



# Skalierbare Simulation von Gastrennung und Nukleation mit Is1: Der aktuelle Stand

Martin Horsch

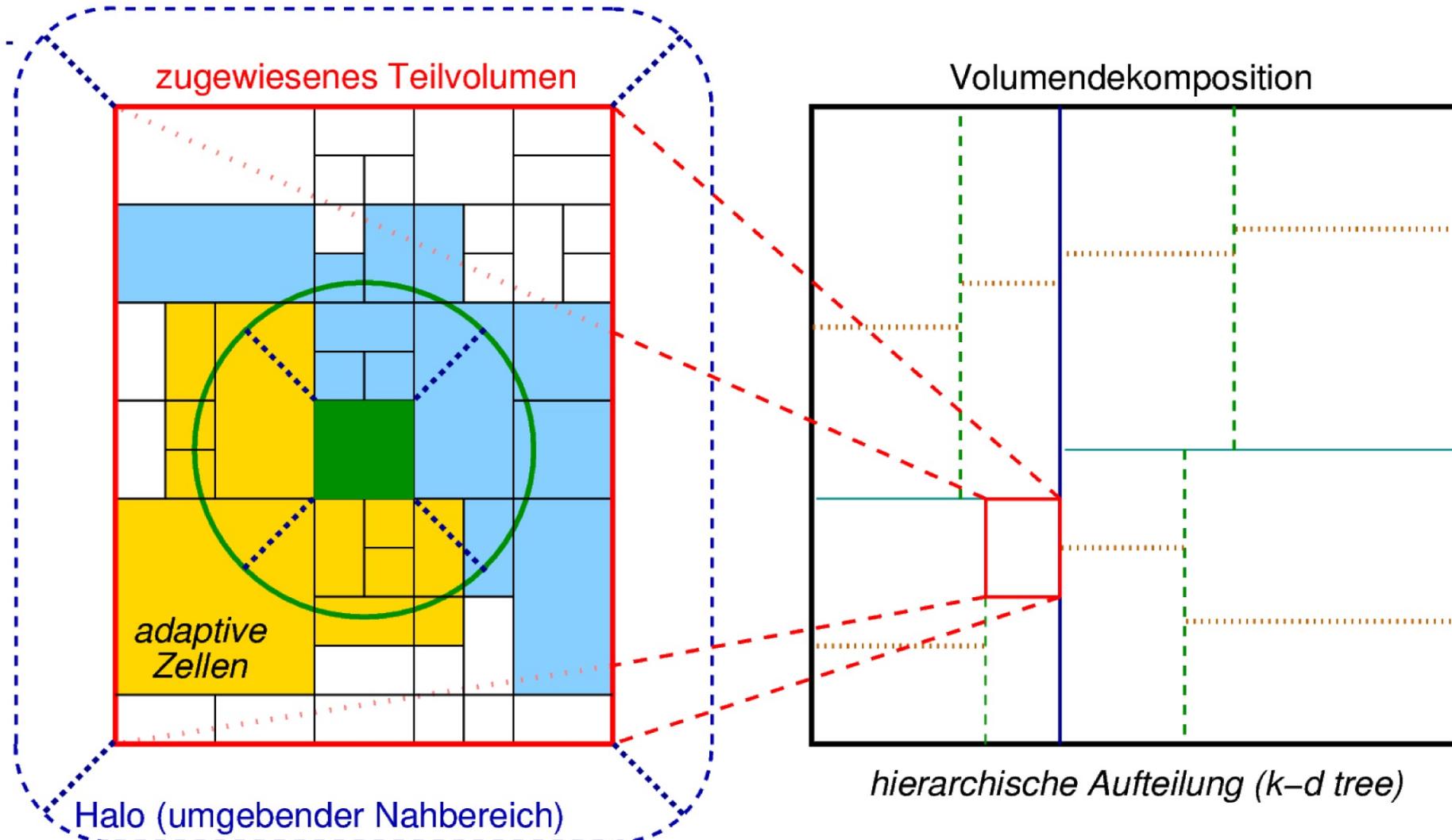
Stuttgart, 23. und 24. Januar 2014  
Projekttreffen BMBF «SkaSim»



