [0, d_{max}]$ der Raum der Eigenschaftskordinaten.

Populations-Bilanz Gleichung (PBE)

Die disperse Phase wird durch eine Transportgleichung für die Anzahl-Dichtefunktion Q beschrieben:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}Q) - \operatorname{div}(\nu_T \nabla Q) = S. \quad (5a)$$

Charakterisiere Q durch seine ersten l Momente:

$$m^{(l)}(\vec{x}, t) := \int_{-\infty}^{\infty} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p, l \in \mathbb{N}_0$$

Integration von Gleichung (5a) und Multiplikation mit d_p^l führt auf:

$$\frac{\partial}{\partial t} m^{(l)} + \operatorname{div}(\vec{U} m^{(l)}) - \operatorname{div}(\nu_T \nabla m^{(l)}) = S^{(l)}, \quad l \in \mathbb{N}_0 \quad (5b)$$

wobei für den Quellterm $S^{(l)}(d_p) := \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot S(d_p) dd_p$ gilt.

Da Q unbekannt ist, nutze numerische Quadratur im Eigenschafts-Raum:

$$\int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l d\nu_{\vec{x}, t}(d_p) \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha}(\vec{x}, t) \xi_{\alpha}^l(\vec{x}, t).$$

Charakterisiere Q durch seine ersten l Momente:

$$m^{(l)}(\vec{x}, t) := \int_{-\infty}^{\infty} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p, l \in \mathbb{N}_0$$

Integration von Gleichung (5a) und Multiplikation mit d_p^l führt auf:

$$\frac{\partial}{\partial t} m^{(l)} + \operatorname{div}(\vec{U} m^{(l)}) - \operatorname{div}(\nu_T \nabla m^{(l)}) = S^{(l)}, \quad l \in \mathbb{N}_0 \quad (5b)$$

wobei für den Quellterm $S^{(l)}(d_p) := \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot S(d_p) dd_p$ gilt.

Da Q unbekannt ist, nutze numerische Quadratur im Eigenschafts-Raum:

$$\int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l d\nu_{\vec{x}, t}(d_p) \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha}(\vec{x}, t) \xi_{\alpha}^l(\vec{x}, t).$$

Charakterisiere Q durch seine ersten l Momente:

$$m^{(l)}(\vec{x}, t) := \int_{-\infty}^{\infty} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p, l \in \mathbb{N}_0$$

Integration von Gleichung (5a) und Multiplikation mit d_p^l führt auf:

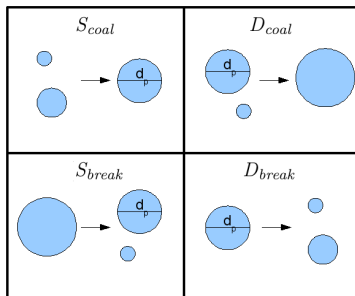
$$\frac{\partial}{\partial t} m^{(l)} + \operatorname{div}(\vec{U} m^{(l)}) - \operatorname{div}(\nu_T \nabla m^{(l)}) = S^{(l)}, \quad l \in \mathbb{N}_0 \quad (5b)$$

wobei für den Quellterm $S^{(l)}(d_p) := \int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot S(d_p) dd_p$ gilt.

Da Q unbekannt ist, nutze numerische Quadratur im Eigenschafts-Raum:

$$\int_0^{d_{\max}} d_p^l \cdot Q(d_p, \vec{x}, t) dd_p = \int_0^{d_{\max}} d_p^l d\nu_{\vec{x}, t}(d_p) \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha}(\vec{x}, t) \xi_{\alpha}^l(\vec{x}, t).$$

Die rechte Seite der PBE modelliert Tropfenzerfall und Tropfenvereinigung (Koaleszenz):



$$S^{(l)}(d_p) = S_{break}^{(l)}(d_p) + S_{coal}^{(l)}(d_p) - D_{break}^{(l)}(d_p) - D_{coal}^{(l)}(d_p)$$

Basierend auf experimentellen und analytischen Untersuchungen ergeben sich die Quellterme zu:

$$S_{break}(d_p) = \int_{d_p}^{d_{max}} n(d'_p) \beta(d_p, d'_p) \kappa(d'_p) Q(d'_p) dd'_p,$$

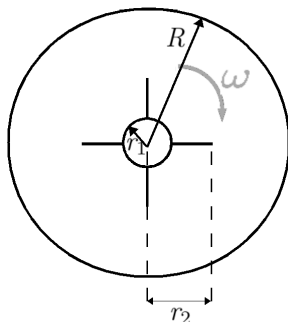
$$D_{break}(d_p) = \kappa(d_p) Q(d_p),$$

$$S_{coal}(d_p) = \frac{1}{2} \int_0^{d_p} \psi(d'_p, d''_p) Q(d'_p) Q(d''_p) dd'_p, \quad d''_p := \sqrt[3]{d_p^3 - d'_p^3}$$

$$D_{coal}(d_p) = Q(d_p) \int_0^{\sqrt[3]{d_{max}^3 - d_p^3}} \psi(d_p, d'_p) Q(d'_p) dd'_p.$$

- n - Anzahl von Tochtertröpfchen,
- β - Zerfalls-Wahrscheinlichkeit eines Tropfens d'_p zu d_p ,
- κ - Wahrscheinlichkeit des Tropfenzerfalls,
- ψ - Wahrscheinlichkeit für Koaleszenz zweier Tropfen.

