

# Nichtlokale Populationsbilanzgleichungen in der Stauforschung und in der chemischen Verfahrenstechnik

Vortrag zur digitalen Exkursion zum Mathematik-Department, Erlangen

Michele Spinola

Angewandte Analysis (A.v.H.-Professur), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

20.04.2020

# **Gliederung**

**Motivation**

**Grundlagen**

**Modellierung**

**Simulation**

**Optimierung von Syntheseprozessen**

**Fazit**

# Motivation

## Stauforschung: Makroskopische Sichtweise

- Analyse des Verkehrs aus der Vogelperspektive  $\Rightarrow$  Verkehrs**fluss**
- Geschwindigkeit eines Autofahrers zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  hängt von der Verkehrsdichte ab zur Zeit  $t$  am Ort  $x$ :  
Hohe Verkehrsdichte zur Zeit  $t$  am Ort  $x \Rightarrow$  Verkehr fließt da kaum  
Niedrige Verkehrsdichte zur Zeit  $t$  am Ort  $x \Rightarrow$  Verkehr fließt da schneller
- **Problemszenario**: Geschwindigkeit abhängig von der Verkehrsdichte **unmittelbar** um einen herum  $\Rightarrow$  Vorgehender Stau unberücksichtigt  
 $\Rightarrow$  Verlässt man sich nur auf **lokale** Informationen, kann es letal ausgehen.  
**Nichtlokale** Informationen passender: Geschwindigkeit abhängig auch von der Verkehrssituation, die vor einem liegt

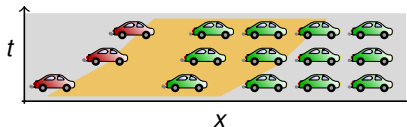


Abbildung 1: Nichtlokalität im Verkehrsfluss: Fahrer im roten Auto mit Sichthorizont (gold), siehe [3].

## Chemische Verfahrenstechnik

- Effektivität synthetisch erzeugter Partikelprodukte abhängig von den Partikeleigenschaften: Form, Oberflächenbeschaffenheit, Komposition, Struktur und **vor allem Größe**
- Wachstumsgeschwindigkeit hängt ab von
  - ... der Konzentration der Partikel im Reaktionsmedium ab (z.B. Ostwald-Reifung) ...
  - ... oder von der Gesamtoberfläche der Partikel ab (Wirbelschichtsprühgranulation (WSSG))

⇒ Wachstum eines Partikels hängt nicht nur von seiner Größe, sondern auch von der Größe anderer Partikeln, also wieder ein **nichtlokales** Phänomen

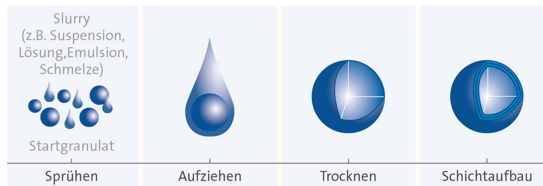


Abbildung 2: WSSG: Wachstum ausgefällter Partikel durch „Aufsprühen“ gelöster Partikel ([4]).

# Grundlagen

## Ableitungen im Mehrdimensionalen

- Betrachte eine differenzierbare Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit Ableitung  $f'$
- $f'(x)$ : Steigung von  $f$  an der Stelle  $x \Leftrightarrow$  lokale Änderungsrate von  $f$  in  $x$   
 $\Rightarrow$  Adäquat für die Beschreibung der Entwicklungen von Funktionen
- Betrachte nun Funktionen, die von zwei Variablen abhängen  
 $\rightsquigarrow q(t, x)$ , z.B. mit der Zeit  $t$ ,  $x$  der Ort/der Partikelradius
- Betrachte Änderungsraten in verschiedene Komponenten:  
 Bei fixiertem  $x$ :  $q_t(t, x)$  ist Änderung von  $q$  in  $t$   
 Bei fixiertem  $t$ :  $q_x(t, x)$  ist Änderung von  $q$  in  $x$
- $q_t, q_x$  heißen **partielle Ableitungen** von  $f$

### Beispiel: Pringles-Chip

$$q(t, x) := t^2 - x^2 \Rightarrow \begin{cases} q_t(t, x) &= 2t \\ q_x(t, x) &= -2x \end{cases}$$

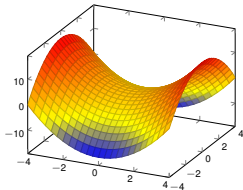


Abbildung 3: Plot von  $q$ .