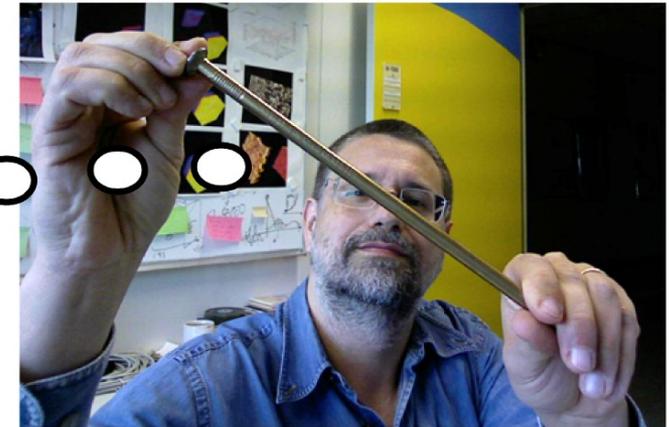
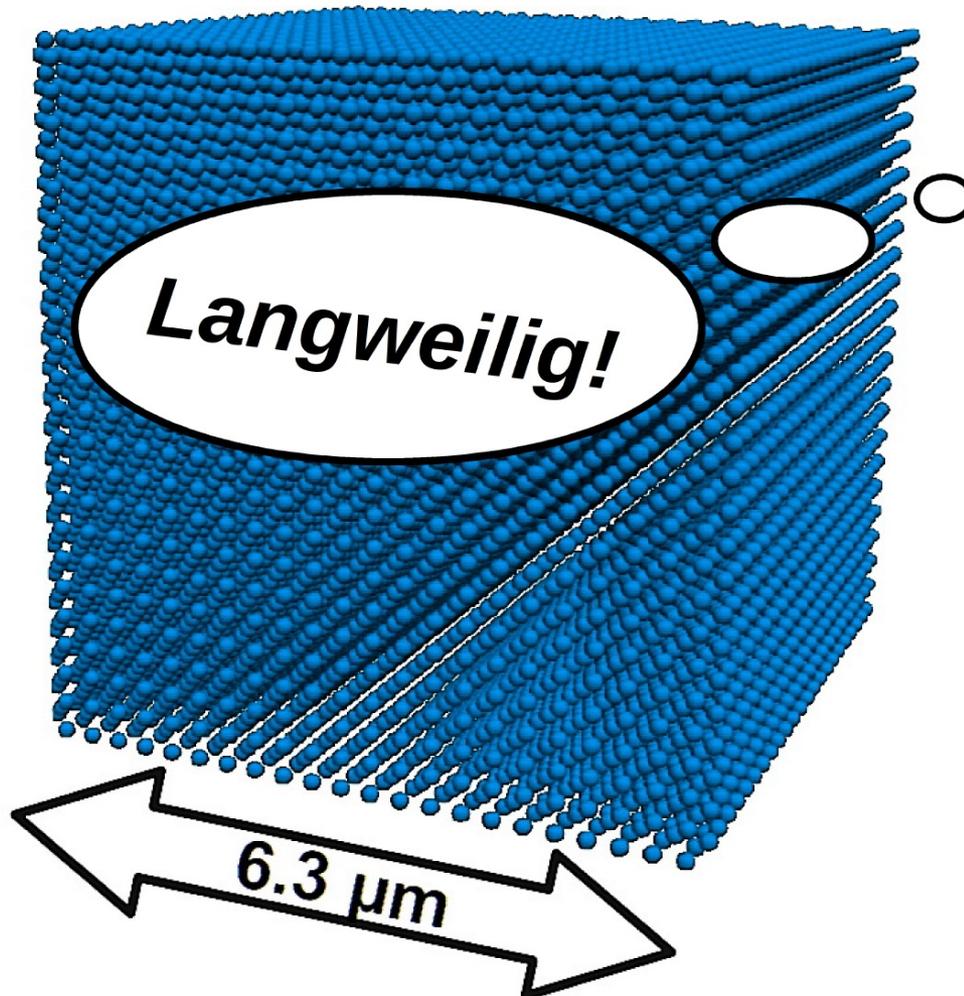
**Computational  
Molecular Engineering**



