

## **BOY-127 TP 1**

# **Numerische Simulation von Tropfenaufprallvorgängen im Hinblick auf die Bildung von Flüssigkeitsfilmen bei der SCR Abgasnachbehandlung**

**Xuan Cai, Martin Wörner, Bettina Frohnafel**

Boysen Doktorandentage, 11.-12.05.2017, Altensteig

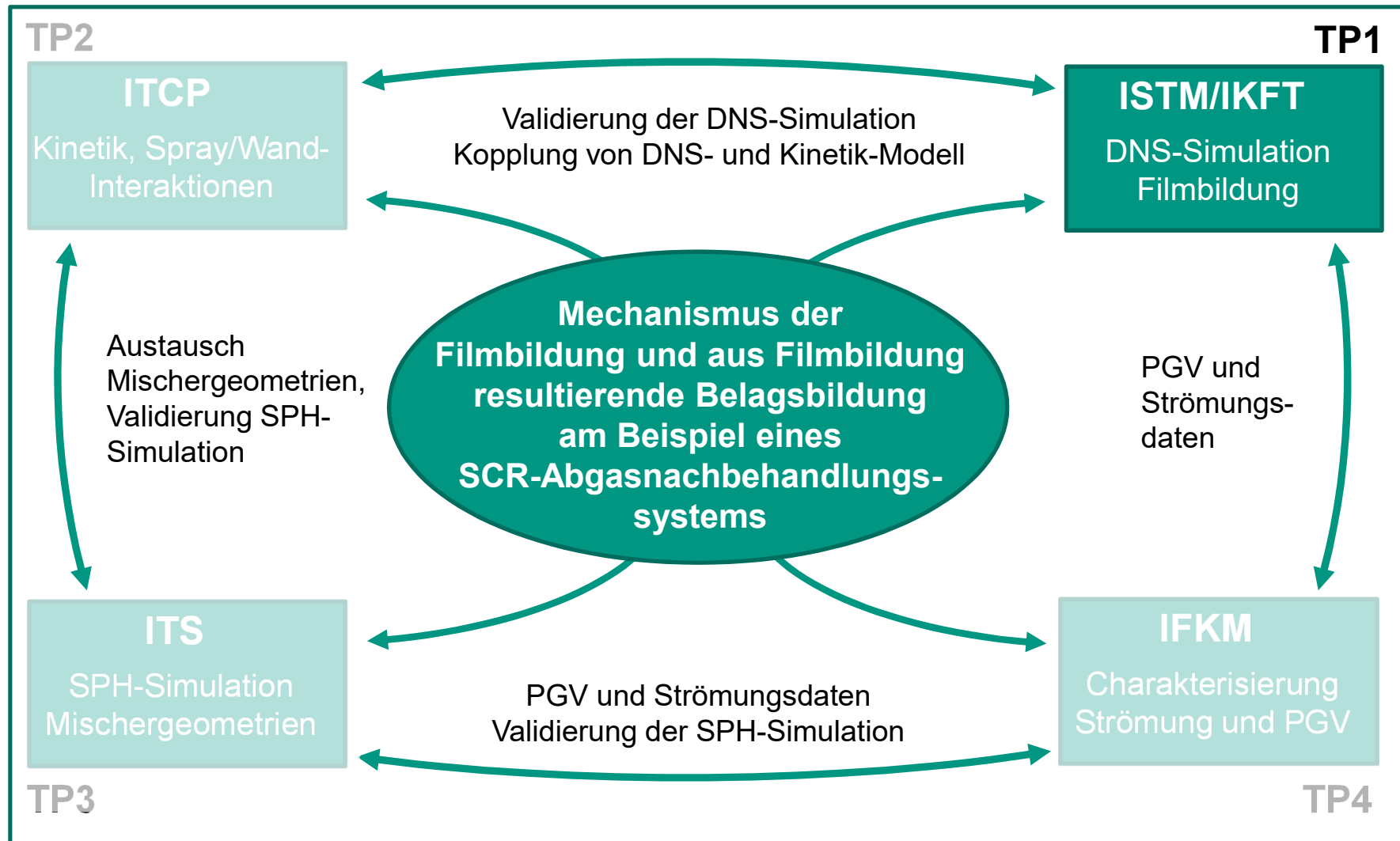
Institut f. Technische Chemie u. Polymerchemie (ITCP) Institut f. Katalysforschung u. -technologie (IKFT) Institut f. Strömungsmechanik (ISTM)