# Integrale

- Verwendung von Integralen zur Berechnung von Flächen unterhalb von Funktionskurven
- Annäherung der Gesamtfläche durch viele Rechtecke geringer Breite

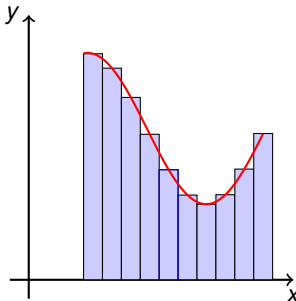


Abbildung 4: Illustration der Fläche unter der Kurve (also des Integrals) und deren Annäherung.

- Bestimmung von Gesamtoberflächen und Gesamtvolumina damit möglich



## Partielle Differentialgleichungen

- Betrachtung der Gleichung  $q_t(t, x) + q_x(t, x) = 0 \rightarrow$  **partielle Differentialgleichung**, also eine Gleichung, in der partielle Ableitungen einer Funktion auftauchen.
- Einige Beispiele

$$q_t(t, x) + ((t^2 - x^2)q(t, x))_x = 0$$

linear

$$q_t(t, x) + (q(t, x)q(t, x))_x = 0$$

nichtlinear, lokal

$$q_t(t, x) + (G[q](t, x)q(t, x))_x = 0$$

nichtlinear, **nichtlokal**,

falls  $G$  über ein Integral  $w$  über  $q$  abhängt

# Modellierung

## Zwei „Welten“, ein Modell

### Verkehrsfluss

- Betrachte eine Funktion  $q$ , die von zwei Variablen abhängt
- Verkehrsfluss auf einer Straße dargestellt als Verkehrsflussdichtefunktion  $q$  über die Zeit und Ort
- Zeitliche Entwicklung des Verkehrs (also von  $q$ ) beschrieben durch

$$q_t(t, x) + (G[q](t, x) \cdot q(t, x))_x = 0 \quad (1)$$

- $G$ : Geschwindigkeit der Fahrzeuge im Verkehrsfluss

### Chemische Verfahrenstechnik

- Terme können ähnlich zu oben beschrieben werden
- Betrachte Funktion  $q$ , die von zwei Variablen abhängt
- $q$  ist **Partikelgrößenverteilung** (PGV):  $q(t, x)$  gibt zur Zeit  $t$  die Anzahl der Partikel mit Radius  $x$  an
- $G$  in (1): Wachstumsgeschwindigkeit der Partikel

(1) beschreibt  $q$  als Erhaltungsgröße: Sofern dem System (Straße, Reaktor) kein neues Material (Autos, Partikel) hinzugefügt wird, bleibt die Gesamtheit von  $q$  erhalten ( $\rightarrow$  Massenerhaltung)

## Begrifflichkeiten und Beispiele

- (1), also

$$q_t(t, x) + (G[q](t, x) \cdot q(t, x))_x = 0,$$

nennt man **Populationsbilanzgleichung** (oder auch Erhaltungsgleichung)

- Zu „Population“: Verschiedene Autopositionen, verschiedene Partikelgrößen
- Zu „Bilanz“: Zeitliche Entwicklung (über die Masse generiert) von  $q$

### Beispiele

- $G$  hängt nicht von  $x$  ab: nur Transport
- $G[q](t, x) = 1 - q(t, x)$ : sogenannte LWR-Gleichung (Stauforschung)
- $G[q](t, x) = 1 - w(t, x)$  (Greenshields' Geschwindigkeitsfunktion ([1])): nichtlokale Version der LWR-Gleichung

# Simulation

## Notwendigkeit numerischer Simulationsverfahren

- Nichtlokale Populationsbilanzgleichungen besitzen unter gewissen Voraussetzungen eindeutige Lösungen.  
⇒ Unter gegebenen Umständen kann nur ein möglicher Verkehrsfluss oder nur eine bestimmte Partikelgrößenverteilung über die Zeit generiert werden
- **Aber:** Es heißt nicht, dass man die Lösung ohne weiteres skizzieren kann
- **Numerische Methoden:** Erzeugung von Näherungslösungen am Computer und damit Simulationen
- Erhöhung der Genauigkeit durch Anpassen bestimmter Objekte im Simulationsprogramm ⇒ möglichst gute Abbildung der Realität
- Folgende Beispiele entnommen aus [3, 2]