# Skalierbare Simulation heterogener Systeme

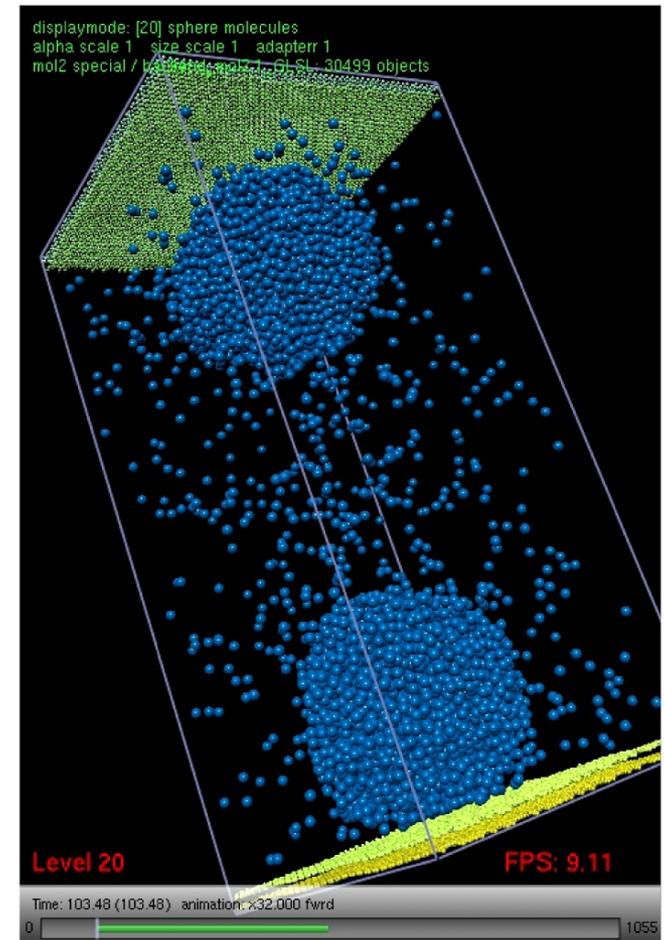
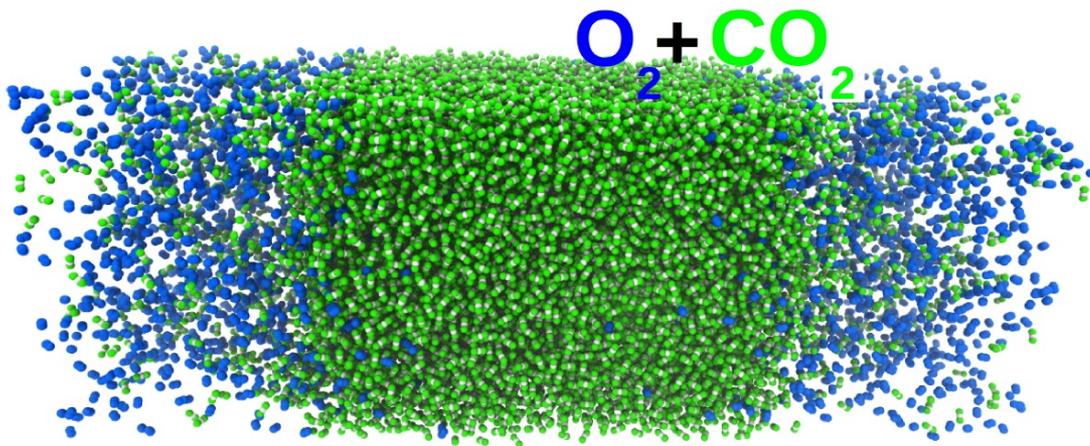


# Weltrekordsimulation



# Simulation von Fluiden an Grenzflächen

- Adsorption (Reinstoff und Gemisch)
- Oberflächenspannung (planar)
- Gekrümmte Phasengrenzen
- Kontaktwinkel / Kontaktlinienhaftung
- Tropfendynamik und Nukleation





# Lizenzierung

## Einigung auf FreeBSD-Lizenz:

- © 2007-2014 High Performance Computing Center Stuttgart, University of Stuttgart. All rights reserved.
- © 2007-2014 University of Paderborn. All rights reserved.
- © 2009-2014 University of Kaiserslautern. All rights reserved.
- © 2007-2014 Technische Universitaet Muenchen. All rights reserved.

...

1. **Redistributions** of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer.
2. **Redistributions** in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution.

- Keine Aussage über Weiterentwicklungen (können proprietär sein)
- Keine ultra-lange Liste aller beteiligten Entwickler erforderlich

