



Αριθμητική προσομοίωση πολυφασικών ροών σε διασπορά-εφαρμογή στη δυναμική της ροής σωματιδίων

Δημήτρης Μητράκος

ΕΜΠ-Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών-Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας

Τριμελής επιτροπή:

Σίμος Σιμόπουλος, Καθηγητής ΕΜΠ

Ευάγγελος Χίνης, Επίκουρος Καθηγητής

Χρήστος Χουσιάδας, Ερευνητής Α, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»



Στόχοι

- Ανάπτυξη υπολογιστικού μοντέλου για την περιγραφή του αερολύματος σε πολλές διαστάσεις.
- Επαλήθευση/Αξιολόγηση μοντέλου
- Εφαρμογή

Πρόοδος

- ✓ 1-Δ μοντέλο
- ✓ 2-Δ μοντέλο
- ✓ Επαλήθευση/Αξιολόγηση (πειραματικά/υπολογιστικά δεδομένα-αντιδραστήρες αερολύματος)
- ✓ Εφαρμογή-ασφάλεια πυρηνικών αντιδραστήρων (δεν έχει ολοκληρωθεί)

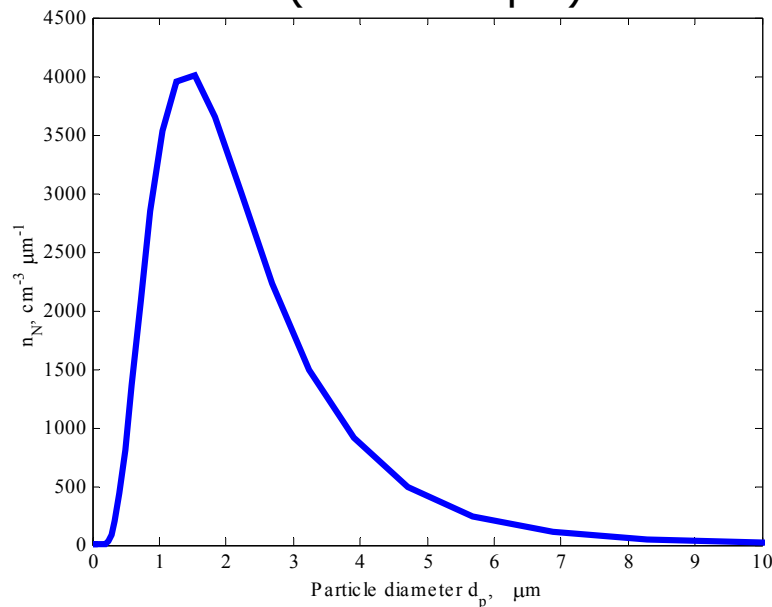


Βασικά στοιχεία περιγραφής αερολύματος

Αερόλυμα (Aerosol): Διφασικό σύστημα, Αέριο-Σωματίδια

Υγεία, Ατμοσφαιρική ρύπανση, Παραγωγή νανο-υλικών, Πυρηνική ενέργεια

Περιγραφή: Μέγεθος-αριθμός σωματιδίων
(1nm – 100μm)



Συνάρτηση κατανόμης μεγέθους $n(\mathbf{x}, \text{size}, t)$

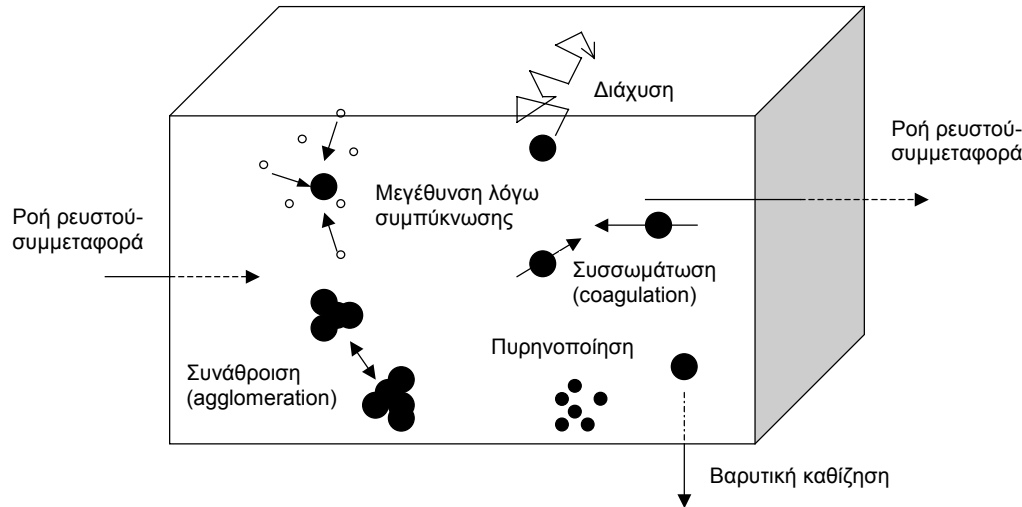
Συγκέντρωση σωματιδίων ανά cm^3 αερίου
με διάμετρο μεταξύ d_p και $d_p + dd_p$