## Beispiel 1: Transportierter Quader I/II

- Kleines Quadrat als Grundfläche eines Quaders, was entlang der Winkelhalbierenden des I. Quadranten transportiert werden soll
- Die Geschwindigkeit entspricht dem Volumen des Teilquaders mit Grundfläche: Schnittfläche des kleinen Quadrates mit grauem Quadrat

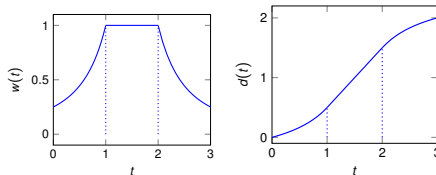
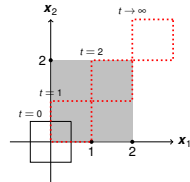


Abbildung 5: **Oben rechts:** Abbildung des transportierten Quadrates. **Unten:** Geschwindigkeit entspricht  $w(t)$  und  $d(t)$  als zeitlicher Abstand Kleinquadratmittelpunkt zu Koordinatenursprung.

## Beispiel 1: Transportierter Quader II/II

- Kleines Quadrat als Grundfläche eines Quaders, was entlang der Winkelhalbierenden des I. Quadranten transportiert werden soll
- Die Geschwindigkeit entspricht dem Volumen des Teilquaders mit Grundfläche: Schnittfläche des kleinen Quadrates mit grauem Quadrat

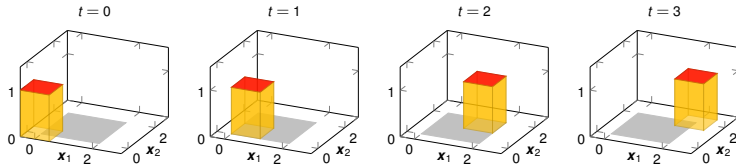
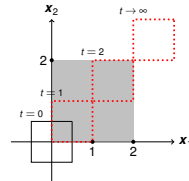


Abbildung 6: Zeitliche Entwicklung des Quaders für  $t \in \{0, 1, 2, 3\}$ .



## Beispiel 2: Transportierter, schrumpfender Quader I/II

- Setting wie im Beispiel zuvor, nur dass der Quader über die Zeit in der Höhe schrumpft
- Gegensätzliche Effekte für die Geschwindigkeit: Erhöhung der Schnittfläche vs. schrumpfender Quader

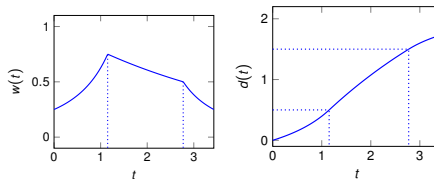
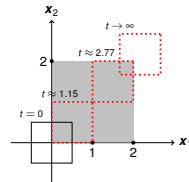


Abbildung 7: **Oben rechts:** Abbildung des transportierten, schrumpfenden Quadrates. **Unten:** Geschwindigkeit entspricht  $w(t)$  und  $d(t)$  als zeitlicher Abstand Kleinquadratmittelpunkt zu Koordinatenursprung.

## Beispiel 2: Transportierter, schrumpfender Quader II/II

- Setting wie im Beispiel zuvor, nur dass der Quader über die Zeit in der Höhe schrumpft
- Gegensätzliche Effekte für die Geschwindigkeit: Erhöhung der Schnittfläche vs. schrumpfender Quader

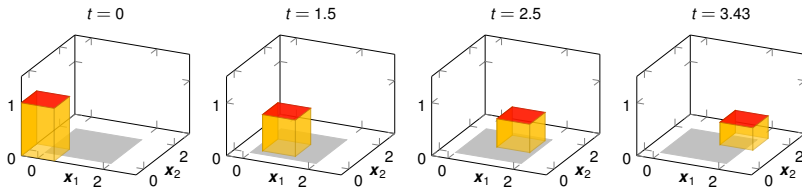
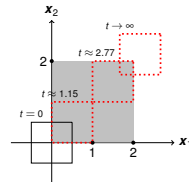


Abbildung 8: Zeitliche Entwicklung des schrumpfenden Quaders für  $t \in \{0, 1.5, 2.5, 3.43\}$ .