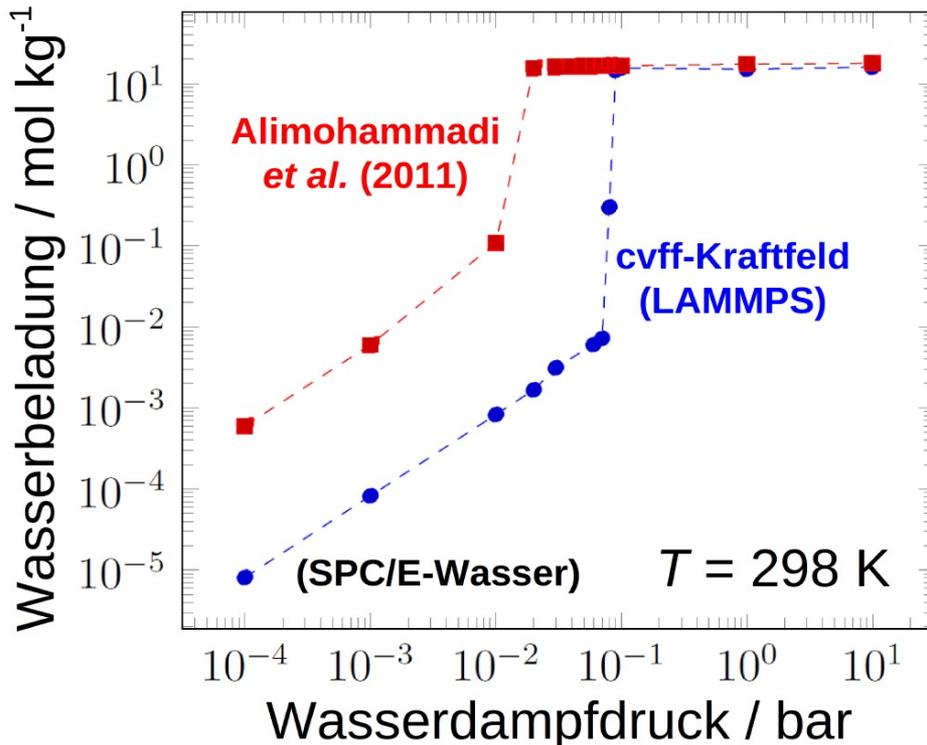


# Entwickler

|                                |             |                  |                      |
|--------------------------------|-------------|------------------|----------------------|
| <b>Martin Bernreuther</b>      | hpcbern     | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Martin Buchholz</b>         | buchholm    | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Phillipp Neumann</b>        | neumanph    | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Martin Horsch</b>           | horsch      | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Wolfgang Eckhardt</b>       | eckhardw    | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Christoph Niethammer</b>    | hpcchris    | Admin            | <a href="#">View</a> |
| <b>Nikola Plamenov Tchipev</b> | tchipevn    | Admin            | <a href="#">View</a> |
| Stefan Becker                  | sbecker     | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Stefan Eckelsbach              | eckelsbach  | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Wolfgang Eckhardt              | eckhardw-ro | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Michael Schappals              | exeron      | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Rio Yokota                     | yokota      | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Stephan Werth                  | swerth      | Senior Developer | <a href="#">View</a> |
| Łukasz Kowalczyk               | lukk        | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Rajat Srivastava               | rajats      | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Ninoy Rahman                   | ninoyrahman | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Weiwei Zhao                    | weiwei      | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Tobias Alter                   | talter      | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Collin Glass                   | hpcglass    | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Matthias Heinen                | mheinen     | Junior Developer | <a href="#">View</a> |
| Muhammad Afzal                 |             |                  |                      |
| Shuyu Sun                      |             |                  |                      |
| Domenic Ienz                   |             |                  |                      |