(#/cm⁻³μm⁻¹)

Άλλες ιδιότητες: Χημική σύσταση, σχήμα, φορτίο σωματιδίων

Δυναμική των σωματιδίων

Όροι πηγής



Ατμός-Σωματίδια

- Σχηματισμός νέων σωματιδίων από μόρια ατμού (**Πυρηνοποίηση**)
- Αλλαγή μεγέθους ήδη υπαρχόντων σωματιδίων (**Συμπύκνωση, Εξάτμιση**)

Σωματίδια-Σωματίδια

- Αλλαγή μεγέθους και αριθμού σωματιδίων λόγω των συγκρούσεων μεταξύ τους (**Συσσωμάτωση**)

Εξωτερικές διαδικασίες

- Εναπόθεση σωματιδίων, λόγω εξωτερικών δυνάμεων (π.χ. **Θερμοφόριση, Βαρύτητα**)

Γενική εξίσωση της δυναμικής (GDE):

$$\frac{\partial \rho n}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} n) - \nabla \cdot (\rho D_p \nabla n) = \frac{\partial \rho n}{\partial t} \Big|_{nucl} + \frac{\partial \rho n}{\partial t} \Big|_{growth} + \frac{\partial \rho n}{\partial t} \Big|_{coag} - \nabla \cdot (\rho \mathbf{c}_{ext} n)$$



Αριθμητική επίλυση

Πολύπλοκες ροές-Πολλές διαστάσεις
(αντιδραστήρες αερολύματος-παραγωγή
νανοσωματιδίων, ατμόσφαιρικά μοντέλα...)



Σύζευξη δυναμικής αερολύματος-
Υπολογιστικής ρευστομηχανικής(CFD)

✓ **Μεγάλο υπολογιστικό κόστος**

Μέγεθος σωματιδίων: Επιπλέον διάσταση

➤ Επίλυση ως προς τις ροπές (moments) της
κατανομής, υπόθεση για τη μορφή, π.χ. lognormal,
της κατανομής (modal methods)

**Μικρό υπολογιστικό
κόστος αλλά όχι
γενική εφαρμογή**

Περισσότερο CFD(Eulerian)-Λιγότερο δυναμική αερολύματος

➤ Διακριτοποίηση της κατανομής σε
τμήματα-Sectional methods

**Γενική εφαρμογή αλλά
μεγάλο υπολογιστικό
κόστος**

Λιγότερο CFD (Lagrangian)-Περισσότερο δυναμική αερολύματος

Στόχος: Περισσότερο CFD-Περισσότερο δυναμική αερολύματος

Eulerian+Sectional



Αριθμητική επίλυση

Sectional methods

Συμπύκνωση $\left. \frac{\partial \rho n}{\partial t} \right|_{growth} = \frac{\partial I \rho n}{\partial d_p}, \quad I = \frac{dd_p}{dt} = \text{Ρυθμός συμπύκνωσης}$

Ο όρος αυτός κάνει την ΓΕΔ υπερβολική $\xrightarrow{\text{Σταθερό πλέγμα μεγέθους σωματιδίων}}$ Αριθμητική διάχυση, αστάθεια

✓ *Κινούμενο πλέγμα:* Δεν έχει τα παραπάνω προβλήματα, αλλά παρουσιάζει σημαντικές **δυσκολίες** στην επίλυση άλλων διαδικασιών και κυρίως της **μεταφοράς**, στα πλαίσια μιας Eulerian προσέγγισης της επίλυσης ως προς το χώρο

Μέθοδος CICR (Cubic Interpolation Cumulative Re-mapping)

Κινούμενο πλέγμα
(Συμπύκνωση)