# Gliederung

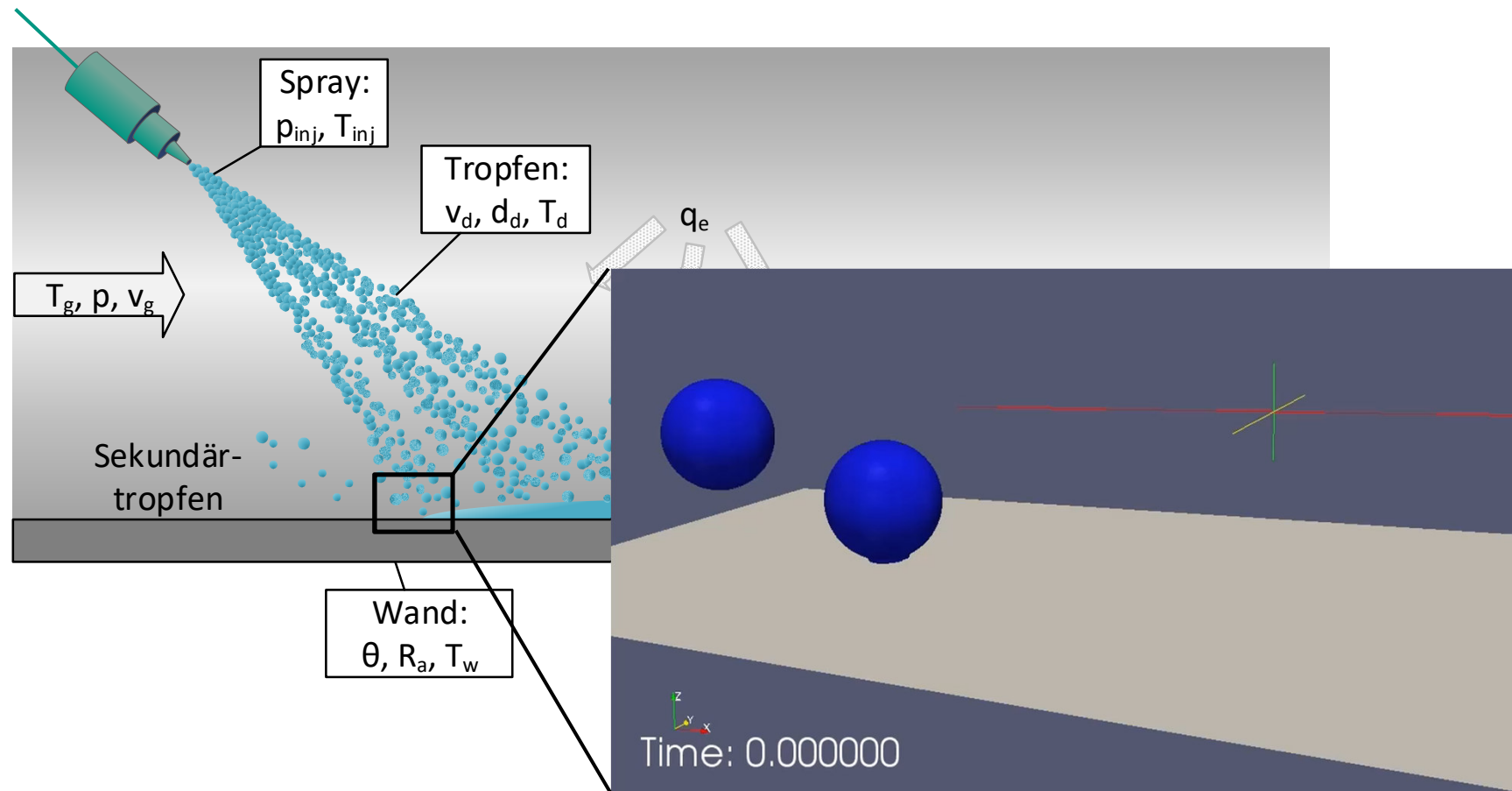
- Einführung und Zielsetzung
- Eigene Vorarbeiten
- Nächste Schritte
- Ausblick und Verknüpfung innerhalb des Projektes BOY-127