... 44 registrierte Personen

# Wechselwirkungsmodell und Adsorption

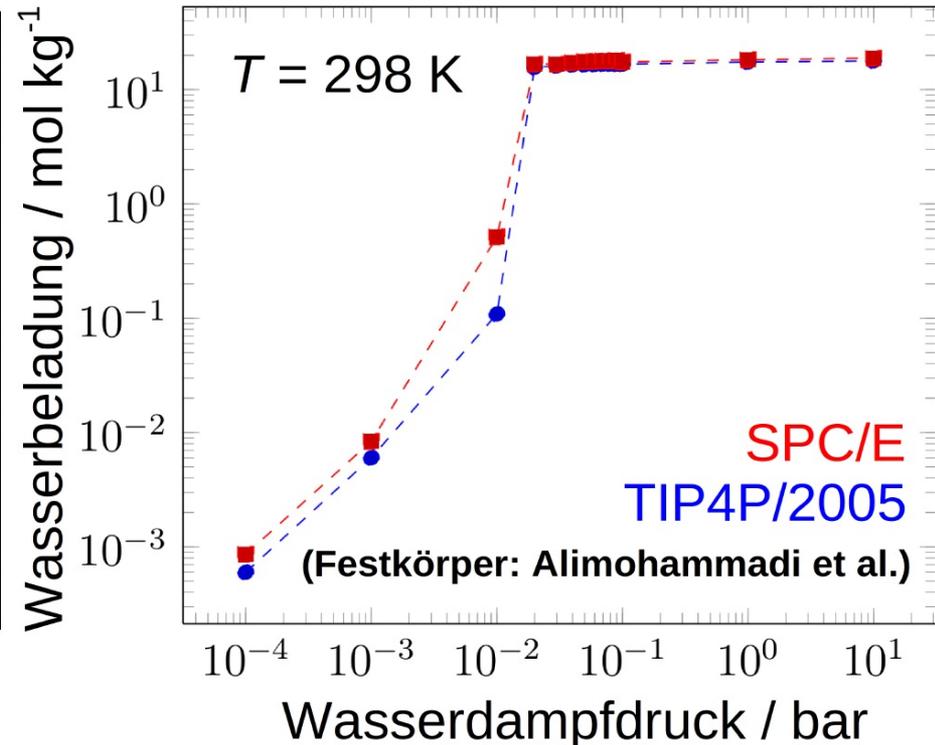
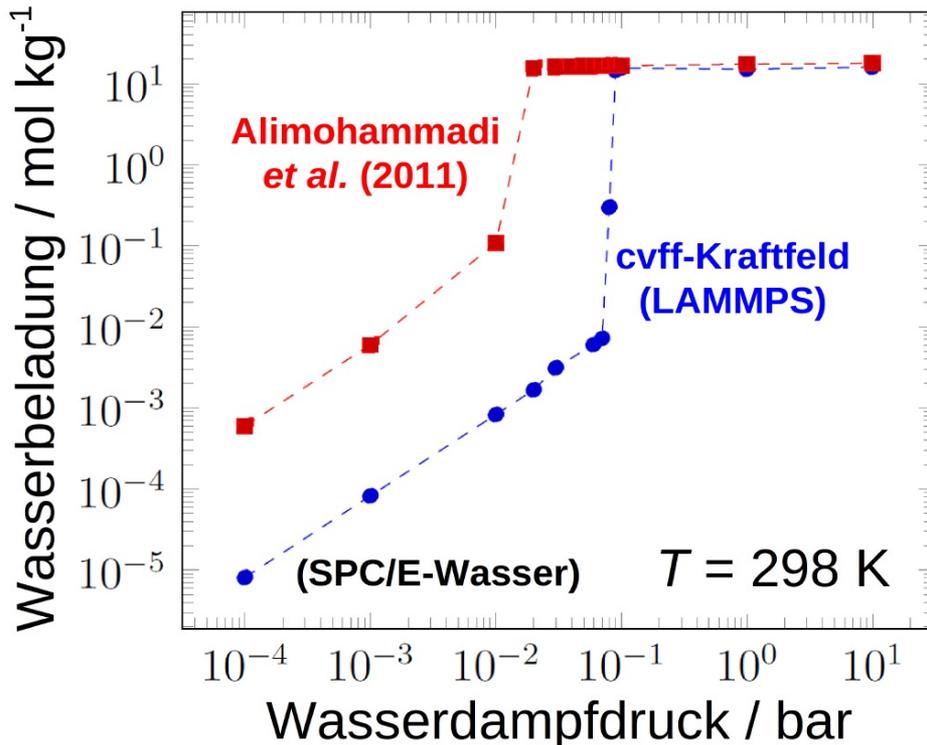


Beispiel: Physisorption von Wasser an Titandioxid

- Getrennte Berücksichtigung der Chemisorption nötig
- Elektrostatik aus quantenmechanischen Rechnungen
- LJ-Parameter für den Festkörper aus der Literatur

**Arbeitspaket 5.2:** Simulation des Gas-Membran-Kontakts (im Gleichgewicht): **Implementierung von Modellen** für die Membran sowie die **Gas-Membran-Wechselwirkung** und Erfassung des Einflusses dieser Wechselwirkung und der Morphologie der Membran auf **Adsorption** und Kontaktwinkel (inkl. Hysterese)

