



Molekulare Simulation industrierelevanter Szenarien

Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD)

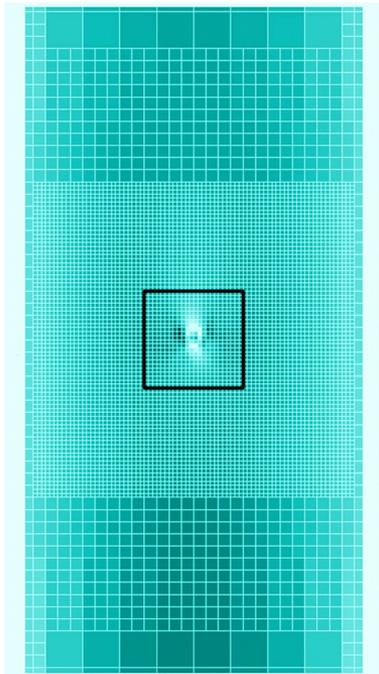
*BMBF-Projekt SkaSim: Skalierbare HPC-Software für
molekulare Simulationen in der chemischen Industrie*

Stuttgart, 30. Januar 2015

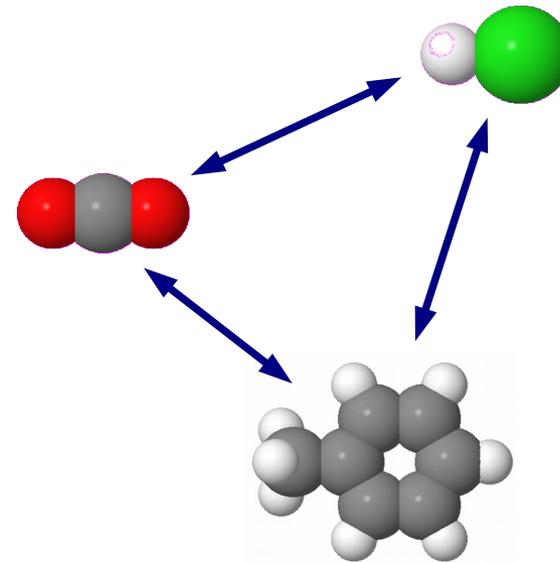




SkaSim-AP 5: Nukleation und Gastrennung



Softwareentwicklung

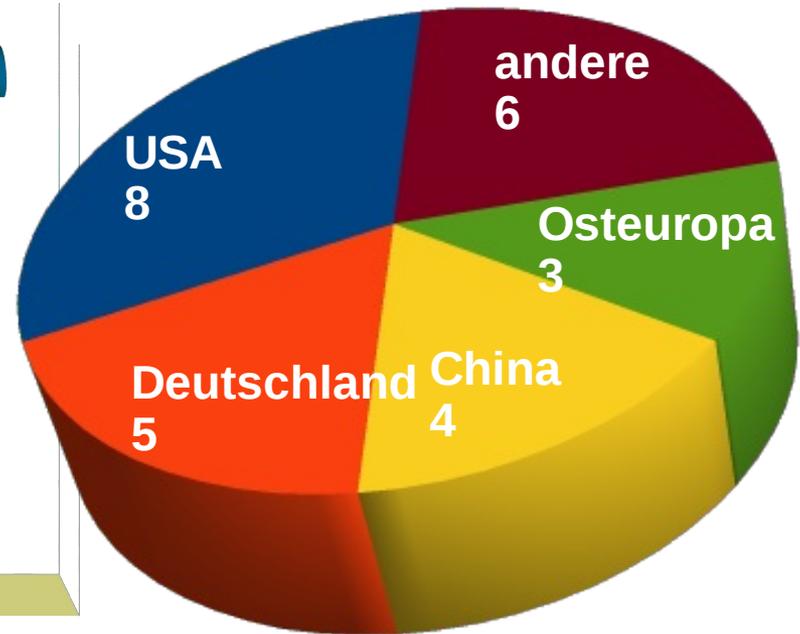
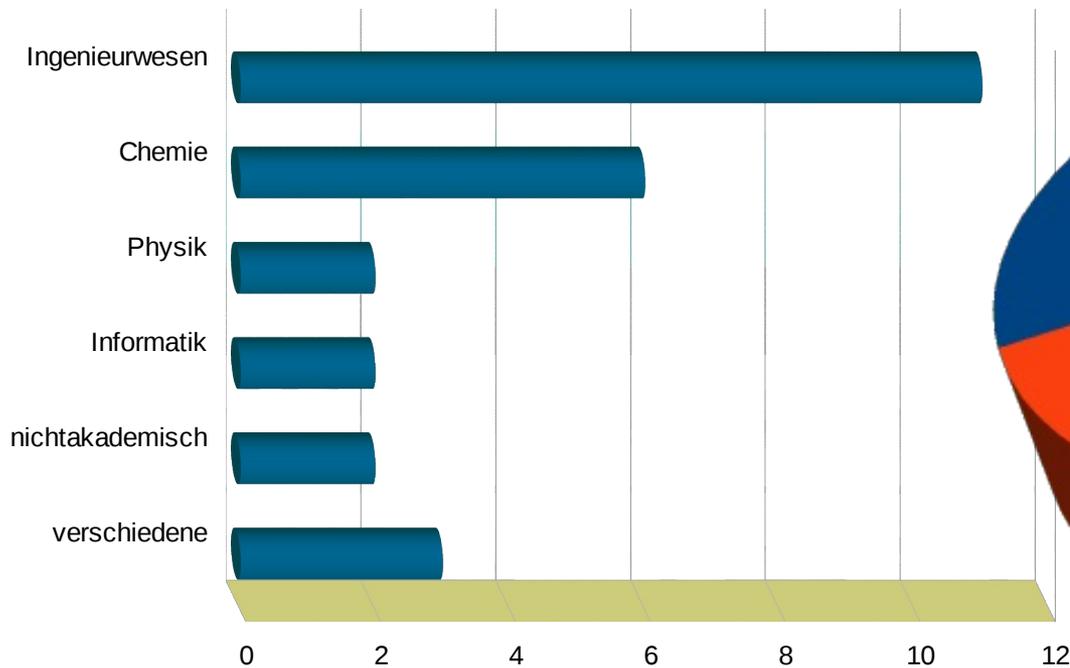


