

# **Analyse des Clustering-, Kollisions- und Agglomerationsverhaltens von Partikeln in laminaren und turbulenten Strömungen**

## **Dissertation**

zur Erlangung des  
Doktorgrades der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

des

Zentrums für Ingenieurwissenschaften  
der Martin-Luther-Universität  
Halle-Wittenberg

vorgelegt

von Dipl.-Ing. (FH) Martin Ernst  
geb. am 26.07.1982 in Halle (Saale)

Gutachter

1. Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
2. Prof. Dr.-Ing. habil. Gunther Brenner

Tag der öffentlichen Verteidigung: 22.09.2016

Diese Arbeit wurde mit Hilfe von L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X und KOMA-Script gesetzt.

*„Die Neigung der Menschen, kleine Dinge für wichtig zu halten, hat sehr viel Großes hervorgebracht.“*

GEORG CHRISTOPH LICHTENBERG

In Erinnerung an CLAYTON CROWE und LEONID I. ZAICHIK.

## Vorwort

Die Arbeiten zur vorliegenden Dissertation wurden im Zeitraum November 2007 bis April 2014 am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik des Zentrums für Ingenieurwissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg realisiert.

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld, der mir die Forschung in diesem interessanten Themengebiet ermöglichte und mir jederzeit beratend zur Seite stand. Ebenfalls danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. G. Brenner für die Übernahme der Zweitbegutachtung und Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. D. Hebecker für den Vorsitz der Promotionskommission.

Danken möchte ich meinen Kollegen, im Speziellen Herrn M. Dietzel, Herrn Dr.-Ing. M. Kuschel, Herrn Dr.-Ing. S. Stübing, Herrn Dr.-Ing. J. Lipowsky, Herrn Dr. S. Horender, Herrn L. Pasternak sowie Herrn A. Müller, die mir mit ihrer Expertise bei der Modellbildung und Programmierung sowie bei den numerischen Untersuchungen stets beratend zur Seite standen. Darüber hinaus danke ich Herrn M. Dietzel, Herrn Dr.-Ing. M. Weickert, Herrn Dr.-Ing. O. Schmidt, Herrn Dr.-Ing. H. Schomburg und Herrn Dr.-Ing. G. Teike für ihre Vorleistungen bei der Entwicklung des LBM-Strömungslösers. Herrn Dr. P. Fede danke ich für seine wertvollen Hinweise zur Implementierung der Pseudo-Spektral-Methode. Herrn Dr. habil. S. Laín möchte ich für die Diskussion der Clusteringergebnisse sowie für seine Gastfreundschaft während meiner beiden Forschungsaufenthalte in Cali, Kolumbien danken. Frau E. Schlauch und Herrn Dr. R. Seto danke ich für die fruchtbare Zusammenarbeit innerhalb des DFG-Schwerpunktprogramms 1273. Des Weiteren möchte ich Herrn M. Maiss und Herrn P. Krause für die Mitarbeit im Rahmen ihrer Studienarbeiten danken. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Deutschen Akademischen Austauschdienst danke ich für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit sowie dem IT-Servicezentrum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg für die Bereitstellung von Rechenkapazitäten. Zudem danke ich Frau Jendryschik für die kritische Durchsicht dieser Arbeit.

Darüber hinaus möchte ich meiner Familie sowie meinen Freunden für die unterstützenden und aufmunternden Gespräche danken, insbesondere in der letzten Phase dieser Arbeit. Ganz besonderen Dank gilt Kathrin und Emil. Danke für Eure unendliche Geduld, sich selbst im Urlaub auf strömungstechnische Probleme einzulassen.

## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht das Clustering sowie die Kollision- und Agglomeration von Feststoffteilchen in laminaren und turbulenten Strömungen. Unter Anwendung direkter numerischer Simulationen wird der Einfluss verschiedener Randbedingungen wie die Trägheit der Teilchen und der Volumenanteil der dispersen Phasen auf das mesoskalige Bewegungs- und Clusteringverhalten sphärischer Partikel analysiert. Darüber hinaus wird mit Hilfe eines zweiten mikroskaligen Ansatzes die fluiddynamische Wechselwirkung von aufgelösten Teilchen kurz vor ihrer Kollision sowie die strömungsinduzierte Agglomeration aufgelöster Primärpartikel ausgewertet und die hervorgehenden Agglomeratstrukturen morphologisch charakterisiert. Das zu diesem Zweck eingesetzte Berechnungsprogramm basiert auf der Lattice-Boltzmann-Methode.

Die Berechnung der Trajektorien diskreter in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Partikel erfolgt in einem Lagrangeschen Bezugssystem auf mesoskaliger Teilchenebene. Die in den Simulationen erfassten Partikel-Partikel-Kollisionen beruhen auf einem deterministischen Ansatz, dessen Funktionalität in einem fluidfreien Partikelsystem validiert wird. Das im Rahmen dieser Studie implementierte stochastische Turbulenzanregungsverfahren beruht auf der Pseudo-Spektral-Methode und generiert Energiespektren, die mit Mess- und Korrelationsdaten vergleichbar sind.

Um die Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzen und die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln bei Kollisions- und Agglomerationsereignissen detailliert zu erfassen, werden die Teilchen auf mikroskaliger Ebene mittels aufgelöster Partikeloberflächen modelliert, deren gekrümmte Bounce-Back-Randbedingung für bewegte Primärpartikel und Agglomerate geeignet ist. Das darüber hinaus vorgestellte Rekonstruktionsschema für fehlende Verteilungsfunktionen unterbindet eine artifizielle Anziehung der Partikel unterhalb der Auflösungsgrenze des Fluids. Die Berechnung der Agglomeration von Partikeln erfolgt analog zu den Kollisionen auf Grundlage eines deterministischen Modellierungsansatzes.

Das Clusteringverhalten träger Partikel wird unter Anwendung der globalen Partikelakkumulation, Korrelationsdimension, radialen Partikelpaarkorrelation sowie der Minkowski-Funktionale als Funktion des Feststoffvolumenbruchs analysiert. Maximales Clustering der Teilchen ist im Allgemeinen für Partikel-Stokes-Zahlen um 1,0 zu beobachten, wenngleich die ermittelten Parameter der Akkumulation und Korrelationsdimension auf eine größtmögliche Entmischung der untersuchten Partikelkonzentrationen hindeuten.

---

trationen für eine Partikel-Stokes-Zahl von 1,25 hindeuten. Unter Berücksichtigung vergleichbarer Partikel-Stokes-Zahlen wird das Clustering durch die betrachteten Volumenbrüche geprägt, wohingegen eine Aufweitung der räumlichen Ausdehnung von Partikelclustern durch Partikel-Partikel-Kollisionen lediglich für den größten untersuchten Volumenbruch zu verzeichnen ist.

Des Weiteren steigt die Frequenz interpartikulärer Wechselwirkungen mit zunehmender Partikelträgheit sukzessive an. Zugleich nehmen die ermittelten Kollisionsraten für vergleichbare Partikel-Stokes-Zahlen mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu. Durch Auswertung der Eulerschen Raumkorrelation von Partikelpaaren zeigt sich, dass die Relativgeschwindigkeiten kollidierender Teilchen für große Partikel-Stokes-Zahlen aufgrund ihrer größeren mittleren radialen Komponenten deutlich von den Relativgeschwindigkeiten benachbarter Partikel abweichen. Da dieses Verhalten für die Weiterentwicklung stochastischer Kollisionsmodelle von großer Bedeutung ist, wird für die in dieser Studie untersuchten Feststoffvolumenbrüche eine funktionale Form der Eulerschen Raumkorrelationen kollidierender Teilchen in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und des Partikelvolumenanteils vorgestellt.

Die Modellierung der Bewegung und Kollision aufgelöster Partikel wird mit Hilfe verschiedener Testfälle systematisch überprüft und mit Mess- und Simulationsdaten verglichen. Die Evaluation umfasst die aufgeprägte Oszillation einer Sphäre, die Sedimentation sphärischer Einzelpartikel sowie die Annäherung, Kollision und Taumbewegung zweier hintereinander sedimentierender Kugeln. Um den Einfluss viskoser Kräfte auf die kurzreichweitigen fluiddynamischen Verdrängungseffekte zu quantifizieren, wird darüber hinaus die Annäherung von Partikeln in ebenen Scherströmungen untersucht. In den Berechnungen steigt die Kollisionswahrscheinlichkeit sowohl mit zunehmender Trägheit als auch mit kleiner werdendem initialen Partikelversatz an.

In einem letzten Schritt werden die Agglomeration und der Transport von Primärpartikeln und Agglomeraten mit aufgelösten Oberflächen analysiert. Die Umströmung im Raum fixierter Agglomerate zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Daten einer Finiten-Element-Methode, sodass das im Rahmen dieser Studie neu entwickelte Rekonstruktionsverfahren auch für nicht-sphärische Teilchen wie Agglomerate geeignet ist. Die direkte numerische Simulation der Agglomeration von Teilchen in einem sedimentierenden Partikelcluster demonstriert darüber hinaus die Leistungsfähigkeit der vorliegenden Lattice-Boltzmann-Methode für mehrere Partikel. Die in diesem Zusammenhang ermittelten Strukturparameter ermöglichen detaillierte Einblicke in den Entstehungsprozess der Agglomerate. Durch einen Vergleich der Agglomerationszeiten für mono- und polydisperse Systeme in ebenen Scherschichten wird zudem der Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung auf die Agglomeration von Primärpartikeln quantifiziert.

## Abstract

The present study analyzes the clustering, collision and agglomeration of solid particles in laminar and turbulent fluid flows. By applying direct numerical simulations, the effect of various boundary conditions such as particle inertia and solid volume fraction on the transport and clustering of spherical point particles is investigated on the mesoscale particle level. In addition, the fluid dynamical interaction between approaching particles shortly before their collision as well as the flow induced agglomeration of primary particles is evaluated using a second microscale approach in which the particle surface is resolved by the numerical grid. In this context, the obtained agglomerate structures are characterized by various morphological parameters. The used computing program is based on the lattice-Boltzmann method.

The tracking of discrete point particles suspended in homogeneous isotropic turbulence is carried out in a Lagrangian frame of reference on the mesoscale particle level. In the performed simulations, collisions between particles are modeled by a deterministic approach which has been validated in a fluid-free particle system. The implemented stochastic forcing scheme for turbulence is based on a pseudo spectral method and generates energy spectra which are comparable with measurement data and empirical models.

In order to resolve flow conditions along the particle-fluid interface as well as fluid dynamical interactions between fluid and particles during collision events, particles are modeled on the microscale particle level with curved no-slip bounce-back boundary conditions. Furthermore, a newly introduced reconstructing scheme for missing distribution functions prevents an artificial attraction of resolved particles for gap distances smaller than the fluid resolution limit. In analogy to collisions, the agglomeration of particles is performed on the basis of a deterministic modeling approach.

The clustering of inertial particles as a function of three solid volume fractions is analyzed with different parameters such as global particle accumulation, correlation dimension, radial particle-pair correlation and Minkowski functionals. In general, maximum clustering of particles can be observed for particle Stokes numbers around 1.0, although the obtained values of the accumulation and correlation dimension indicate a maximum segregation at a particle Stokes number of 1.25. Taking comparable particle Stokes numbers into account, clustering is mainly affected by the considered volume fractions, in which collisions between particles lead to a widening of the spatial particle distribution only for the largest analyzed solids load.

Furthermore, the frequency of inter-particle collisions increases with growing particle inertia. At the same time, the obtained collision rates increase at comparable particle Stokes numbers with increasing solid volume fraction. The analysis of the Eulerian spatial correlation of particle pairs shows that the relative velocity of colliding particles deviates from that of neighboring particles, in particular for large particle Stokes numbers. Since this new finding has a significant impact on the behavior of stochastic collision models, novel functional forms of the Eulerian spatial correlation are proposed as a function of the particle Stokes number and particle volume fraction.

The motion and collision of resolved particles is examined by means of different test cases and compared with measurement and simulation data from literature. The evaluation comprises the forced oscillation of a single sphere, the sedimentation of spherical particles as well as the drafting, collision and tumbling of two sedimenting spheres which are vertically placed in a row. In order to quantify the effect of viscous forces on the short range fluid dynamical interaction, the approach of two particles in plane shear flow is investigated. As a result, the collision probability increases with both increasing particle inertia and decreasing initial offset between particles.

In the last step, the transport and agglomeration of particles with resolved surfaces is analyzed. In this context, the fluid flow around agglomerates fixed in place shows a good agreement with the results obtained by a finite element method, which proves that the newly developed reconstruction scheme is also suitable for non-spherical particles such as agglomerates. Moreover, the agglomeration of particles in a sedimenting cluster demonstrates the capability of the developed lattice-Boltzmann method for several non-spherical particles. The obtained structural parameters allow detailed insights into the growing process of agglomerates. Finally, the agglomeration within mono- and poly-dispersed particle systems is used to quantify the effect of the short-range fluid dynamical interaction on the agglomeration of primary particles in laminar shear flows.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>xii</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>xx</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>xxv</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Stand des Wissens . . . . .	2
1.2 Zielsetzung der Arbeit . . . . .	7
1.3 Gliederung der Arbeit . . . . .	10
<b>2 Numerische Methoden</b>	<b>11</b>
2.1 Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	11
2.1.1 Boltzmann-Gleichung . . . . .	11
2.1.2 D3Q19-Modell . . . . .	13
2.1.3 Einbindung externer Volumenkräfte . . . . .	15
2.2 Generierung homogener isotroper Turbulenz . . . . .	16
2.2.1 Pseudo-Spektral-Methode . . . . .	17
2.2.2 Berechnung der Fourier-Transformation . . . . .	19
2.3 Lagrangesches Tracking von Partikelpartikeln . . . . .	19
2.3.1 Partikelbewegungsgleichungen . . . . .	20
2.3.2 Bestimmung des Partikelzeitschritts . . . . .	24
2.4 Lagrangesches Tracking aufgelöster Partikel . . . . .	25
2.4.1 Modellierung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	26
2.4.2 Partikelbewegungsgleichungen . . . . .	28
2.4.3 Bewegung der Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	30
2.4.4 Annäherung aufgelöster Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	31
2.5 Charakterisierung von Partikelclustern . . . . .	33
2.5.1 Globale Partikelakkumulation . . . . .	33
2.5.2 Korrelationsdimension . . . . .	36
2.5.3 Radiale Korrelation von Partikelpaaren . . . . .	37
2.5.4 Minkowski-Funktionale . . . . .	38
2.6 Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen . . . . .	40
2.6.1 Deterministisches Kollisionsmodell . . . . .	40

---

2.6.2	Kollisionsoperator . . . . .	42
2.7	Modellierung der Partikelagglomeration . . . . .	44
2.7.1	Deterministisches Agglomerationsmodell . . . . .	44
2.7.2	Agglomerationsoperator . . . . .	45
2.7.3	Bewegungsgleichungen des Agglomerats . . . . .	46
<b>3</b>	<b>Direkte numerische Simulation der Fluidströmung</b>	<b>50</b>
3.1	Validierung des Strömungslösers . . . . .	50
3.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	50
3.1.2	Analyse der laminaren Fluidströmung . . . . .	52
3.2	Evaluation der Turbulenzanregung . . . . .	53
3.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	54
3.2.2	Kenngrößen der turbulenten Fluidströmung . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Clustering und Kollision von Partikeln</b>	<b>65</b>
4.1	Numerische Konfiguration . . . . .	65
4.1.1	Kontinuierliche Phase . . . . .	65
4.1.2	Disperse Phase . . . . .	67
4.2	Lagrangesches Partikeltracking . . . . .	71
4.2.1	Analyse der Partikelkräfte . . . . .	71
4.2.2	Turbulenter Partikeltransport . . . . .	75
4.3	Charakterisierung von Partikelclustern . . . . .	79
4.3.1	Globale Partikelakkumulation . . . . .	80
4.3.2	Korrelationsdimension . . . . .	82
4.3.3	Radiale Korrelation von Partikelpaaren . . . . .	83
4.3.4	Minkowski-Funktionale . . . . .	84
4.4	Partikel-Partikel-Wechselwirkungen . . . . .	89
4.4.1	Validierung des deterministischen Kollisionsmodells . . . . .	89
4.4.2	Analyse des Kollisionsverhaltens . . . . .	91
4.4.3	Zwei-Partikel-Raumkorrelation der Partikelgeschwindigkeit . . . . .	97
<b>5</b>	<b>Fluiddynamische Wechselwirkung von Partikeln</b>	<b>103</b>
5.1	Oszillation eines sphärischen Partikels . . . . .	103
5.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	104
5.1.2	Analyse der stromungsinduzierten Partikelkraft . . . . .	105
5.2	Sedimentation von Einzelpartikeln . . . . .	106
5.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	106
5.2.2	Einfluss der räumlichen Diskretisierung . . . . .	108
5.2.3	Evaluation mit experimentellen Daten . . . . .	109

---

5.3	Sedimentation von Partikelpaaren . . . . .	113
5.3.1	Numerische Konfiguration . . . . .	113
5.3.2	Evaluation anhand numerischer Daten . . . . .	114
5.4	Annäherung von Partikeln in Scherströmungen . . . . .	116
5.4.1	Numerische Konfiguration . . . . .	117
5.4.2	Einfluss viskoser Fluidkräfte . . . . .	118
<b>6</b>	<b>Transport, Wachstum und Morphologie von Agglomeraten</b>	<b>121</b>
6.1	Fluiddynamische Wechselwirkung in Agglomeraten . . . . .	121
6.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	122
6.1.2	Einfluss der Partikel auf das Strömungsfeld . . . . .	124
6.1.3	Widerstandskräfte und Drehmomente auf Partikel . . . . .	125
6.2	Agglomeration sedimentierender Partikel . . . . .	129
6.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	129
6.2.2	Transientes Agglomerationsverhalten . . . . .	131
6.2.3	Charakterisierung der Agglomeratmorphologie . . . . .	133
6.3	Scherinduzierte Agglomeration von Partikeln . . . . .	136
6.3.1	Numerische Konfiguration . . . . .	136
6.3.2	Transientes Wachstum von Agglomeraten . . . . .	138
6.3.3	Charakterisierung der Agglomeratmorphologie . . . . .	144
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>151</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>156</b>
A.1	Trilineare Interpolationsmethode . . . . .	156
A.2	Grundgleichungen der Frequenzanalyse . . . . .	157
A.3	Analysierte Agglomeratstrukturen . . . . .	159
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>162</b>

# Symbolverzeichnis

## Lateinische Symbole

$A$	$[\text{m}^2]$	Oberfläche
$A_A$	$[\text{m}^2]$	Oberfläche des Agglomerats
$A_c$	$[-]$	Beschleunigungszahl
$\mathcal{A}_r$	$[-]$	Vereinigungsmenge als Funktion des Radius
$A_v$	$[\text{m}^2]$	Oberfläche der volumenäquivalenten Kugel
$\mathbf{a}$	$[\text{m}/\text{s}^2]$	Beschleunigung
$\mathbf{a}^{\text{ext}}$	$[\text{m}/\text{s}^2]$	Beschleunigung infolge externer Volumenkräfte
$\mathbf{a}_{\sigma_i}^{\text{ext}}$	$[\text{m}/\text{s}^2]$	Diskrete Beschleunigung infolge externer Volumenkräfte
$B_{ij}^P$	$[\text{m}^2/\text{s}^2]$	Korrelationstensor der Partikelgeschwindigkeit
$\mathcal{B}_r$	$[-]$	Kugel mit dem Radius $r$
$b$	$[-]$	Auftriebskoeffizient
$C_0$	$[-]$	Universelle Kolmogorov-Konstante
$C_2(r)$	$[\text{m}]$	Korrelationsintegral
$c$	$[\text{m}/\text{s}]$	Gitterkonstante
$c_A$	$[-]$	Beiwert zur Saffman-Auftriebskraft
$c_B$	$[-]$	Beiwert zur Basset-Kraft
$c_R$	$[-]$	Restitutionskoeffizient
$c_S$	$[\text{m}/\text{s}]$	Schallgeschwindigkeit
$c_V$	$[-]$	Beiwert zur Kraft durch die virtuelle Masse
$c_W$	$[-]$	Widerstandsbeiwert
$D_2$	$[-]$	Korrelationsdimension
$D_f$	$[-]$	Fraktale Dimension
$D(\kappa)$	$[\text{m}^3/\text{s}^3]$	Dreidimensionales Dissipationsspektrum
$d_2(r)$	$[-]$	Lokale Korrelationsdimension
$d_P$	$[\text{m}]$	Partikeldurchmesser
$\bar{d}_P$	$[\text{m}]$	Mittlerer Durchmesser der Primärpartikel
$d_h$	$[\text{m}]$	Hydraulischer Durchmesser
$d_v$	$[\text{m}]$	Durchmesser der volumenäquivalenten Kugel
$E$	$[\text{N m}]$	Kinetische Energie des Fluids
$E(\kappa)$	$[\text{m}^3/\text{s}^2]$	Dreidimensionales Energiespektrum
$E_x(\kappa)$	$[\text{m}^3/\text{s}^2]$	Eindimensionales Energiespektrum