# Verzahnung der Teilprojekte



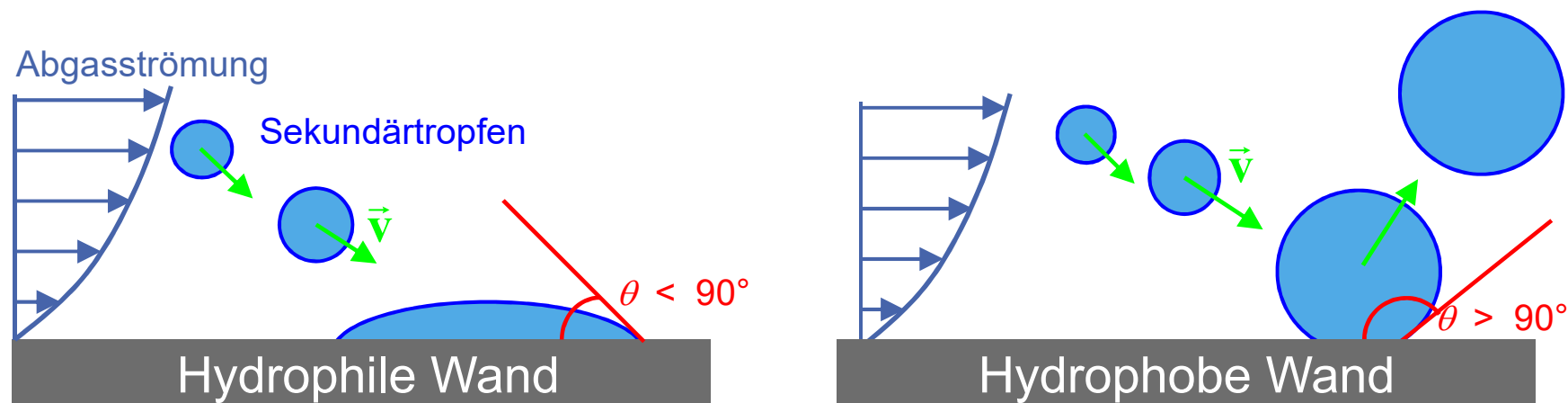
# Motivation TP1

Numerische Untersuchung des Aufprallverhaltens von individuellen AdBlue<sup>®</sup>-Tropfen



# Zielsetzung

- Tropfenaufprall mittels DNS Simulationen untersuchen
  - Vorgang der Filmbildung im Detail verstehen
  - Aufzeigen, inwieweit die Filmbildung durch Modifizierung von Wand- und Sprayeigenschaften verhindert oder minimiert werden kann



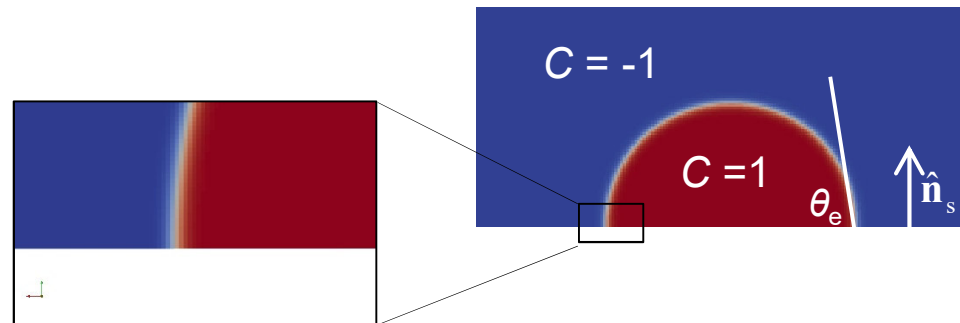
# Gliederung

- Einführung und Zielsetzung
- **Eigene Vorarbeiten**
- Nächste Schritte
- Verknüpfung innerhalb des Projektes und Ausblick

# Numerische Methode und Code

## ■ Phasen-Feld Methode

- Gas-Flüssigkeit-Grenzfläche hat eine endliche Dicke („diffuse-interface“)
- die Phasenverteilung wird durch den Wert des „order-parameter“  $C$  beschrieben
- Kopplung von Cahn-Hilliard-Gleichung und Navier-Stokes-Gleichung
- besonderes geeignet für Modellierung von Benetzungsvorgängen



## ■ Code *phaseFieldFoam*

- in der open-source CFD Software OpenFOAM implementiert
- Entwicklung in Zusammenarbeit mit Dr. H. Marschall (TU-Darmstadt)

