

Vernetzte multivariate Populationsbilanzen mittels Monte Carlo Methoden

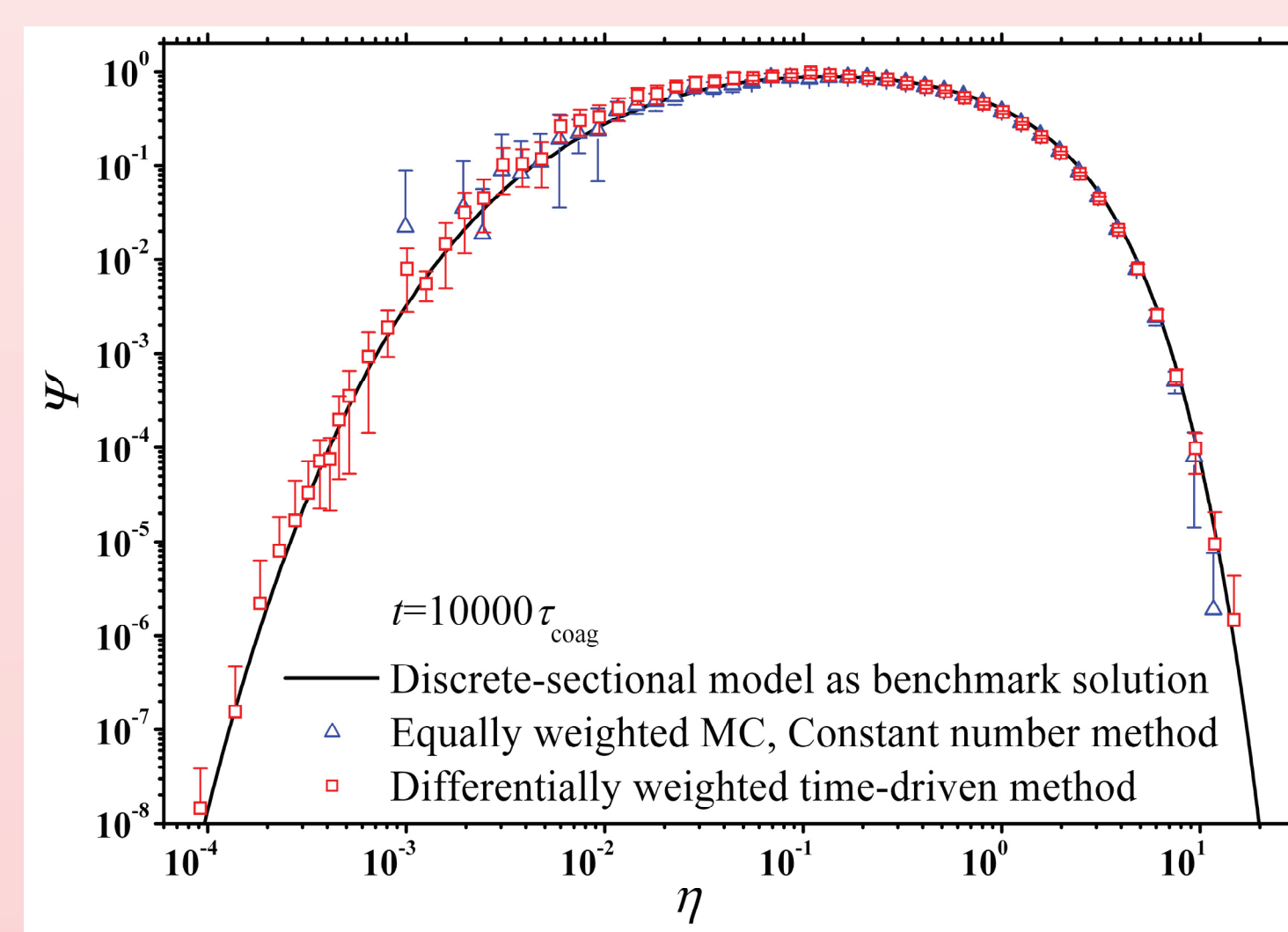
F.E. Krus, Fachgebiet Nanostrukturtechnik / Fak. Ingenieurwissenschaften & Center for NanoIntegration Duisburg-Essen (CENIDE)