# Wechselwirkungsmodell und Adsorption

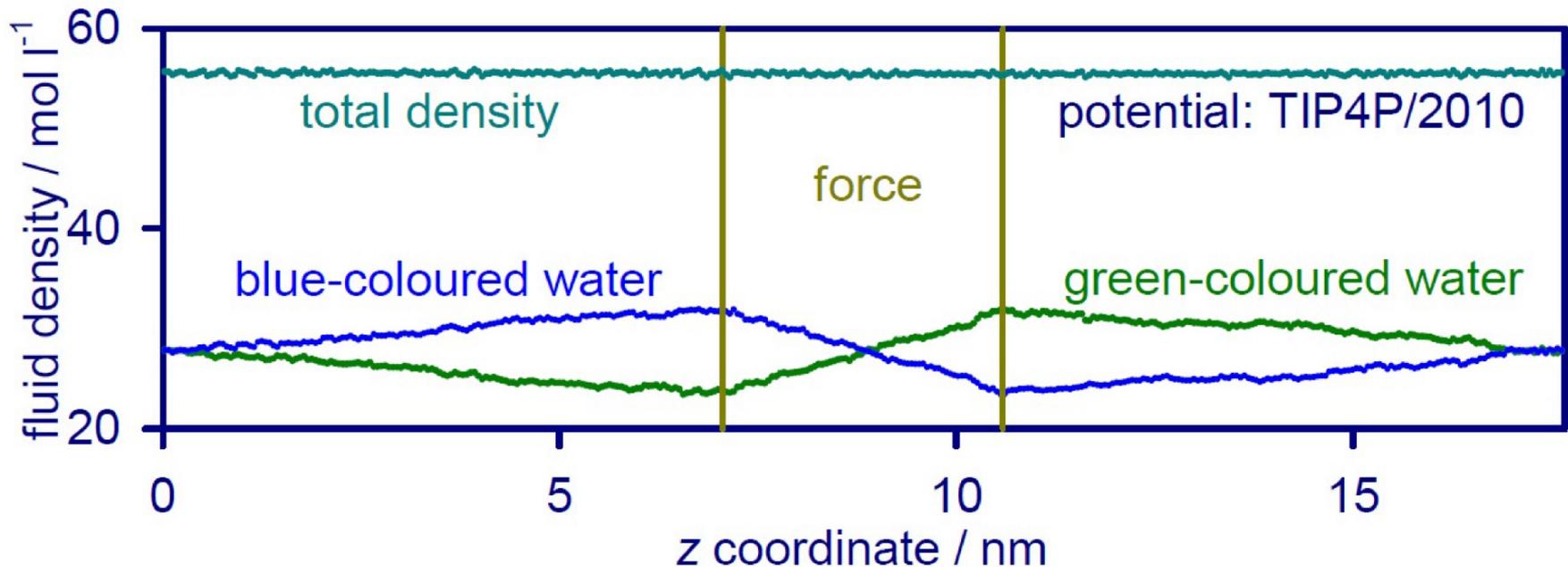


**Arbeitspaket 5.2:** Simulation des Gas-Membran-Kontakts (im Gleichgewicht): **Implementierung von Modellen** für die Membran sowie die **Gas-Membran-Wechselwirkung** und Erfassung des Einflusses dieser Wechselwirkung und der Morphologie der Membran auf **Adsorption** und Kontaktwinkel (inkl. Hysterese)



# Der Dämon von Avendaño

NEMD-Methode zur Separation des diffusiven und viskosen Transports:



**Arbeitspaket 5.3:** Simulation der Gastrennung durch die Entwicklung und Implementierung einer geeigneten **NEMD-Simulationsmethode** (z.B. einer Variante des **Dämons von Avendaño**) und deren Anwendung auf die Durchströmung eines porösen Substrats durch ein zu trennendes Gasgemisch



# Homogenisierung durch Skalenseparation

Mikrostruktur  
(heterogen)

- Systematische Simulation der Diffusion / Selektivität in nano- und mikroporösen Medien
- Variation von Porenstruktur und Zustandspunkt des Fluids

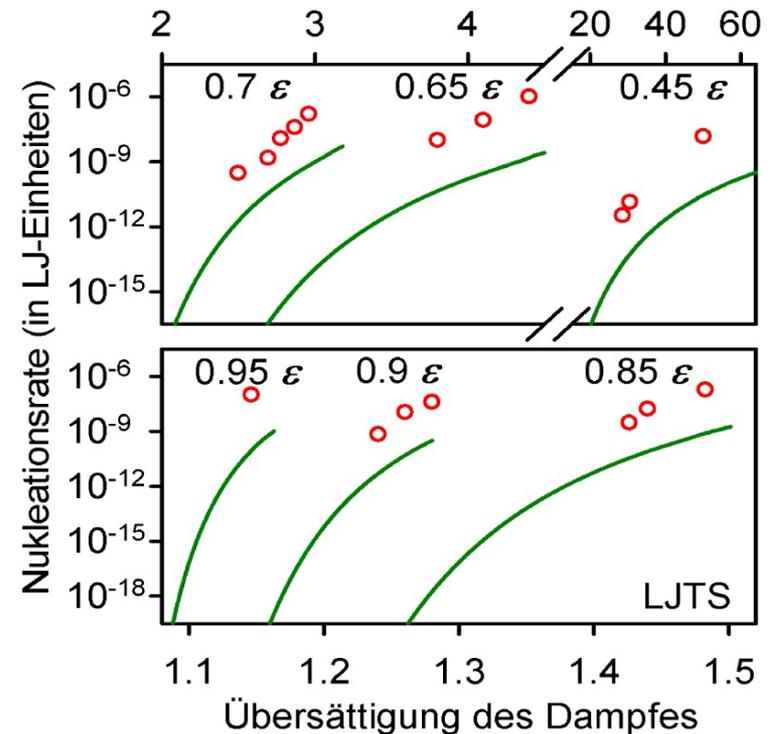
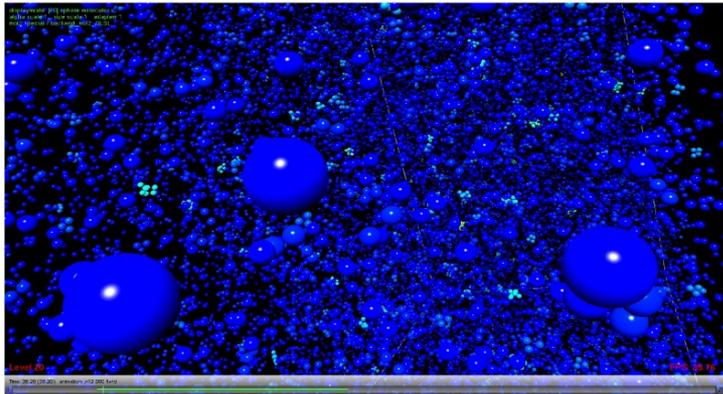
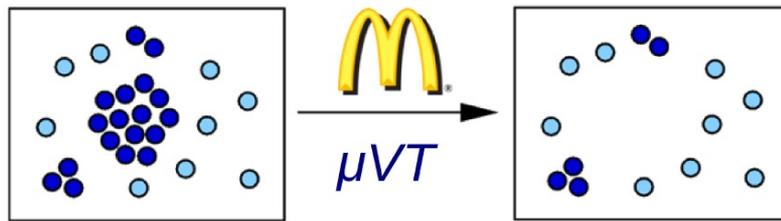
Makrostruktur  
(quasi homogen)