Leitanwendung

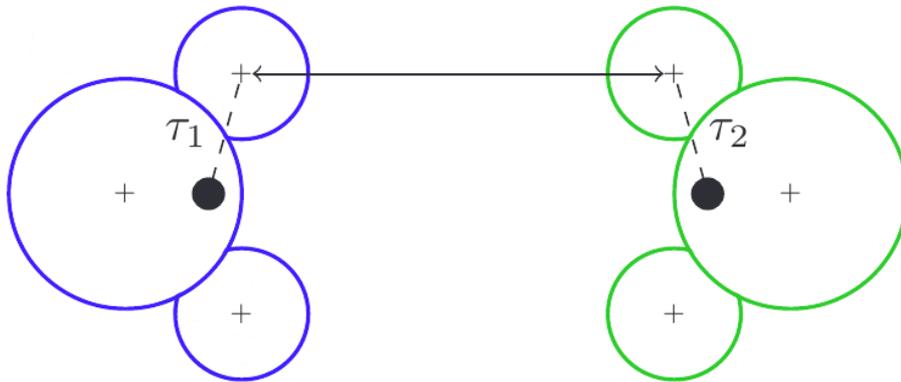


Release 1.0 von Is1 mardyn

Aktuell 26 registrierte Benutzer mit Zugang zu unserer Website.



Weiterentwicklung von *Is1 mardyn*



Abschneidekorrektur für
planarsymmetrische Systeme
(im aktuellen Trunk)

In Branches existierende, funktionierende Features (z.B. Kavitäten):