## Beispiel 3: Rotation eines wachsenden Teilrings I/II

- Betrachte ein gerades Prisma, bei dem die Grundfläche der kleine Teilring ist
- Das Prisma rotiert gegen den Uhrzeigersinn um den Koordinatenursprung und die Grundfläche wird dabei größer
- Gleichzeitig schrumpft das Prisma in der Höhe
- Die Rotationsgeschwindigkeit entspricht dem Teilvolumen des Prismas auf der Schnittfläche mit dem grauen Kreis

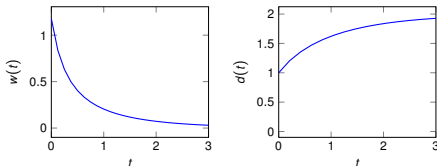
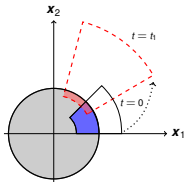


Abbildung 9: **Oben rechts:** Abbildung des rotierenden, wachsenden Teilrings. **Unten:** Geschwindigkeit entspricht  $w(t)$  und  $d(t)$  als zeitlicher Abstand Kleinquadratmittelpunkt zu Koordinatenursprung.

## Beispiel 3: Rotation eines wachsenden Teilrings II/II

- Betrachte ein gerades Prisma, bei dem die Grundfläche der kleine Teilring ist
- Das Prisma rotiert gegen den Uhrzeigersinn um den Koordinatenursprung und die Grundfläche wird dabei größer
- Gleichzeitig schrumpft das Prisma in der Höhe
- Die Rotationsgeschwindigkeit entspricht dem Teilvolumen des Prismas auf der Schnittfläche mit dem grauen Kreis

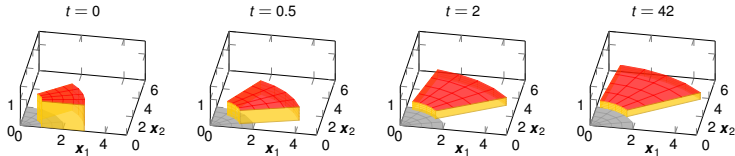
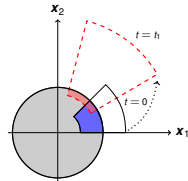


Abbildung 10: Zeitliche Entwicklung des Prismas für  $t \in \{0, 0.5, 2, 42\}$ .

## Beispiel 4: Verkehrsfluss, Ampelschaltung und Sichthorizont

- Start mit einer vollen Straße (voll: **dunkelrot**, leer: **dunkelblau**)
- Zu jeder geraden Zeit wird die Ampel am rechten Ende grün, zu jeder ungeraden wird sie rot
- Je vorausschauender die Autofahrer, desto weniger voll verdichtete Straßenteile entstehen

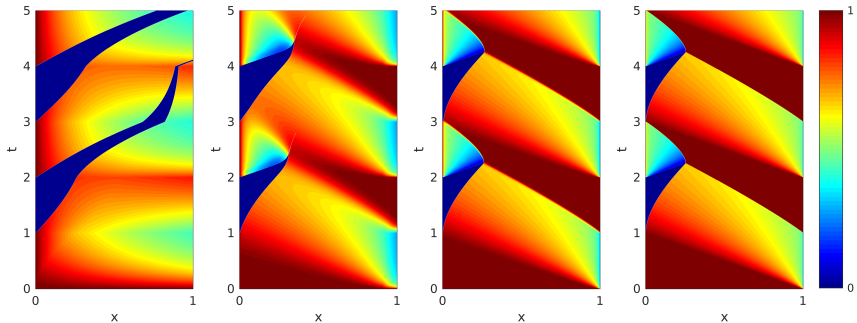


Abbildung 11: Verkehrssituation mit verschiedenen Sichtweiten (von links nach rechts absteigend).

