



národní
úložiště
šedé
literatury

Dynamika aerosolů - matematická formulace, numerické řešení

Pušman, Jan
2012

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-126884>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 20.04.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní [nusl.cz](http://www.nusl.cz) .

DYNAMIKA AEROSOLŮ - MATEMATICKÁ FORMULACE, NUMERICKÉ ŘEŠENÍ

Jan PUŠMAN¹, Vladimír ŽDÍMAL¹

¹Oddělení aerosolových studií, Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Praha, pusman@icpf.cas.cz

Klíčová slova: Dynamika aerosolů, rozdělení velikosti, GDE, CFD, DQMOM, OpenFOAM

SUMMARY

Mathematical and computer modeling of aerosols is used in a wide range of applications including atmospheric physics and chemistry, environmental protection, nuclear safety and industrial applications such as the production of nanomaterials. The aim of this work is twofold. We present a closer look at some aspects of mathematical modeling of aerosols as sub-discipline of continuum mechanics. We provide an overview of common methods and we discuss limitations on their applicability. The long-term goal of authors is to create a new solver of aerosol dynamics based on OpenFOAM platform. A mathematical formulation of the problem is given in terms of Navier-Stokes-Fourier system coupled with evolutionary equation governing aerosol size distribution. Trial numerical simulations in a 2D channel were performed under physically simplified conditions.

ÚVOD

Matematické a počítačové modelování aerosolů nachází uplatnění v širokém spektru aplikací od atmosférické fyziky a chemie, ochranu životního prostředí přes jadernou bezpečnost po průmyslové aplikace jako je např. produkce nanomateriálů. Následující příspěvek sleduje dva cíle. Prezentovat aerosolové veřejnosti bližší aspekty matematického modelování aerosolů jako subdisciplíny mechaniky kontinua. Uvádíme přehled užívaných metod a diskutujeme jejich použitelnost vzhledem k oblasti využití, výpočetní náročnosti a možnosti dalších modifikací. Dlouhodobějším cílem autorů je vytvoření nového řešiče dynamiky aerosolu na platformě OpenFOAM. OpenFOAM je volně šiřitelný (ve smyslu všeobecné veřejné licence GNU) soubor CFD knihoven napsaných v jazyce C++. Toto řešení plně implementuje myšlenky objektově orientovaného programování a umožňuje pracovat s vysokoúrovňovou syntaxí kódu, která je velmi blízko konvenční notaci parciálních diferenciálních rovnic (Weller a kol., 1998).

FORMULACE ÚLOHY

Výchozím bodem našeho popisu jsou bilance hmoty, energie a hybnosti. Ústřední roli v matematickém popisu chování dispergované fáze hraje obecná dynamická rovnice (General Dynamic Equation, GDE) (Friedlander, 1997). Matematická formulace kompletní úlohy uvažuje nestlačitelný Navierův-Stokesův-Fourierův systém svázaný s evoluční rovnicí (1) řídící vývoj velikostního rozdělení aerosolů a zahrnuje popis fyzikálně chemických procesů koagulace, kondenzace, vypařování a nukleace.

V posledních čtyřiceti letech byla vyvinuta a dále rozvíjena řada přístupů k řešení (1). Mezi nejrozšířenější patří metoda Gelbardova a Seinfeldova (Gelbard a kol., 1980) spolu s Metodou momentů (Hulburt, 1964). Velmi populární se stala také Modální metoda (Whitby, 1997). Některé omezující předpoklady předchozích metod odstraňuje metoda QMOM (Quadrature Method of Moments) (McGraw, 1997). Tento přístup byl autory Marchisiem a Foxem modifikován na DQMOM (Direct Quadrature Method of Moments) (Marchisio, 2005).

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(\mathbf{x}, v, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{x}, v, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)] - \nabla \cdot [D\nabla n(\mathbf{x}, t)] = \\
= \nabla \cdot (n(\mathbf{x}, v, t)\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) - \frac{\partial}{\partial v} (Gn) + \frac{1}{2} \int_0^v K(v - v', v')n(\mathbf{x}, v - v', t)dv' \\
- n(\mathbf{x}, v, t) \int_0^\infty K(v', v)n(\mathbf{x}, v', t)dv' + s(\mathbf{x}, v, t) - r(\mathbf{x}, v, t). \quad (1)
\end{aligned}$$

Význam použitých symbolů: n - funkce popisující rozdělení velikosti částic, \mathbf{x} - kartézské souřadnice, t - čas, v - parametr odpovídající velikosti částice, \mathbf{u} - rychlost disperzní fáze, \mathbf{c} - externí silové pole, D - difuzní koeficient, G - koeficient růstu částic, K - koagulační kernel, s - zdroje, r - ztráty.

VÝSLEDKY – NUMERICKÉ ŘEŠENÍ

Obecná dynamická rovnice byla pro potřeby numerického řešení (v duchu DQMOM metody) přeformulována na úlohu obsahující pouze transportní rovnice pro váhy a uzly kvadraturní formule. V současnosti je naprogramován řešič pro případ, kdy se v Obecné dynamické rovnici (a tedy i v transportních rovnicích pro váhy a uzly kvadraturní formule) omezíme jen na některé členy. Vytvořený řešič je využit k realizaci numerického řešení pro konkrétní úlohu na omezené oblasti – 2D kanál.

PODĚKOVÁNÍ

Tato práce byla podpořena grantem Ministerstva vnitra ČR pod číslem VF2010201513.

LITERATURA

- Friedlander S. K., *Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol behavior*, (1977).
- Gelbard F., Tambour Y., Seinfeld J. H., *Sectional representations for simulating aerosol dynamics*, *Journal of Colloid and Interface Science*, 76(2):541–556, (1980).
- Hulburt H. M., Katz S., *Some problems in particle technology:: A statistical mechanical formulation*, *Chemical Engineering Science*, 19(8):555–574, (1964).
- Marchisio D. L., Fox R. O., *Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments*, *Journal of Aerosol Science*, 36(1):43–73, (2005).
- McGraw R., *Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments*. *Aerosol Science and Technology*, 27(2):255–265, (1997).
- Weller H. G., Tabor G, Jasak H., and Fureby C., *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques*. *Computers in physics*, 12:620, (1998).
- Whitby E. R., McMurry P. H., *Modal Aerosol Dynamics Modeling*. *Aerosol Science and Technology*, 27(6):673–688, (1997).