$\mathbf{e}_n$	[–]	Normaleneinheitsvektor
$\mathbf{e}_t$	[–]	Tangentialeinheitsvektor
$\mathbf{e}_x$	[–]	Einheitsvektor in x-Richtung
$\mathbf{e}_y$	[–]	Einheitsvektor in y-Richtung
$\mathbf{e}_z$	[–]	Einheitsvektor in z-Richtung
$\mathbf{F}$	[N]	Kraft
$\mathbf{F}_B$	[N]	Basset-Kraft
$\mathbf{F}_S$	[N]	Saffman-Auftriebskraft
$F_{St}$	[N]	Widerstandskraft im Stokes-Bereich
$\mathbf{F}_V$	[N]	Kraft durch die virtuelle Masse
$\mathbf{F}_W$	[N]	Widerstandskraft
$\mathbf{F}^{\text{ext}}$	[kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> ]	Externe Volumenkraft
$\mathbf{F}_g$	[N]	Schwerkraft mit Gravitation und Auftrieb
$\mathbf{F}_p$	[N]	Kraft durch einen Druckgradienten
$\mathbf{F}_{\sigma i}$	[N m]	Diskrete Kraft an der Partikeloberfläche
$F_{\sigma i}^{\text{ext}}$	[kg/m <sup>3</sup> s]	Diskreter Kraftterm für externe Volumenkräfte
$f$	[kg s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> ]	Verteilungsfunktion
$f(r)$	[–]	Longitudinale Zwei-Punkt-Raumkorrelation
$f_0$	[1/s]	Grundfrequenz der Oszillation
$f_1$	[–]	Substitutionsfunktion in der Partikelbewegungsgleichung
$f_2$	[–]	Substitutionsfunktion in der Partikelbewegungsgleichung
$f^{\text{eq}}$	[kg s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> ]	Gleichgewichtsverteilungsfunktion
$f_A$	[1/s]	Agglomerationsfrequenz
$f_K$	[1/s]	Kollisionsfrequenz
$f_{\sigma i}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Diskrete Verteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^{\text{eq}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Diskrete Gleichgewichtsverteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^{\text{neq}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Diskrete Nicht-Gleichgewichtsverteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^*$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Diskrete Post-Relaxationsverteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^{**}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Diskrete Post-Propagationsverteilungsfunktion
$\mathbf{g}$	[m/s <sup>2</sup> ]	Erdbeschleunigung
$g(r)$	[–]	Transversale Zwei-Punkt-Raumkorrelation
$g_r$	[–]	Radiale Partikelpaarkorrelationsfunktion
$H$	[m]	Integrale mittlere Krümmung
$h_S$	[m]	Höhe der rückwärtsgewandten Stufe
$I_P$	[kg m <sup>2</sup> ]	Trägheitsmoment des sphärischen Partikels
$I_{aa}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Hauptträgheitsmoment des Partikels um die a-Achse
$I_{bb}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Hauptträgheitsmoment des Partikels um die b-Achse
$I_{cc}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Hauptträgheitsmoment des Partikels um die c-Achse
$I_{xx}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Trägheitsmoment des Partikels um die raumfeste x-Achse

$I_{yy}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Trägheitsmoment des Partikels um die raumfeste y-Achse
$I_{zz}$	[kg m <sup>2</sup> ]	Trägheitsmoment des Partikels um die raumfeste z-Achse
$\mathbf{J}$	[N s]	Impuls
$J_n$	[N s]	Normalanteil des Impulses
$J_t$	[N s]	Tangentialanteil des Impulses
$k$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Spezifische turbulente kinetische Energie des Fluids
$k_f$	[–]	Strukturkoeffizient
$k_P$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Spezifische kinetische Energie des Partikels
$L$	[m]	Abmessung des Rechengebietes in einer Raumrichtung
$L_f$	[m]	Longitudinales integrales Längenmaß
$L_g$	[m]	Transversales integrales Längenmaß
$m$	[kg]	Fluidmasse
$m_A$	[kg]	Agglomeratmasse
$m_P$	[kg]	Partikelmasse
$m_{P\text{eff}}$	[kg]	Effektive Partikelmasse
$N$	[–]	Anzahl an Gitterpunkten in einer Raumrichtung
$N_B$	[–]	Gesamtanzahl an Boxen
$N_P$	[–]	Anzahl an Partikeln
$N_{P\text{ges}}$	[–]	Gesamtanzahl an Partikeln
$N_{P^2}$	[–]	Anzahl an Partikelpaaren
$N_{P^2\text{ges}}$	[–]	Gesamtanzahl an Partikelpaaren
$N_{PP}$	[–]	Anzahl an Primärpartikeln
$N_Z$	[–]	Anzahl an erzeugten und entfernten Fluidzellen
$N_{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}}$	[1/m <sup>4</sup> ]	Theoretische Verteilungsfunktion der Relativgeschwindigkeit
$N_{\theta_{\alpha\beta}}$	[rad/m <sup>3</sup> s]	Theoretische Verteilungsfunktion des Kollisionswinkels
$n_P$	[1/m <sup>3</sup> ]	Partikelanzahlkonzentration
$P$	[–]	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$P_{\text{Pois}}$	[–]	Poisson-Verteilung
$p$	[Pa]	Druck
$Q$	[–]	Einheitsquaternion
$q$	[–]	Abstand zwischen Partikeloberfläche und Fluidknoten
$q_0$	[–]	Koeffizient des Einheitsquaternions
$q_1$	[–]	Koeffizient des Einheitsquaternions
$q_2$	[–]	Koeffizient des Einheitsquaternions
$q_3$	[–]	Koeffizient des Einheitsquaternions
$q_{\sigma i}$	[–]	Diskreter Abstand zwischen Oberfläche und Fluidknoten
$\mathbf{R}$	[–]	Drehtensor
$R_E(\mathbf{r})$	[–]	Eulersche Zwei-Punkt-Raumkorrelation

$R_E(\tau)$	[–]	Eulersche Autokorrelation
$R_E^K$	[–]	Eulersche Raumkorrelation kollidierender Partikel
$R_L^F$	[–]	Lagrangesche Kreuzkorrelation der Fluidgeschwindigkeit
$R_L^{F@P}$	[–]	Lagrangesche Kreuzkorrelation der Fluidgeschwindigkeit an der Position des Partikels
$R_L^P$	[–]	Lagrangesche Kreuzkorrelation der Partikelgeschwindigkeit
$R_g$	[m]	Schwerpunktradius
$r$	[m]	Radius
$r_P$	[m]	Partikelradius
$\bar{r}_P$	[m]	Mittlerer Radius der Primärpartikel
$S_{ij}$	[1/s]	Tensor der Dehnungsgeschwindigkeit des Fluids
$\mathbf{T}$	[N m]	Drehmoment
$T$	[s]	Periodendauer
$\mathbf{T}_{\sigma i}$	[N m]	Diskretes Drehmoment an der Partikeloberfläche
$T_A$	[s]	Zeitmaß der Anregung
$T_I$	[s]	Zeit bis zur vollständigen Interpenetration zweier Partikel
$T_{KV}$	[s]	Zeit des Partikels zum Durchqueren eines Kontrollvolumens
$T_P$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Agitation des Partikels
$T_W$	[s]	Zeit des Partikels zum Durchqueren eines Wirbels
$t$	[s]	Zeit
$t_{ges}$	[s]	Gesamtzeit
$U_0$	[m/s]	Grundgeschwindigkeit der Oszillation
$\mathbf{u}$	[m/s]	Fluidgeschwindigkeit
$\tilde{\mathbf{u}}$	[m/s]	Extrapolierte Fluidgeschwindigkeit
$u'$	[m/s]	Charakteristische turbulente Fluidgeschwindigkeit
$\mathbf{u}_A$	[m/s]	Geschwindigkeit des Agglomerats im Massenschwerpunkt
$\mathbf{u}_{F@P}$	[m/s]	Fluidgeschwindigkeit an der Position des Partikels
$\mathbf{u}_P$	[m/s]	Partikelgeschwindigkeit
$u'_P$	[m/s]	Isotrope Schwankungsgeschwindigkeit des Partikels
$u_P^S$	[m/s]	Ungestörte, stationäre Sinkgeschwindigkeit des Partikels
$\mathbf{u}_P^U$	[m/s]	Umfangsgeschwindigkeit des Partikels
$\mathbf{u}_P^*$	[m/s]	Partikelgeschwindigkeit nach dem Stoß
$\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$	[m/s]	Relativgeschwindigkeit zweier Partikel
$\mathbf{u}_{P\alpha\beta}^*$	[m/s]	Relativgeschwindigkeit zweier Partikel nach dem Stoß
$\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}$	[m/s]	Tangentiale Schlupfgeschwindigkeit im Kollisionspunkt
$\mathbf{u}_S$	[m/s]	Geschwindigkeit auf dem Feststoffknoten
$u_{\dot{\gamma}}$	[m/s]	Ungestörte Fluidgeschwindigkeit unter Scherbedingung
$u_\eta$	[m/s]	Kolmogorov-Geschwindigkeitsmaß
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen

$V_H$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen der konvexen Hülle
$V_S$	[m <sup>3</sup> ]	Feststoffvolumen
$V_V$	[m <sup>3</sup> ]	Hohlraumvolumen
$V_\mu$	[–]	Minkowski-Funktionale
$v_\mu$	[–]	Raumdichte der Minkowski-Funktionale
$w_r$	[m/s]	Radiale Komponente der Partikelrelativgeschwindigkeit
$X_0$	[m]	Grundamplitude der Oszillation
$\mathbf{x}$	[m]	Position
$\mathbf{x}_A$	[m]	Position des Massenschwerpunktes des Agglomerats
$\mathbf{x}_F$	[m]	Position des Fluidknotens
$\mathbf{x}_{FF}$	[m]	Position des nächstbenachbarten Fluidknotens
$\mathbf{x}_P$	[m]	Partikelposition
$\mathbf{x}_{P12}$	[m]	Relative Position zweier Primärpartikel
$\mathbf{x}_{P\alpha\beta}$	[m]	Relative Position zweier Partikel
$\mathbf{x}_R$	[m]	Position des Drehpunktes
$\mathbf{x}_S$	[m]	Position des Feststoffknotens
$\mathbf{x}_W$	[m]	Position der Phasengrenzfläche
$\hat{y}$	[–]	Amplitudenverhältnis
$Z_A$	[–]	Übergangsfunktion der Anregung

### Griechische Symbole

$\alpha_P$	[–]	Volumenanteil der dispersen Phase
$\beta_{Re}$	[–]	Verhältnis von Scher- zu Partikel-Reynolds-Zahl
$\Gamma$	[–]	Zufallszahl mit Gauß-Verteilung
$\Gamma_A$	[m <sup>3</sup> /s]	Kollisionsrate nach Abrahamson
$\Gamma_{KK}$	[m <sup>3</sup> /s]	Kollisionsrate nach Kruis und Kusters
$\Gamma_S$	[m <sup>3</sup> /s]	Numerisch berechnete Kollisionsrate
$\Gamma_{ST}$	[m <sup>3</sup> /s]	Kollisionsrate nach Saffman und Turner
$\gamma$	[–]	Längenskalen-Verhältnis
$\dot{\gamma}$	[1/s]	Scherrate
$\Delta V$	[m <sup>3</sup> ]	Diskretes Volumenelement
$\Delta s$	[m]	Minimale Spaltweite zwischen zwei Oberflächen
$\Delta t$	[s]	Diskreter Fluidzeitschritt
$\Delta t_K$	[s]	Kollisionszeit eines Partikelpaars
$\Delta t_P$	[s]	Diskreter Partikelzeitschritt
$\Delta x$	[m]	Räumliche Diskretisierung
$\Delta\phi_A$	[°]	Drehwinkelverschiebung des Agglomerats

$\epsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	Dissipationsrate des Fluids
$\zeta$	[–]	Abruptheit der Anregung
$\eta$	[Pa s]	Dynamische Viskosität
$\eta_K$	[m]	Kolmogorov-Längenmaß
$\theta_{\alpha\beta}$	[rad]	Geometrischer Kollisionswinkel
$\kappa$	[1/m]	Wellenzahl
$\kappa_0$	[1/m]	Kleinste aufgelöste Wellenzahl
$\kappa_A$	[1/m]	Angeregte Wellenzahl
$\kappa_{\max}$	[1/m]	Größte aufgelöste Wellenzahl
$\lambda$	[–]	Mittlere Anzahl an Partikeln in einer Zelle
$\lambda_T$	[m]	Taylor-Längenmaß
$\mu_d$	[–]	Dynamischer Reibungskoeffizient
$\mu_s$	[–]	Statischer Reibungskoeffizient
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	Kinematische Viskosität
$\xi$	[m/s]	Geschwindigkeit eines Fluidelements
$\xi_{\sigma i}$	[m/s]	Diskrete Geschwindigkeit eines Fluidelements
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Fluidichte
$\tilde{\rho}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Extrapolierte Fluidichte
$\rho_P$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Partikeldichte
$\Sigma_P$	[–]	Globale Akkumulation der Partikel
$\sigma$	[–]	Standardabweichung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der gemessenen Partikelanzahlverteilung
$\sigma_A$	[m/s]	Amplitude der Anregung
$\sigma_{\text{Pois}}$	[–]	Standardabweichung der Poisson-Verteilung
$\tau$	[s]	Relaxationszeit
$\tau_A$	[s]	Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Agglomerationen
$\tau_E$	[s]	Eulersches integrales Zeitmaß
$\tau_K$	[s]	Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Kollisionen
$\tau_L^F$	[s]	Lagrangesches integrales Zeitmaß des Fluids
$\tau_L^{F@P}$	[s]	Lagrangesches integrales Zeitmaß des Fluids an der Position des Partikels
$\tau_L^P$	[s]	Lagrangesches integrales Zeitmaß des Partikels
$\tau_L^\epsilon$	[s]	Lagrangesches Dissipationszeitmaß des Fluids
$\tau_P$	[s]	Partikelrelaxationszeit
$\tau_W$	[s]	Gewichtete Wirbelumdrehungszeit
$\tau_e$	[s]	Eulersches Makrozeitmaß
$\tau_\eta$	[s]	Kolmogorov-Zeitmaß
$\Phi$	[–]	Porosität
$\phi_A$	[°]	Drehwinkel des Agglomerats

$\varphi$	[–]	Phasenwinkel
$\chi$	[–]	Euler-Charakteristik
$\Psi$	[–]	Sphärizität
$\psi$	[–]	Schiefeparameter
$\psi_0$	[–]	Grenzschiefeparameter
$\Omega$	[kg s <sup>2</sup> /m <sup>6</sup> ]	Bhatnagar-Gross-Krook-Kollisionsoperator
$\omega$	[1/s]	Wirbelstärke des Fluids
$\omega_A$	[1/s]	Winkelgeschwindigkeit des Agglomerats
$\omega_P$	[1/s]	Winkelgeschwindigkeit des Partikels
$\omega_S$	[1/s]	Kreisfrequenz der turbulenten Strömung
$\omega_{F@P}$	[1/s]	Winkelgeschwindigkeit des Fluids am Ort des Partikels
$\omega_{\sigma i}$	[–]	Gewichtungsfaktor der diskreten Gleichgewichtsverteilung

### Dimensionslose Kennzahlen

$Cu_P$	Partikel-Courant-Zahl
$Ma$	Mach-Zahl
$Re_{BFS}$	Reynolds-Zahl der Strömung des Backward-Facing Step
$Re_L$	Turbulente Reynolds-Zahl
$Re_P$	Partikel-Reynolds-Zahl
$Re_S$	Partikel-Reynolds-Zahl der Fluidscherung
$Re_\lambda$	Taylor-Reynolds-Zahl
$Sr_P$	Partikel-Strouhal-Zahl
$St$	Partikel-Stokes-Zahl basierend auf der Konvektion
$St_A$	Partikel-Stokes-Zahl basierend auf der relativen Advektion
$St_K$	Partikel-Stokes-Zahl basierend auf dem Kolmogorov-Zeitmaß
$St_L$	Partikel-Stokes-Zahl basierend auf dem Lagrangeschen integralen Zeitmaß
$St_\omega$	Partikel-Stokes-Zahl im Frequenzbereich

### Abkürzungen

BBO	Basset-Boussinesq-Oseen
BFS	Backward-Facing Step
BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
C-C	Cluster-Cluster
DEM	Diskrete-Element-Methode
DFT	Diskrete Fourier-Transformation

DKT	Drafting-Kissing-Tumbling
DNS	Direkte numerische Simulation
DPM	Diskrete-Partikel-Methode
FDM	Fiktive-Domain-Methode
FEM	Finite-Element-Methode
FFT	Fast-Fourier-Transformation
LBM	Lattice-Boltzmann-Methode
LES	Large-Eddy-Simulation
PBE	Populations-Bilanz-Gleichungen
PIV	Particle Image Velocimetry
PSM	Pseudo-Spektral-Methode
P-C	Partikel-Cluster
RVF	Radiale Verteilungsfunktion
WDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

## Abbildungsverzeichnis

1.1	Ansätze zur Multiskalenanalyse partikulärer Strömungen . . . . .	8
2.1	Richtungen der 19 Geschwindigkeitsvektoren in dem D3Q19-Modell .	14
2.2	Programmablaufplan zur adaptiven Bestimmung der diskreten Partikelzeitschritte . . . . .	26
2.3	Schematische Darstellung der gekrümmten Wandrandbedingung in der Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	27
2.4	Bewegung der Feststoff-Fluid-Phasengrenze eines sphärischen Partikels über das regulär strukturierte, äquidistante Rechengitter . . . . .	31
2.5	Schematische Darstellung zweier sich annähernder Partikel . . . . .	32
2.6	Zweidimensionale Ansicht des für die Boxcounting-Methode verwendeten Gitters mit drei charakteristischen Verteilungen der Partikel . . .	34
2.7	Gegenüberstellung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen einer geordneten, zufälligen und lokal konzentrierten Partikelanzahlverteilung mit der zu Grunde liegenden Poisson-Verteilung . . . . .	35
2.8	Schematische Darstellung der zur Bestimmung der Partikelpaarkorrelationsfunktion generierten Kugelschalen . . . . .	37
2.9	Momentaufnahme der Verteilung in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Partikel mit verschiedenen Hüllradien zur Bestimmung der Minkowski-Funktionale . . . . .	38
2.10	Programmablaufplan zur zeitlich sequentiellen Erkennung und Durchführung von Partikel-Partikel-Kollisionen . . . . .	41
2.11	Schematische Darstellung zweier kollidierender Partikel . . . . .	43
3.1	Schematische Darstellung der Geometrie des Backward-Facing Step .	51
3.2	Entwicklung des vertikalen Geschwindigkeitsprofils an verschiedenen Positionen stromabwärts der rückwärtsgewandten Stufe . . . . .	53
3.3	Dreidimensionale Verteilung der Wirbelstärke in Abhängigkeit der räumlichen Diskretisierung . . . . .	55
3.4	Gegenüberstellung der durch direkte numerische Simulationen berechneten Energie- und Dissipationsspektren . . . . .	57
3.5	Zeitliche Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie und Dissipationsrate im Verlauf der Simulation V-128 <sup>3</sup> . . . . .	58

---

3.6	Wahrscheinlichkeitsverteilung der Komponenten der Fluidgeschwindigkeit des Testfalls V-256 <sup>3</sup> . . . . .	59
3.7	Verlauf der auf Grundlage direkter numerischer Simulationen berechneten Eulerschen Zwei-Punkt-Raumkorrelationsfunktionen . . . . .	61
4.1	Dreidimensionales Energie- und Dissipationsspektrum des Simulationslaufs S-128 <sup>3</sup> als Funktion der Wellenzahl . . . . .	67
4.2	Zeitliche Entwicklung der mittleren kinetischen Energie der Partikel als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	71
4.3	Vergleich der in einer Stufenkanalströmung aufgezeichneten Partikelkräfte mit aus der Literatur verfügbaren Simulationsdaten als Funktion der Zeit . . . . .	72
4.4	Spektrale Verteilung des Phasenwinkels als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	74
4.5	Momentaufnahme des turbulenten Strömungsfeldes und der Partikelverteilung in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	75
4.6	Mittlere Wirbelstärke und Dehnungsrate des Fluids an der Position der Partikel in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und des Volumenbruchs der dispersen Phase . . . . .	76
4.7	Vergleich der mittleren spezifischen kinetischen Energie der Partikel mit Daten weiterer direkter numerischer Simulationen in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	77
4.8	Lagrangesches integrales Zeitmaß der Partikel und des Fluids an der Position der Partikel in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und des Volumenbruchs der dispersen Phase . . . . .	78
4.9	Globale Akkumulation der Partikel bei verschiedenen Volumenbrüchen der dispersen Phase in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und Boxgröße . . . . .	81
4.10	Korrelationsdimension in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und des Volumenbruchs der dispersen Phase . . . . .	82
4.11	Radiale Verteilungsfunktion in Abhängigkeit des Separationsabstandes und der Partikel-Stokes-Zahl auf Grundlage verschiedener Volumenanteile der dispersen Phase . . . . .	84
4.12	Raumdichten der Minkowski-Funktionale als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen . . . . .	86
4.13	Beeinflussung des Raumdichtenverlaufs der Minkowski-Funktionale durch die Ab- und Anwesenheit von Partikel-Partikel-Kollisionen sowie den Stichprobenumfang . . . . .	88

---

4.14	Fluktuation der in einem granularen Medium berechneten Kollisionsrate als Funktion der Zeit . . . . .	90
4.15	Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des geometrischen Kollisionswinkels und der Relativgeschwindigkeit zweier kollidierender Partikel in einem granularen Medium mit theoretischen Verteilungsfunktionen auf Grundlage der kinetischen Gastheorie . . . . .	91
4.16	Einfluss der Partikel-Stokes-Zahl und des Volumenbruchs der dispersen Phase auf die mittlere Kollisionszeit . . . . .	92
4.17	Vergleich der ermittelten Kollisionsraten mit analytischen Approximationen für kleine und große Partikel-Stokes-Zahlen . . . . .	94
4.18	Vergleich der ermittelten Kollisionsfrequenzen mit Daten aus Large-Eddy-Simulationen und analytischen Approximationen . . . . .	95
4.19	Eulersche Zwei-Partikel-Raumkorrelation der Partikelgeschwindigkeit verschiedener Berechnungs- und Korrelationsansätze als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	98
4.20	Mittlerer Betrag der radialen Komponente der Relativgeschwindigkeit zweier Partikel aufgetragen über der Partikel-Stokes-Zahl in Abhängigkeit des Volumenbruchs der dispersen Phase . . . . .	100
5.1	Schematische Darstellung der Oszillation eines kugelförmigen Partikels über das raumfeste, äquidistante Rechengitter . . . . .	104
5.2	Zeitlicher Verlauf der in Bewegungsrichtung auf das Partikel wirkenden strömungsinduzierten Gesamtkraft . . . . .	105
5.3	Kanalgeometrie, Messpunkte und Startposition des sedimentierenden Partikels . . . . .	107
5.4	Einfluss der Diskretisierung auf die Partikelsinkgeschwindigkeit . . . . .	109
5.5	Vergleich der berechneten Trajektorien und Sinkgeschwindigkeiten eines sphärischen Partikels mit Particle Image Velocimetry-Messungen und theoretischen Approximationen . . . . .	110
5.6	Vergleich des zeitlichen Verlaufs der berechneten und gemessenen z-Komponente der Fluidgeschwindigkeit an definierten Messpunkten bei verschiedenen Partikel-Reynolds-Zahlen . . . . .	111
5.7	Momentaufnahmen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes in der Umgebung eines sedimentierenden Partikels . . . . .	112
5.8	Zeitabhängige Entwicklung der Sinkgeschwindigkeiten des sedimentierenden Partikelpaares und Gegenüberstellung mit Simulationsdaten auf Grundlage der Fiktiven-Domain-Methode . . . . .	114
5.9	Momentaufnahmen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes im Umfeld des sedimentierenden Partikelpaares . . . . .	115