📖 Jacqmin, *J. Comput. Phys.* **1999**, 155: 96-127

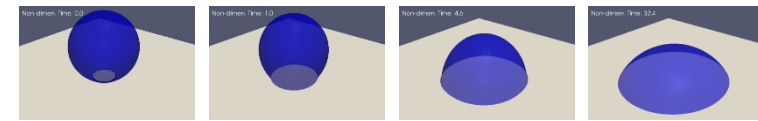
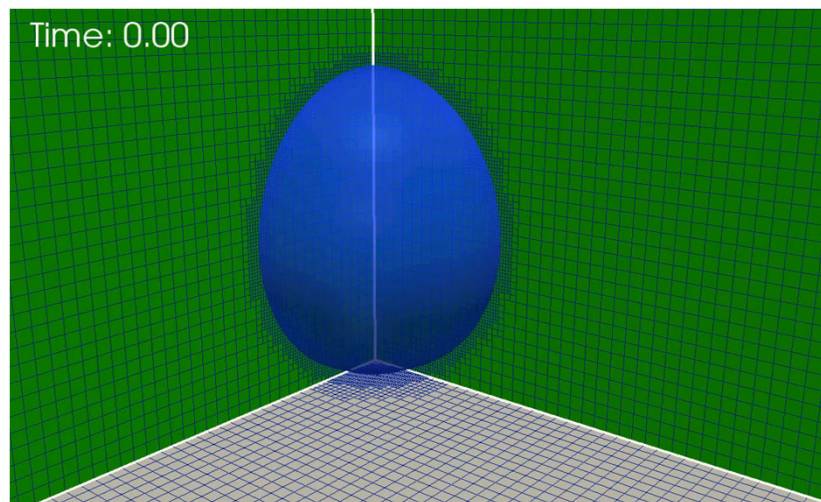
📖 Marschall, Cai and Wörner (in preparation)

# Validierung und Anwendung von *phaseFieldFoam*

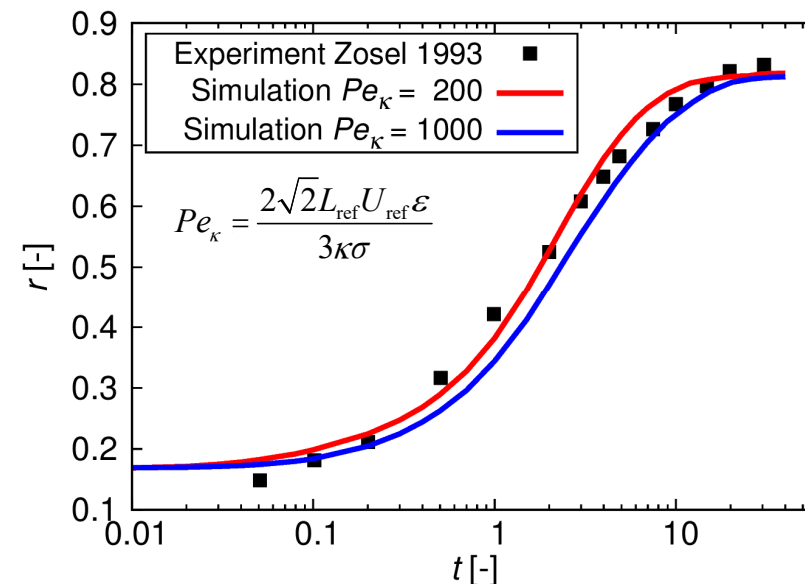
## ■ Experiment von Zosel

- Tropfendurchmesser  $\approx 3$  mm
- Tropfenviskosität  $\mu = 25$  pa·s
- glatte Oberfläche ( $\theta_e = 58^\circ$ )