Problemstellung

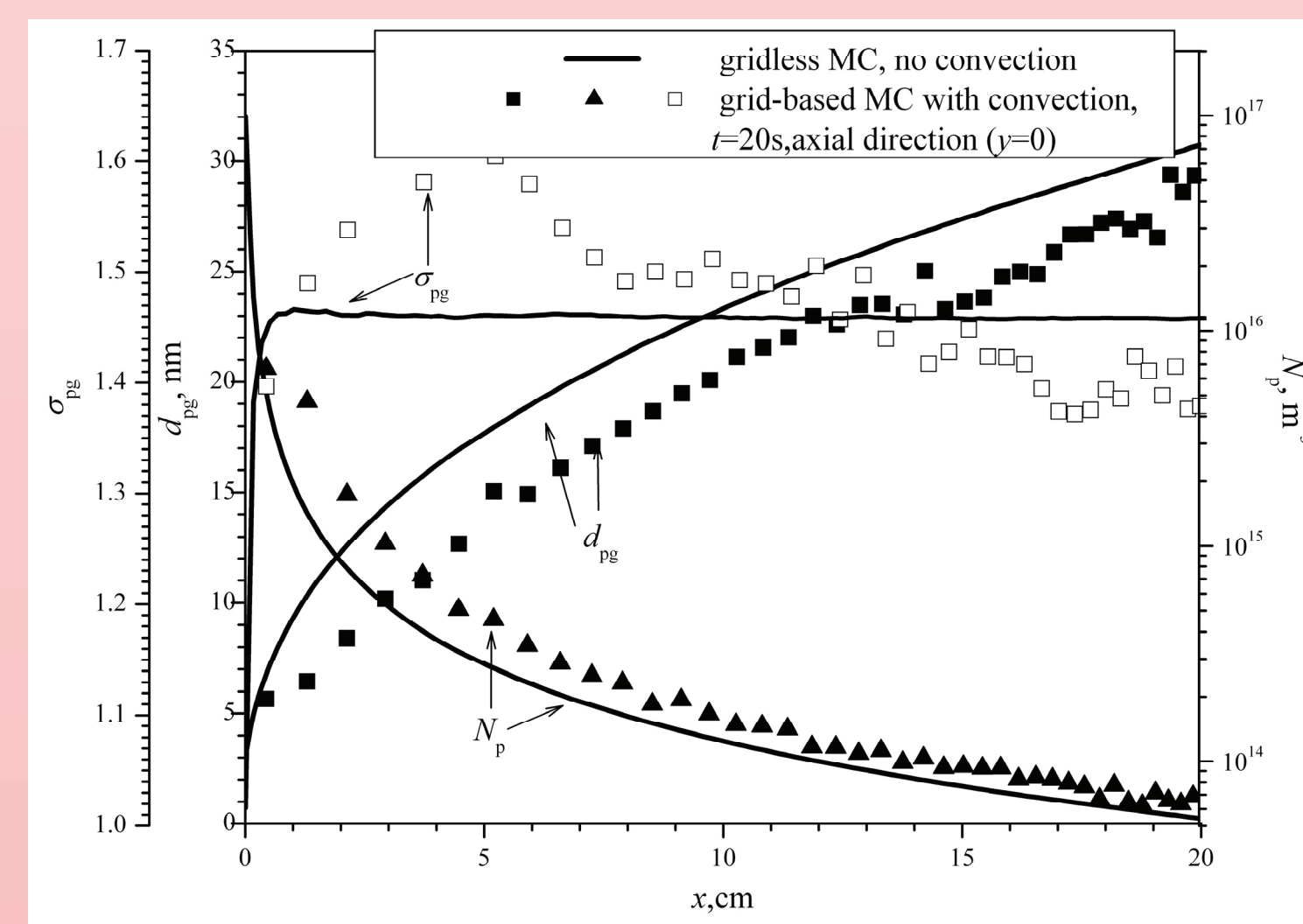
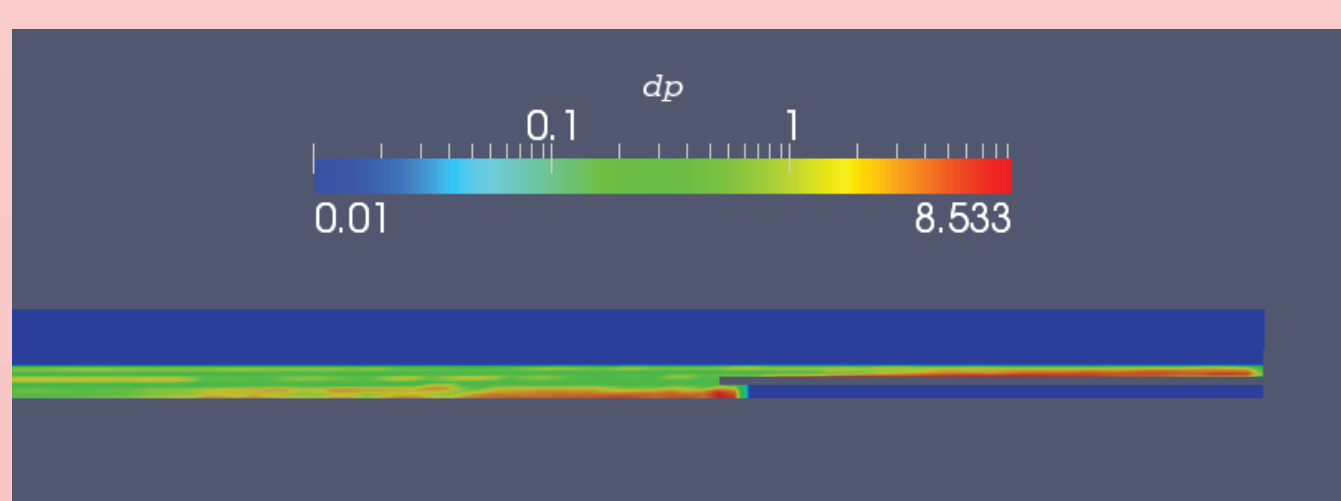
- Kombination von (stochastischen) Populationsbilanzen mittels Monte Carlo (MC) Methoden mit (deterministischen) Fließschemasimulationen
- Erreichen von akzeptablen Rechenzeiten bei Verwendung von MC Methoden auch für Systeme mit vielen Modulen/Kompartimenten