SPLINE
Αθροιστική
κατανομή

Σταθερό πλέγμα (μεταφορά, διάχυση, πυρηνοποίηση, συσσωμάτωση, εναπόθεση)

✓ **Αθροιστική κατανομή:** Ευστάθεια στην επίλυση

➤ Οι άλλες διαδικασίες δεν παρουσιάζουν σημαντικές δυσκολίες: Μέθοδοι απο βιβλιογραφία



Αριθμητική επίλυση

Σύζευξη δυναμικής αερολύματος-CFD

✓ Δυναμική αερολύματος-Μεταφορά: Πολύ διαφορετικές σταθερές χρόνου (**Stiff**)

Κλασικές μέθοδοι επίλυσης (CFD): Διακριτοποίηση των εξισώσεων και γραμικοποίηση



Πολύ μεγάλο υπολογιστικό κόστος

Operator Splitting

Δυναμική αερολύματος:

Η συνεισφορά κάθε **όρου** υπολογίζεται **χωριστά**



Συνολικός **όρος** πηγής

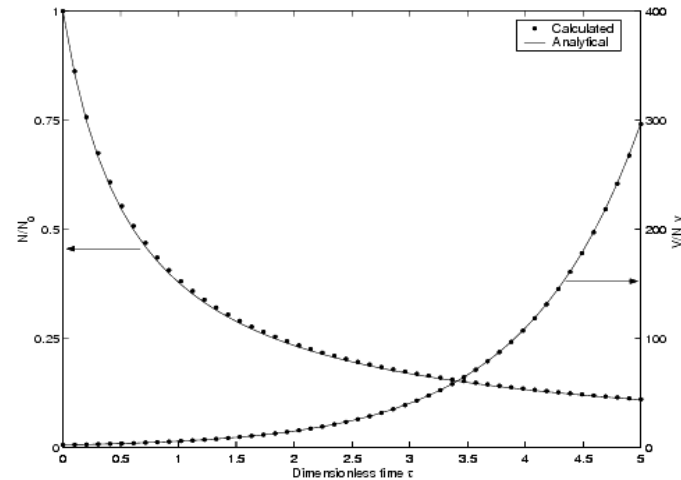
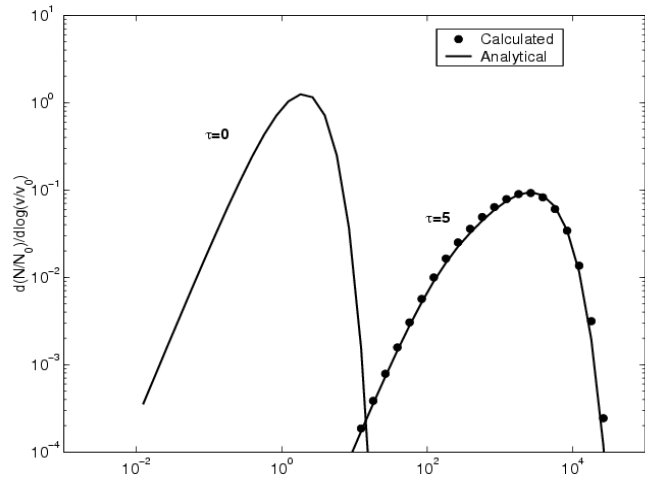
Πεπερασμένοι όγκοι, ADI