3D Simulation mit adaptiver Gitterverfeinerung an der Grenzfläche



Normierter Benetzungsradius über der Zeit



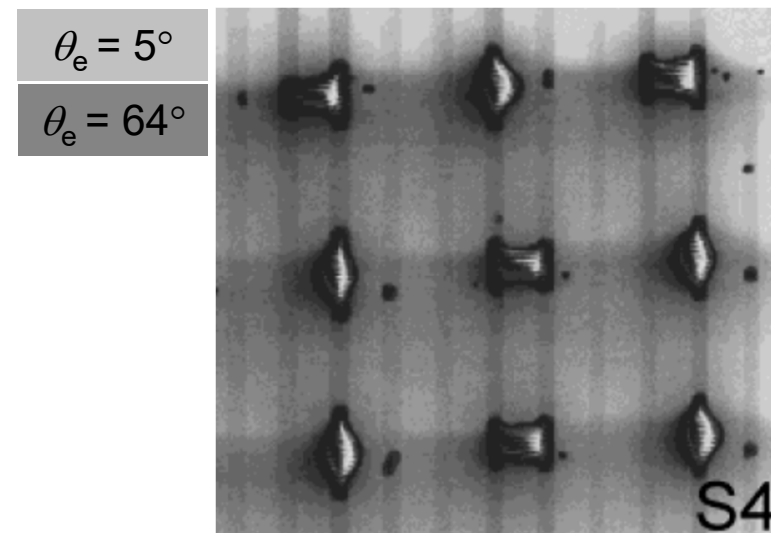
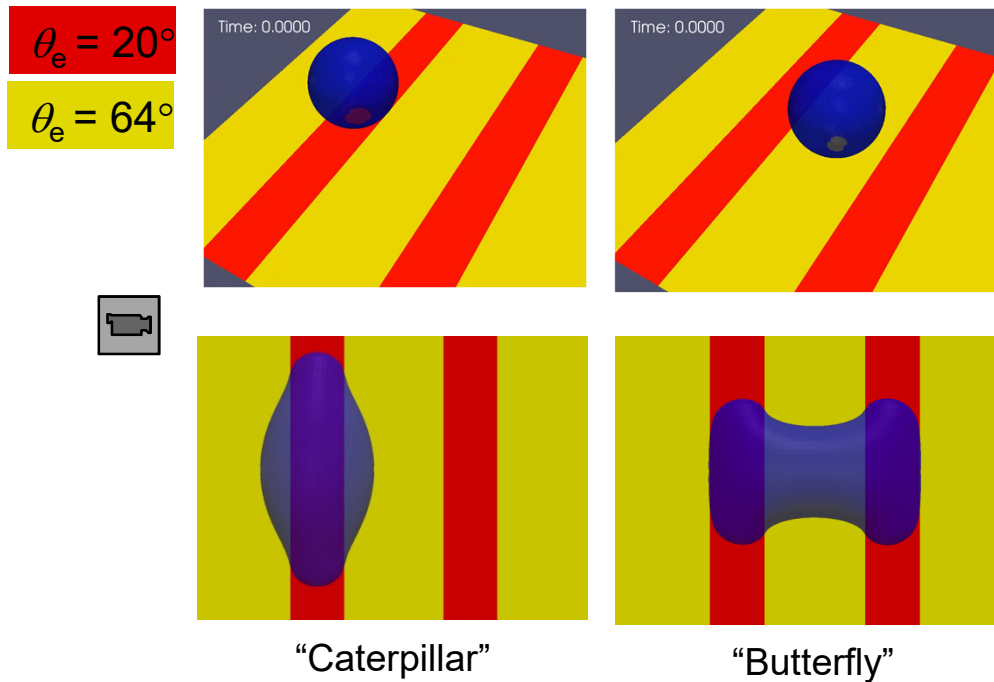
📖 Zosel, *Colloid and Polymer Science* **1993**, 271: 680–687

📖 Cai, Marschall, Wörner and Deutschmann, *Chem. Eng. Technol.* **2015**, 38: 1985–1992



# Validierung und Anwendung von *phaseFieldFoam*

- Experiment von Léopoldès et al.
  - Radius des Inkjet-Tropfens = 11µm



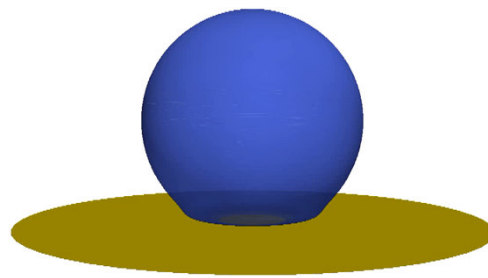
Scanning Electron Microscope  
Léopoldès et al.