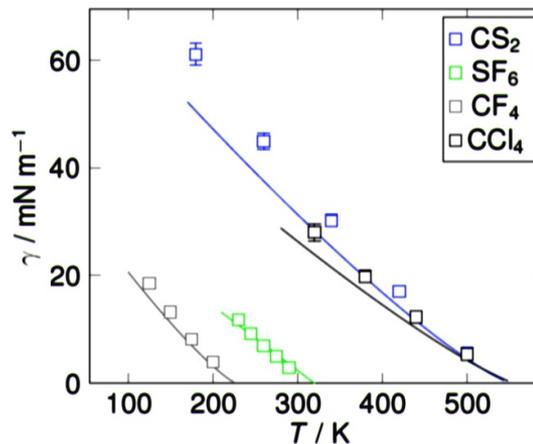
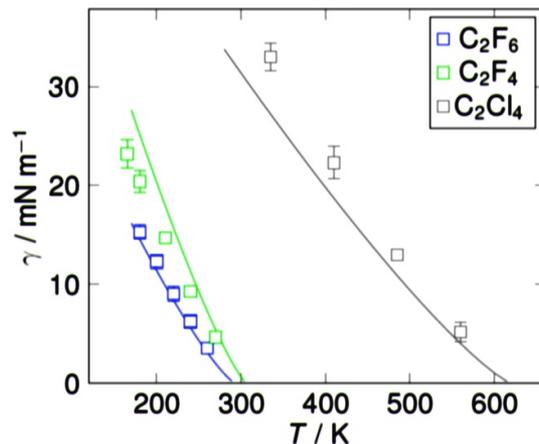
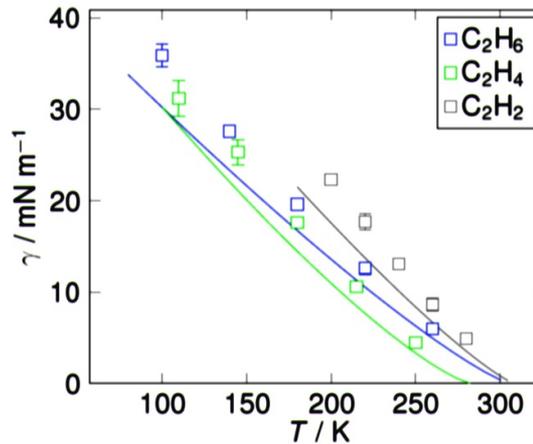
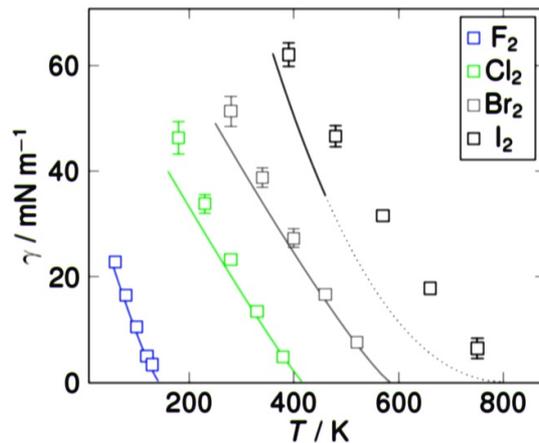
- In der Session zu *Is1 mardyn* zusammentragen

Seit längerem laufende Schlüsselvorhaben:

- Innere Freiheitsgrade
- Fast-Multipole-Methode

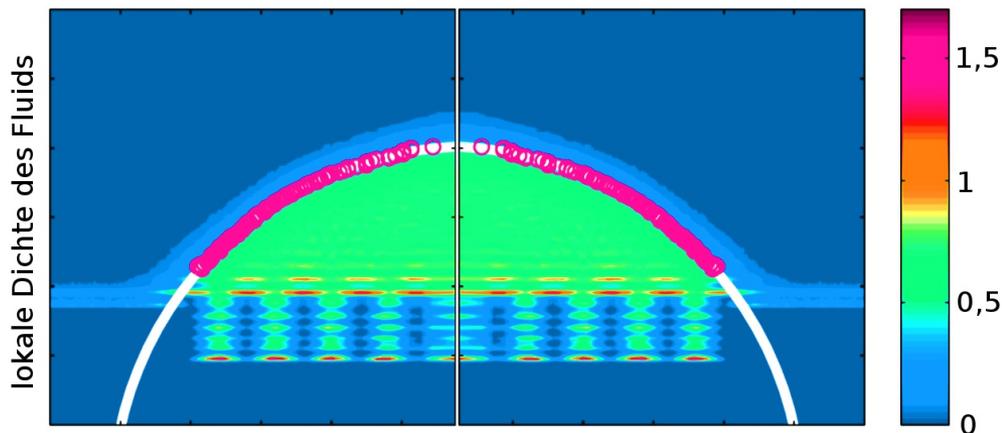
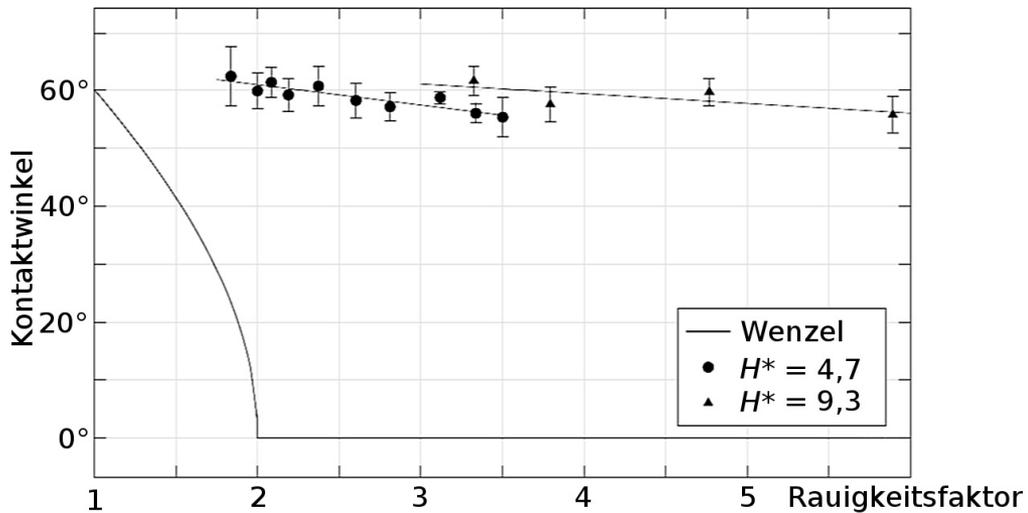