# Optimierung von Syntheseprozessen

# Grundsätzliche Erläuterungen

- Für die Synthese qualitativ hochwertiger Produkte geeignete Wahl der Prozessparameter über die Zeit nötig
- Prozessparameter:  $\alpha$  (z.B. Prozesstemperatur),  $\beta_1$  (Einflussrate neuer Partikel),  $\beta_2$  (Ausflussrate)
- Modell:

$$q_t(t, x) + (G[q, \alpha, \beta_1](t, x)q(t, x))_x = \beta_1(t)q_{in}(x) - \beta_2q(t, x)$$

$$q(0, x) = q_0(x)$$

- Abhängigkeit von  $G$ : Zeit, Partikelgröße, nichtlokal von der PGV (Gesamtoberfläche der Partikel, Konzentration),  $\alpha$  und  $\beta_1$
- Mehrere Optimierungsziele denkbar: Erreichen gewünschter PGV, Minimierung der relativen Standardabweichung
- Auch denkbar, Kosten verbunden mit Energieverbrauch mit in die Optimierung einzubinden
- Schranken/Nebenbedingungen für Prozessparameter

## Beispiel 5: Erreichen gewünschter PGVen I/III

- **Ziel:** Erreichen einer gewünschten PGV  $q_d$  mit Start-PGV  $q_0$  und zeitlicher Anpassung der Wachstumsgeschwindigkeit durch  $\alpha$  und der Einflussrate  $\beta_1$  neuer Partikel mit PGV  $q_{in} = q_0$
- Dabei: Reifungsgeschwindigkeit entspricht  $\frac{\alpha(t)}{\text{Gesamtoberfläche d. Partikel}}$
- Minimiere die (quadrierte) Fläche unter der PGV am Ende des Prozesses, die nicht mit der von  $q_d$  überlappen

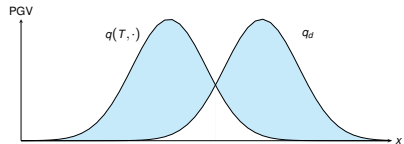
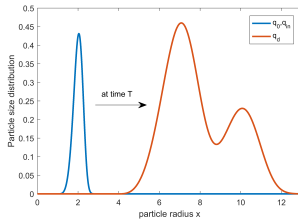
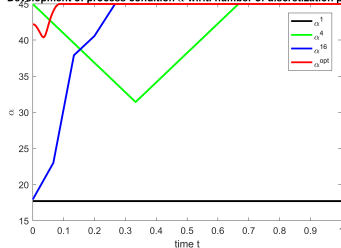


Abbildung 12: **Links:** Illustration des Optimierungsziels. **Rechts:** Nicht überlappende Bereiche als Fehlermaß.



## Beispiel 5: Erreichen gewünschter PGVen II/III

Development of process condition  $\alpha$  w.r.t. number of discretization points



Development of process condition  $\beta_1$  w.r.t. number of discretization points

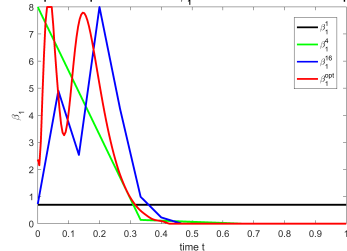


Abbildung 13: Erhaltene, optimierte Prozessparameter  $\alpha$  (links) und  $\beta_1$  (rechts) mit zunehmender, erlaubter Variation über die Zeit. Die optimalen Prozessparameter sind rot dargestellt.

**Beobachtung:** Optimierte Prozessbedingungen variieren in der Zeit

## Beispiel 5: Erreichen gewünschter PGVen III/III

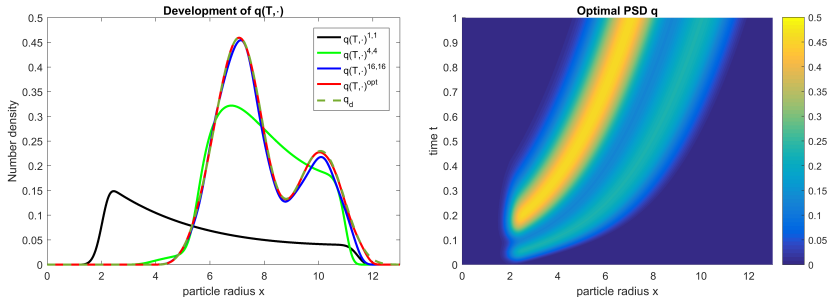


Abbildung 14: **Links:** Berechnete PGVen  $q(T, \cdot)$  zur Endzeit für verschiedene optimierte Prozessparameterpaare mit Ziel-PGV  $q_d$ . **Rechts:** Oberflächenplot der resultierenden optimalen Lösung.