Vorarbeiten

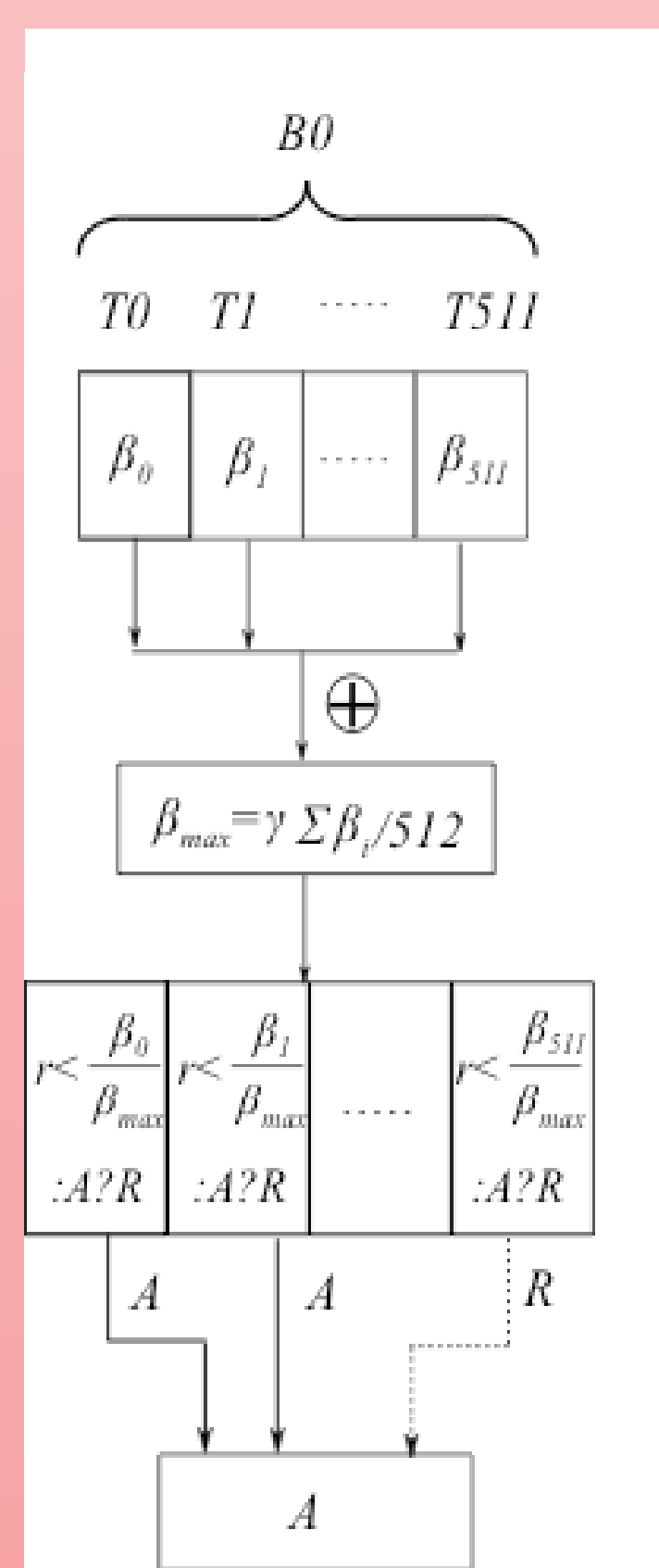
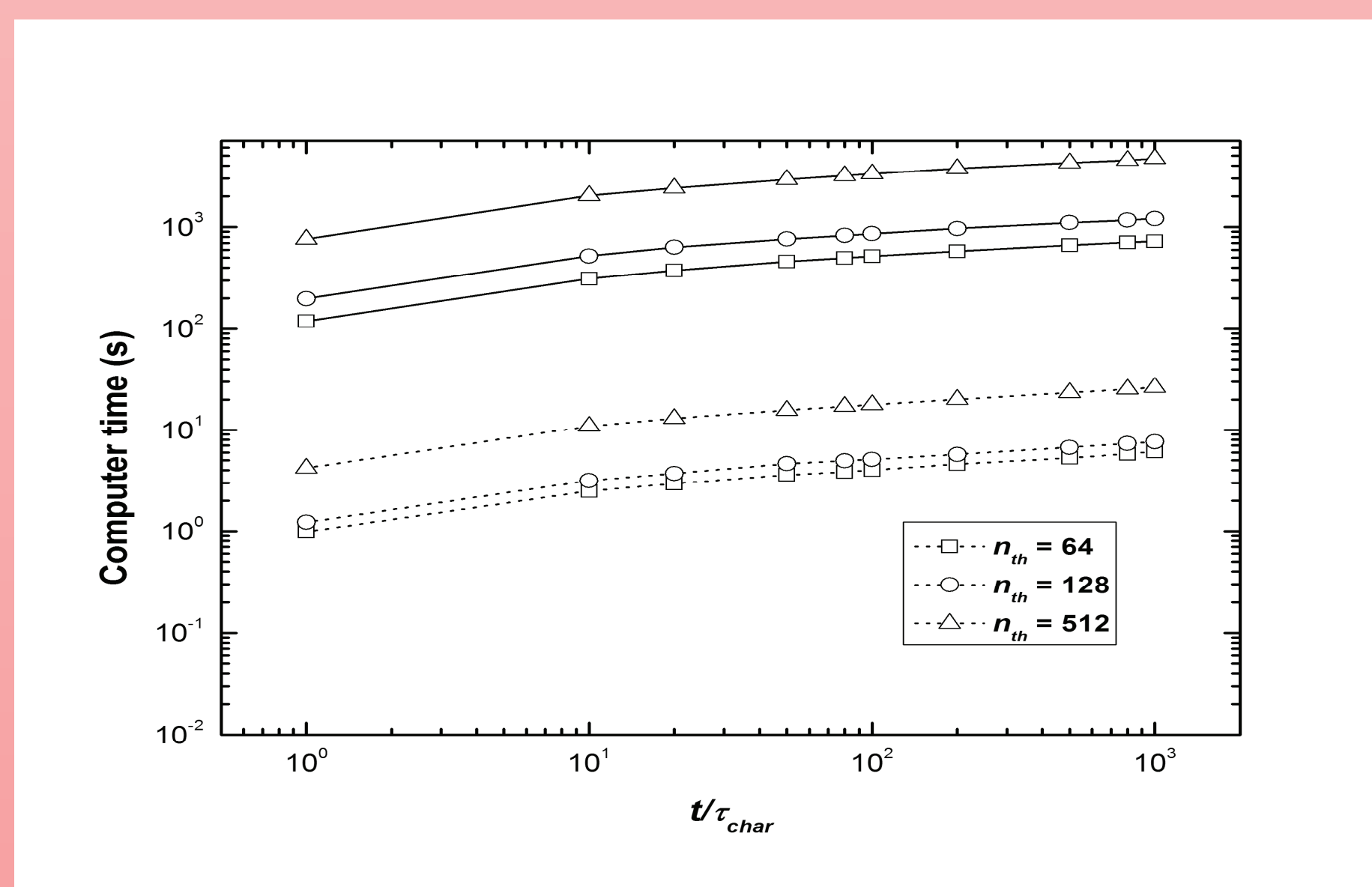
- Langjährige Forschung zu Monte Carlo-basierten Populationsbilanzen, insbesondere für Aerosolreaktoren (Inverse Methode, höhere Präzision mittels Gewichtung)