---

5.10	Zeitliche Entwicklung des relativen Abstandes zwischen zwei sich in einer ebenen Scherströmung annähernden Partikeln als Funktion der advektiven Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	118
5.11	Einfluss der advektiven Partikel-Stokes-Zahl auf den kleinsten Partikelabstand und der zu diesem Zeitpunkt gemessenen Relativgeschwindigkeit zwischen den sich in einer ebenen Scherströmung bewegenden Partikeln in Abhängigkeit des fiktiven Kollisionswinkels . . . . .	119
6.1	Typische kompakte und offene Strukturen der für diese Studie generierten Agglomerate . . . . .	123
6.2	Schematische Darstellung des diskretisierten Rechengebiets bei Finite-Element-Methode und Lattice-Boltzmann-Methode unter Berücksichtigung lokaler Gitterverfeinerungen im Bereich der Primärpartikel . .	124
6.3	Konturdiagramm der Strömungsgeschwindigkeit mit Stromlinien des Fluids im Umfeld eines offen strukturierten Agglomerats . . . . .	125
6.4	Vergleich der mittels Lattice-Boltzmann-Methode und Finite-Element-Methode berechneten Strömungsgeschwindigkeit mit der ungestörten Geschwindigkeit der initial aufgeprägten Fluidscherung im Umfeld eines offen strukturierten Agglomerats . . . . .	126
6.5	Vergleich scherinduzierter Widerstandskräfte auf Primärpartikel in kompakten und offenen Agglomeraten unter Anwendung der Lattice-Boltzmann-Methode und Finite-Element-Methode . . . . .	128
6.6	Scherinduziertes Gesamtdrehmoment auf kompakte und offene Agglomerate in Abhängigkeit der Anzahl agglomerierter Primärpartikel . .	129
6.7	Momentaufnahmen des Geschwindigkeitsfelds mit zugehöriger Verteilung der sinkenden Primärpartikel und Agglomerate zu verschiedenen Zeitpunkten . . . . .	131
6.8	Zeitabhängiges Wachstum eines Agglomerats infolge der Kollision mit benachbarten Primärpartikeln und Agglomeraten . . . . .	132
6.9	Zeitliche Entwicklung der Sphärizität und des Schwerpunktradius der während der Sedimentation extrahierten Agglomeratstrukturen . . . .	133
6.10	Verlauf der Porosität des wachsenden Agglomerats als Funktion der Zeit unter Angabe der Anzahl agglomerierter Primärpartikel . . . . .	135
6.11	Momentaufnahmen der Fluidgeschwindigkeit mit zugehöriger polydisperser Größenverteilung der Partikel zu verschiedenen Zeitpunkten .	139
6.12	Zeitliche Entwicklung der Gesamtanzahl der Partikel und Primärpartikel als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl . . . . .	140
6.13	Agglomerationszeit in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel . . . . .	142

---

6.14	Zeitliche Entwicklung der Gesamtanzahl der Partikel und Primärpartikel in Abhängigkeit der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl . . .	143
6.15	Agglomerationszeit als Funktion der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl und der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel . . . . .	144
6.16	Vergleich der Sphärizität von Agglomeraten als Funktion des Durchmessers der volumenäquivalenten Kugel . . . . .	145
6.17	Entwicklung des Schwerpunktradius in Abhängigkeit des Durchmessers der volumenäquivalenten Kugel mit der Partikel-Stokes-Zahl und der Partikel-Reynolds-Zahl als Parameter . . . . .	146
6.18	Vergleich der gemittelten Anzahl monodisperser Primärpartikel je Agglomerat mit theoretischen Vorhersagen als Funktion des Schwerpunktradius mit der Partikel-Stokes-Zahl und der Partikel-Reynolds-Zahl als Parameter . . . . .	148
6.19	Verteilung der Porosität von Agglomeraten als Funktion des Durchmessers der volumenäquivalenten Kugel mit der Partikel-Stokes-Zahl und der Partikel-Reynolds-Zahl als Parameter . . . . .	149
A.1	Indizierung der zur trilinearen Interpolation eines Wertes an der Partikelposition verwendeten Eck- und Stützpunkte . . . . .	157
A.2	Übersicht zu den zur Berechnung des scherinduzierten Gesamtdrehmomentes analysierten offenen Agglomeraten . . . . .	160
A.3	Zusammenfassung der zur Berechnung des scherinduzierten Gesamtdrehmomentes untersuchten kompakten Agglomerate . . . . .	161

## Tabellenverzeichnis

2.1	Definition der Minkowski-Funktionale im dreidimensionalen Raum in Bezug auf die zugehörigen geometrischen Größen . . . . .	39
3.1	Geometrische Abmessungen des Backward-Facing Step und charakteristische Eigenschaften des Fluids . . . . .	52
3.2	Zusammenfassung der zur Generierung homogener isotroper Turbulenz verwendeten Diskretisierungs- und Anregungsparameter . . . . .	54
3.3	Statistische Kenngrößen der erzeugten turbulenten Fluidströmungen .	56
3.4	Normiertes quadratisches Mittel der Komponenten der Fluidgeschwindigkeit auf Grundlage der angeregten turbulenten Strömungsfelder . .	60
4.1	Zusammenfassung der für die Berechnung der turbulenten Fluidströmung angewandten Diskretisierungs- und Anregungsparameter . . . .	66
4.2	Charakteristische Eigenschaften der in S-128 <sup>3</sup> generierten homogenen isotropen Turbulenz . . . . .	68
4.3	Dimensionslose Eigenschaften der Partikel in Abhängigkeit des Volumenanteils der dispersen Phase in den Simulationsläufen S-128 <sup>3</sup> . . . .	69
4.4	Koeffizienten der analytischen Drei-Koeffizienten-Korrelation der Partikelgeschwindigkeit kollidierender Partikel als Funktion des Feststoffvolumenbruchs . . . . .	101
5.1	Fluid- und Partikeleigenschaften der betrachteten Sedimentationen . .	108
5.2	Räumliche Diskretisierung des vertikalen Kanals und der sedimentierenden Kugel . . . . .	109
6.1	Zusammenfassung der zur Agglomeration in Scherströmungen modifizierten Fluid- und Partikeleigenschaften . . . . .	138
6.2	Zusammenfassung der zur Vorhersage von Cluster-Cluster- und Partikel-Cluster-Kollisionen verwendeten Vorfaktoren . . . . .	147

# 1 Einleitung

Die Advektion in Fluidströmungen suspendierter Stäube, Tropfen und Blasen ist in vielen Naturphänomenen und industriellen Prozessen anzutreffen. Technische Anwendungen umfassen etwa die Optimierung strahlgeführter Verbrennungsverfahren in Dieselmotoren (Ning *et al.* 2009) und Raketenantrieben (Gosman & Ioannides 1983), die Separation von Feststoffen oder Tropfen in Zyklonen (Lipowsky 2013) und der pneumatische Transport von Kohlenstaub (Lain & Sommerfeld 2013). Zu natürlichen und umweltbedingten Prozessen zählen zum Beispiel die Verbreitung atmosphärischer Aerosole (Ayala *et al.* 2008), die Bildung von Regentropfen (Falkovich *et al.* 2002), die Entwicklung von Cumuluswolken (Shaw *et al.* 1998) sowie die Dynamik von Sandstürmen (Westphal *et al.* 1987).

Das Transportverhalten von Partikeln in Fluiden ist aufgrund ihrer finiten Ausdehnung und zumeist größeren Materialdichte weitaus komplexer als das der Fluidteilchen. Aufgrund ihrer Trägheit ist die Dynamik der Partikel dissipativ, in Folge dessen Inhomogenitäten in der räumlichen Verteilung der Teilchen auftreten. Im Gegensatz zu den eingangs genannten makroskaligen Prozessen basiert die Entstehung von Partikelclustern in der dispersen Phase vorwiegend auf mesoskaligen Phänomenen, die im Übergangsbereich zwischen mikroskopischer und makroskopischer Betrachtungsweise der Partikel anzusiedeln sind. Abgesehen vom Transport der Teilchen durch das Trägerfluid sind die Partikel zudem in der Lage, untereinander zu interagieren. Die Kollision und Agglomeration von Teilchen stellen in diesem Zusammenhang die wohl fundamentalsten Prozesse dar, die wiederum auf mikroskaligen Phänomenen beruhen. Beispielsweise ist für die gezielte Beeinflussung der Stabilität von gerührten Suspensionen das Verständnis über die beim Clustering wie auch bei der Kollision und Agglomeration von Partikeln wirkenden mehrskaligen Mechanismen unabdingbar.

Der folgende Abschnitt gibt einen Überblick über die in der Literatur zur direkten numerischen Simulation von Clustering-, Kollisions- und Agglomerationsprozessen verfügbaren Modellierungsansätze und fasst wesentliche Ergebnisse vorangegangener Studien zusammen. Anschließend werden in Abschnitt 1.2 die Ziele dieser Arbeit formuliert und in Abschnitt 1.3 die Gliederung dieser Arbeit erläutert.

## 1.1 Stand des Wissens

Im Rahmen der direkten numerischen Simulation (DNS) wird das zu analysierende Strömungsgebiet fein genug räumlich diskretisiert, um die kleinsten turbulenten Wirbelstrukturen mit Hilfe des Rechengitters detailliert zu erfassen. Die DNS homogener isotroper Turbulenz geht beispielsweise auf Arbeiten von Orszag & Patterson (1972) und Rogallo (1981) zurück. In dieser idealisierten Strömungsform können die turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten des Fluids sowohl anhand experimentell ermittelter Energiespektren (Comte-Bellot & Corrsin 1971) deterministisch modelliert (Siggia 1981; Pumir 1994; Overholt & Pope 1998) als auch durch gekoppelte Zufallsprozesse stochastisch angeregt werden (Eswaran & Pope 1988; Alvelius 1999; Ten Cate *et al.* 2006).

Für die numerische Berechnung partikelbeladener Strömungen haben sich in der Literatur neben der Kontinuummethode und Diskreten-Partikel-Methode (DPM) verschiedene DNS-Methoden als wesentliche Modellierungsansätze etabliert. Bei der Kontinuummethode, auch Zwei-Fluid-Methode genannt, wird die kontinuierliche Fluidphase und die disperse Partikelphase als kontinuierliche Medien behandelt.

Unter Anwendung der DPM werden die betrachteten Teilchen als Massepunkte, im Folgenden Punktpartikel genannt, angesehen, worin die als Ein-Wege-Kopplung bezeichnete einseitige fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln zumeist auf korrelierten Beiwerten beruht. Erste Studien zum Widerstandsbeiwert verschiedenartig geformter Körper in laminaren Strömungen gehen auf Stokes (1850) zurück. Darauf aufbauend untersuchten Basset (1888), Boussinesq (1903) und Oseen (1927) die Sedimentation starrer Kugeln in ruhenden Fluiden, auf dessen Grundlage Tchen (1947) wenig später eine korrelierte Bewegungsgleichung für Punktpartikel in nicht-uniformen und instationären Strömungen entwickelte. Corrsin & Lumley (1957) sowie Maxey & Riley (1983) identifizierten Unstimmigkeiten in Tchens Erweiterung und stellten daraufhin ebenfalls Gleichungen für die Bewegung von kleinen starren Kugeln in nicht-uniformen Strömungen vor. Analog zur Zwei-Fluid-Methode wird die kontinuierliche Phase bei diesem Ansatz ebenfalls als kontinuierliches Medium behandelt, in der die Wirkung der Partikel auf das Fluid anhand von Modellen zu approximieren ist.

Im Rahmen DNS basierter Modellierungsansätze werden die Erhaltungsgleichungen für Impuls, Kontinuität und Energie der kontinuierlichen Fluidphase simultan mit den Bewegungsgleichungen der durch das Rechengitter numerisch aufgelösten Partikel gelöst. Dieses Verfahren ermöglicht eine zweiseitige fluiddynamische Fluid-Partikel-Interaktion, die in der Literatur als Zwei-Wege-Kopplung bezeichnet wird. Da bei diesem Ansatz die Partikeloberfläche direkt mit dem Fluid wechselwirkt, werden die Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzflächen detailliert erfasst und die auf

die Partikel wirkenden strömungsmechanischen Kräfte unmittelbar bestimmt. Die Modellierung aufgelöster Partikel ermöglicht ein sehr exaktes Berechnungsverfahren. Gleichwohl sind diese Simulationen rechenintensiv und im Vergleich zur DPM nur für eine geringe Partikelanzahl geeignet. In der Literatur angewandte Modellierungsansätze basieren im Wesentlichen auf der Finite-Element-Methode (Feng *et al.* 1994), Lattice-Boltzmann-Methode (Ladd 1994a; Ladd 1994b), Fiktive-Domain-Methode (Glowinski *et al.* 2001) und Immersed-Boundary-Methode (Feng & Michaelides 2005).

In turbulenten Strömungen können Partikel der wirbelbehafteten Strömung des Fluids aufgrund ihrer Trägheit nur partiell folgen. Die daraus hervorgehende Inhomogenität in der räumlichen Verteilung der Partikel, in der Literatur häufig als bevorzugte Konzentration bezeichnet, ist mittels verschiedener Messverfahren qualitativ wie auch zum Teil quantitativ detektierbar (Eaton & Fessler 1994; Salazar *et al.* 2008; De Jong *et al.* 2010) und resultiert aus der Wechselwirkung der Partikel mit den turbulenten Wirbeln des zugrundeliegenden Trägerfluids. Als Folge dessen neigen träge Partikel dazu, in Regionen mit geringer Wirbelstärke sowie hoher Dehnungsrate zu akkumulieren (Wang & Maxey 1993). Dies führt unter bestimmten Bedingungen zur Bildung von Clustern, die in diesem Kontext als Regionen mit signifikant höherer Teilchenkonzentration verstanden werden, die wiederum von Regionen mit geringerer Konzentration umgeben sind (Squires & Eaton 1991).

Cluster können sich sowohl in homogener als auch in inhomogener Turbulenz bilden. Das Phänomen des Clustering von trägen Partikeln in inhomogenen turbulenten Strömungen ist beispielsweise durch den Effekt der Turbophorese erklärbar (Reeks 1983). In homogener Turbulenz beruht das Clustering infolge einer gleichverteilten Turbulenzintensität nicht auf der turbulenten Partikelmigration sondern auf der Interaktion der Teilchen mit den kohärenten Wirbelstrukturen (Maxey 1987). Die einfachste und am besten studierte Turbulenzform ist die statistisch homogene isotrope Turbulenz in inkompressiblen Fluiden, in der die kleinskaligen Wirbelstrukturen sowohl für die Dissipation des Fluids als auch für das Clustering der Partikel verantwortlich sind (Sundaram & Collins 1997; Bec *et al.* 2005; Fede & Simonin 2006; Yoshimoto & Goto 2007).

Die physikalischen Mechanismen für die bevorzugte Konzentration sowie das Clustering träger Teilchen in homogener isotroper Turbulenz unter Vernachlässigung der Gravitation sind auf strömungsinduzierte Turbulenz-Partikel- und kollisionsinduzierte Partikel-Partikel-Wechselwirkungen zurückzuführen. Auf Basis neuerer Untersuchungen wurden spezifische Clusteringmechanismen wie der Schlingen-Effekt (Falkovich *et al.* 2002), Kaustik-Effekt (Wilkinson & Mehlig 2005) und Sweep-Stick-Mechanismus (Coleman & Vassilicos 2009) identifiziert, die im Wesentlichen auf einer Beschreibung der strömungsinduzierten Relativgeschwindigkeit träger Partikelpaare beruhen. Darüber hinaus wird das Clustering von Teilchen durch weitere Faktoren wie den

Volumenanteil der dispersen Phase sowie die Ab- und Anwesenheit von Partikel-Partikel-Kollisionen beeinflusst (Laviéville *et al.* 1995; Sundaram & Collins 1997).

In den vergangenen Jahren wurden eine Vielzahl an Methoden entwickelt, um die bevorzugte Konzentration respektive das Clustering von Partikeln in turbulenten Strömungen zu identifizieren, charakterisieren und quantifizieren (siehe Monchaux *et al.* (2012) und darin aufgeführte Literaturstellen). Die wohl am häufigsten angewandte Methode zur qualitativen Analyse des Clustering ist die Visualisierung suspendierter Teilchen (Reade & Collins 2000; Bec 2005; Yoshimoto & Goto 2007).

Des Weiteren lässt sich die statistische Verteilung der lokalen Partikelanzahldichte nutzen, um die relative Neigung der Partikel zur Entmischung und folglich zur bevorzugten Konzentration zu messen. Die Segregation der dispersen Phase wird in diesem Zusammenhang mittelbar durch die globale Akkumulation der Partikel quantitativ bestimmt, worin die resultierende Partikelanzahlverteilung mit einer zufälligen Poisson-Verteilung verglichen wird (Fessler *et al.* 1994). Die fraktale Dimension einer Verteilung von Partikeln im metrischen Raum kann mit Hilfe verschiedener Maßzahlen berechnet werden. Hierzu zählen zum Beispiel die ersten drei verallgemeinerten Dimensionen (Hentschel & Procaccia 1983), die Kapazitätsdimension (Grassberger 1983), die Informationsdimension (Kolmogorov 1959), die Korrelationsdimension (Grassberger & Procaccia 1983) sowie die Kaplan-Yorke-Dimension (Eckmann *et al.* 1986) unter Anwendung der Lyapunov-Exponenten. Nach Monchaux *et al.* (2012) hat sich die Korrelationsdimension basierend auf dem von Grassberger & Procaccia (1984) eingeführten Berechnungsalgorithmus als skalare Maßzahl für die fraktale Dimension in der Literatur durchgesetzt. Die Korrelation zweier Partikel als Funktion ihres Separationsabstandes bietet darüber hinaus die Möglichkeit, das Clustering von Partikeln über mehrere Skalen hinweg zu analysieren. Hierbei eignet sich insbesondere die radiale Korrelation von Partikelpaaren zur statistischen Beschreibung der Verteilung inhomogener Konzentrationsfelder (Sundaram & Collins 1997; Reade & Collins 2000; Pozorski & Apte 2009).

Weder die radiale Partikelpaarkorrelation noch die Korrelationsdimension und Akkumulation von Partikeln gewähren jedoch einen Einblick in die räumliche Struktur von Partikelclustern. Ferner können qualitativ abweichende Clusterstrukturen ähnliche Absolutwerte der Maßzahl annehmen (Calzavarini *et al.* 2008). Diese Mehrdeutigkeit lässt sich unter Zuhilfenahme der Minkowski-Funktionale auflösen, die eine morphologische Analyse von Partikelverteilungen ermöglicht (Hadwiger 1957; Mecke & Wagner 1991; Thompson 1996). Die Minkowski-Funktionale wurden bereits zur Charakterisierung der großräumigen Verteilung von Galaxien (Kerscher *et al.* 1997) und anderen Strukturen (Mecke *et al.* 1994) im Universum sowie zur Beschreibung der Morphologie von Blasen- und Partikelclustern in turbulenten Strömungen (Calzavarini *et al.* 2008) angewandt.

Zusammenfassend zeigen Bec *et al.* (2007) anhand numerischer Analysen in homogener isotroper Turbulenz, dass die Bewegung von Partikeln unterhalb der kleinsten charakteristischen Turbulenzskalen durch die Dehnung und dissipativen Dynamiken des Fluids bestimmt wird. Aufgetragen über der Partikel-Stokes-Zahl erreicht die Korrelationsdimension ein globales Minimum bei Eins, welches als maximales Partikelclustering interpretiert wird (Bec *et al.* 2007). Unter Zuhilfenahme des phänomenologischen Verhaltens der mittleren Wirbelstärke und Dehnungsrate des Fluids an der Position der Partikel lässt sich das maximale Clustering im Sinne einer optimalen Ansprechzeit der Partikel interpretieren, die entgegen der wirbelförmigen Strömungsstrukturen korreliert. Dieser Effekt ist für die Akkumulation von Partikeln und somit für die Bildung von Inhomogenitäten in ihrer räumlichen Verteilung verantwortlich (Bec *et al.* 2007).

Die Kollision von Teilchen lässt sich mit Hilfe deterministischer (O'Rourke 1981; Tanaka & Tsuji 1991; Lun & Liu 1997) wie auch stochastischer Kollisionsmodelle (Babovsky 1989; Oesterlé & Petitjean 1993; Sommerfeld 2001) beschreiben. Im Vergleich zur deterministischen Betrachtungsweise kollidieren beim stochastischen Ansatz reale Partikel mit fiktiven Teilchen, worin die Eigenschaften der fiktiven Kollisionspartner auf korrelierten Zufallsprozessen beruhen. Im Gegensatz dazu werden beim deterministischen Ansatz Kollisionen zwischen den Partikeln durch häufiges prüfen eines Kollisionskriteriums direkt aufgelöst.

In partikelbeladenen Strömungen wird der Transport einzelner Teilchen sowohl vom instationären Strömungsfeld als auch von Partikel-Partikel-Kollisionen direkt beeinflusst. Sundaram & Collins (1997), Wang *et al.* (1998) und Février *et al.* (2001) untersuchten beispielsweise mit Hilfe deterministischer Berechnungsansätze die interpartikuläre Wechselwirkung in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Feststoffteilchen. Die gegenwärtigen Entwicklungen zur turbulenzinduzierten Partikel-Partikel-Wechselwirkung träger Teilchen werden von Wang *et al.* (2009) zusammengefasst.