Oberflächenspannung und Nukleation





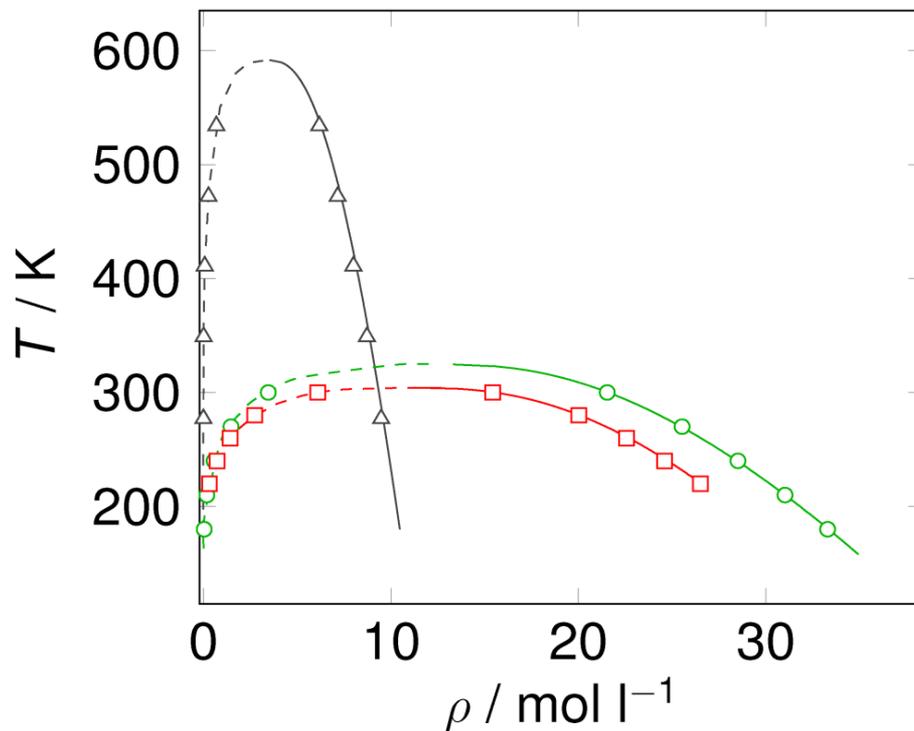
Adsorption und Gastrennung





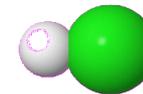
Leitanwendung: Reinstoffe

Sättigungsdichte



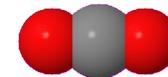
Symbole: Modelle
Linien: DIPPR-Korrelation