- Kombination von (stochastischen) Populationsbilanzen mittels MC Methoden mit (deterministischen) 2D-CFD Transportmodulen (8000 Zellen mit je 5000 Partikeln)

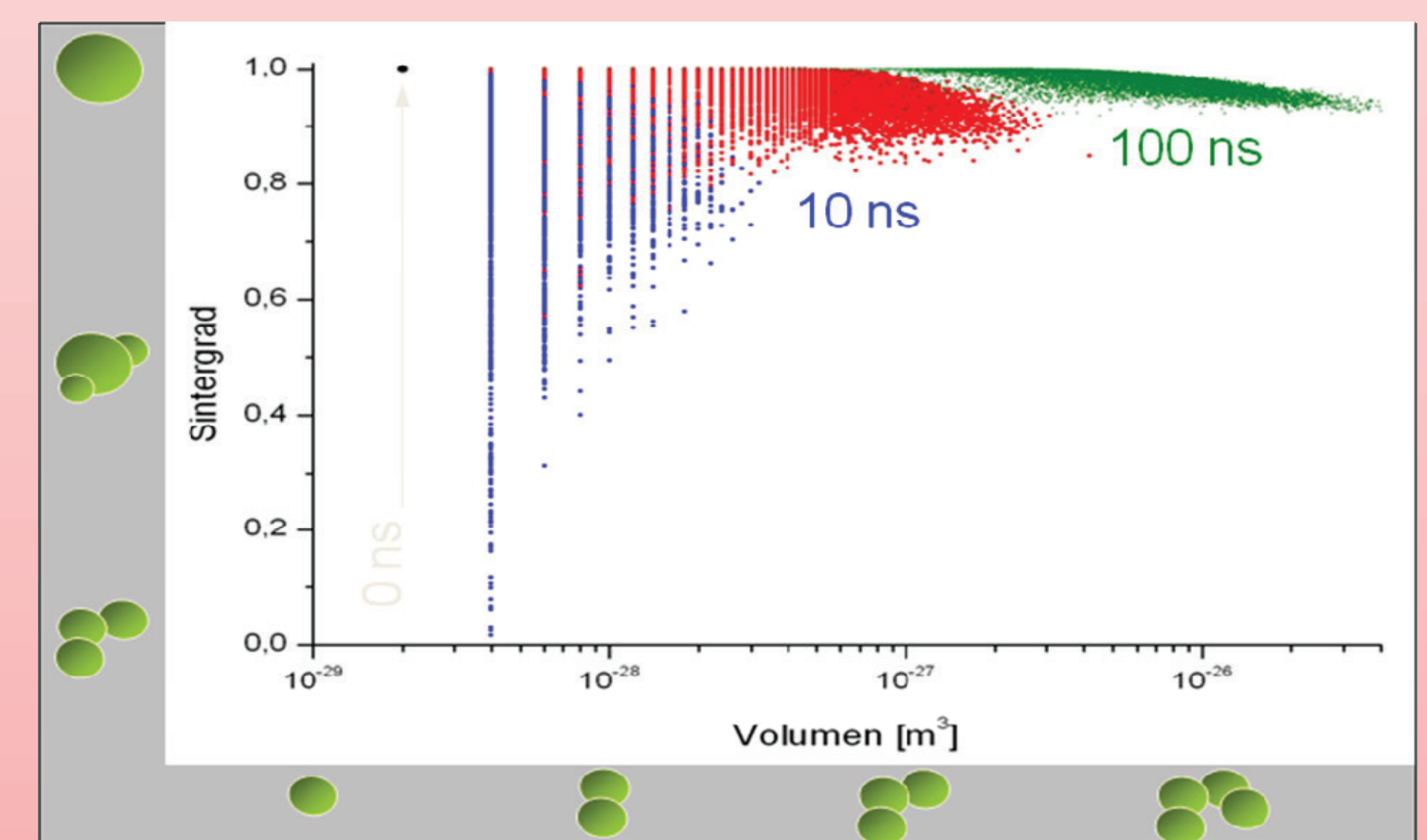


- Erreichen von akzeptablen Rechenzeiten bei Verwendung von MC Methoden auch für Systeme mit vielen Modulen/Kompartimenten: massive Parallelisierung mittels preiswerter Grafikkarten (NVIDIA/ CUDA)



Projektziele