- Grundlage: Korrelation effektiver Transportgrößen (inkl. Ein- und Austrittseffekten und Randbedingungen)
- Berücksichtigung einer statistischen Verteilung der Porendurchmesser

Ziel: Homogenisierungsansatz durch Simulation großer Systeme auch direkt validieren (lange Simulationszeit bis zum stationären Zustand)

**Arbeitspaket 5.4:** Entwicklung eines für die Gastrennung geeigneten Ansatzes der mathematischen **Homogenisierung** für exakt periodische Systeme und Übertragung auf ein **nichtperiodisch strukturiertes Substrat**

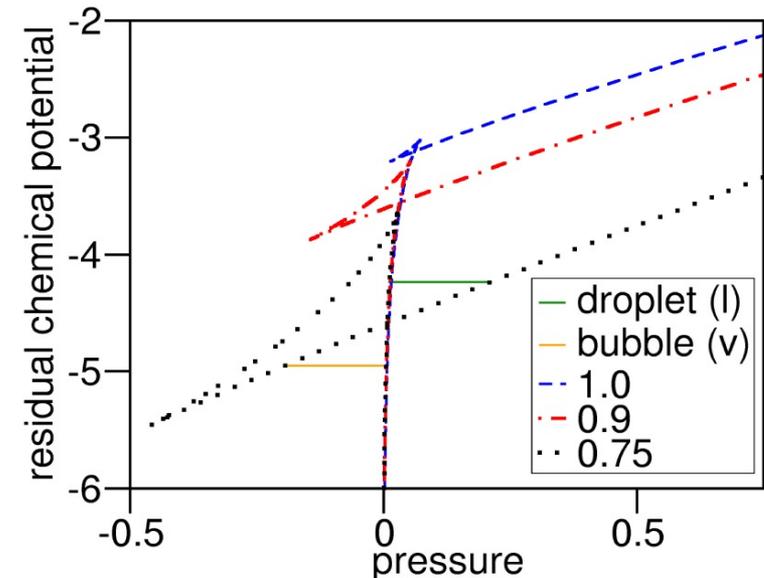
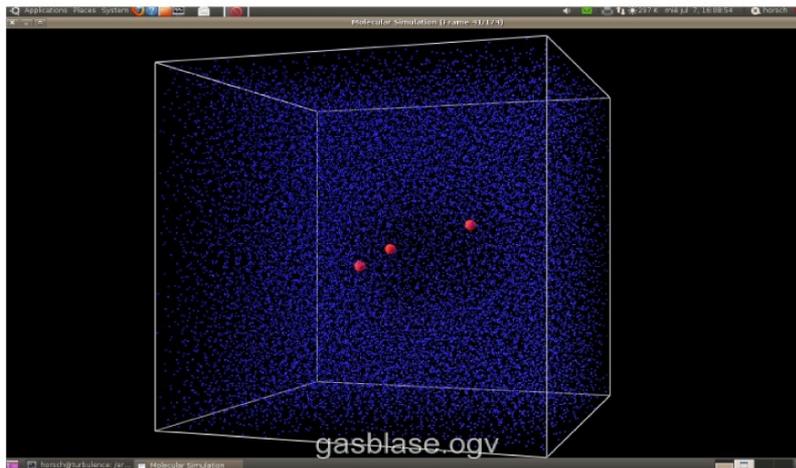
# Simulation der homogenen Nukleation



**Arbeitspaket 5.5:** Simulation der Nukleation ausgehend von einem metastabilen flüssigen Zustand durch die Entwicklung und Implementierung einer geeigneten **NEMD-Simulationsmethode** (z.B. einer Variante von **McDonald's Dämon**); Überprüfung und Verbesserung der bestehenden Nukleationstheorien

# Nukleation aus der flüssigen Phase

BASF: An der Bildung von Gasblasen und an Feststoffausfall interessiert.