📖 Léopoldès et al. *Langmuir* **2003**, 19: 9818-9822

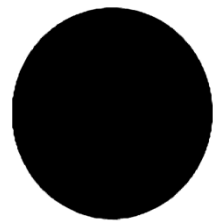
📖 Cai, Marschall, Wörner and Deutschmann, *10<sup>th</sup> Intl. OpenFOAM® Workshop, 2015*, Ann Arbor, Michigan

# Validierung und Anwendung von *phaseFieldFoam*

- Aufprall eines Wassertropfens auf eine feste Wand
  - Tropfendurchmesser = 2 mm, Aufprallgeschwindigkeit = 0.62 m/s
  - Kontaktwinkel der Wand = 100°

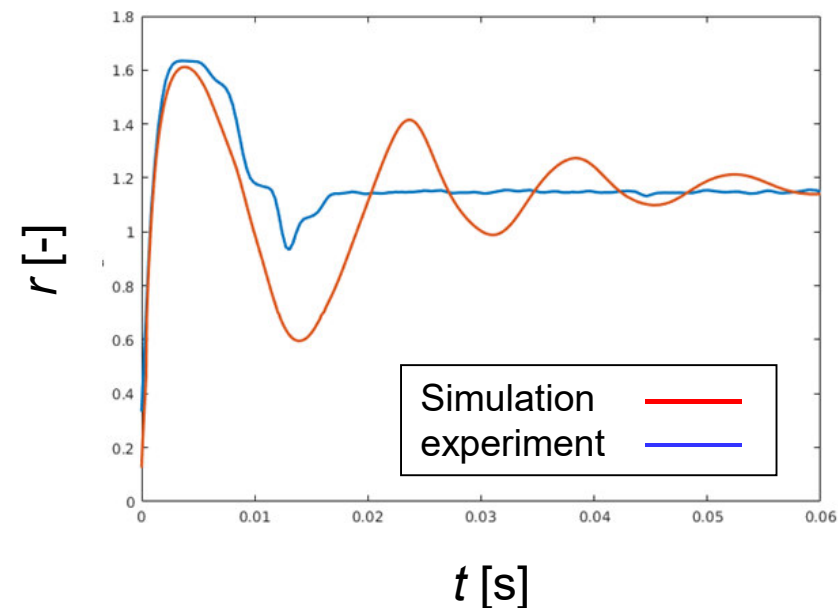


Simulation



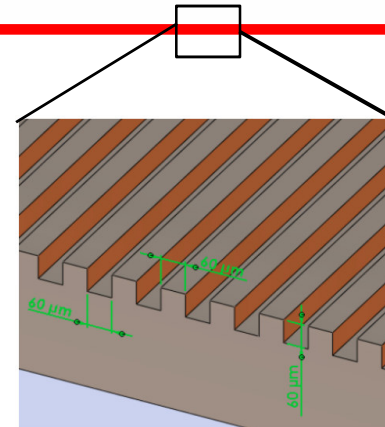
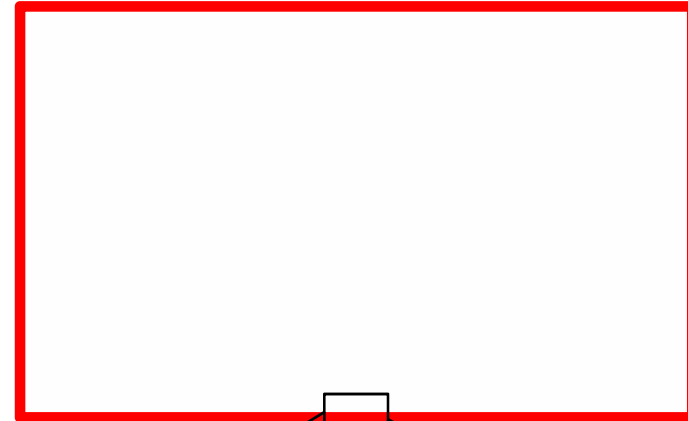
Experiment