- Kombination von multivariaten Populationsbilanzen mit Fließschemasimulationsmethoden
→ kann weitere Partikeleigenschaftsverteilungen als nur Größe liefern
(z.B. Sintergrad, Ladung, Zusammensetzung)



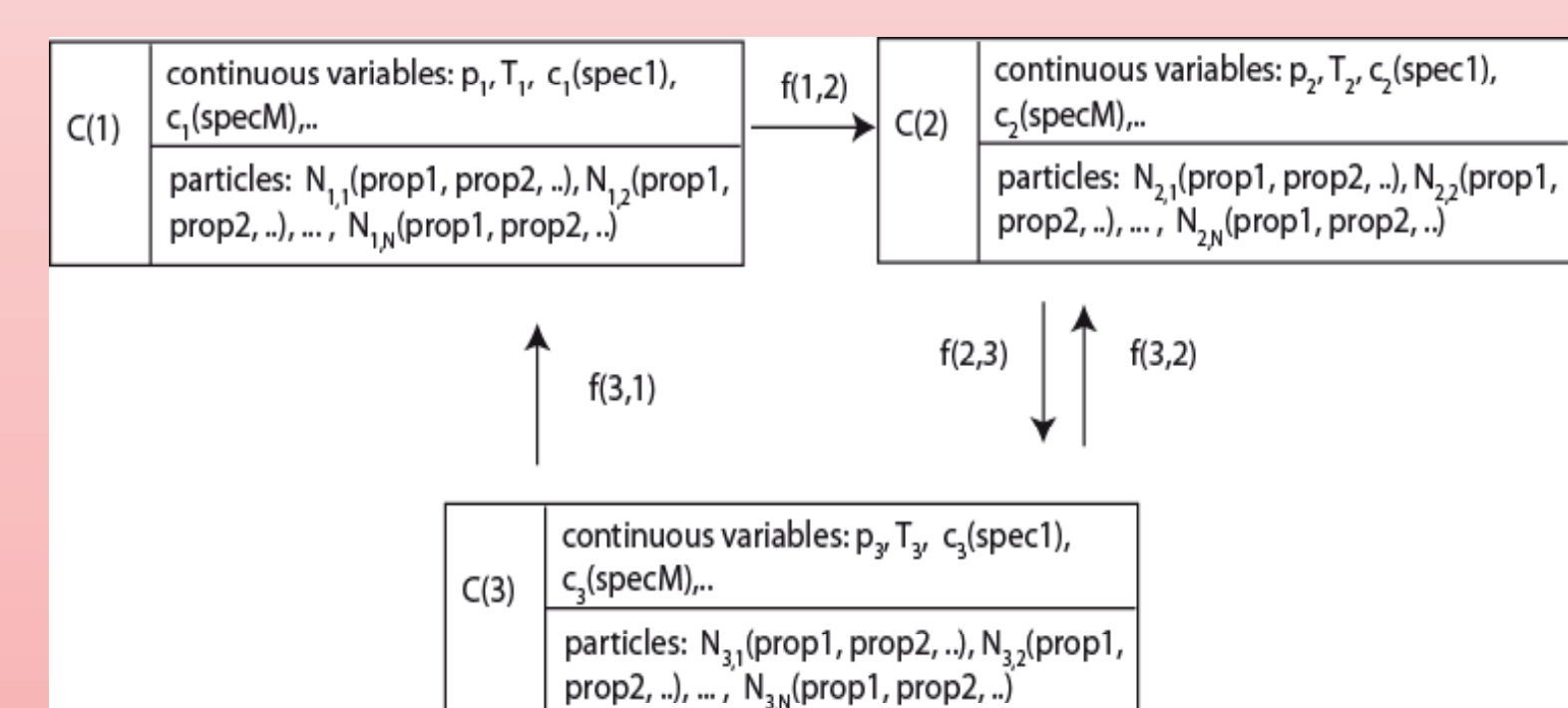
- Erstellung möglichst allgemeiner MC Algorithmen die sich leicht an sich ändernden Prozess- oder Maschinefunktionen anpassen
- Entwicklung neuer parallelisierter numerischer Algorithmen, GPU-tauglich (GPU: PC-Grafikkarte, 300€ für 512 Rechenkerne)