Die interpartikuläre Wechselwirkung zwischen kollidierenden Teilchen lässt sich darüber hinaus durch verschiedene Approximationen analytisch beschreiben. Saffman & Turner (1956) entwickelten beispielsweise eine Näherung zur Vorhersage der Kollisionsrate monodisperser Tropfen in atmosphärischer Turbulenz. Da in diesem Ansatz der Partikeldurchmesser deutlich kleiner als das kleinste turbulente Längenmaß ist, können die angenommenen Tropfen der isotropen Fluidturbulenz uneingeschränkt folgen. Demgegenüber basiert die von Abrahamson (1975) entwickelte Approximation auf der kinetischen Gastheorie und behandelt die Kollisionsrate träger Partikel in hochintensiver Turbulenz, in der der Teilchentransport gänzlich unkorreliert gegenüber der Fluidströmung ist. Ein weiteres von Kruijs & Kusters (1997) vorgeschlagenes Modell stellt eine Erweiterung der von Williams & Crane (1983) eingeführten Formulierung dar und bezieht im Gegensatz zu Saffman & Turner (1956) und Abrahamson

(1975) die Relativgeschwindigkeit suspendierter Teilchen in die Kollisionsrate ein. Auf Grundlage dieser Überlegungen entwickelten Mei & Hu (1999), Reade & Collins (2000), Alipchenkov & Zaichik (2001), Wang *et al.* (2005) und Zaichik *et al.* (2006) wenig später allgemeinere analytische Näherungen zur Beschreibung der Kollisionsrate von Partikeln in homogener isotroper Turbulenz.

Trotz der rasanten Weiterentwicklung vielfältiger Messtechniken wie die Neutronen- und Röntgenstreuung ist die experimentelle Erfassung einzelner Mechanismen während der Entstehungsphase von Agglomeraten nur schwer realisierbar. Durch den Einsatz empirischer wie auch numerischer Methoden ist es allerdings möglich, bestimmte Einflussfaktoren getrennt voneinander unter definierten Randbedingungen zu analysieren.

Für die Vorhersage der Agglomerationsrate von Partikeln existieren in der Literatur eine Vielzahl semiempirischer Methoden, die bis zu Von Smoluchowski (1917) zurückreichen und zumeist auf einer mesos- respektive mikroskopischen Betrachtungsweise der Teilchen beruhen. Hierzu zählen unter anderem die Brownsche-Dynamik und Molekulardynamik (Chen & Kim 2004), Monte-Carlo-Methoden (Schmid *et al.* 2004; Kim *et al.* 2010), die dissipative Partikeldynamik und das Fluid-Partikel-Modell (Dzwiniel *et al.* 2002) sowie die Stokessche-Dynamik (Brady & Bossis 1988; Harshe *et al.* 2010; Vanni & Gastaldi 2011).

Im Hinblick auf die numerische Modellierung der Agglomeration von Partikeln wird häufig zwischen Eulerschen und Lagrangeschen Ansätzen unterschieden. Zur Gruppe der Eulerschen Modellierungsansätze zählen zum Beispiel die Populations-Bilanz-Gleichungen (PBE), die in diskretisierter (Kim & Kramer 2005) wie auch kontinuierlicher Form (Zucca *et al.* 2006) Anwendung finden und kurzreichweitige Phänomene wie das nach Derjagin-Landau-Verwey-Overbeek benannte DLVO-Wechselwirkungspotential berücksichtigen (Melis *et al.* 1999). Unter Einsatz der Populations-Bilanz-Gleichungen wurde unter anderem die Agglomeration von Partikeln in kolloidalen Suspensionen einschließlich Bruch- und Restrukturierungseffekten (Sandkühler *et al.* 2003; Soos *et al.* 2006) sowie die initiale Agglomeration von Primärpartikeln in turbulenten Strömungen (Flesch *et al.* 1999; Bäbler *et al.* 2010) analysiert.

Für die numerische Berechnung der Agglomeration von Partikeln in einer Lagrangeschen Betrachtungsweise wird häufig die Diskrete-Element-Methode (DEM) angewandt (Li *et al.* 2011). Diese Methode beschreibt das mechanische Verhalten von diskret unterteilten Strukturen wie granulare Medien auf Grundlage von Kontaktmodellen. Unter Anwendung der DEM analysierten Peng *et al.* (2010) beispielsweise Agglomerations- und Bruchvorgänge in bewegten Agglomeraten durch Annahme von Normalkräften gemäß DLVO-Theorie. Komplexere Kontaktmodelle mit Normal- und Tangentialkräften (Becker *et al.* 2009) sowie Feder-Dämpfer-Systemen (Shrimpton

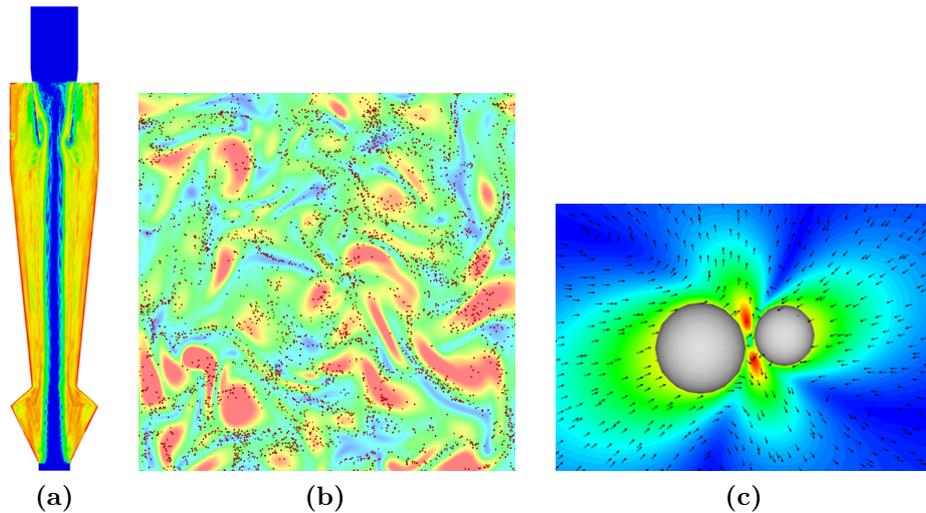
& Danby 2012) ermöglichen darüber hinaus eine Restrukturierung agglomerierter Primärpartikel infolge von Biegung und Torsion. Durch Kopplung der DEM mit Strömungslösern lassen sich zudem strömungsinduzierte Effekte wie der Transport von Primärpartikeln und Agglomeraten in Fluidturbulenz abbilden.

Unter Anwendung stochastischer wie auch deterministischer Ansätze ist es möglich, die Agglomeration von Partikeln in die Diskrete-Partikel-Methode zu integrieren. Die von Ho & Sommerfeld (2002) sowie Guo *et al.* (2004) vorgeschlagenen stochastischen Agglomerationsmodelle betrachten zum Beispiel ein in der Strömung entstandenes Agglomerat nach dem Anlagerungsvorgang weiterhin als einzelne, volumenäquivalente Kugel. Die genaue Lage der im Agglomerat gebundenen Primärpartikel wird hierbei nicht einbezogen. Um die Morphologie der entstandenen Agglomerate evaluieren zu können, erweiterten Stübing & Sommerfeld (2012) und Lipowsky (2013) das von Ho & Sommerfeld (2002) eingeführte Modell um ein zusätzliches Modul zur Speicherung der Agglomerationshistorie. Ein von Schutte *et al.* (2013) kürzlich vorgestellter DPM basierter Ansatz erlaubt zudem die deterministische Beschreibung strömungsinduzierter Anlagerungsprozesse an frei im Raum bewegliche Agglomeratstrukturen.

Großes Potential bietet darüber hinaus die direkte numerische Simulation aufgelöster Agglomerate. In den letzten Jahren wurde beispielsweise die Lattice-Boltzmann-Methode angewandt, um verschiedene Strömungswiderstände für im Raum fixierte Agglomeratstrukturen zu berechnen (Binder *et al.* 2006; Binder *et al.* 2009; Derksen & Eskin 2011; Dietzel & Sommerfeld 2013). Da der Strömungswiderstand jedoch von der Orientierung der Agglomerate abhängig ist, gelang es bisher nicht, die ermittelten Widerstandsbeiwerte durch einfache Korrelationen zu verallgemeinern. Die DNS basierte Agglomeration aufgelöster Partikel in homogener isotroper Turbulenz wurde nach Kenntnis des Autors bislang lediglich von Derksen (2013) berechnet. In den vorgestellten LBM-Analysen wurde die Morphologie der entstandenen Agglomerate jedoch nicht charakterisiert.

## 1.2 Zielsetzung der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die skalenübergreifende Analyse von Mechanismen, die das Clustering sowie die Kollision und Agglomeration von Feststoffteilchen in laminaren und turbulenten Strömungen maßgeblich beeinflussen. In diesem Zusammenhang sind 1) der Effekt der Partikelträgheit sowie der Volumenanteil der dispersen Phase auf das mesoskalige Bewegungsverhalten der Teilchen, 2) die fluiddynamische Wechselwirkung bei der Annäherung von Partikeln kurz vor ihrer Kollision und 3) der kollisions- und strömungsinduzierte Transport von Agglomeraten auf der Mikroskala von besonderem Interesse. Für die durchzuführenden Untersuchungen wird ein konsistenter Berech-



**Abb. 1.1.** Multiskalenanalyse partikulärer Strömungen: (a)  $\mathcal{O}(\sim 2 \text{ m})$  Makroskalige RANS-Rechnung der mittleren Konzentration von Punktpartikeln in einem Zyklon (Lipowsky 2013), (b)  $\mathcal{O}(\sim 10 \text{ cm})$  DNS des Clustering von einzelnen Punktpartikeln in Fluidturbulenz auf der Mesoskala und (c)  $\mathcal{O}(\sim 1 \text{ mm})$  mikroskalige DNS der fluiddynamischen Wechselwirkung zwischen zwei sich annähernden Partikeln mit numerisch aufgelösten Oberflächen.

nungsansatz angestrebt, der es erlaubt, sowohl die bevorzugte Konzentration der Teilchen unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Stößen auf der Mesoskala als auch die Kollision und Agglomeration von Partikeln auf mikroskopischer Partikelebene möglichst detailliert numerisch zu simulieren. Die in diesem Kontext definierten meso- und mikroskaligen Betrachtungsebenen der Teilchen werden in Abbildung 1.1 anhand dreier numerisch berechneter Zweiphasenströmungen verdeutlicht.

Die durchzuführenden Untersuchungen sollen zu einem besseren Verständnis der beim Partikelclustering sowie bei der Kollision und Agglomeration von Teilchen zugrundeliegenden Elementarprozesse beitragen, die in den Studien dieser Arbeit durch strömungsinduzierte Wechselwirkungen geprägt sind. Mit Hilfe direkter numerischer Simulationen ist zu erarbeiten, in welchem Ausmaß das Clustering und die Kollisionsrate von Teilchen durch die Trägheit und den Volumenbruch der dispersen Phase beeinflusst wird. Darüber hinaus ist zu untersuchen, inwieweit lokale Phänomene wie die relative Bewegung benachbarter Partikel sowie die bevorzugte Konzentration von Teilchen durch Partikel-Partikel-Kollisionen berührt werden. Dieses Verständnis ist insbesondere für die Weiterentwicklung stochastischer Kollisionsmodelle, die in deutlich effizienteren Berechnungsansätzen zur Analyse technischer Zweiphasenströmungen zum Einsatz kommen, von großer Bedeutung. Des Weiteren ist zu überprüfen, ob die strömungsinduzierte Annäherung aufgelöster sphärischer und nicht-sphärischer Partikel durch kurzreichweitige fluiddynamische Wechselwirkungen beeinflusst wird.

In diesem Zusammenhang sind die zu erwartenden Verdrängungseffekte des Fluids kurz vor Partikel-Partikel-Kollisionen von speziellem Interesse. Abschließend ist ein numerisches Berechnungsverfahren zu entwickeln, mit dessen Hilfe die Entstehungsphase von Agglomeraten und die daraus hervorgehenden Morphologien quantifizierbar sind.

Das in dieser Arbeit angewandte Berechnungsprogramm basiert auf der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) und erlaubt die direkte numerische Simulation von Fluid-Feststoff-Strömungen. Die LBM zeichnet sich gegenüber anderen DNS basierten Methoden durch den lokalen Charakter der Modellgleichungen sowie die direkte und effiziente Berechnung der auf die Partikel wirkenden Kräfte aus, die auf ein Zurückprallen von Fluidteilchen an der Partikeloberfläche zurückzuführen sind. Hölzer & Sommerfeld (2009), Hölzer & Sommerfeld (2010) und Dietzel & Sommerfeld (2013) demonstrierten die Anwendbarkeit des Strömungslösers anhand der Umströmung sphärischer und nicht-sphärischer Teilchen.

Für die angestrebten Untersuchungen ist eine Erweiterung des LBM basierten Berechnungsprogramms wie folgt erforderlich: Da die mesoskopische Betrachtung zehntausender Einzelpartikel mit direkten numerischen Simulationen aufgrund des erheblichen Rechenaufwands derzeit technisch nicht möglich ist, sollte die Analyse des Clustering- und Kollisionsverhaltens von Partikeln in turbulenten Strömungen unter Anwendung des DPM-Ansatzes erfolgen, worin die Teilchen vereinfacht als Massepunkte modelliert werden. Die beabsichtigten Berechnungen erfordern zudem eine deterministische Behandlung von Partikel-Partikel-Kollisionen sowie geeignete Methoden zur Charakterisierung der entstandenen Partikelcluster. Um äußere Einflüsse auf die partikelbeladene Strömung ausschließen zu können, wird für den instationären Transport der Teilchen homogene isotrope Turbulenz als idealisierte Strömungsform unter Berücksichtigung periodischer Randbedingungen angestrebt.

Die Analyse des Kollisions- und Agglomerationsverhaltens von Einzelpartikeln sollte auf mikroskaliger Teilchenebene mit Hilfe aufgelöster Partikeloberflächen erfolgen, um die Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzen und die fluiddynamische Wechselwirkung sowohl zwischen Fluid und Partikeln als auch zwischen agglomerierenden Teilchen detailliert zu erfassen. Zu diesem Zweck sind Bewegungsgleichungen in die LBM zu integrieren, die eine Translation und Rotation aufgelöster Primärpartikel und Agglomerate in zunächst laminaren Strömungen erlauben. Neben einer neu zu entwickelnden deterministischen Behandlung der Agglomeration von Partikeln sind in diesem Zusammenhang geeignete Strukturparameter heranzuziehen, um die Morphologie der entstandenen Agglomerate zu charakterisieren. Darüber hinaus ist eine parallelisierte Berechnung einzelner LBM-Sequenzen mittels geeigneter Verfahren wie OpenMP (Chapman *et al.* 2007), MPI (Gropp 2007) und CUDA (Yong & Brenner 2013) in Betracht zu ziehen.

### 1.3 Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt aufgebaut: Kapitel 2 beinhaltet einen kurzen Überblick über die Grundgleichungen der Lattice-Boltzmann-Methode zur Berechnung des Fluids, eine Verfahrensbeschreibung zur Anregung homogener isotroper Turbulenz auf Grundlage der Pseudo-Spektral-Methode und zwei Modellierungsansätze für die Lagrangesche Bewegung von Partikeln auf meso- und mikroskaliger Teilchenebene. Darüber hinaus werden vier Auswertungsmethoden zur Charakterisierung des Clustering sowie die deterministische Modellierung der Kollision und Agglomeration von Teilchen vorgestellt. Anschließend wird in Kapitel 3 der LBM basierte Strömungslöser anhand der direkten numerischen Simulation einer laminaren Kanalströmung mit rückwärtsgewandter Stufe sowie dreier turbulenter Strömungsfelder validiert. In Kapitel 4 folgt die Analyse des Clustering- und Kollisionsverhaltens von Punktpartikeln in homogener isotroper Turbulenz auf der Mesoskala. In dieser Studie wird das Clustering von Teilchen anhand der globalen Partikelakkumulation, Korrelationsdimension, radialen Partikelpaarkorrelation sowie der Minkowski-Funktionale bewertet und der Einfluss verschiedener Feststoffvolumenanteile auf die mittlere Kollisionszeit und die Relativgeschwindigkeit kollidierender Partikel als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl charakterisiert. Die fluiddynamische Wechselwirkung einzelner Partikel und Partikelpaare wird in Kapitel 5 auf der Mikroskala analysiert. Um die zu diesem Zweck entwickelten und implementierten Berechnungsmodelle für aufgelöste Teilchen evaluieren zu können, werden vier numerisch berechnete Standardtestfälle ausgewertet und mit verfügbaren Mess- und Simulationsdaten verglichen. In Kapitel 6 wird zudem das mikroskalige Transport- und Agglomerationsverhalten von Primärpartikeln und Agglomeraten mit numerisch aufgelösten Oberflächen in verschiedenen laminaren Strömungen untersucht. Die dargelegten Studien umfassen einen Vergleich der Umströmung im Raum fixierter Agglomerate mit Finite-Element-Simulationen, die Sedimentation und Agglomeration von Teilchen in einem ruhenden Fluid und den Transport agglomerierender Primärpartikel in ebenen Scherschichten. Die Morphologie der entstandenen Agglomerate wird hierbei mit Hilfe verschiedener Strukturparameter quantifiziert. Abschließend werden in Kapitel 7 die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick über denkbare Folgeuntersuchungen gegeben.

## 2 Numerische Methoden

Das Ziel dieser Arbeit ist die skalenübergreifende Analyse des Clustering-, Kollisions- und Agglomerationsverhaltens von Feststoffteilchen in laminaren und turbulenten Zweiphasenströmungen. Zu diesem Zweck wurden die in diesem Kapitel vorgestellten Methoden in eine vorhandene und auf der Programmiersprache C++ basierende Lattice-Boltzmann-Methode implementiert (Teike 2010; Schomburg 2010; Weickert 2010; Schmidt 2011; Dietzel & Sommerfeld 2013), deren Modellierung im Abschnitt 2.1 kurz zusammengefasst wird. Die direkte numerische Simulation homogener isotroper Turbulenz beruht auf dem in Abschnitt 2.2 dargelegten Anregungsverfahren. In den vorliegenden Untersuchungen wird der Transport von Teilchen in verschiedenen Strömungs- und Turbulenzstrukturen anhand zweier Betrachtungsweisen analysiert. Während das in Abschnitt 2.3 eingeführte Lagrangesche Tracking von Punktpartikeln auf mesoskaliger Teilchenebene anzusiedeln ist, erfolgt die in Abschnitt 2.4 vorgestellte Modellierung der Lagrangeschen Bewegung sphärischer wie auch nicht-sphärischer Partikel, deren Oberfläche durch das Rechengitter numerisch aufgelöst ist, auf mikroskaliger Teilchenebene. Die bevorzugte Konzentration in Fluidturbulenz suspendierter Punktpartikel wird unter Einsatz der in Abschnitt 2.5 dargelegten Auswertungsmethoden charakterisiert. Abschließend werden die in den Berechnungen angewandten deterministischen Kollisions- und Agglomerationsmodelle in den Abschnitten 2.6 und 2.7 präsentiert.

### 2.1 Lattice-Boltzmann-Methode

Die Berechnung der dreidimensionalen Fluidströmung erfolgt in dieser Arbeit auf Grundlage der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM). Diese Methode basiert im Wesentlichen auf einer stark vereinfachten Beschreibung der Mikrodynamik einzelner Fluidmoleküle. Die Interaktion zwischen den Fluidteilchen wird dabei nicht direkt aufgelöst, sondern durch die Boltzmann-Gleichung modelliert.

#### 2.1.1 Boltzmann-Gleichung

Der grundlegende Parameter in der Boltzmann-Statistik ist die Verteilungsfunktion  $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ . Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein fiktives Fluidpartikel an einem Ort  $\mathbf{x}$  mit der Geschwindigkeit  $\boldsymbol{\xi}$  zum Zeitpunkt  $t$  anzutreffen. Die Masse  $m$  der zugrundeliegenden Fluidteilchen, die sich zu der Zeit  $t$  in den Volumenelementen

$(d\mathbf{x})^3$  und in den Geschwindigkeitselementen  $d\boldsymbol{\xi}$  befindet, ist wie folgt definiert:

$$m = \iint f \, d\mathbf{x} \, d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1)$$

Aus den Momenten der Verteilungsfunktion lassen sich darüber hinaus lokale makroskopische Größen des Fluids wie Dichte  $\rho$ , Impuls  $\rho\mathbf{u}$  und Energie  $\rho E$  ableiten:

$$\rho = \int f \, d\boldsymbol{\xi} \quad (2.2)$$

$$\rho\mathbf{u} = \int \boldsymbol{\xi} f \, d\boldsymbol{\xi} \quad (2.3)$$

$$\rho E = \frac{m}{2} \int (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 f \, d\boldsymbol{\xi} \quad (2.4)$$

Im Fall einer isothermen Strömung, wie sie in dieser Arbeit angenommen wird, ist Gleichung (2.4) vernachlässigbar. Die zeitliche und räumliche Entwicklung der Verteilungsfunktion wird durch die Boltzmann-Gleichung unter Berücksichtigung von Kollisionen zwischen den Fluidelementen beschrieben:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{a}^{\text{ext}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \Omega(f) \quad (2.5)$$

worin  $\mathbf{a}^{\text{ext}}$  eine Beschleunigung, hervorgerufen durch externe Volumenkräfte, kennzeichnet (Crouse 2003). In den vorliegenden Untersuchungen wird Gleichung (2.5) mit Hilfe des Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)-Kollisionsoperators  $\Omega$  unter Anwendung der Einzelzeitrelaxation gelöst (Bhatnagar *et al.* 1954):

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}}) \quad (2.6)$$

Demnach erfolgt die Relaxation der Verteilungsfunktion zur Gleichgewichtsverteilungsfunktion  $f^{\text{eq}}$  bei einer konstanten Relaxationszeit  $\tau$ . Dies führt zu der nachstehenden Form der Boltzmann-Gleichung unter Beachtung externer Volumenkräfte:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla + \mathbf{a}^{\text{ext}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}}) \quad (2.7)$$

Die im Folgenden definierte Gleichgewichtsverteilungsfunktion entspricht in ihrer Form einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung:

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi c_S^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2c_S^2}\right) \quad (2.8)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{u}$  die lokale Geschwindigkeit des Fluids. Wie von Wolf-Gladrow (2000) gezeigt, erfüllt die Gleichgewichtsverteilungsfunktion die thermische und die kalorische Zustandsgleichung für ideale Gase. Mittels Multiskalenexpansion, auch als

Chapman-Enskog-Analyse bekannt, lässt sich demonstrieren, dass unter Anwendung der Beziehung:

$$\eta = \tau p = \tau c_S^2 \rho \quad (2.9)$$

die Boltzmann-Gleichung (2.7) mit BGK-Näherung auf makroskopischer Ebene sowohl die Kontinuitätsgleichung als auch die Navier-Stokes-Gleichung erfüllt (Wolf-Gladrow 2000). Gemäß Gleichung (2.9) kann die dynamische Viskosität  $\eta$  als Funktion des Drucks  $p$  sowie der Schallgeschwindigkeit  $c_S$  und der Fluidichte  $\rho$  definiert werden.