**Beobachtung:** Die gewünschte PGV wird nur erreicht, wenn den Prozessbedingungen erlaubt wird, mehr in der Zeit zu variieren

## Beispiel 6: Minimierung der relativen Standardabweichung I/II

- Gesetzte Ziele zur Endzeit für die resultierende PGV:
  - Erreichen des gewünschten Verteilungsmittelwert  $\mu_d = 6$
  - Minimierung von  $\sigma_{\text{rel}} = \frac{\sigma}{\mu}$ , die sogenannten relative Standardabweichung
- Zu Beginn PGV  $q_0$
- Zu steuernder Prozessparameter: Einflussrate  $\beta_1$  neuer Partikel mit PGV  $q_{\text{in}} = q_0$
- Wachstumsdynamik: Ostwald-Reifung, also Abhängigkeit der Wachstumsgeschwindigkeit von der Konzentration der Partikel

## Beispiel 6: Minimierung der relativen Standardabweichung II/II

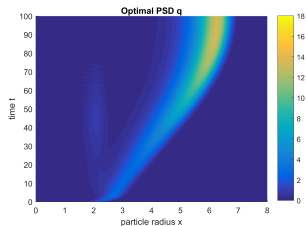
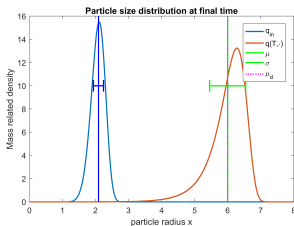
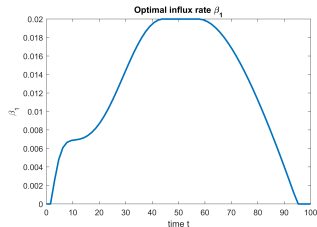
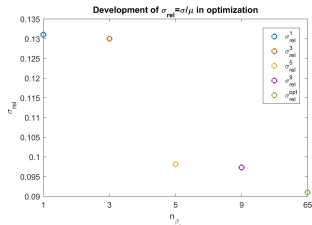


Abbildung 15: Entwicklung der relativen Standardabweichung (**oben links**), optimale zeitabhängige Einflussrate  $\beta_1$  (**oben rechts**), Optimallösung zur Endzeit zusammen mit der PGV  $q_{in}$  externer Partikel (**unten links**) und Oberflächenplot der Optimallösung (**unten rechts**)

# Fazit

# Zusammenfassung und Ausblick

## Zusammenfassung

- Anwendung nichtlokaler Populationsbilanzgleichungen in der Stauforschung und in der chemischen Verfahrenstechnik
- Illustration diverser numerischer Simulationen, die den Transportcharakter der Gleichungen aufgezeigt haben
- Präsentation von Optimierungsproblemen innerhalb der chemischen Verfahrenstechnik (Erreichen gewünschter Partikelgrößenverteilungen, Minimierung des Energieverbrauchs)

## Weitere (teilweise noch nicht erforschte) Aspekte

- Optimierung von Verkehrsflüssen durch geeignete Steuerung von Ampelschaltungen
- Erweiterung der Ergebnisse ...
  - ... auf mehrere gekoppelte nichtlokale Populationsbilanzgleichungen
  - ... durch Einbezug eines zeitlichen Delays, z.B. wenn Autofahrer Verkehrsinformationen mit einer zeitlichen Verzögerung bekommen
  - ... durch Abbilden chemischer Syntheseprozesse in Verweilzeitreaktoren

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit.  
**Noch Fragen? Dann nicht zögern, sie zu stellen 😊**

## Literaturverzeichnis

- 
 Greenshields, B.D., Bibbins, J.R., Channing, W.S. and Miller, H.H. „A study of traffic capacity“. In: *Highway research board proceedings*. Vol. 1935. National Research Council (USA), Highway Research Board. 1935.
  
- 
 Keimer, A., Pflug, L. and Spinola, M. „Existence, uniqueness and regularity of multi-dimensional nonlocal balance laws with damping“. In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 466.1 (2018), pp. 18–55.
  
- 
 Keimer, A., Pflug, L. and Spinola, M. „Nonlocal scalar conservation laws on bounded domains and applications in traffic flow“. In: *SIAM SIMA* 50.6 (2018), pp. 6271–6306.
  
- 
*Wirbelschichtverfahren - Batch und kontinuierliche Prozesse - Sprühgranulation*. <https://www.neuhaus-neotec.de/de/neuhaus-neotec-partikeltechnologie/verfahren/prozesse/detail//show/spruehgranulation/>. 2020.