Huang *et al.*



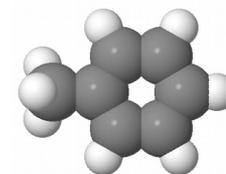
HCl

Merker *et al.*



CO₂

Huang *et al.*



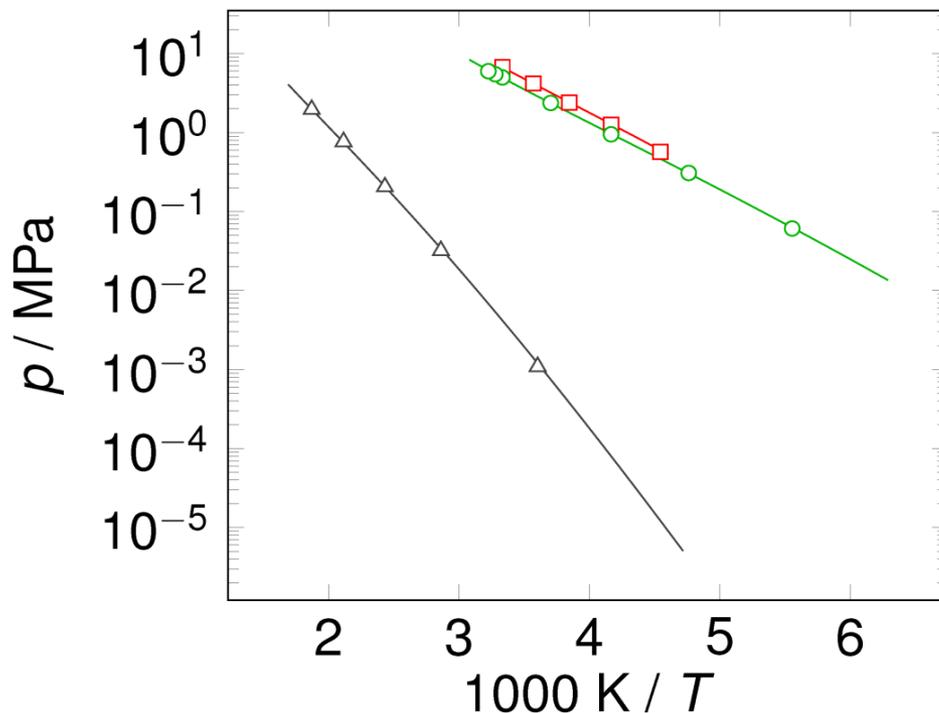
Toluol

Reinstoffmodelle aus Vorarbeiten (an Bulkdaten des VLE angepasst)