### 2.1.2 D3Q19-Modell

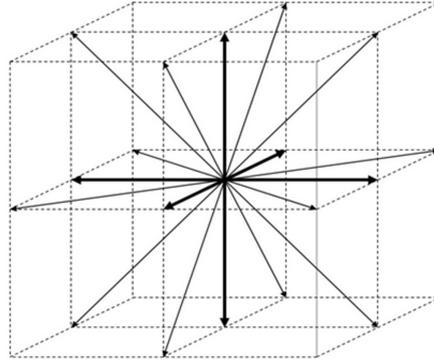
Im Rahmen der Lattice-Boltzmann-Methode bewegen sich fiktive Fluidelemente, repräsentiert durch Verteilungsfunktionen, entlang eines Gitters, an dessen Knoten sie miteinander kollidieren. Neben der räumlichen Diskretisierung, realisiert durch das numerische Gitter, wird bei der LBM zuzüglich die Geschwindigkeit sowie die Zeit diskretisiert. Während eines Zeitschrittes dürfen die Verteilungsfunktionen nur entlang der diskreten Gitterrichtungen zu einem der benachbarten Gitterknoten sich propagieren. Die Substitution der kontinuierlichen Geschwindigkeiten  $\boldsymbol{\xi}$  in Gleichung (2.7) durch diskrete  $\boldsymbol{\xi}_{\sigma i}$ , angedeutet durch den Index  $\sigma i$ , führt zu der diskreten Boltzmann-Gleichung:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \mathbf{a}_{\sigma i}^{\text{ext}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}_{\sigma i}} \right) f_{\sigma i} = -\frac{1}{\tau} (f_{\sigma i} - f_{\sigma i}^{\text{eq}}) \quad (2.10)$$

mit  $f_{\sigma i} = f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)$ . Die Anzahl der verfügbaren diskreten Geschwindigkeitsrichtungen  $\sigma i$ , welche die Gitterknoten miteinander verbinden, hängt von dem angewandten LBM-Modell ab. In dieser Arbeit findet das D3Q19-Modell Anwendung. Es gilt für dreidimensionale Gitter und stellt je Gitterknoten 19 Propagationsrichtungen bereit (siehe Abbildung 2.1). Diese Richtungen lassen sich unterteilen in sechs vertikale und horizontale Geschwindigkeitsvektoren ( $\sigma = 1$ ), zwölf diagonale Geschwindigkeitsvektoren ( $\sigma = 2$ ) und eine Richtung für die Null-Geschwindigkeit im Ursprung des Gitterknotens ( $\sigma = 0$ ). Die Lattice-Boltzmann-Gleichung ergibt sich schließlich durch Diskretisierung von Zeit und Raum mit  $\Delta t$  und  $\Delta \mathbf{x} = \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \Delta t$ :

$$f_{\sigma i}^{**} - f_{\sigma i} = -\frac{\Delta t}{\tau} \underbrace{(f_{\sigma i} - f_{\sigma i}^{\text{eq}})}_{f_{\sigma i}^{\text{neq}}} + \Delta t F_{\sigma i}^{\text{ext}} \quad (2.11)$$

in der  $f_{\sigma i}^{**} = f_{\sigma i}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t)$  einer diskreten Verteilungsfunktion am Ende der Propagation entspricht und  $F_{\sigma i}^{\text{ext}}$  einen diskreten Kraftterm für externe Volumenkräfte kennzeichnet. Der Klammerausdruck in Gleichung (2.11) entspricht dem Nicht-Gleichgewichtsanteil der diskreten Verteilungsfunktion mit  $f_{\sigma i}^{\text{neq}} = f_{\sigma i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}, t)$ .



**Abb. 2.1.** Richtungen der 19 Geschwindigkeitsvektoren in dem D3Q19-Modell.

Die Lattice-Boltzmann-Gleichung unterteilt sich in einen Transportschritt (Propagation) - linke Seite von Gleichung (2.11) - und in einen Kollisionsschritt (Relaxation) - rechte Seite von Gleichung (2.11). Zunächst werden während der Relaxation Informationen auf jedem Gitterknoten entgegen einer Gleichgewichtsverteilung relaxiert und im Anschluss entlang der jeweiligen Gitterrichtungen transportiert. Die diskrete Gleichgewichtsverteilungsfunktion  $f_{\sigma i}^{\text{eq}}$  und ihre entsprechenden Wichtungsfaktoren  $\omega_{\sigma i}$  sind für das D3Q19-Modell wie folgt definiert:

$$f_{\sigma i}^{\text{eq}} = \omega_{\sigma i} \rho \left( 1 + \frac{3 \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9 (\boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u})^2}{2 c^4} - \frac{3 \mathbf{u}^2}{2 c^2} \right) \quad (2.12)$$

$$\omega_{\sigma i} = \begin{cases} 1/3 & \text{für } \sigma = 0, i = 1 \\ 1/18 & \text{für } \sigma = 1, i = 1 \dots 6 \\ 1/36 & \text{für } \sigma = 2, i = 1 \dots 12 \end{cases} \quad (2.13)$$

Die Gitterkonstante  $c$  entspricht dem Verhältnis aus räumlicher und zeitlicher Diskretisierung,  $\Delta x$  und  $\Delta t$ , und steht in direkter Beziehung zu der Schallgeschwindigkeit  $c_S$  des Fluids:

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \sqrt{3} c_S \quad (2.14)$$

Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.2) und (2.3) ergeben sich aus den Momenten der diskreten Verteilungsfunktionen lokale Fluideigenschaften wie Dichte und Impuls:

$$\rho = \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i} \quad (2.15)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\sigma} \sum_i \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} f_{\sigma i} \quad (2.16)$$

worin  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  die lokale Geschwindigkeit des Fluids abbildet. Darüber hinaus leitet sich der lokale Druck  $p = p(\mathbf{x}, t)$  von der lokalen Dichte  $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$  und der Schallgeschwindigkeit  $c_S$  ab:

$$p = c_S^2 \rho = \frac{1}{3} \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \rho \quad (2.17)$$

Die nachfolgende Gleichung beschreibt die Beziehung zwischen der dynamischen Viskosität  $\eta$  und der Relaxationszeit  $\tau$  des Lattice-Boltzmann-Schemas:

$$\eta = \frac{1}{6} \rho c^2 (2\tau - \Delta t) \quad (2.18)$$

Unter Anwendung von Gleichung (2.18) lässt sich der Fluidzeitschritt  $\Delta t$  für die Lösung der Lattice-Boltzmann-Gleichung (2.11) direkt berechnen. Neben der unteren Grenze des Relaxationszeitparameters,  $\tau/\Delta t > 0,515$ , wird die numerische Stabilität des Verfahrens durch die Obergrenze der Mach-Zahl,  $Ma = |\mathbf{u}|/c_S < 0,2$ , limitiert. Je nach Auflösung des numerischen Gitters kann die Relaxationszeit zudem die maximal realisierbare Reynolds-Zahl begrenzen.

Nähere Beschreibungen der LBM basierten Randbedingungen wie Einlass, Auslass und feste Wand können aus Hölzer (2007), Teike (2010) und Schmidt (2011) entnommen werden. Darüber hinaus beinhalten Crouse (2003) und Schomburg (2010) detaillierte Informationen über die zugrundeliegende Baumdatenstruktur.

### 2.1.3 Einbindung externer Volumenkräfte

Fluidströmungen sind für gewöhnlich internen oder externen Kräften ausgesetzt wie intermolekulare Wechselwirkungen oder Gravitation. Der Beitrag der externen Volumenkraft  $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ , der zur Veränderung der Verteilungsfunktion  $f$  beiträgt, wird in der Boltzmann-Gleichung (2.7) durch den Kraftterm  $\mathbf{a}^{\text{ext}} \cdot \partial/\partial \boldsymbol{\xi} f$  beschrieben, in der  $\mathbf{a}^{\text{ext}}$  eine externe Beschleunigung hervorgerufen durch die Kraftdichte  $\mathbf{F}^{\text{ext}}$  ist:

$$\mathbf{F}^{\text{ext}} = \rho \mathbf{a}^{\text{ext}} \quad (2.19)$$

In der Lattice-Boltzmann-Gleichung (2.11) kann dieser Term aufgrund der Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums jedoch nicht direkt Anwendung finden. Die Einbeziehung externer Kräfte in die Lattice-Boltzmann-Gleichung stellt ein fundamentales Problem der LBM dar. In der Literatur wird dabei im Wesentlichen zwischen Modellen mit modifizierter Gleichgewichtsverteilungsfunktion (Shan & Chen 1993; Shan & Doolen 1995; Buick & Greated 2000) und Modellen mit zusätzlichem Kraftterm in der Lattice-Boltzmann-Gleichung (Luo 1997; He *et al.* 1998; Marty *et al.* 1998; Luo 1998; Ladd & Verberg 2001; Shan *et al.* 2006; Kupershtokh *et al.* 2009) unterschieden.

Begründet durch die stringente Kapselung von externer Volumenkraft und Gleichgewichtsverteilungsfunktion hat sich die Anwendung eines zusätzlichen Kraftterms in der Lattice-Boltzmann-Gleichung gegenüber einer Modifizierung der Gleichgewichtsverteilungsfunktion durchgesetzt (Guo & Shu 2013). Ferner haben numerische Untersuchungen von Huang *et al.* (2011) anhand einer zweidimensionalen Taylor-Green-Wirbelströmung gezeigt, dass die oben referenzierten Kraftterm-Modelle eine vergleichbare Genauigkeit für Einphasenströmungen liefern. Aufgrund der Erweiterungsmöglichkeit zu Kollisionsoperatoren mit Mehrfachzeitrelaxation (Guo & Zheng 2008) wurde im Rahmen dieser Arbeit ein von Guo *et al.* (2002b) vorgeschlagenes Kraftterm-Modell in das Berechnungsprogramm implementiert. Der Zusammenhang zwischen der externen Volumenkraft  $\mathbf{F}^{\text{ext}}$  und dem zugehörigen diskreten Kraftterm  $F_{\sigma i}^{\text{ext}}$  ist dabei wie folgt definiert:

$$F_{\sigma i}^{\text{ext}} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \omega_{\sigma i} \left( \frac{3(\boldsymbol{\xi}_{\sigma i} - \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u})}{c^4} \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \right) \cdot \mathbf{F}^{\text{ext}} \quad (2.20)$$

Unter Berücksichtigung der ersten drei Momente des Kraftterms  $\mathbf{a}^{\text{ext}} \cdot \partial/\partial \boldsymbol{\xi} f$  basiert  $F_{\sigma i}^{\text{ext}}$  in Gleichung (2.20) auf einer Potenzreihenentwicklung von  $\boldsymbol{\xi}_{\sigma i}$  (siehe Guo *et al.* (2002b) für weiterführende Details).

## 2.2 Generierung homogener isotroper Turbulenz

Turbulente Strömungszustände bilden sich, ausgehend von einer laminaren Strömung, oberhalb einer kritischen Reynolds-Zahl durch Instabilitäten in der Grenzschicht aus (Schlichting *et al.* 2006). Mit Hilfe der direkten numerischen Simulation (DNS) lassen sich wirbelbehaftete Strukturen in der turbulenten Strömung über alle Größenskalen durch das Rechengitter numerisch auflösen. Die der mittleren Strömungsbewegung überlagerten dreidimensionalen, stochastischen Schwankungsbewegungen hängen dabei im großen Maße von den zu definierenden Anfangs- und Randbedingungen ab. Um den Einfluss von Einlass-, Auslass- und Wandrandbedingungen auf das Transportverhalten von Wirbelementen zu reduzieren, haben sich seit vielen Jahren würfelförmige Rechengebiete mit periodischen Wänden für die Analyse von Elementarprozessen in der Fachliteratur etabliert (Orszag & Patterson 1972). Aufgrund der fehlenden Produktion von turbulenter kinetischer Energie, wie etwa durch Strömungseinlässe, muss das turbulente Strömungsfeld jedoch durch stochastische Verfahren künstlich angeregt werden.

Das in dieser Arbeit verwendete Anregungsverfahren basiert auf einer von Eswaran & Pope (1988) vorgeschlagenen Pseudo-Spektral-Methode (PSM). Hierbei werden Geschwindigkeitskomponenten im Bereich kleiner Wellenzahlen durch das Hinzufügen

von Energie künstlich beschleunigt. Die auf diese Weise erzeugten großskaligen Wirbel-elemente zerfallen im weiteren Verlauf der Simulation in Form einer Energiekaskade in zunehmend kleinere Strukturen, bis sie schließlich durch viskose Kräfte vollständig dissipieren. Ausgehend von einem ruhenden Fluid bildet sich nach einiger Zeit ein statistisch stationäres Geschwindigkeitsfeld aus, worin die hinzugefügte mittlere Energie der mittleren Dissipationsrate des Fluids entspricht. Darüber hinaus sind die statistischen Eigenschaften der Strömung an jedem Ort im Berechnungsgebiet isotrop sowie homogen verteilt.

### 2.2.1 Pseudo-Spektral-Methode

Im Rahmen der PSM wird das dreidimensionale Strömungsfeld zu jedem Fluidzeitschritt von dem physikalischen Raum in den Spektralraum und wieder zurück transformiert (Eswaran & Pope 1988). Im physikalischen Raum entspricht das Rechengelände einem Würfel mit der Kantenlänge  $L$ , welcher durch  $N^3$  Gitterknoten äquidistant diskretisiert wird. Für jede Raumrichtung gilt die Beziehung  $\Delta x = L/N$ . Die Position der Gitterknoten ist mit  $\mathbf{x} = (l_1 \Delta x, l_2 \Delta x, l_3 \Delta x)$  definiert, in der  $l_1$ ,  $l_2$  und  $l_3$  ganze Zahlen zwischen  $[0; N - 1]$  sind. Der Spektralraum, auch als Fourier- oder Wellenzahlraum bezeichnet, wird demgegenüber durch  $N^3$  Wellenzahlen mit  $\boldsymbol{\kappa} = (m_1 \kappa_0, m_2 \kappa_0, m_3 \kappa_0)$  abgebildet. Die ganzzahligen Variablen  $m_1$ ,  $m_2$  und  $m_3$  variieren dabei zwischen  $[1 - N/2; N/2]$ . Die kleinste aufgelöste Wellenzahl  $\kappa_0$  ist gleich  $2 \pi/L$ . Folglich liegen alle physikalisch signifikanten Wellenzahlen innerhalb einer Kugel mit dem Radius  $\kappa_{\max} = N/2 \kappa_0$ . Die Transformation der Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  an der Position  $\mathbf{x}$  erfolgt mit Hilfe der nachstehenden dreidimensionalen diskreten Fourier-Transformation (DFT):

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{1}{N^3} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \mathbf{u} \exp(-i \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.21)$$

worin  $\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$  der zugehörige Fourier-Koeffizient ist. Das mit Hilfe von Gleichung (2.21) transformierte Geschwindigkeitsfeld wird durch eine dreidimensionale Matrix  $\mathbf{A}$  abgebildet<sup>1</sup>, die aus komplexen, vektorwertigen Fourier-Koeffizienten besteht und sich durch eine Hermitesche Symmetrie,  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$ , kennzeichnet. Unter Berücksichtigung der Zufallsbeschleunigung  $\hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}}$  ist die Impulsgleichung innerhalb des Spektralraums wie folgt definiert:

$$\frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} = \hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}} \quad (2.22)$$

<sup>1</sup>Da die in C++ verfügbaren statischen Arrays aufgrund ihrer begrenzten Speicherverwaltung für große Matrizen ungeeignet sind, wurde die Datenstruktur der dreidimensionalen Matrix in einer zeilendominierten Reihenfolge unter Anwendung der sequentiellen Containerklasse *vector* realisiert.

mit  $\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$  und  $\hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}} = \hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ . Die drei Komponenten der Zufallsbeschleunigung  $\hat{a}_i^{\text{ext}}$  sind jeweils aus einem Realteil  $\Re$  und einem Imaginärteil  $\Im$  zusammengesetzt, sodass  $\hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}}$  aus insgesamt sechs Komponenten besteht. Diese sechs Komponenten werden unabhängig voneinander durch den nachstehend genannten Uhlenbeck-Ornstein-Prozess (Uhlenbeck & Ornstein 1930; Renshaw 1987) bestimmt und in dem komplexen Vektor  $\hat{\mathbf{b}}$  zusammengefasst:

$$\begin{aligned}\Re(\hat{b}_i(\boldsymbol{\kappa}, t + \Delta t)) &= \left(1 - \frac{\Delta t}{T_A}\right) \Re(\hat{b}_i(\boldsymbol{\kappa}, t)) + \Gamma Z_A \sqrt{\frac{2 \sigma_A^2 \Delta t}{T_A}}, \\ \Im(\hat{b}_i(\boldsymbol{\kappa}, t + \Delta t)) &= \left(1 - \frac{\Delta t}{T_A}\right) \Im(\hat{b}_i(\boldsymbol{\kappa}, t)) + \Gamma Z_A \sqrt{\frac{2 \sigma_A^2 \Delta t}{T_A}}\end{aligned}\quad (2.23)$$

Die zeitliche Entwicklung dieser stochastischen Differentialgleichungen wird, neben dem Zeitmaß und der Amplitude der Anregung,  $T_A$  und  $\sigma_A$ , durch eine Gaußsche Zufallszahl  $\Gamma$  mit  $\mathcal{N}(0, 1)$ -Verteilung bestimmt. Das Ziel dieses Verfahrens besteht in der Generierung großer Wirbelelemente. Aus diesem Grund erfolgt die stochastische Anregung der Fluidgeschwindigkeit, in Analogie zu Février *et al.* (2005) und Fede & Simonin (2006), im Bereich kleiner Wellenzahlen zwischen  $\kappa_A = [2 \kappa_0; 6 \kappa_0]$ . Mit Hilfe der von Overholt & Pope (1998) vorgeschlagenen Filterfunktion  $Z_A$  wird ein stetiger Übergang zu den nicht-angeregten Wellenzahlen realisiert:

$$Z_A = \tanh\left(\frac{\kappa_A - \kappa_i}{\zeta \kappa_A}\right) \mathcal{H}(\kappa_A - \kappa_i) \quad (2.24)$$

worin  $\mathcal{H}$  die Heaviside-Funktion kennzeichnet. Die Abruptheit der Anregung beruht auf numerischen Vergleichsuntersuchungen und beträgt in dieser Studie  $\zeta = 0, 2$  (Overholt & Pope 1998). Um die von Eswaran & Pope (1988) geforderte Kontinuitätsbedingung,  $\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}} = 0$ , zu gewährleisten, entspricht die Zufallsbeschleunigung  $\hat{\mathbf{a}}^{\text{ext}}$  der Projektion von  $\hat{\mathbf{b}}$  auf einer Ebene senkrecht zu  $\boldsymbol{\kappa}$ :

$$\hat{a}_i^{\text{ext}} = \hat{b}_i - \frac{\hat{b}_j \kappa_j}{\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa}} \kappa_i \quad (2.25)$$

Nach Beendigung der Anregung wird das dreidimensionale Geschwindigkeitsfeld, unter Einhaltung der Hermiteschen Zwangsbedingung zur Matrixsymmetrie (Sen & Venkaiah 1988), mittels inverser DFT in den physikalischen Raum zurück transformiert:

$$\mathbf{u} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \sum_{m_3} \hat{\mathbf{u}} \exp(i \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.26)$$

Durch Anwendung allseitig periodischer Randbedingungen bildet sich nach einer endlichen Anzahl an Iterationsschritten statistisch stationäre Turbulenz mit homogenen und isotropen Eigenschaften aus.

### 2.2.2 Berechnung der Fourier-Transformation

Die Lösung der in den Gleichungen (2.21) und (2.26) dargestellten diskreten Fourier-Transformationen erfordert jeweils  $\mathcal{O}(n^2)$ -Rechenoperationen. Ein effizienter Algorithmus zur Berechnung einer DFT stellt die schnelle Fourier-Transformation, auch Fast-Fourier-Transformation (FFT) genannt, dar. Auf der Grundlage eines Teile-und-herrsche-Verfahrens verwendet die FFT zuvor berechnete Zwischenergebnisse und spart folglich arithmetische Rechenoperationen ein. Die in dieser Arbeit angewandte FFT basiert auf dem Cooley-Tukey-Algorithmus und benötigt, im Gegensatz zur herkömmlichen DFT, lediglich  $\mathcal{O}(n \log_2(n))$ -Rechenoperationen (Cooley & Tukey 1965). Für gewöhnlich können FFTs mit Hilfe externer Bibliotheken wie die FFTW<sup>2</sup> (Frigo & Johnson 2005) numerisch gelöst werden. Da diese Bibliotheken nur bedingt auf den für die Simulationen verwendeten Hochleistungsrechnern zur Verfügung stehen, wurde der Cooley-Tukey-Algorithmus im Rahmen dieser Arbeit in das Berechnungsprogramm implementiert.