Arbeitsprogramm

1. GPU-basierte Parallelisierung weiterer Mechanismen (Keimbildung, Wachstum)
2. Minimierung des Einflusses von stochastischen Fluktuationen und Entwicklung einer geeigneten Zeitschrittkontrolle
3. Transport der Simulationspartikel zwischen den Kompartimenten in Fließschema, basierend auf Wahrscheinlichkeiten (sowohl CSTR als auch PFR Verweilzeit)
4. Modellanwendung: Beschichtungsuniformität in einem Wurstercoater (Kontakt zwischen einem Spray und Partikel in einem Wirbelbett)
5. Kombination von MC mit allgemeinen Apparatfunktionen (Partikelabscheidung, Größentrennung)
6. Überprüfung der Eignung von CAPE-OPEN Standard als Interface

Methodik

- Simulationspartikel in GPU Speicher (zur Zeit maximal 10⁸ mit je 4 Eigenschaften)
- Feste Zahl an Simulationspartikel pro Kompartiment, Benutzung Gewichtungsfaktoren



- Deterministische und stochastische Schritte abwechselnd (Zeitschrittsteuerung)
- Vorgabe der erwünschten numerischen Genauigkeit an MC Module

Eigene Publikationen zum Thema

1. A. Maisels, F. E. Krus, H. Fissan, Direct Monte Carlo simulation for simultaneous nucleation, coagulation, and surface growth in dispersed systems, Chem. Eng. Sci. 59, 2231-2239 (2004).
2. H. Zhao, F.E. Krus, C. Zheng; Reducing statistical noise and extending the size spectrum by applying weighted simulation particles in Monte Carlo simulation of coagulation, Aerosol Sci. Technol. 43, 781-793 (2009).
3. H. Zhao, F.E. Krus; Monte carlo simulation for aggregative mixing of nanoparticles in two-component systems, Industrial and Engineering Chemistry Research 50, 10652 (2011).
4. Krus, F.E., J. Wei, T. van der Zwaag, S. Haep, Computational fluid dynamics based stochastic aerosol modeling: Combination of a cell-based weighted random walk method and a constant-number Monte-Carlo method for aerosol dynamics, Chem.Eng.Sci. 70 109-120 (2012)