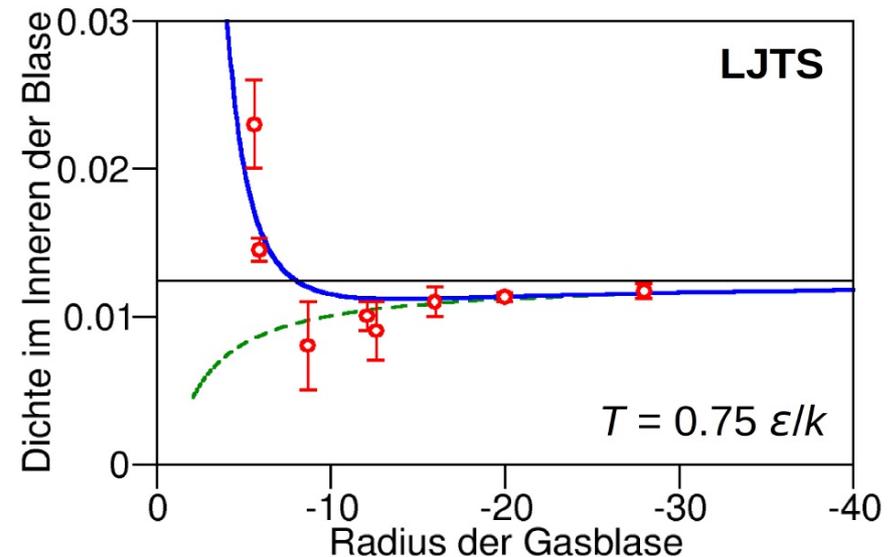
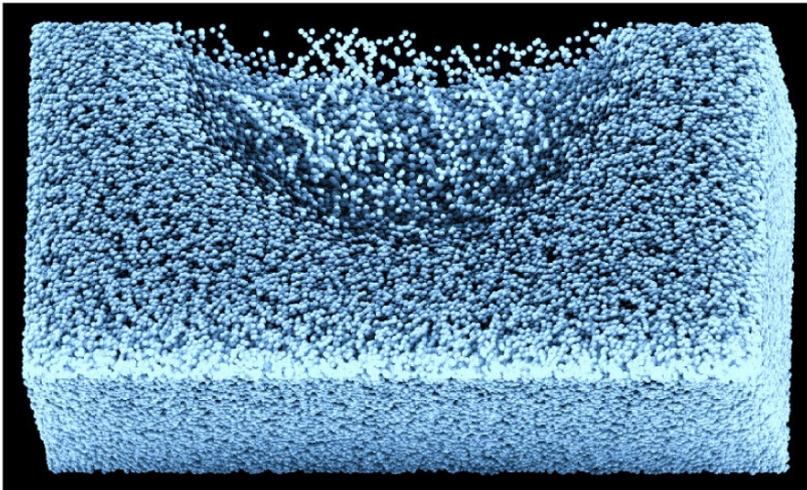


Voraussetzung: Modellvalidierung für VLE und Oberflächenspannungen.

**Arbeitspaket 5.5:** Simulation der Nukleation ausgehend von einem **metastabilen flüssigen Zustand** durch die Entwicklung und Implementierung einer geeigneten NEMD-Simulationemethode (z.B. einer Variante von McDonald's Dämon); Überprüfung und Verbesserung der bestehenden Nukleationstheorien

# Nukleation aus der flüssigen Phase

BASF: An der Bildung von Gasblasen und an Feststoffausfall interessiert.



Voraussetzung: Modellvalidierung für VLE und Oberflächenspannungen.

**Arbeitspaket 5.5:** Simulation der Nukleation ausgehend von einem metastabilen flüssigen Zustand durch die Entwicklung und Implementierung einer geeigneten NEMD-Simulationsmethode (z.B. einer Variante von McDonald's Dämon); **Überprüfung und Verbesserung der bestehenden Nukleationstheorien**



# Diskussionsbedarf

- **Was müssen wir *nächste Woche* klären?**
- **Werbeoffensive nach dem *I. Release***
- **Bestandsaufnahme und Bereinigung *svn***
- **Welche Features sollen ins *II. Release*?**