Die Berechnung einer dreidimensionalen FFT beruht im Wesentlichen auf eindimensionalen Multi-Zeilen-FFTs. Auf Basis des von Takahashi (2003) vorgeschlagenen Sechs-Stufen-Verfahrens werden hierbei in den Schritten zwei, vier und sechs jeweils  $n_1 n_2$  individuelle einzeilige FFTs mit jeweils  $n_3$ -Datenpunkten durchgeführt. Demgegenüber beinhalten die Schritte eins, drei und fünf eine Transposition der entsprechenden dreidimensionalen Grundmatrizen. Die Abarbeitung der eindimensionalen FFTs wurde darüber hinaus unter Verwendung der Programmierschnittstelle OpenMP (Chapman *et al.* 2007) parallelisiert.

## 2.3 Lagrangesches Tracking von Partikeln

Zur Analyse von Kollisions- und Agglomerationsprozessen finden, wie in Kapitel 1.2 diskutiert, zwei unterschiedliche Modellierungsansätze für die disperse Feststoffphase Anwendung. In diesem Kapitel wird zunächst die Berechnung von Partikelbahnen unter Verfolgung diskreter Massepunkte beschrieben. Anschließend folgen in Kapitel 2.4 Einzelheiten zu der Modellierung von diskreten Partikeln mit durch das Rechengitter aufgelösten Partikeloberflächen.

Der Massepunkt, im Folgenden Partikel genannt, stellt die höchstmögliche Idealisierung eines realen Teilchens dar. Hierbei wird die gesamte Masse im Schwerpunkt des Partikels vereinigt. Die in dieser Arbeit untersuchten sphärischen Partikel gelten als starr sowie nicht deformierbar und weisen eine monodisperse Größenverteilung auf. Während die räumliche Beschreibung des kontinuierlichen Fluids auf einer Eulerschen Betrachtungsweise beruht, bewegen sich die diskreten Par-

<sup>2</sup>„Fastest Fourier Transform in the West“.

tikel in einem Lagrangeschen Bezugssystem frei durch das ortsfeste Rechengitter des Fluids. Dieser Modellierungsansatz wird im Allgemeinen als Euler-Lagrange-Verfahren bezeichnet.

### 2.3.1 Partikelbewegungsgleichungen

Die Änderung der Partikelposition  $\mathbf{x}_P$  sowie der translatorischen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_P$  wird durch den folgenden Satz gewöhnlicher Differentialgleichungen numerisch gelöst (Sommerfeld *et al.* 2008):

$$m_P \frac{d\mathbf{u}_P}{dt_P} = \sum_n \mathbf{F}_n \quad (2.27)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_P}{dt_P} = \mathbf{u}_P \quad (2.28)$$

worin  $m_P = \pi/6\rho_P d_P^3$  die Partikelmasse,  $dt_P$  der Partikelzeitschritt und  $\mathbf{F}_n$  die Summe aller verschiedenen Kräfte repräsentiert, die auf das Partikel wirken. Die Rotation der sphärischen Teilchen wird in den in Kapitel 4 vorgestellten Untersuchungen aufgrund ihrer geringen Relevanz nicht berücksichtigt. Das zweite Newtonsche Gesetz für die Translation (2.27) und die kinematische Gleichung für die Position (2.28) bestimmen den Impulstransfer von der Fluidphase auf die Partikel. Um einen Vergleich mit zuvor publizierten Simulationsdaten von Sundaram & Collins (1997) und Fede & Simonin (2006) zu ermöglichen, wird die auch als Zwei-Wege-Kopplung bezeichnete fluiddynamische Wechselwirkung zwischen den Partikeln sowie von den Partikeln auf die Fluidphase vernachlässigt. Eine Erweiterung der Gleichung (2.27) stellt die nach Basset, Boussinesq und Oseen benannte BBO-Bewegungsgleichung dar (Maxey & Riley 1983):

$$\begin{aligned} m_P \frac{d\mathbf{u}_P}{dt_P} = & \underbrace{\frac{\pi}{8} \rho d_P^2 c_W (\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P) |\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P|}_{\text{I}} \\ & + \underbrace{m_P \frac{\rho}{\rho_P} \frac{D\mathbf{u}_{F@P}}{Dt_P}}_{\text{II}} + \underbrace{m_P c_V \frac{\rho}{\rho_P} \left( \frac{D\mathbf{u}_{F@P}}{Dt_P} - \frac{d\mathbf{u}_P}{dt_P} \right)}_{\text{III}} \\ & + \underbrace{\frac{3}{2} d_P^2 \sqrt{\pi \rho \eta} c_B \left( \int_0^t \frac{d}{d\tau} (\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} + \frac{(\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P)_0}{\sqrt{t}} \right)}_{\text{IV}} \\ & + \underbrace{m_P \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_P} \right) \mathbf{g}}_{\text{V}} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Demnach setzt sich die Gesamtkraft  $\mathbf{F}_n$  aus der Widerstandskraft  $\mathbf{F}_W$  (I), der Kraft  $\mathbf{F}_p$  durch einen Druckgradienten in der Strömung (II), der virtuellen Masse des Fluids  $\mathbf{F}_V$  (III), der Basset-Kraft  $\mathbf{F}_B$  (IV) und der Schwerkraft  $\mathbf{F}_g$  unter Berücksichtigung von Gravitation und Auftrieb (V) zusammen.

Die Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_{F@P}$  in Gleichung (2.29) entspricht der Fluidgeschwindigkeit an der Position des Partikels und gilt, aufgrund des zuvor vernachlässigten Impulstransfers vom Partikel auf das Fluid, als lokal störungsfrei. Die Komponenten von  $\mathbf{u}_{F@P}$  werden unter Verwendung der acht zu dem jeweiligen Partikel nächstbenachbarten Fluidknoten auf Basis einer trilineararen Interpolationsmethode rekonstruiert (siehe Anhang A.1). Dieser Ansatz kann bei größeren Turbulenzgraden zu Abweichungen gegenüber Interpolationsverfahren mit höheren Fehlerordnungen führen (Sundaram & Collins 1996).

Das totale Differential  $D/Dt_P$  von  $\mathbf{u}_{F@P}$  kennzeichnet die Beschleunigung eines Fluidelements entlang des mit dem Partikel mitbewegten Koordinatensystems, siehe Gleichung (2.30),  $d/dt_P$  von  $\mathbf{u}_P$  hingegen die Beschleunigung eines Partikels entlang seiner Trajektorie, siehe Gleichung (2.31):

$$\frac{D}{Dt_P} \equiv \frac{\partial}{\partial t_P} + u_{F@Pj} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (2.30)$$

$$\frac{d}{dt_P} \equiv \frac{\partial}{\partial t_P} + u_{Pj} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (2.31)$$

Die Grundform der BBO-Gleichung nach Maxey & Riley (1983) beruht auf der Annahme, dass der Partikeldurchmesser  $d_P$  deutlich kleiner als die räumliche Diskretisierung des Rechengitters,  $d_P \ll \Delta x$ , und folglich kleiner als das kleinste Längenmaß  $\eta_K$  der turbulenten Fluidströmung,  $d_P < \eta_K$ , ist. Ferner ist die ursprüngliche BBO-Gleichung nur für  $Re_P \ll 1$  gültig. Die Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_P$  stellt hierin das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften bezogen auf das charakteristische Längenmaß  $d_P$  dar:

$$Re_P = \frac{\rho d_P |\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P|}{\eta} \quad (2.32)$$

Die Widerstandskraft, welche sich aus einem Reibungs- und Formwiderstand zusammensetzt, ist abhängig vom Widerstandsbeiwert  $c_W$  (Sommerfeld 1996). Für die in dieser Studie untersuchten sphärischen Partikel findet eine von Schiller & Naumann (1933) vorgeschlagene Korrelation zur Bestimmung des  $c_W$ -Wertes im Bereich  $0,5 < Re_P < 1000$  Anwendung:

$$c_W = \begin{cases} \frac{24}{Re_P}, & Re_P \leq 0,5 \\ \frac{24}{Re_P} (1 + 0,15 Re_P^{0,687}), & 0,5 < Re_P < 1000 \\ 0,44, & Re_P \geq 1000 \end{cases} \quad (2.33)$$

In Gleichung (2.33) wird der Bereich  $Re_P \leq 0,5$  als Stokes-Regime und  $Re_P \geq 1000$  als Newton-Regime bezeichnet. Da der Widerstandsbeiwert nach Gleichung (2.33) allein von der Partikel-Reynolds-Zahl abhängig ist, bleiben Modifizierungen von  $c_W$  infolge von Schwarmeffekten durch benachbarte Partikel unberücksichtigt.

Während der Beschleunigung oder Verzögerung eines Partikels in einem Fluid wird ein bestimmter Teil des umgebenden Fluids aufgrund der zu verdrängenden Fluidmasse ebenfalls beschleunigt respektive verzögert (Sommerfeld *et al.* 2008). Die hierzu erforderliche Kraft wird als virtuelle Masse  $\mathbf{F}_V$  bezeichnet. Nach Auton *et al.* (1988) lässt sich die Beschleunigung des Fluids mit Hilfe der substantiellen Ableitung  $D\mathbf{u}_{F@P}/Dt_P$  quantifizieren. Der Beiwert  $c_V$  zur virtuellen Masse ermöglicht eine Gültigkeitserweiterung von  $\mathbf{F}_V$  für höhere  $Re_P$  und wurde von Odar & Hamilton (1964) als Funktion der Beschleunigungszahl  $A_c$  definiert:

$$c_V = 2,12 - \frac{0,1344}{0,12 + A_c^2} \quad (2.34)$$

mit:

$$A_c = \frac{|\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P|^2}{d_P \left| \frac{d(\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P)}{dt_P} \right|} \quad (2.35)$$

Wie neuere numerische Untersuchungen von Chang & Maxey (1995) und Magnaudet *et al.* (1995) zeigen, kann dieser Beiwert für kleine bis moderate  $Re_P$  auch mit  $c_V = 0,5$  angenommen werden. In der von Michaelides & Roig (2011) kürzlich publizierte Neuinterpretation des von Odar & Hamilton (1964) vorgestellten Datensatzes wird allerdings deutlich, dass sich  $c_V$  nicht eindeutig als Funktion der Beschleunigungszahl  $A_c$  verhält. Michaelides & Roig (2011) schlagen daher einen Beiwert von  $c_V = 1,0$  vor.

Die Basset-Kraft  $\mathbf{F}_B$  beschreibt eine Zähigkeitskraft, welche durch eine verzögerte Entwicklung der Grenzschicht an der Partikeloberfläche in Folge einer Änderung der Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und umgebenden Fluid hervorgerufen wird (Sommerfeld 1996). Gleichung (2.29) berücksichtigt eine anfängliche Relativgeschwindigkeit  $(\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P)_0$  nach Reeks & McKee (1984) sowie das totale Differential  $d/dt_P$  entlang der Partikeltrajektorie (Michaelides & Feng 1995). Der Beiwert  $c_B$  zur Basset-Kraft kann sowohl klassisch als Funktion der Beschleunigungszahl  $A_c$  (Odar & Hamilton 1964):

$$c_B = 0,48 + \frac{0,52}{(1 + A_c)^3} \quad (2.36)$$

als auch, auf Basis neuerer Untersuchungen, in Abhängigkeit der Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_P$  und der Partikel-Strouhal-Zahl  $Sr_P$  ausgedrückt werden (Michaelides & Roig 2011):

$$c_B = 1,0 - 0,527 \left( 1 - \exp \left( -0,14 Re_P Sr_P^{0,82} \right)^{5/2} \right) \quad (2.37)$$

Bei instationären Strömungsvorgängen lässt sich mit Hilfe von  $Sr_P$  die Ablösefrequenz von Wirbeln an der Partikeloberfläche bestimmen:

$$Sr_P = \frac{g}{2 \pi f_0 u_P^S} \quad (2.38)$$

worin  $g$  der Erdbeschleunigung,  $f_0$  der Oszillationsfrequenz und  $u_P^S$  der ungestörten, stationären Sinkgeschwindigkeit des Partikels entspricht. Für die numerische Berechnung des in Gleichung (2.29) dargestellten Basset-Integrals wurde der nachstehende Lösungsansatz von Alexander (2004) in das Simulationsprogramm implementiert:

$$\begin{aligned} & \int_0^t \frac{d}{d\tau} (\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \\ &= \sum_{n=0}^{M-1} \frac{d\mathbf{u}_{F@P}^{(n+1)}}{dt} 2 \left( \sqrt{t-t^{(n)}} - \sqrt{t-t^{(n+1)}} \right) \\ &- \sum_{n=0}^{M-1} \frac{\mathbf{u}_P^{(n+1)} - \mathbf{u}_P^{(n)}}{\Delta t^{(n)}} 2 \left( \sqrt{t-t^{(n)}} - \sqrt{t-t^{(n+1)}} \right) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Bewegen sich Partikel in einer Scherströmung, erfahren sie, aufgrund der ungleichmäßigen Druckverteilung über ihrer Oberfläche, eine zusätzliche Auftriebskraft (Sommerfeld *et al.* 2008). Die auf Saffman (1965) und Saffman (1968) zurückgehende Kraft wirkt senkrecht zur Strömung in Richtung der größeren Relativgeschwindigkeit. Sie ist nicht in der allgemeinen Form der BBO-Gleichung (2.29) enthalten. Nach Mei (1992) kann die Saffman-Auftriebskraft  $\mathbf{F}_S$  wie folgt beschrieben werden:

$$\mathbf{F}_S = 1,615 d_P^2 \sqrt{\rho \eta} c_A \frac{(\mathbf{u}_{F@P} - \mathbf{u}_P) \times \boldsymbol{\omega}_{F@P}}{\sqrt{|\boldsymbol{\omega}_{F@P}|}} \quad (2.40)$$

mit der Rotation des Fluids an der Position des Partikels,  $\boldsymbol{\omega}_{F@P} = \nabla \times \mathbf{u}_{F@P}$ , und dem Beiwert  $c_A$  zur Auftriebskraft als Erweiterung für höhere  $Re_P$ . Die von Mei (1992) vorgeschlagene empirische Korrelation basiert auf numerischen Untersuchungen von Dandy & Dwyer (1990) und ist für  $0,1 \leq Re_P \leq 100$  gültig:

$$c_A = \begin{cases} \left(1 - 0,3314 \beta_{Re}^{1/2}\right)^{(-0,1 Re_P)} + 0,3314 \beta_{Re}^{1/2}, & Re_P \leq 40 \\ 0,0524 (\beta_{Re} Re_P)^{1/2}, & Re_P > 40 \end{cases} \quad (2.41)$$

worin  $\beta_{Re}$  das Verhältnis von Scher-Reynolds-Zahl  $Re_S$  zu Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_P$  ist:

$$\beta_{Re} = 0,5 \frac{Re_S}{Re_P} \quad (2.42)$$

Die Partikel-Reynolds-Zahl der Fluidscherung  $Re_S$  berücksichtigt die Rotation des Fluids und den Partikeldurchmesser als charakteristisches Längenmaß:

$$Re_S = \frac{\rho d_P^2 |\boldsymbol{\omega}_{F@P}|}{\eta}, \quad (2.43)$$

In den in Kapitel 4 vorgestellten Studien sind die untersuchten Dichten der Partikel um ein Vielfaches größer als die des Fluids. Zudem ist die mittlere freie Weglänge des Fluids um Größenordnungen kleiner als die kleinsten betrachteten Partikeldurchmesser. Aus diesen Gründen wird die durch die Brownsche Diffusion hervorgerufene Zufallsbewegung von Teilchen vernachlässigt werden.

### 2.3.2 Bestimmung des Partikelzeitschritts

Die Partikelbewegungsgleichungen (2.27) und (2.28) werden in dieser Arbeit durch ein Euler-Verfahren erster Ordnung numerisch gelöst (Sommerfeld 1996):

$$\mathbf{u}_P(t + \Delta t_P) = \frac{\sum_n \mathbf{F}_n}{m_P} \Delta t_P + \mathbf{u}_P(t) \quad (2.44)$$

$$\mathbf{x}_P(t + \Delta t_P) = \frac{\mathbf{u}_P(t) + \mathbf{u}_P(t + \Delta t_P)}{2} \Delta t_P + \mathbf{x}_P(t) \quad (2.45)$$

Das simultane Lösen der Gleichungen (2.44) und (2.45) für alle im Strömungsgebiet befindlichen Partikel ermöglicht eine deterministische Beschreibung von Partikel-Partikel-Kollisionen (vgl. Kapitel 2.6.1) sowie eine parallelisierte Berechnung der Partikelbewegungsgleichungen unter Anwendung von OpenMP (Chapman *et al.* 2007). Diese Vorgehensweise setzt allerdings voraus, dass die Partikelbewegungsgleichungen mit dem jeweils gleichen Partikelzeitschritt gelöst werden. Der für alle Partikel gültige Partikelzeitschritt  $\Delta t_P$  wird dabei adaptiv zu jedem Iterationsschritt aus dem halben Minimum der kleinsten relevanten charakteristischen Zeitmaße ermittelt:

$$\Delta t_P = 0,5 \min(\tau_{P\min}, T_{KV\min}, T_{W\min}, T_{I\min}) \quad (2.46)$$

Unter Berücksichtigung aller verfolgten Partikel  $N_P$  gilt mit  $n = N_P$ :

$$\tau_{P\min} = \min(\tau_P^{(1)}, \dots, \tau_P^{(n)}) \quad (2.47)$$

$$T_{KV\min} = \min(T_{KV}^{(1)}, \dots, T_{KV}^{(n)}) \quad (2.48)$$

$$T_{W\min} = \min(T_W^{(1)}, \dots, T_W^{(n)}) \quad (2.49)$$

Die Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  definiert diejenige Zeit, die ein Partikel aus seiner Ruhelage benötigt, um sich zu 63,2 % der Geschwindigkeit des umgebenden Fluids anzupassen (Sommerfeld *et al.* 2008):

$$\tau_P = \frac{\rho_P d_P^2}{18 \eta} \frac{24}{c_W Re_P} \quad (2.50)$$

Basierend auf der Geschwindigkeit des Partikels charakterisiert  $T_{KV}$  die erforderliche Zeit des Partikels zum Durchqueren einer Gitterzelle mit dem Volumen  $(\Delta x)^3$ :

$$T_{KV} = \frac{\Delta x}{|\mathbf{u}_P|} \quad (2.51)$$

Für die Analyse des Transportverhaltens von Partikeln in turbulenten Strömungen wird zudem die Zeit des Partikels zum Durchqueren eines turbulenten Wirbels herangezogen:

$$T_W = \tau_\eta \frac{\mathbf{u}_{F@P}}{\mathbf{u}_P} \quad (2.52)$$

worin das Kolmogorov-Zeitmaß  $\tau_\eta$  das kleinste Zeitmaß der Turbulenz kennzeichnet (siehe Kapitel 3.2.2). An dieser Stelle spielt die in der Literatur häufig diskutierte Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Partikel-Partikel-Kollisionen aufgrund des angewandten deterministischen Kollisionsalgorithmus nur eine untergeordnete Rolle. Zur Auflösung von Kollisionen ist es dennoch erforderlich, die Zeit  $T_I$  bis zur vollständigen Interpenetration zweier kollidierender Partikel in Gleichung (2.46) zu berücksichtigen. Details zur Berechnung von  $T_I$  folgen in Kapitel 2.6.1.

Die Berechnung von Fluidströmung und Partikelbewegung beruht, entsprechend der Gleichungen (2.11) und (2.44)-(2.45), auf einer unterschiedlichen zeitlichen Diskretisierung der zugrundeliegenden Differentialgleichungen. Im Allgemeinen ist der diskrete Fluidzeitschritt  $\Delta t$  größer als der diskrete Zeitschritt  $\Delta t_P$  für die Bewegung der Partikel. Um eine zeitlich gekoppelte Berechnung beider Phasen zu ermöglichen, wurde der in Abbildung 2.2 dargestellte Programmablaufplan zur adaptiven Bestimmung der diskreten Partikelzeitschritte entwickelt.

Zu Beginn der zeitlich gekoppelten Berechnung befinden sich beide Phasen in der Zeitebene  $t$ . In einem ersten Schritt erfolgt zunächst die Berechnung der Fluidphase mit dem Zeitschritt  $\Delta t$ . Anschließend werden alle Partikel auf Grundlage von Gleichung (2.46) simultan mit dem Zeitschritt  $\Delta t_P$  bewegt, bis sie die neue Zeitebene  $t + \Delta t$  erreichen. Folglich bewegen sich die Partikel während des Trackings über den Zeitraum  $\Delta t$  in einem eingefrorenen Strömungsfeld. Ist der berechnete Partikelzeitschritt größer als die Restzeit  $t^*$ , die zum Erreichen von  $\Delta t$  verbleibt, gilt  $\Delta t_P = t^*$ . Am Ende dieser Sequenz befinden sich beide Phasen auf der neuen Zeitebene  $t + \Delta t$  und der Berechnungsalgorithmus beginnt von Neuem.

## 2.4 Lagrangesches Tracking aufgelöster Partikel

In dieser Arbeit werden die diskreten Partikel, neben des Modellansatzes für Punktpartikel, mit Hilfe eines LBM basierten Ansatzes in ihrer Struktur durch das numerische Rechengitter vollständig aufgelöst. Die Partikeloberfläche interagiert dabei

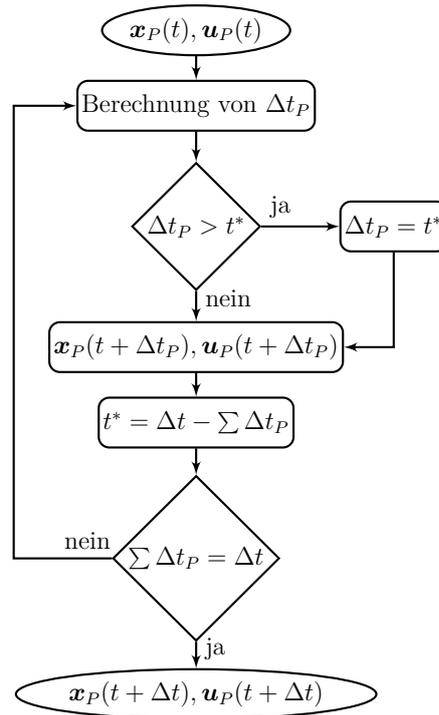
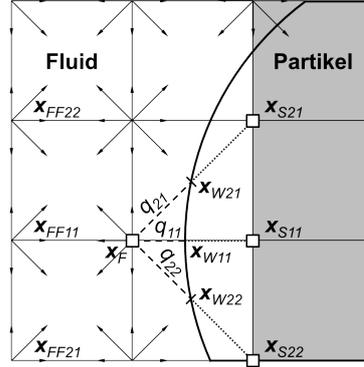


Abb. 2.2. Programmablaufplan zur adaptiven Bestimmung der diskreten Partikelzeitschritte.

direkt mit dem Fluid, sodass Details der Strömung im Nahbereich des Partikels erfasst werden. Die auf die Partikel wirkenden strömungsmechanischen Kräfte ergeben sich unmittelbar aus der im Folgenden beschriebenen LBM-Randbedingung. Im Fall bewegter Partikel dienen diese Kräfte zur Änderung der Partikelposition innerhalb des zugrundeliegenden stationären, äquidistanten Rechengitters.