Die numerische Simulation wurde für einen vereinfachten, zweidimensionalen Rührer durchgeführt:



Beschreibung des Rührers durch:

- R - Radius Rührergehäuse,
- r_1 - Innenradius,
- r_2 - Länge der Rührblätter,
- ω - Drehgeschwindigkeit.

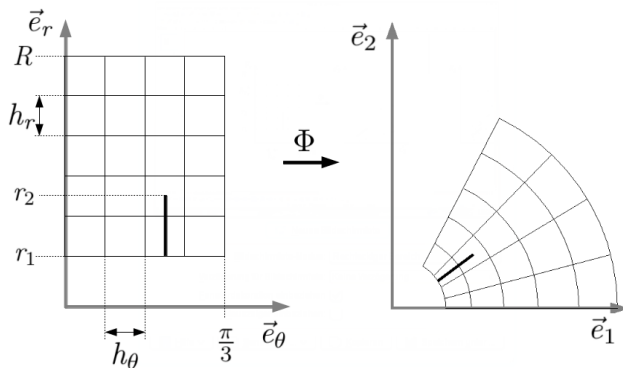
Die Geometrie des Rührers kann in Polarkoordinaten beschrieben werden.

In Polarkoordinaten ist der Rührer ein rechteckiges Gebiet (links).

Die Koordinaten-Transformation

$$\Phi : [r_1, R] \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad \Phi(r, \theta) = \begin{bmatrix} r \cdot \cos \theta \\ r \cdot \sin \theta \end{bmatrix}$$

repräsentiert den Rührer in kartesischen Koordinaten (rechts).

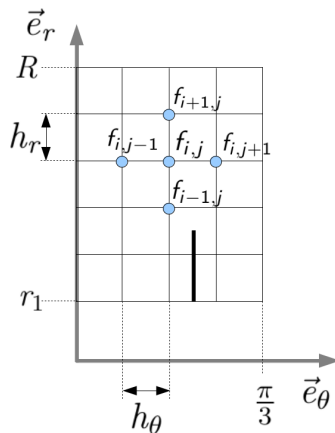


Partielle Ableitungen werden durch so genannte "finite Differenzen" approximiert:

Sei $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dann

$$\left(\frac{\partial f}{\partial r} \right)_{i,j} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2h_r},$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \theta} \right)_{i,j} \approx \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2h_\theta}.$$

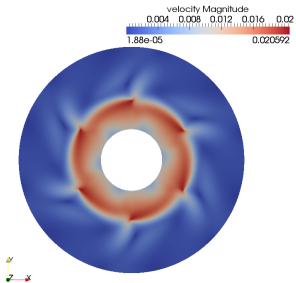
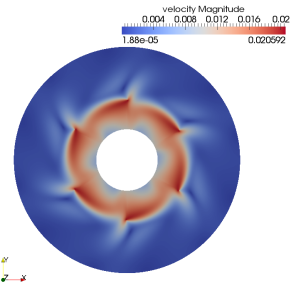
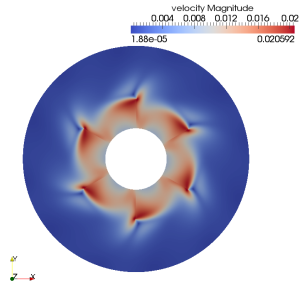
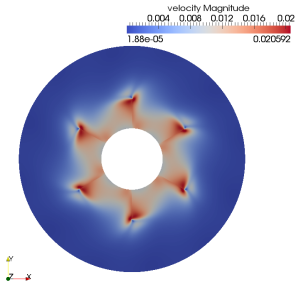


Simulationsergebnisse:

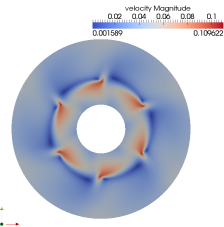
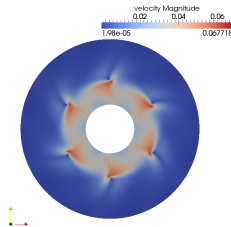
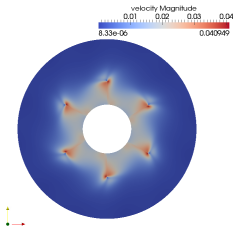
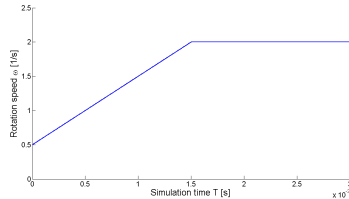
Parameter	Wert
Radius des Rührergehäuses	$R = 0.075m$
Innenradius	$r_1 = 0.02m$
Länge der Rührblätter	$r_2 = 0.04m$
Drehgeschwindigkeit	$\omega = 0.5 \frac{1}{s}$
Zeitschrittgröße	$\delta t = 10^{-6}s$
Simulationszeit	$T_{end} = 0.0015s$
Gitterpunkte pro Sechstel	100×150

Dies führt zu einer maximalen Geschwindigkeit an der Spitze der Rührblätter, $u_{tip} = 0.02 \frac{m}{s}$, bei einer Reynolds-Zahl von

$$Re := \frac{\omega \cdot (2r_2)^2}{\nu} = 3.200$$

Simulationsergebnisse für $Re = 3.200$ 

Für höhere Reynolds-Zahlen wird die Drehgeschwindigkeit ω sukzessiv erhöht um numerische Instabilität zu vermeiden:



Vielen Dank an Prof. Volker Mehrmann und
Jan Heiland für die Betreuung.

Gibt es Fragen / Anmerkungen ?