Leitanwendung: Reinstoffe

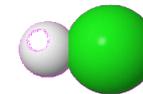
Dampfdruck



Symbole: Modelle

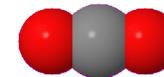
Linien: DIPPR-Korrelation

Huang *et al.*



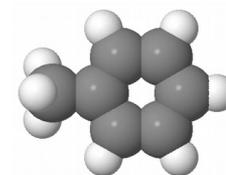
HCl

Merker *et al.*



CO₂

Huang *et al.*

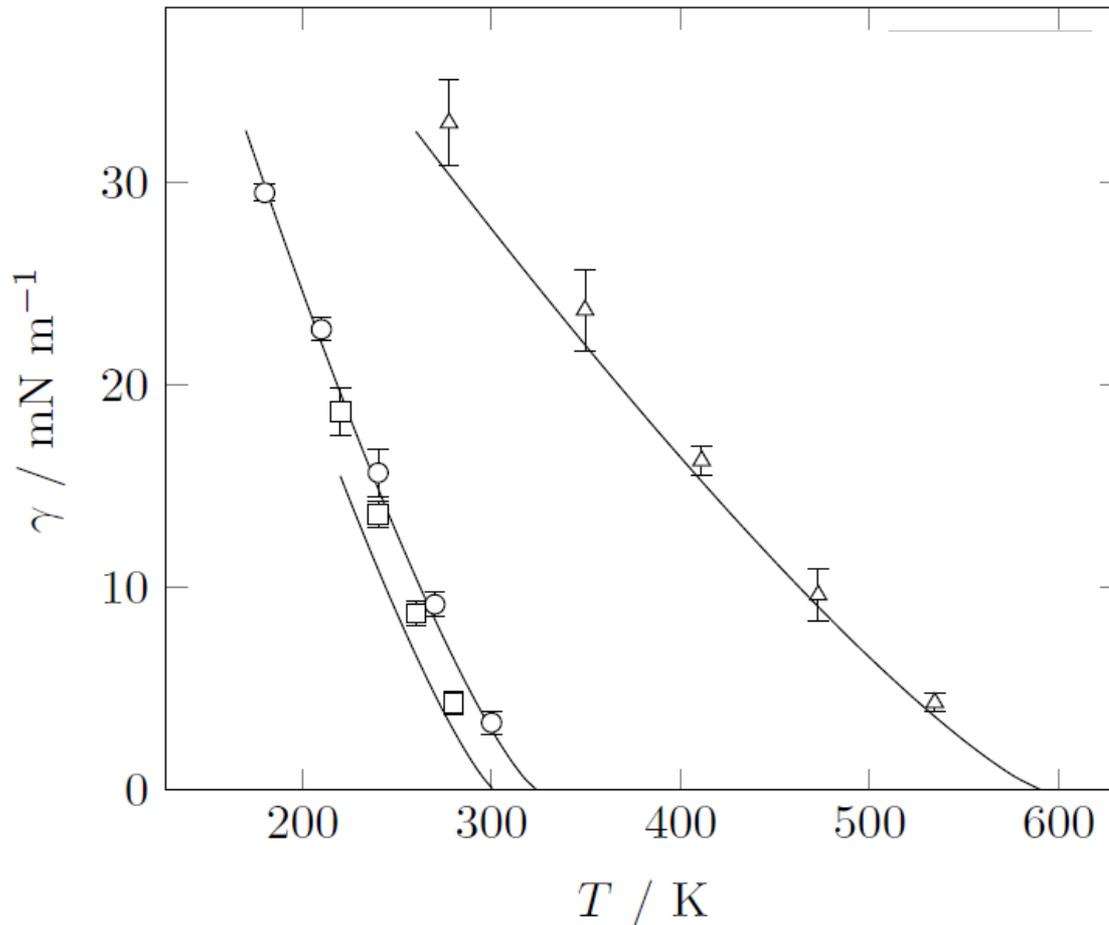


Toluol

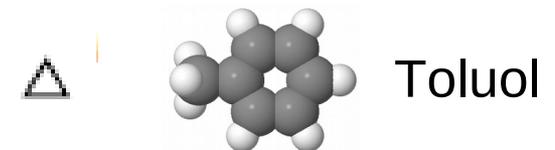
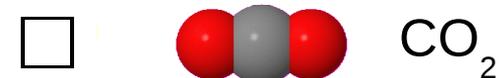
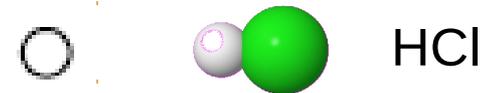
Reinstoffmodelle aus Vorarbeiten (an Bulkdaten des VLE angepasst)



Leitanwendung: Reinstoffe

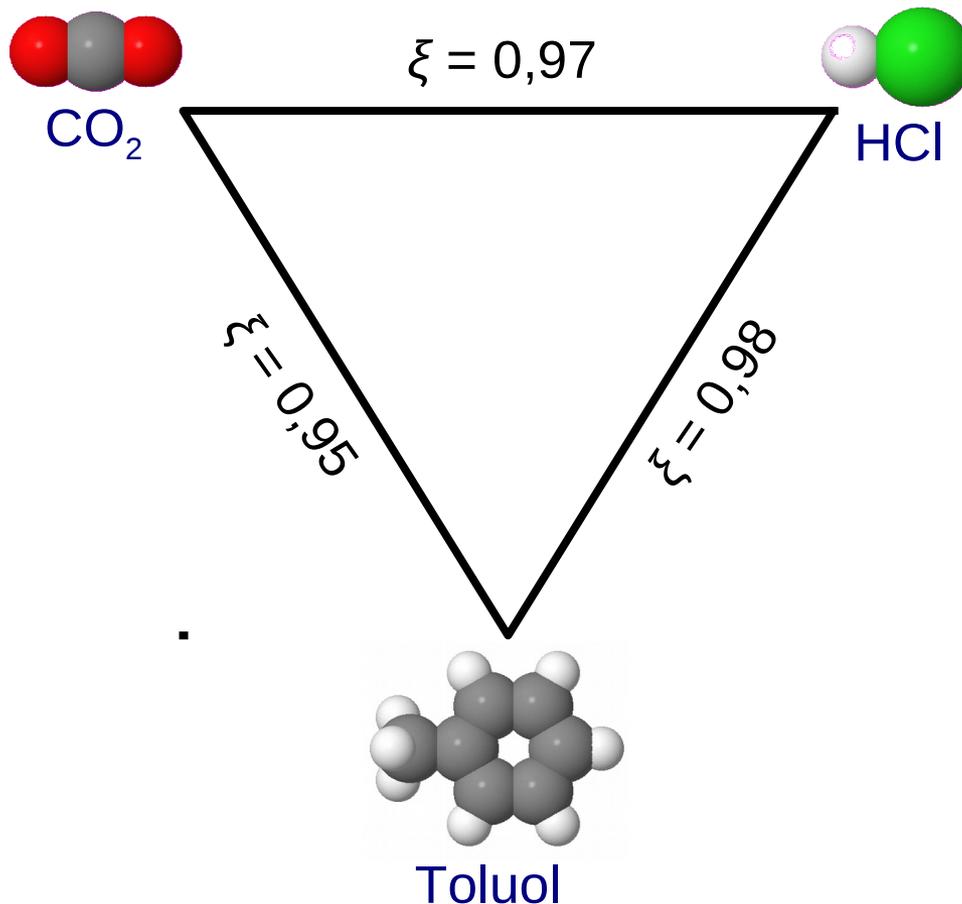


Symbole: Modelle
Linien: DIPPR-Korrelation





Leitanwendung: Gemische



Binärer Wechselwirkungsparameter ξ kann an einen oder wenige Datenpunkte angepasst werden:

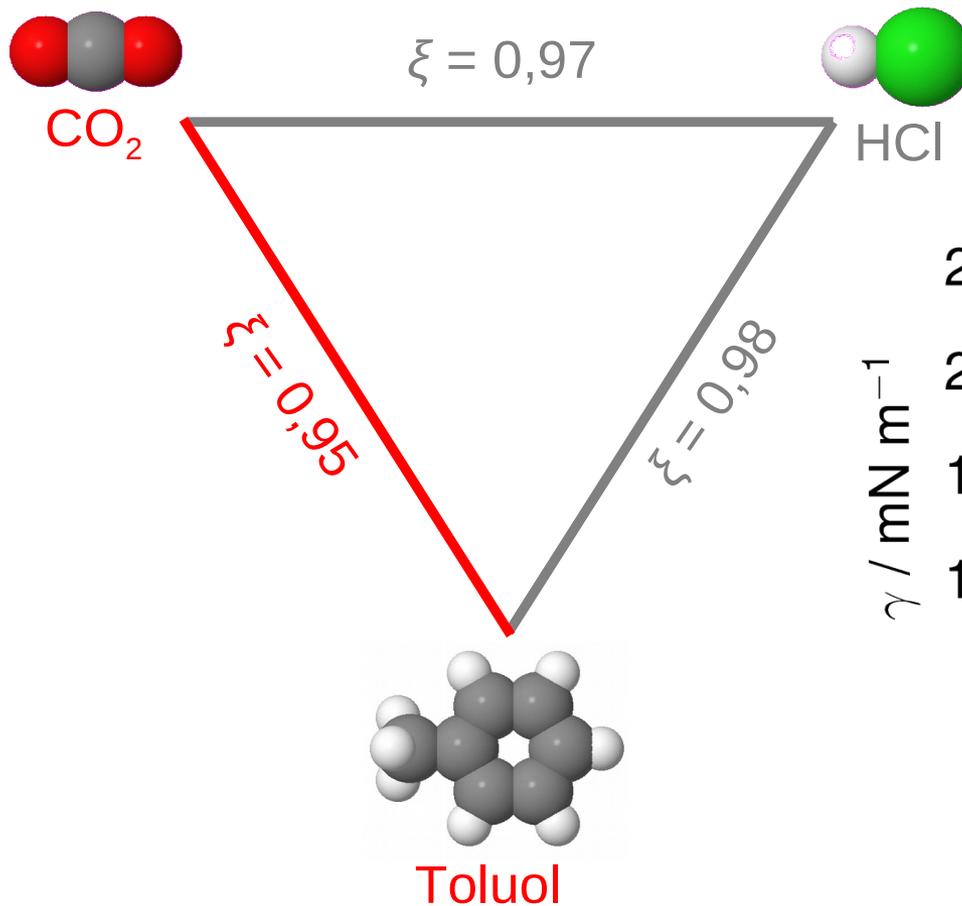
Dampfdruck des Azeotrops für CO₂ und HCl ($T = 290$ K)

Henrykoeffizienten von CO₂ in Toluol (310 – 480 K)

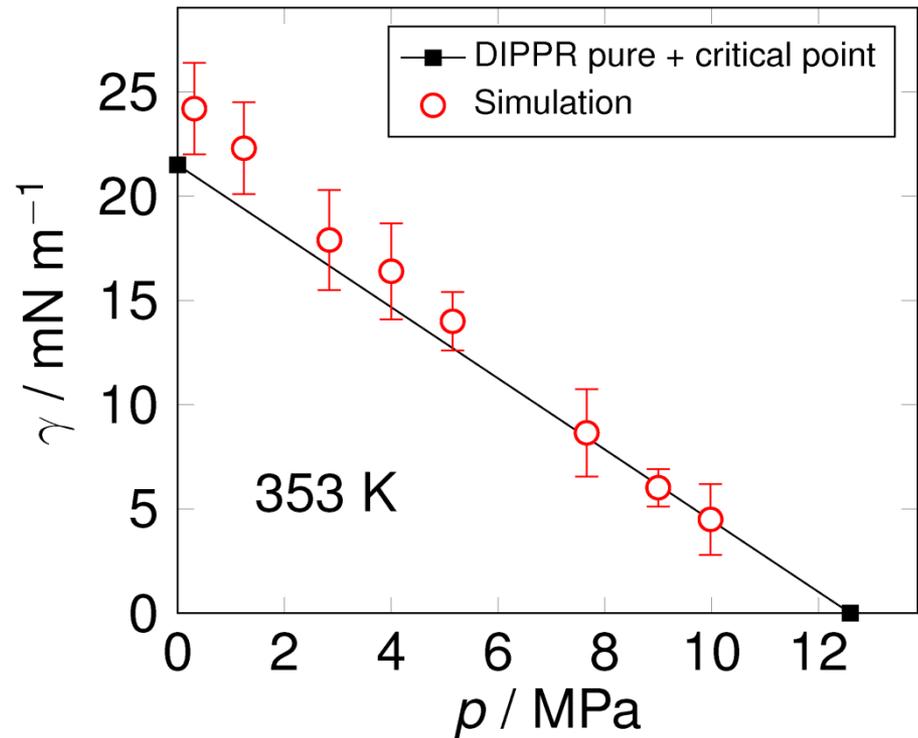
Toluol + HCl aus Projekt von Huang *et al.* mit BASF