✓ Μεταβλητό dt : Επιτάχυνση σύγκλισης

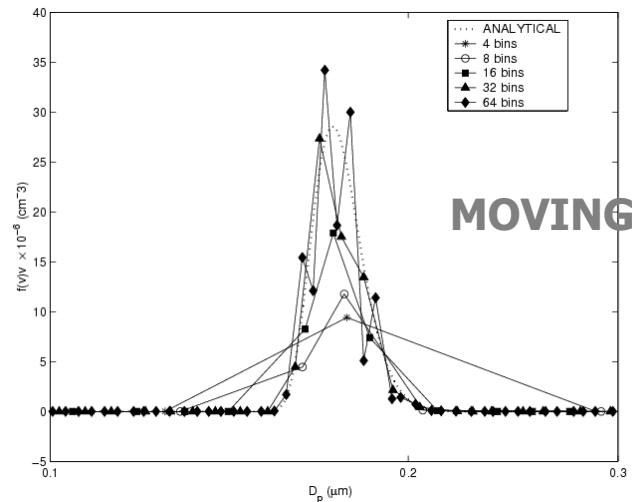
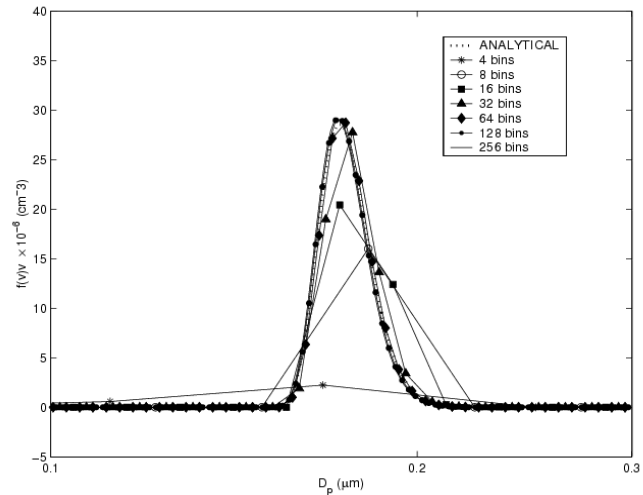


Επαλήθευση μεθόδων επίλυσης αερολύματος (στατικό αερόλυμα)

Σύγκριση με γνωστές αναλυτικές λύσεις



Συμπύκνωση + συσσωμάτωση



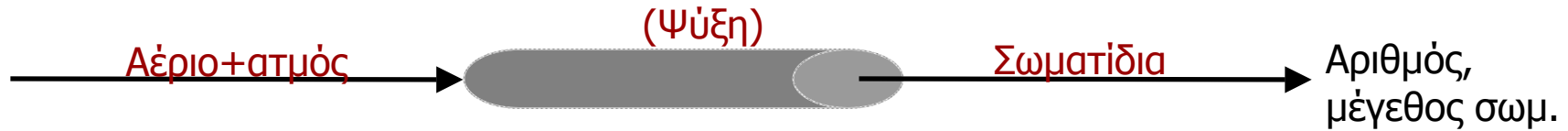
Συμπύκνωση

MOVING CENTER



Επαλήθευση μοντέλου: Προσομοίωση αντιδραστήρα στρωτής ροής

Ταυτόχρονη πυρηνοποίηση-συμπύκνωση σε αντιδραστήρα στρωτής ροής



Δυναμική αερολύματος:

Γενική δυναμική εξίσωση:

$$\frac{\partial \rho n_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{u} + \mathbf{c}_{th})n_m) - \nabla \cdot (\rho D_p \nabla n_m) = \frac{\partial \rho n_m}{\partial t} \Big|_{nucl} + \frac{\partial \rho n_m}{\partial t} \Big|_{growth} + \frac{\partial \rho n_m}{\partial t} \Big|_{coag}$$

Εξίσωση μάζας ατμού:

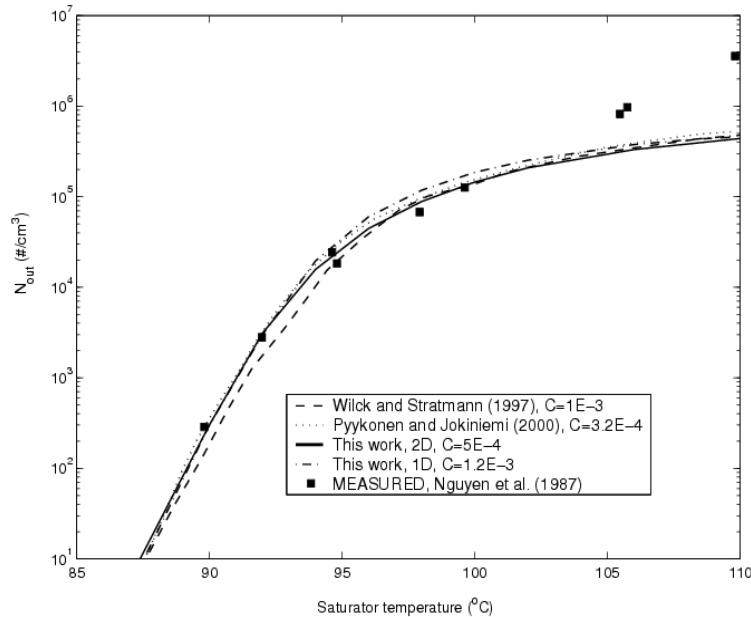
$$\frac{\partial \rho C_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} C_m) - \nabla \cdot (\rho D_v \nabla C_m) = - \frac{\partial \rho C_m}{\partial t} \Big|_{nucl} - \frac{\partial \rho C_m}{\partial t} \Big|_{growth}$$