#### 2.4.1 Modellierung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen

Um die gekrümmte Oberfläche der Partikel mit einem strukturierten Gitter auflösen zu können, muss die exakte Position der Partikeloberfläche innerhalb einer Rechenzelle berücksichtigt werden. In der Literatur existieren für die Abbildung von gekrümmten Wänden ohne Schlupf zwischen der Partikeloberfläche und dem umgebenden Fluid verschiedene Ansätze (Bouzidi *et al.* 2001; Guo *et al.* 2002a; Mei *et al.* 2002), bei denen das Zurückprallen der Fluidmoleküle an der Partikeloberfläche durch eine sogenannte Bounce-Back-Randbedingung modelliert wird. Aufgrund der Anwendbarkeit insbesondere für bewegte Phasengrenzen wurde das von Guo *et al.* (2002a) vorgeschlagene Extrapolationsschema für die Modellierung gekrümmter Wandrandbedingungen umgesetzt.



**Abb. 2.3.** Schematische Darstellung der gekrümmten Wandrandbedingung in der Lattice-Boltzmann-Methode: Das numerische Gitter ist in Fluidzellen (*weiße Gitterzellen*) und Feststoffzellen (*graue Gitterzellen*) unterteilt. Die effektive Kontur der gekrümmten Phasengrenze (*fett durchgezogene Linie*) wird durch Verteilungsfunktionen (*schwarze Pfeile*) diskretisiert. Der relative Abstand zwischen den Fluidknoten und der gekrümmten Partikeloberfläche (*gestrichelte Linien*) wird durch den Parameter  $q_{\sigma i}$  gewichtet. In den kubischen Gitterzellen befinden sich die Gitterknoten (*kleine offene Quadrate*) stets am vorderen unteren linken Eckpunkt.

Die grundlegende Idee von Guo *et al.* (2002a) besteht in der Aufteilung des numerischen Gitters in zwei Teile. Wie in Abbildung 2.3 gezeigt, werden alle Knoten, die innerhalb einer Partikelstruktur liegen, als Feststoffknoten (*graue Gitterzellen*) markiert, wohingegen Knoten außerhalb des Partikels den Status eines Fluidknotens (*weiße Gitterzellen*) besitzen.<sup>3</sup> Die Verbindung zwischen dem Fluidknoten  $\mathbf{x}_F$  und dem Feststoffknoten  $\mathbf{x}_S$  schneidet die physische Phasengrenze an der Position  $\mathbf{x}_W$  (siehe Abbildung 2.3). Der Anteil des auf der Fluidseite befindlichen Abschnittes berechnet sich mit:

$$q = \frac{|\mathbf{x}_F - \mathbf{x}_W|}{|\mathbf{x}_F - \mathbf{x}_S|} \quad (2.53)$$

Entsprechend Abbildung 2.3 kennzeichnet der Parameter  $q_{\sigma i}$  den diskreten Relativabstand zwischen der Partikeloberfläche und den nächst benachbarten Fluidknoten in  $\sigma i$ -Richtung. Um die Propagation auf dem Fluidknoten  $\mathbf{x}_F$  durchführen zu können, sind diskrete Post-Relaxationsverteilungsfunktionen  $f_{\sigma i}^*(\mathbf{x}_S, t)$  auf den jeweiligen Feststoffknoten  $\mathbf{x}_S$  erforderlich:

$$f_{\sigma i}^* = f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}_S, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) f_{\sigma i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_S, t) \quad (2.54)$$

<sup>3</sup>In der vorliegenden Lattice-Boltzmann-Methode werden Fluidinformationen und Partikeleigenschaften per Definition auf dem Gitterknoten gespeichert, während die Gitterzellen ihr zugehöriges Kontrollvolumen repräsentieren. Die Position des Knotens befindet sich für jede Art von Gitterknoten stets am vorderen unteren linken Eckpunkt der würfelförmigen Gitterzelle.

worin  $f_{\sigma_i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}_S, t)$  dem Gleichgewichtsanteil und  $f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_S, t)$  dem Nicht-Gleichgewichtsanteil von  $f_{\sigma_i}^*(\mathbf{x}_S, t)$  entspricht. Der diskrete Gleichgewichtsanteil  $f_{\sigma_i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}_S, t)$  wird zu diesem Zweck mit Hilfe der folgenden Definition approximiert (Guo *et al.* 2002a):

$$f_{\sigma_i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}_S, t) = \omega_{\sigma_i} \left[ \rho_P + \rho \left( \frac{3 \boldsymbol{\xi}_{\sigma_i} \cdot \mathbf{u}_S}{c^2} + \frac{9 (\boldsymbol{\xi}_{\sigma_i} \cdot \mathbf{u}_S)^2}{2 c^4} - \frac{3 \mathbf{u}_S^2}{2 c^2} \right) \right] \quad (2.55)$$

In Gleichung (2.55) beschreiben  $\rho_P$  und  $\mathbf{u}_S$  die Dichte und Geschwindigkeit auf dem Feststoffknoten  $\mathbf{x}_S$ ,  $\rho$  indessen die Fluiddichte auf  $\mathbf{x}_F$ . Die Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_S$  wird durch lineare Extrapolation als Funktion von  $q$  bestimmt:

$$\mathbf{u}_S = \begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{x}_W) + (q-1) \mathbf{u}(\mathbf{x}_F) + (1-q) \frac{2 \mathbf{u}(\mathbf{x}_W) + (q-1) \mathbf{u}(\mathbf{x}_F)}{1+q}, & q < 0,75 \\ \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}_W) + (q-1) \mathbf{u}(\mathbf{x}_F)}{q}, & q \geq 0,75 \end{cases} \quad (2.56)$$

Der ebenfalls erforderliche Nicht-Gleichgewichtsanteil  $f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_S, t)$  berechnet sich aus den Nicht-Gleichgewichtsanteilen der Verteilungsfunktionen auf den Fluidknoten  $\mathbf{x}_F$  und  $\mathbf{x}_{FF}$ :

$$f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_S, t) = \begin{cases} q_{\sigma_i} f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_F, t) + (1 - q_{\sigma_i}) f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_{FF}, t), & q < 0,75 \\ f_{\sigma_i}^{\text{neq}}(\mathbf{x}_F, t), & q \geq 0,75 \end{cases} \quad (2.57)$$

Unter Verwendung von  $q_{\sigma_i}$  wird die Oberfläche des Partikels durch das numerische Rechengitter vollständig aufgelöst. Dies ermöglicht sowohl eine detaillierte Erfassung der Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzflächen als auch die direkte Bestimmung der auf das Partikel wirkenden strömungsinduzierten Kräfte und folglich die Lösung der Partikelbewegungsgleichungen.

## 2.4.2 Partikelbewegungsgleichungen

Im Gegensatz zu den Punktpartikeln werden für die Bewegung von Partikeln mit aufgelösten Partikeloberflächen, neben dem zweiten Newtonschen Gesetz für die Translation, auch die Eulerschen Gleichungen für die Rotation herangezogen. Die Kräfte und Momente, die eine Änderung der Partikelposition bewirken, gehen hierbei unmittelbar aus der fluiddynamischen Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikel hervor. Unter Anwendung der LBM resultieren die auf die Partikel wirkenden strömungsinduzierten Kräfte und Momente aus der Bilanzierung des lokalen Fluidimpulses an der Partikeloberfläche. Die Differenz des Fluidimpulses vor und nach dem Wandkontakt führt zu der lokalen Kraft  $\mathbf{F}_{\sigma_i}$ . Das lokale Drehmoment  $\mathbf{T}_{\sigma_i}$  folgt aus der lokalen Kraft und ihrem Abstand  $\mathbf{x}_R$  zum Zentrum der Rotation:

$$\mathbf{F}_{\sigma_i}(\mathbf{x}, t + \Delta t/2) = \frac{\Delta V}{\Delta t} (f_{\sigma_i}(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_{\sigma_i}^*(\mathbf{x}, t)) \boldsymbol{\xi}_{\sigma_i} \quad (2.58)$$

$$\mathbf{T}_{\sigma_i}(\mathbf{x}, t + \Delta t/2) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_R) \times \mathbf{F}_{\sigma_i}(\mathbf{x}, t + \Delta t/2) \quad (2.59)$$

worin  $f_{\sigma i}^*(\mathbf{x}, t)$  die Verteilungsfunktion zwischen Relaxation und Propagation ist. Durch Summierung aller lokalen Kräfte und Momente entlang der Partikeloberfläche ergeben sich schließlich die Gesamtkraft  $\mathbf{F}$  und das Gesamtdrehmoment  $\mathbf{T}$  durch:

$$\mathbf{F}(t + \Delta t/2) = \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\sigma i} \mathbf{F}_{\sigma i}(\mathbf{x}, t + \Delta t/2) \quad (2.60)$$

$$\mathbf{T}(t + \Delta t/2) = \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\sigma i} \mathbf{T}_{\sigma i}(\mathbf{x}, t + \Delta t/2) \quad (2.61)$$

Für die Validierung der resultierenden strömungsinduzierten Kräfte wurde in der Vergangenheit der Widerstandsbeiwert einer im Raum fixierten Kugel für ein breites Spektrum an Partikel-Reynolds-Zahlen berechnet und mit experimentell ermittelten Daten verglichen. Wie Arbeiten von Hölzer & Sommerfeld (2009) und Dietzel & Sommerfeld (2010) zeigen, konnten die Simulationen die Hauptmerkmale der Strömungsstruktur im Nahbereich der Kugel erfassen und darüber hinaus die jeweiligen Widerstandsbeiwerte für  $Re_P = [0,3; 480]$  mit einer hinreichenden Genauigkeit vorhersagen.

In Analogie zu der Modellierung von Punktpartikeln erfolgt die Bewegung von Partikeln mit aufgelösten Oberflächen ebenfalls in einem Lagrangeschen Bezugssystem. Die Änderung der translatorischen und rotatorischen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit,  $\mathbf{u}_P$  und  $\boldsymbol{\omega}_P$ , sowie der Partikelposition  $\mathbf{x}_P$  ergeben sich aus der Lösung folgender gewöhnlicher Differentialgleichungen entlang der Partikeltrajektorie:

$$m_P \frac{d\mathbf{u}_P}{dt} = \mathbf{F} \quad (2.62)$$

$$I_P \frac{d\boldsymbol{\omega}_P}{dt} = \mathbf{T} \quad (2.63)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_P}{dt} = \mathbf{u}_P \quad (2.64)$$

mit der Masse  $m_P$  und dem Trägheitsmoment  $I_P$  des Partikels sowie dem Fluidzeitschritt  $dt$ . In Kapitel 5 soll in einem ersten Schritt zunächst die fluiddynamische Wechselwirkung sphärischer Partikel analysiert werden, sodass die Verschiebung des Partikeldrehwinkels vorerst außer Acht gelassen wird. Aufgrund dieser Vereinfachung wird das Trägheitsmoment des Partikels mit  $I_P = 0,1 m_P d_P^2$  berechnet. Die für den Transport agglomerierter Primärpartikel erforderlichen Bewegungsgleichungen werden in Kapitel 2.7.3 separat diskutiert. Neben strömungsinduzierten Kräften können zudem externe Kräfte wie die Schwerkraft in Gleichung (2.62) Berücksichtigung finden:

$$m_P \frac{d\mathbf{u}_P}{dt} = \mathbf{F} + m_P \left(1 - \frac{\rho}{\rho_P}\right) \mathbf{g} \quad (2.65)$$

worin  $\mathbf{g}$  die Erdbeschleunigung repräsentiert. Die Zufallsbewegung von Partikeln infolge der Brownschen Diffusion kann, wie auch bei der Modellierung von Punktpartikeln,

aufgrund der in den Kapiteln 5 und 6 untersuchten Partikeldichten und -durchmesser vernachlässigt werden. Die Integration der Gleichungen (2.62)-(2.64) basiert auf einem Euler-Verfahren erster Ordnung, welches zum folgenden Satz linearisierter Differentialgleichungen führt:

$$\mathbf{u}_P(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{F}}{m_P} \Delta t + \mathbf{u}_P(t) \quad (2.66)$$

$$\boldsymbol{\omega}_P(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{T}}{I_P} \Delta t + \boldsymbol{\omega}_P(t) \quad (2.67)$$

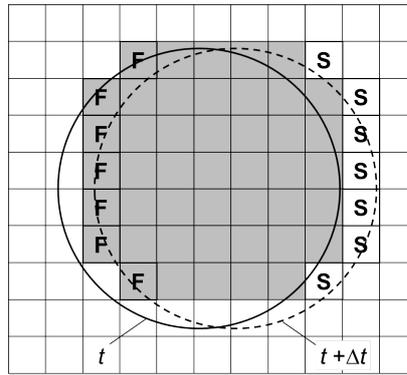
$$\mathbf{x}_P(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{u}_P(t) + \mathbf{u}_P(t + \Delta t)}{2} \Delta t + \mathbf{x}_P(t) \quad (2.68)$$

Im Gegensatz zu der Beschreibung von Punktpartikeln beruht die Berechnung von Fluidströmung und Partikelbewegung bei dem aufgelösten Modellansatz auf der gleichen zeitlichen Diskretisierung  $\Delta t$ . Da die in dieser Arbeit realisierten Zeitschritte um ein Vielfaches kleiner als die Partikelrelaxationszeiten  $\tau_P$  sind, ist der durch die Linearisierung der Gleichungen (2.66)-(2.68) entstandene Fehler als marginal zu bewerten. Das Verhältnis  $\Delta t/\tau_P$  variiert hierbei zwischen  $[6,17 \times 10^{-6}; 6,93 \times 10^{-4}]$ . Um vollständig transiente Simulationen zu ermöglichen, werden die veränderlichen Partikelvariablen zu jedem Fluidzeitschritt aktualisiert. Darüber hinaus erfolgt die Lösung der Bewegungsgleichungen aller im Strömungsgebiet befindlichen Partikel simultan nach Beendigung des Zeitschrittes der Fluidphase.

### 2.4.3 Bewegung der Feststoff-Fluid-Phasengrenzen

Im Rahmen der Lagrangeschen Betrachtungsweise können sich die Partikel frei durch das Fluidgebiet bewegen. Als Folge der Modellierung der Phasengrenze zwischen Fluid und Partikel bedingt eine Veränderung der Partikelposition zugleich Modifikationen der Zellstatus im numerischen Rechengitter. Bewegt sich ein Partikel über das stationäre Gitter, ändern Knoten, die innerhalb eines Zeitschrittes vom Partikel neu überdeckt werden, ihren Status von Fluid auf Feststoff. Demgegenüber wechseln die hinter dem Partikel befindlichen und zuvor als Feststoff markierten Knoten am Ende eines Zeitschrittes ihren Status auf Fluid, sobald sie außerhalb der Partikelstruktur liegen. Abbildung 2.4 verdeutlicht den Umschaltvorgang zwischen den beiden Zellstatus anhand der Bewegung einer Scheibe über ein zweidimensionales Rechengitter.

Für die Reinitialisierung neu entstandener Fluidknoten werden die Gleichgewichts- und Nicht-Gleichgewichtsanteile der 19 Verteilungsfunktionen eines jeden Knotens mit Hilfe der von Caiazzo (2008) vorgeschlagenen Extrapolationsmethode rekonstruiert. Die sogenannte Refill-Methode besteht aus den folgenden vier Teilschritten: Zu Beginn werden  $\rho$  und  $\mathbf{u}$  von den nächst benachbarten Fluidknoten auf den neuen Fluidknoten



**Abb. 2.4.** Bewegung der Feststoff-Fluid-Phasengrenze eines sphärischen Partikels über das regulär strukturierte, äquidistante Rechengitter innerhalb des Zeitschritts  $\Delta t$  (in Analogie zu Seo & Mittal (2011)): Die Umschaltung des Status von Fluid auf Feststoff, symbolisiert mit S, sowie von Feststoff auf Fluid, gekennzeichnet durch F, wird aus Gründen der Vereinfachung hier lediglich in einer zweidimensionalen Ansicht dargestellt.

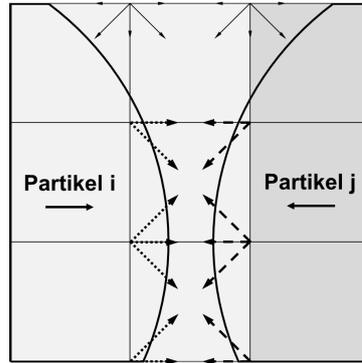
extrapoliert. Die zugehörigen Gleichgewichtsverteilungen  $f_{\sigma i}^{\text{eq}}$  werden in einem zweiten Schritt nach Lallemand & Luo (2003) mit:

$$f_{\sigma i}^{\text{eq}} = \omega_{\sigma i} \tilde{\rho} \left( 1 + \frac{3 \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \tilde{\mathbf{u}}}{c^2} + \frac{9 (\boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2}{2 c^4} - \frac{3 \tilde{\mathbf{u}}^2}{2 c^2} \right) \quad (2.69)$$

berechnet. In Gleichung (2.69) kennzeichnen  $\tilde{\rho}$  und  $\tilde{\mathbf{u}}$  Extrapolationen der Fluidichte und Fluidgeschwindigkeit auf dem zu rekonstruierenden Knoten. Im dritten Schritt erfolgt die Bestimmung der Nicht-Gleichgewichtsverteilungen  $f_{\sigma i}^{\text{neq}}$  durch Extrapolation von den benachbarten Fluidknoten (Caiazzo 2008). Mit Hilfe von  $f_{\sigma i}^{\text{eq}}$  und  $f_{\sigma i}^{\text{neq}}$  ist es schließlich möglich, die diskreten Verteilungsfunktionen gemäß Gleichung (2.11) zu reinitialisieren. Die Anwendbarkeit der Refill-Methode auf Mehrphasenströmungen wurde kürzlich von Thömmes *et al.* (2009) demonstriert.

#### 2.4.4 Annäherung aufgelöster Feststoff-Fluid-Phasengrenzen

Im Verlauf einer Simulation können sich die Oberflächen bewegter Partikel bis unter die Auflösungsgrenze des finiten Rechengitters nähern. In dem Spalt zwischen den Partikeloberflächen fehlen jedoch ab einer bestimmten Phase der Annäherung Fluidknoten. Folglich ist die in Gleichung (2.60) definierte Impulsbilanz entlang der Partikeloberfläche aufgrund fehlender Verteilungsfunktionen unvollständig, was zu einer unphysikalischen Anziehungskraft zwischen den Partikeln führt. Abbildung 2.5 zeigt ein solches Szenario, worin die fehlenden Verteilungsfunktionen des Fluids auf den Feststoffknoten des gegenüberliegenden Partikels in Form von *gestrichelten* und *gepunkteten Pfeilen* angedeutet sind.



**Abb. 2.5.** Schematische Darstellung zweier sich annähernder Partikel: Das in dem Spalt zwischen den Partikeloberflächen befindliche Fluid liegt unterhalb der Auflösungsgrenze des numerischen Gitters. Die *gestrichelten Pfeile* kennzeichnen diejenigen Verteilungsfunktionen auf den Feststoffknoten von Partikel j, die für die Impulsbilanz des Fluids entlang der Oberfläche von Partikel i fehlen. Demgegenüber sind die *gepunkteten Pfeile* Partikel i zuzuordnen.

Infolgedessen lassen sich die strömungsinduzierten Kräfte, die bei einer Annäherung üblicherweise der Bewegungsrichtung der Partikel entgegenwirken, nicht mehr fehlerfrei berechnen. Dies hat zur Konsequenz, dass bei einem direkten Kontakt der Partikeloberflächen beide Kollisionspartner künstlich aneinander haften und somit ein mögliches Abprallen verhindert wird. Um eine artifizielle Anziehung der Partikel unterhalb der Auflösungsgrenze des Fluids zu verhindern, wurde das folgende Rekonstruktionsschema für fehlende Verteilungsfunktionen entwickelt: Fällt der Abstand zwischen den Partikeloberflächen unter die räumliche Diskretisierung  $\Delta x$ , werden auf den Feststoffknoten des gegenüberliegenden Partikels zu jedem Zeitschritt sogenannte Nicht-Fluidknoten neu generiert. Die Position dieser Knoten entspricht dem Ort der fehlenden Verteilungsfunktionen (siehe Abbildung 2.5). Darüber hinaus werden Nicht-Fluidknoten nur bei Bedarf für die Berechnung der strömungsinduzierten Kräfte erstellt und anschließend wieder entfernt. Demzufolge üben Nicht-Fluidknoten keinen Einfluss auf die effektive Struktur der Partikel aus.