Leitanwendung: Gemische



Oberflächenspannung





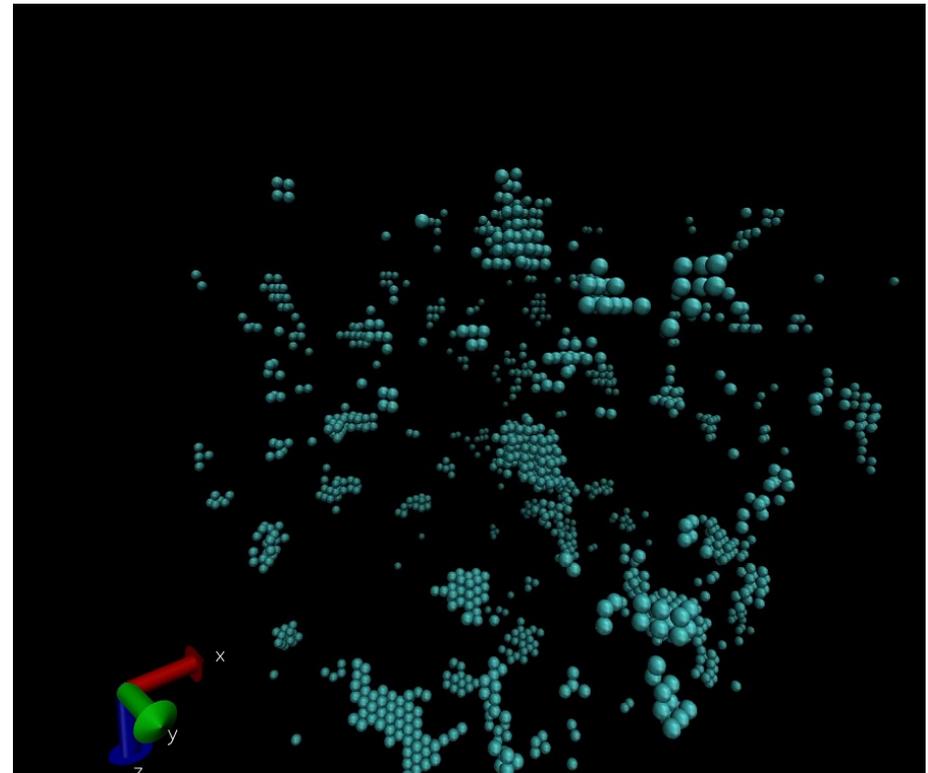
Kavitation in metastabilen Flüssigkeiten

Bildung von Gasblasen durch
homogene Nukleation ausgehend
von einem metastabilen flüssigen
Zustand.

Vorgesehene Szenarien:

- Kavitation in reinem unter-
sättigtem CO_2
- Gemische mit Toluol / HCl
(mit CO_2 übersättigt)

Methode implementiert in branch
CaveatEmptor, erste Rechnungen
für reines CO_2 abgeschlossen.



CO_2 bei $T = 280 \text{ K}$ und $\rho/\rho'(T) = 84 \%$



Zusammenfassung

- Simulation der **Gasblasenbildung** durch homogene Nukleation implementiert und in ersten Läufen mit brauchbaren Ergebnissen getestet
- Anpassung der binären Wechselwirkungsparameter für die **Gemische**
- Wissenschaftlich interessante Phänomene: Abweichung von der Kapillaritätsapproximation, Anreicherung von CO_2 an der Phasengrenze
- Wunsch für die molekulare Modellierung: **Multikriterielle Optimierung** für viele niedrigmolekulare Fluide (und ggf. Gemische) realisieren.
- Herausforderung für die Simulation der Kavitation: Sehr lange und **große Simulationen** (vgl. Ergebnisse der ETH Zürich).