CFD υπολογισμοί: ANSWER (ACRI, USA)



Προσομοίωση αντιδραστήρα στρωτής ροής

(Nguyen *et al.* 1987)



Wilck and Stratmann (1997):

Eulerian-Modal

Pyykonen and Jokiniemi (2000):

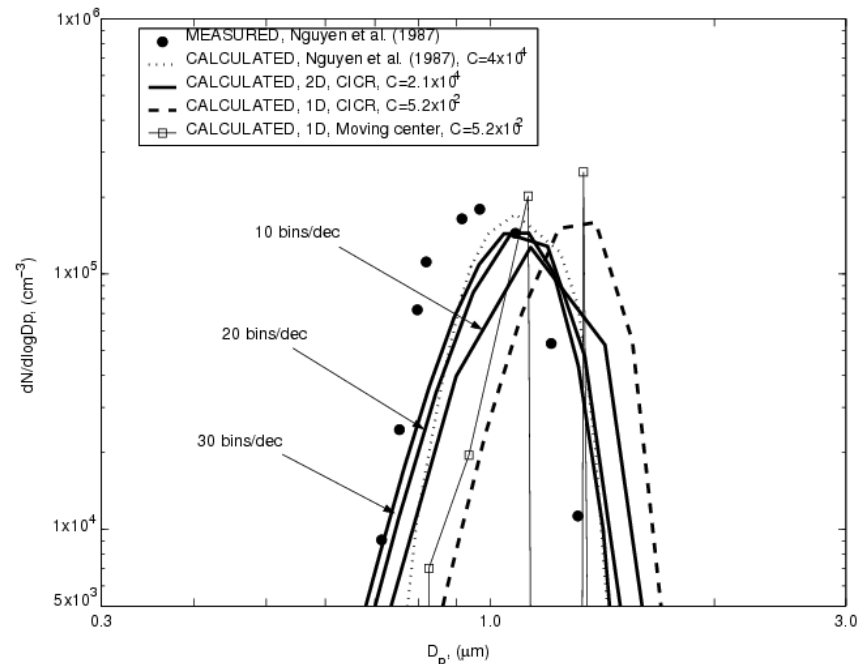
Lagrangian-2D-Sectional

✓ Έγιναν επίσης μονοδιάστατοι υπολογισμοί

Pyykonen and Jokiniemi (2000):