Normierter Benetzungsradius über der Zeit



## Experimentelle Ergebnisse

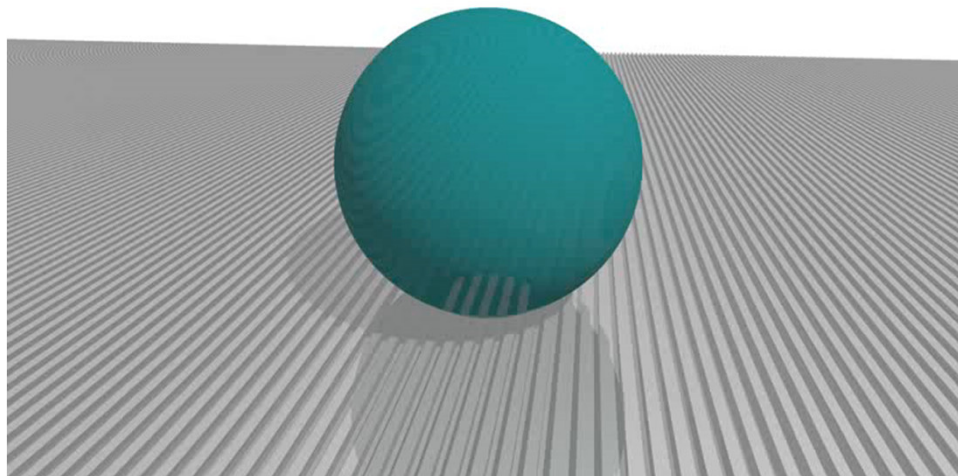
- „Deposit“ oder „rebound“ abhängig von glatter oder mikrostrukturierten Wand




 Fink, Bernard, Marschall, Wörner, Frohnapfel and Cai, *Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppe CFD, 2017*, Dresden

## Validierung und Anwendung von *phaseFieldFoam*

- Tropfenabprall („rebound“) von einer mikrostrukturierten Wand

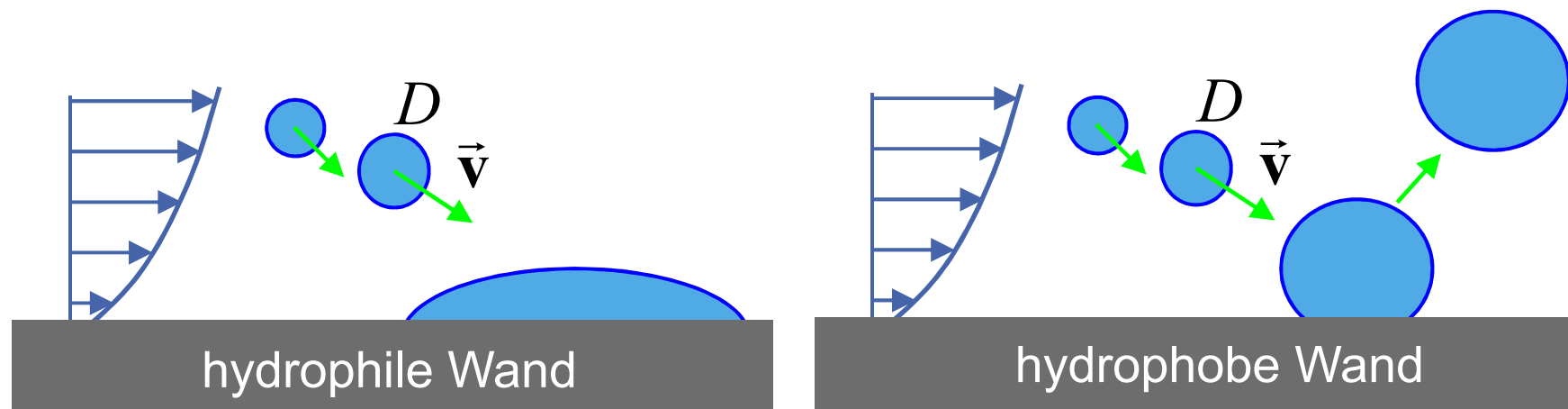


Simulation mit 500 Kernen,  
Dauer ca. 3 Monate!

 Fink, Bernard, Marschall, Wörner, Frohnapfel and Cai, *Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppe CFD, 2017*, Dresden

## Nächste Schritte

- Neben den Benetzungseigenschaften sind weitere physikalische Parameter zu untersuchen:
  - Tropfengröße  $D$
  - Aufprallgeschwindigkeit und -winkel  $\vec{V}$