Eulerian-Sectional: CPU days, μια τάξη μεγέθους απόκλιση

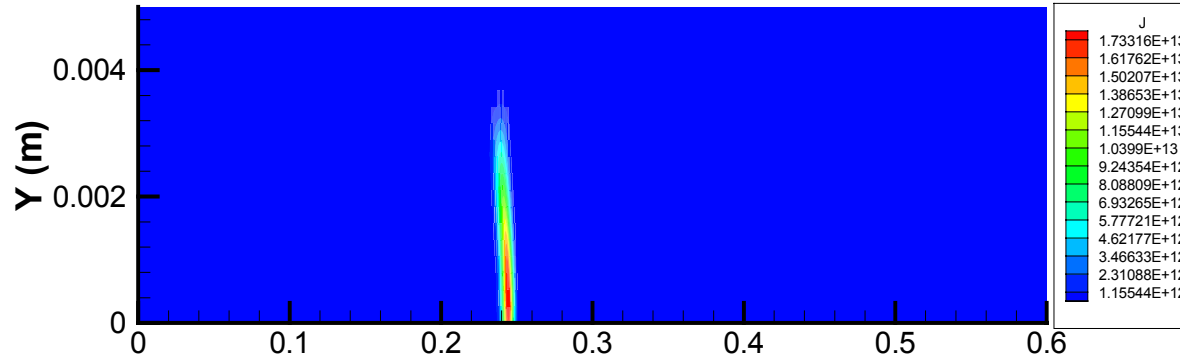
Με το μοντέλο μας:
CPU time=25-100 min



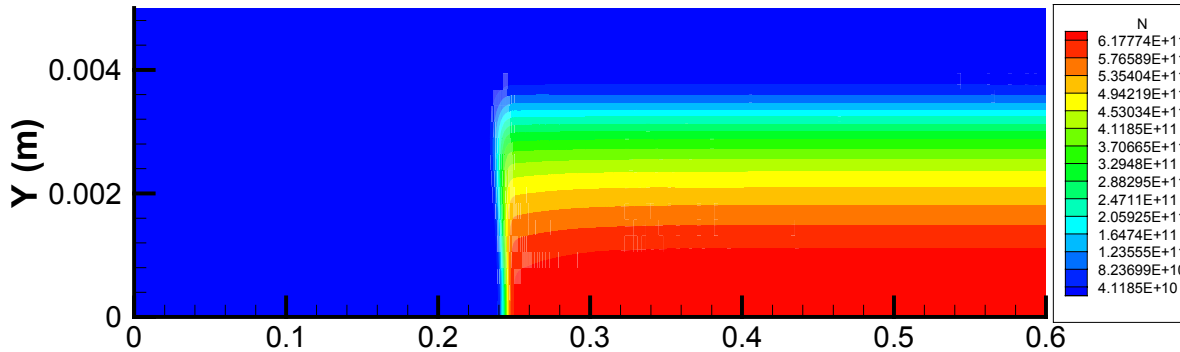


Προσομοίωση αντιδραστήρα στρωτής ροής

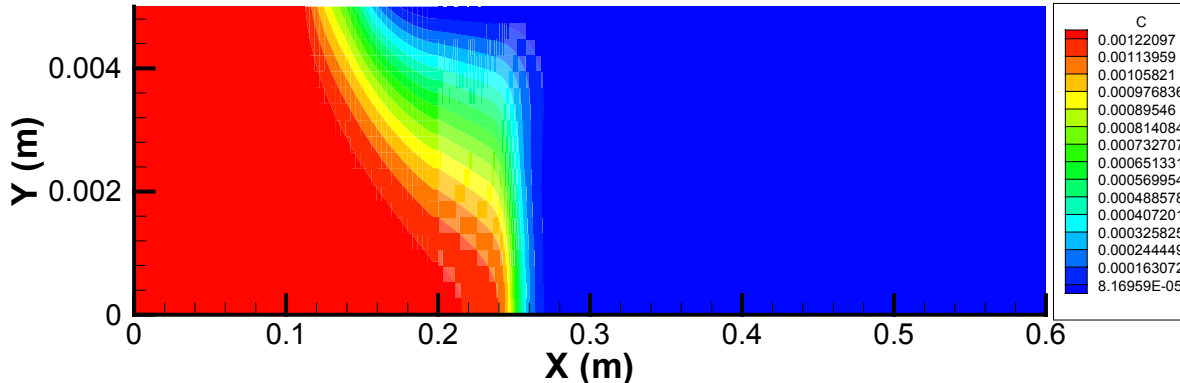
Προβλεπόμενα μεγέθη στον αγωγό



**Ρυθμός
Πυρηνποίησης**



Αριθμός σωματιδίων



Κλάσμα ατμού

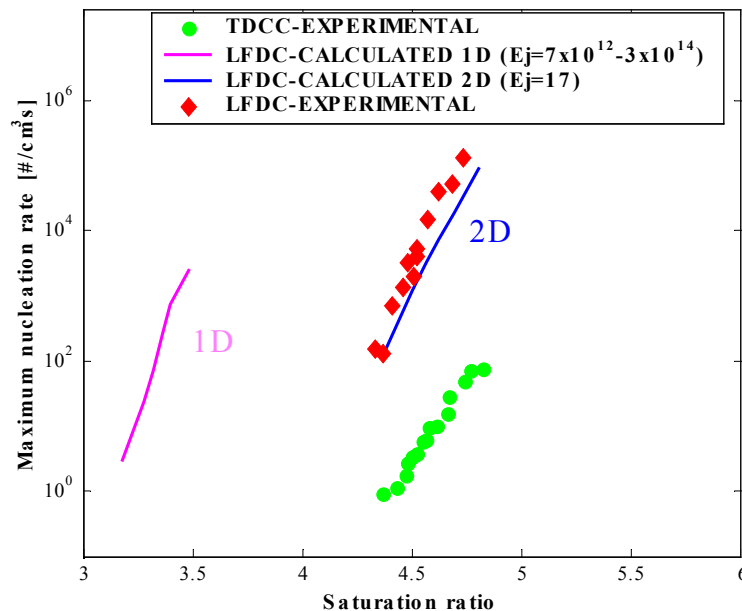


Προσομοίωση αντιδραστήρα στρωτής ροής

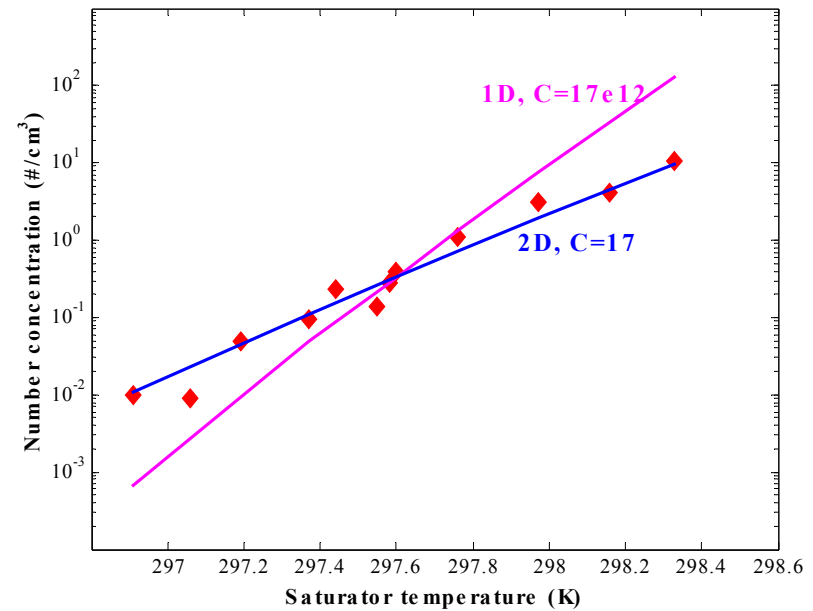
Homogeneous nucleation experiment of 1-butanol in a laminar flow aerosol reactor

Σε συνεργασία με Czech Acad. Sci.

(Brus et al., Journal of Chemical Physics, 2005)



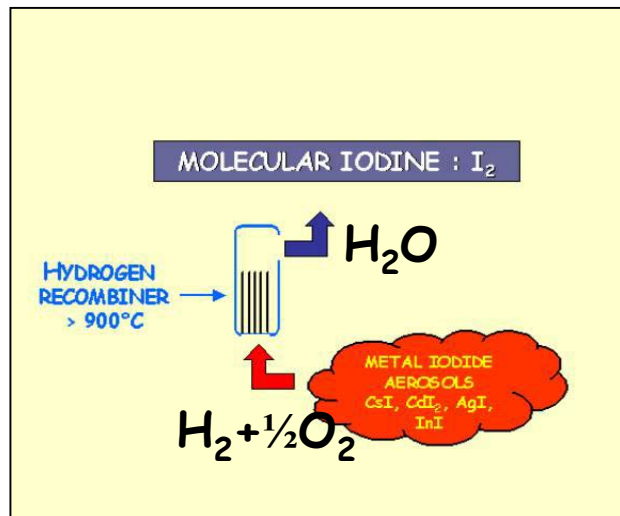
Maximum nucleation rate, as a function of the saturation ratio for the isotherm of 275 K.



Number concentration at the exit of the reactor, as function of the saturator temperature, for the isotherm of 275 K.

Εφαρμογή-ασφάλεια αντιδραστήρων (Severe accidents)

Analysis of the thermal decomposition of metal-iodide aerosols due to passage through hydrogen recombiners



RECI-experiment
IRSN, France



(Sabroux, J.C and Deschamps, F., 2005)



Εφαρμογή-ασφάλεια αντιδραστήρων (Severe accidents)

RECI-experiment/Υπολογισμοί

Χημεία

π.χ. N_2 , O_2 , H_2O , OH , I , HO_2 , HIO , CdO , HI , IO ,
 H_2O_2 , I_2 , IO_2 , CdI_2 , I_2O , Cd , O , H_2 , O_3 , CdI , H

Υπολογισμός χημικής
σύστασης αέριας φάσης

Χημική ισορροπία-Ελαχιστοποίηση
Gibbs free energy

✓ *Επόμενο βήμα:* Υπολογισμός σύστασης σωματιδιακής φάσης