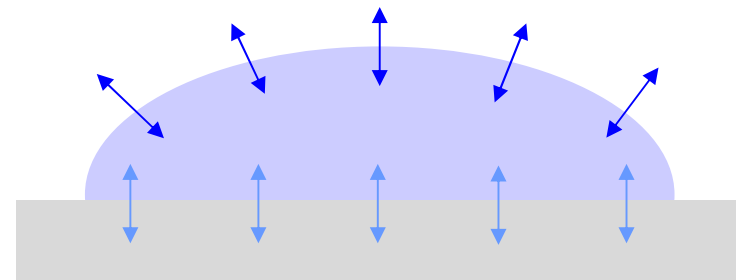


# Ausblick über weitere Arbeiten

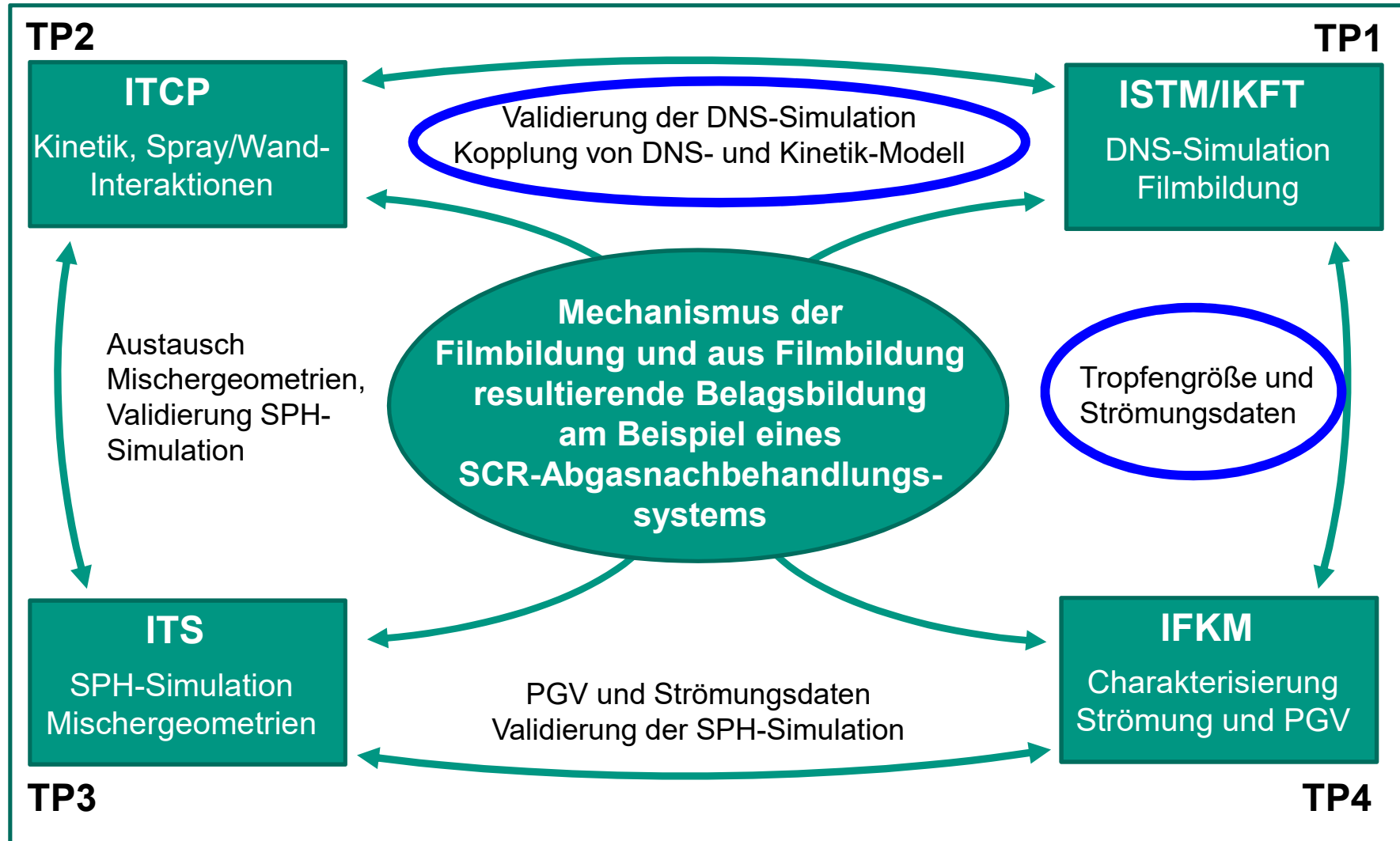
Hydrodynamik  
(Jahr 1)

Kopplung mit Wärmeübergang  
(Jahr 2)

Kopplung mit Verdunstung  
(Jahr 3)



# Verknüpfung mit anderen Teilprojekten



# Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit !

Institut f. Technische Chemie u. Polymerchemie (ITCP) Institut f. Katalyseforschung u. -technologie (IKFT) Institut f. Strömungsmechanik (ISTM)