Unter Annahme von bewegten, schlupffreien Wandrandbedingungen erfolgt die Initialisierung der Nicht-Fluidknoten durch Rekonstruktion der Strömungsgeschwindigkeit an der Partikeloberfläche. Die Geschwindigkeit des Fluids  $\mathbf{u}$  entspricht hierzu der Umfangsgeschwindigkeit des Partikels  $\mathbf{u}_P^U$ . Auf Grundlage dessen werden die fehlenden Verteilungsfunktionen analog zu Gleichung (2.12) wie folgt bestimmt:

$$f_{\sigma i}^{\text{eq}} = \omega_{\sigma i} \rho \left( 1 + \frac{3 \boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}_P^U}{c^2} + \frac{9 (\boldsymbol{\xi}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}_P^U)^2}{2 c^4} - \frac{3 (\mathbf{u}_P^U)^2}{2 c^2} \right) \quad (2.70)$$

mit der Umfangsgeschwindigkeit des Partikels an der Position  $\mathbf{x}$ :

$$\mathbf{u}_P^U = \mathbf{u}_P + \boldsymbol{\omega}_P \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \quad (2.71)$$

Mit Hilfe dieses Ansatzes ist es möglich, die Impulsbilanz der Verteilungsfunktionen des Fluids an der Partikeloberfläche vollumfänglich zu gewährleisten. Die Anwendbarkeit dieses neu entwickelten Rekonstruktionsschemas wird in Kapitel 5.3 anhand der Sedimentation eines Partikelpaares demonstriert.

Ungeachtet dessen ist die Auflösung des Fluids weiterhin durch das finite Rechengitter begrenzt. Der sich zwischen dicht benachbarten Partikeln ausbildende Fluidfilm kann dabei nur zum Teil simuliert werden. Folglich wird der Anteil des Fluidfilms, der nicht direkt durch das numerische Rechengitter aufzulösen ist, durch eine empirische Approximation modelliert. Nguyen & Ladd (2002) sowie Feng & Michaelides (2005) führen hierzu eine künstliche Rückstellkraft zwischen den involvierten Partikelpaaren ein. Im Rahmen dieser Arbeit wird allerdings nur derjenige Teil des Fluidfilms berücksichtigt, der direkt durch das numerische Rechengitter aufgelöst wird.

## 2.5 Charakterisierung von Partikelclustern

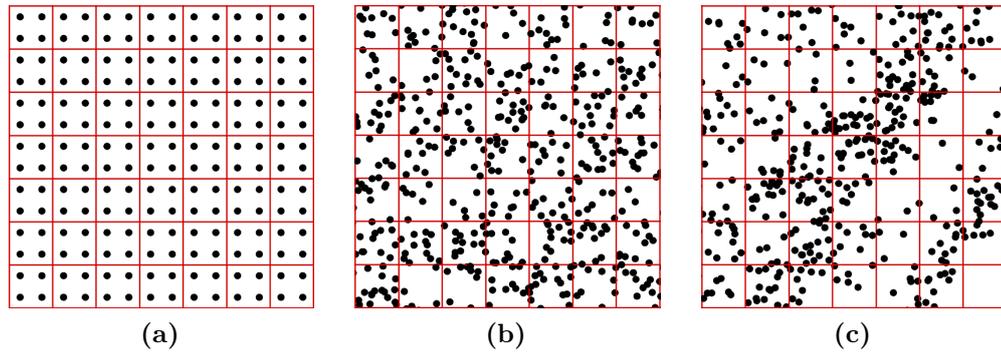
Unter Anwendung der in den folgenden Abschnitten beschriebenen Methoden ist es möglich, die bevorzugte Konzentration der Einzelpartikel (Kapitel 2.5.1) sowie die radiale Korrelation von Partikelpaaren (Kapitel 2.5.2 und 2.5.3) zu quantifizieren. Die Berechnung der verschiedenen skalaren Größen basiert im Wesentlichen auf einem Vergleich des betrachteten Konzentrationfeldes der Partikel mit einer zufällig verteilten Partikelkonzentration. Darüber hinaus lässt sich die Morphologie von Partikelclustern anhand der Minkowski-Funktionale charakterisieren (siehe Kapitel 2.5.4). Unter Einsatz dieser Methoden wird in Kapitel 4.3 das Clusteringverhalten in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Punktpartikel detailliert spezifiziert.

### 2.5.1 Globale Partikelakkumulation

Die statistische Verteilung der lokalen Partikelanzahldichte wird genutzt, um die relative Neigung der Partikel zur Entmischung und folglich zur bevorzugten Konzentration zu messen. Nach Fessler *et al.* (1994) wird die Segregation der dispersen Phase mittelbar durch die globale Akkumulation  $\Sigma_P$  der Partikel bestimmt:

$$\Sigma_P = \frac{1}{\lambda} (\sigma - \sigma_{\text{Pois}}) \quad (2.72)$$

worin  $\sigma$  die Standardabweichung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (WDF) der betrachteten Partikelanzahlverteilung  $P(N_P)$  und  $\sigma_{\text{Pois}}$  die Standardabweichung einer



**Abb. 2.6.** Zweidimensionale Ansicht des für die Boxcounting-Methode verwendeten Gitters (rote Quadrate) mit drei charakteristischen Verteilungen der Partikel (schwarze Punkte): (a) geordnet, (b) zufällig und (c) lokal konzentriert.

Poisson-Verteilung ist. Im Fall einer zufälligen Verteilung der gleichen Gesamtpartikelanzahl  $N_{P_{\text{ges}}}$  entspricht die zugehörige WDF der Partikelanzahlverteilung einer Poisson-Verteilung:

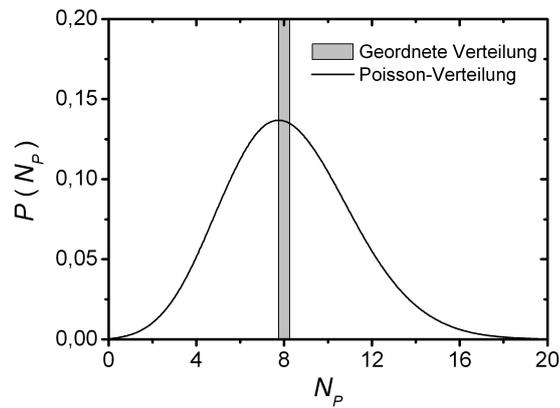
$$P_{\text{Pois}}(n) = \frac{\lambda^n}{n!} \exp(-\lambda) \quad (2.73)$$

mit  $n$  voneinander unabhängigen Ereignissen. In den Gleichungen (2.72) und (2.73) repräsentiert  $\lambda$  die mittlere Partikelanzahl in einer Zelle unter Annahme einer gleichmäßigen Zufallsverteilung der Partikel:

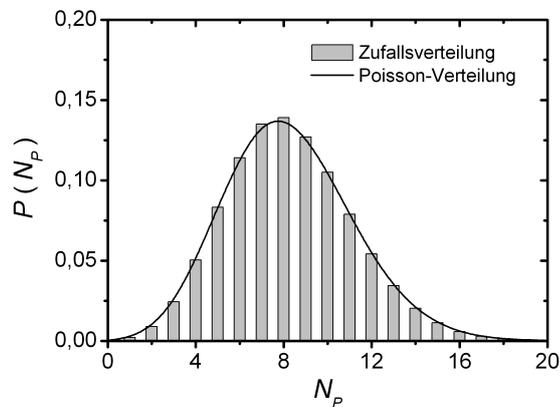
$$\lambda = \frac{N_{P_{\text{ges}}}}{N_B} \quad (2.74)$$

Die Ermittlung der betrachteten Partikelanzahlverteilung beruht auf der Boxcounting-Methode. Zu diesem Zweck wird das gesamte Rechengebiet mit einem äquidistanten Gitter der Gitterweite  $\Delta x_i$  überdeckt und die Partikelanzahl  $N_P$  in jeder würfelförmigen Box bestimmt. Der Parameter  $N_B$  entspricht hierbei der Gesamtanzahl an verwendeten Boxen. Abbildung 2.6 verdeutlicht dieses Konzept anhand dreier charakteristischer Partikelverteilungen. Die zugehörigen WDFs der Partikelanzahlverteilung sind in Abbildung 2.7 gemeinsam mit der entsprechenden Poisson-Verteilung dargestellt.

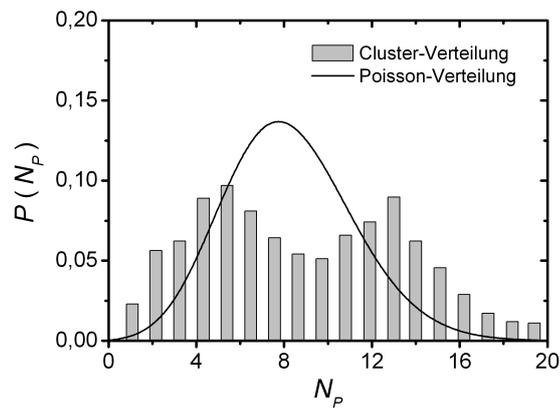
Wie Abbildung 2.7a zeigt, befinden sich im Fall der geordneten Verteilung jeweils acht Partikel in einer Box, sodass die globale Akkumulation der Partikel nach Gleichung (2.72) Werte von  $\Sigma_P < 0$  annimmt. Bei einer zufälligen Verteilung der Partikel entspricht die WDF der Partikelanzahlverteilung gleich der zugehörigen Poisson-Verteilung (siehe Abbildung 2.7b). Als Folge dessen ist  $\Sigma_P = 0$ . Demgegenüber impliziert die in Abbildung 2.7c dargestellte bimodale Anzahlverteilung der Partikel



(a)



(b)



(c)

**Abb. 2.7.** Gegenüberstellung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen  $P$  (graue Balken) einer (a) geordneten, (b) zufälligen und (c) lokal konzentrierten Partikelanzahlverteilung mit der Grunde liegenden Poisson-Verteilung  $P_{\text{Pois}}$  (durchgezogene Linie).

eine Segregation der dispersen Phase. In diesem Zusammenhang ist  $\Sigma_P > 0$  und steigt mit zunehmendem Grad des Clustering sukzessive an. Dieser Ansatz zur Charakterisierung der Akkumulation von Partikeln wurde beispielsweise in homogener isotroper Turbulenz (Février *et al.* 2005) sowie in einer turbulenten Kanalströmung (Picciotto *et al.* 2005) angewandt.

### 2.5.2 Korrelationsdimension

Die in der Literatur wohl am verbreitetste Kennzahl zur Bestimmung der fraktalen Dimension von geometrischen Objekten ist die Korrelationsdimension. Dieser durch Grassberger & Procaccia (1984) eingeführte Strukturparameter wurde erstmals von Tang *et al.* (1992) auf das Clustering von Partikeln appliziert und später von weiteren Arbeitsgruppen wie Fessler *et al.* (1994), Calzavarini *et al.* (2008) und Bec *et al.* (2008) verwendet. Die Berechnung der Korrelationsdimension  $D_2$  beruht auf dem Korrelationsintegral  $C_2(r)$ , welches die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass zwei Partikel mit den Positionen  $\mathbf{x}_{P_i}$  und  $\mathbf{x}_{P_j}$  innerhalb des Abstands  $r$  liegen. Auf Basis der Heaviside-Funktion  $\mathcal{H}$  ist  $C_2(r)$  wie folgt definiert:

$$C_2(r) = \lim_{N_P \rightarrow \infty} \frac{1}{N_P^2} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{i=j+1}^{N_P} \mathcal{H}(r - |\mathbf{x}_{P_i} - \mathbf{x}_{P_j}|), \quad i \neq j \quad (2.75)$$

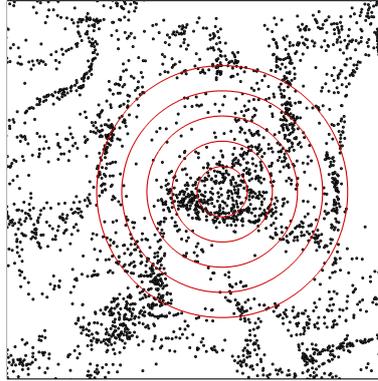
Die Korrelationsdimension gibt das Skalierungsverhalten von  $C_2(r) \sim r^{D_2}$  für  $r \rightarrow 0$  an und wird mit:

$$D_2 = \lim_{r \rightarrow 0} d_2(r), \quad d_2(r) = \frac{d \log C_2(r)}{d \log r} \quad (2.76)$$

berechnet.<sup>4</sup> Die logarithmische Ableitung  $d_2(r)$  in Gleichung (2.76) wird als lokale Korrelationsdimension bezeichnet. Sind die Partikel in dem gesamten Volumen um das Bezugspartikel  $\mathbf{x}_{P_i}$  gleichmäßig verteilt, skaliert  $C_2(r)$  mit  $r^3$  und  $D_2 = 3$ . Weisen die Partikel hingegen eine gleichmäßige Verteilung über die Fläche einer Kugelschale auf, ist die Korrelationsdimension gleich zwei, da  $C_2(r)$  mit  $r^2$  skaliert. Darüber hinaus können sich die Partikel gleichmäßig in einer geradlinigen eindimensionalen Strähne konzentrieren. In diesem Fall skaliert  $C_2(r)$  mit  $r$  und  $D_2 = 1$ . Die Korrelationsdimension quantifiziert demnach die Abweichung der betrachteten Partikelverteilung zu einer gleichmäßigen  $n$ -dimensionalen Zufallsverteilung in Form einer skalaren Größe, die sich mit zunehmendem Grad des Clustering entsprechend reduziert.

---

<sup>4</sup>Das für die Bestimmung der Korrelationsdimension angewandte Berechnungsprogramm ist unter Sarraille & DiFalco (1992) zugänglich. Es beruht auf einem optimierten Boxcounting-Algorithmus von Liebovitch & Toth (1989).



**Abb. 2.8.** Schematische Darstellung der zur Bestimmung der Partikelpaarkorrelationsfunktion generierten Kugelschalen (*rote Kreisringe*) im Zentrum eines Partikelclusters (*schwarze Punkte*) unter Annahme von Partikel-Partikel-Kollisionen.

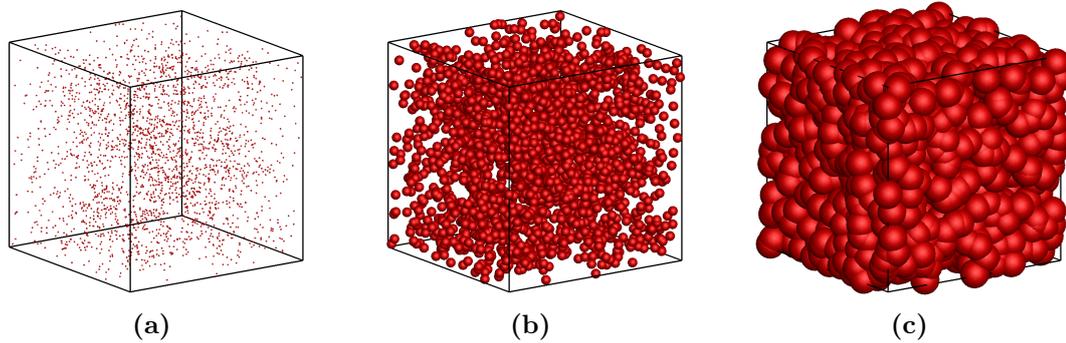
### 2.5.3 Radiale Korrelation von Partikelpaaren

Die Partikelpaarkorrelationsfunktion  $g_r(r)$  wird häufig als radiale Verteilungsfunktion (RVF) bezeichnet. Sie bezieht die Anzahl  $N_{P2}(r)$  der Partikelpaare, die durch den Abstand  $r$  innerhalb des Intervalls  $[r - \Delta r/2; r + \Delta r/2]$  separiert sind, auf die erwartete Gesamtanzahl  $N_{P2\text{ges}}$  der Partikelpaare, die sich aus einer gleichmäßigen Partikelverteilung ergibt. Die RVF wird durch Einteilung der Partikelpaare entsprechend ihres Separationsabstandes rechnerisch bestimmt:

$$g_r(r) = \left\langle \frac{N_{P2}(r)/\Delta V_r}{N_{P2\text{ges}}/V} \right\rangle_P \quad (2.77)$$

worin  $\Delta V_r$  das Volumen einer Kugelschale mit der Stärke  $\Delta r$  charakterisiert und  $N_{P2\text{ges}} = N_P(N_P - 1)/2$  die Gesamtanzahl an Partikelpaaren im gesamten Volumen  $V$  des Strömungsgebiets ist. Die zugrundeliegende Klasseneinteilung der Partikelpaare wird in Abbildung 2.8 anhand verschieden großer Kugelschalen veranschaulicht. In Gleichung (2.77) kennzeichnet der Operator  $\langle \cdot \rangle_P$  den Ensemblemittelwert über eine diskrete Anzahl an Partikeln.

Unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen können gleichgroße Partikel nicht weniger als einen Durchmesser auseinander liegen. Im Fall  $r < d_P$  gilt daher  $g_r = 0$ . Für große Separationsabstände nähert sich das Partikelfeld hingegen einer gleichmäßigen Verteilung mit  $g_r(r \rightarrow \infty) = 1$ . Im übrigen Definitionsbereich,  $d_P \leq r < \infty$ , kann die radiale Verteilung Werte von  $g_r \geq 1$  annehmen.



**Abb. 2.9.** Momentaufnahme der Verteilung in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Partikel (*rote Kugeln*) mit verschiedenen Hüllradien zur Bestimmung der Minkowski-Funktionale: (a)  $r/\eta_K = 0,5$ , (b)  $r/\eta_K = 3,0$  und (c)  $r/\eta_K = 9,0$ . Die Hüllradien  $r$  sind mit Hilfe des Kolmogorov-Längenmaßes  $\eta_K$  normiert.

#### 2.5.4 Minkowski-Funktionale

Weder die radiale Korrelation  $g_r$  von Partikelpaaren noch die Korrelationsdimension  $D_2$  und Akkumulation  $\Sigma_P$  von Partikeln gewähren einen Einblick in die räumliche Struktur von Partikelclustern. Darüber hinaus können nach Calzavarini *et al.* (2008) qualitativ andersartige Clusterstrukturen ähnliche Werte von  $\Sigma_P$  und  $D_2$  annehmen. Diese Mehrdeutigkeit lässt sich unter Zuhilfenahme der Minkowski-Funktionale auflösen, welche eine morphologische Analyse von Partikelverteilungen ermöglichen.

Die Minkowski-Funktionale wurden ursprünglich für die Kosmologie entwickelt, um die globale Geometrie und Struktur der großräumigen Verteilung von Galaxien zu quantifizieren (Schmalzing *et al.* 1996). Der in dieser Arbeit angewandte Ansatz für die Berechnung der Minkowski-Funktionale orientiert sich an Mecke *et al.* (1994). Zur Unterscheidung des Clustering in räumlich ausgedehnten Bögen, die aus wolken- oder fadenförmigen Gruppierungen bestehen können, wird die Vereinigungsmenge  $\mathcal{A}_r$  aus der Gesamtheit aller sphärischen Partikel  $N_{P_{\text{ges}}}$  gebildet:

$$\mathcal{A}_r = \bigcup_{i=1}^{N_{P_{\text{ges}}}} \mathcal{B}_r(\mathbf{x}_{P_i}) \quad (2.78)$$

worin  $\mathcal{B}_r$  eine Kugel um das Partikel an der Position  $\mathbf{x}_{P_i}$  mit dem Hüllradius  $r$  ist. Durch schrittweises Aufblähen der diskreten Kugelhüllen gemäß Abbildung 2.9 entstehen im zunehmenden Maß Verbindungen zwischen benachbarten Kugeln. Die globale Morphologie der Vereinigungsmenge dieser Kugeln verändert sich mit jedem neuen Hüllradius, sodass  $r$  ein Analyseparameter ist. Mit diesen Voraussetzungen zeigt Hadwiger (1957), dass die vier Minkowski-Funktionale  $V_\mu$  mit  $\mu \in \{0, 1, 2, 3\}$  eine

**Tab. 2.1.** Definition der Minkowski-Funktionale  $V_\mu$  im dreidimensionalen Raum in Bezug auf die zugehörigen geometrischen Größen (Schmalzing *et al.* 1996).

Geometrische Größe		$\mu$	$V_\mu$
$V$	Volumen	0	$V$
$A$	Oberfläche	1	$A/6$
$H$	Integrale mittlere Krümmung	2	$H/3\pi$
$\chi$	Euler-Charakteristik	3	$\chi$

vollständige morphologische Charakterisierung des Körpers  $\mathcal{A}_r$  in den drei Dimensionen erlauben. Tabelle 2.1 listet die einzelnen Funktionale sowie ihre jeweilige geometrische Interpretation auf. Für einen glatten Körper  $K$  werden die Oberfläche  $A$ , mittlere Krümmung  $H$  und Euler-Charakteristik  $\chi$  nach Kerscher *et al.* (1997) anhand der folgenden Oberflächenintegrale berechnet:

$$A = \oint_{\partial K} dA \quad (2.79)$$

$$H = \frac{1}{2} \oint_{\partial K} dA \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (2.80)$$

$$\chi = \frac{1}{4\pi} \oint_{\partial K} dA \frac{1}{r_1 r_2} \quad (2.81)$$

mit den Hauptkrümmungsradien  $r_1$  und  $r_2$ .<sup>5</sup> Die Raumdichten der Minkowski-Funktionale  $v_\mu$  ergeben sich aus der Normierung von  $V_\mu$  auf die Kantenlängen  $L$  des würfelförmigen Rechengebiets:

$$v_\mu(\mathcal{A}_r) = \frac{V_\mu(\mathcal{A}_r)}{L^3}, \quad \mu \in \{0, 1, 2, 3\} \quad (2.82)$$

Wie von Mecke *et al.* (1994) diskutiert, ermöglicht die Euler-Charakteristik als topologische Invariante weitere Definitionen, beispielsweise:  $\chi = \#(\text{isolierte Körper}) - \#(\text{Tunnel}) + \#(\text{vollständig umschlossene Hohlräume})$ . Im Fall einer zufälligen Verteilung der Partikel stimmen die Raumdichten der Minkowski-Funktionale mit den aus Mecke & Wagner (1991) bekannten analytischen Werten einer Poisson-Verteilung überein.

<sup>5</sup>Die Berechnung der Minkowski-Funktionale erfolgt mit einem von Kerscher *et al.* (1997) entwickelten Computerprogramm, welches auf den von Mecke *et al.* (1994) dargelegten Methoden beruht und unter Schmalzing & Kerscher (2007) verfügbar ist.

## 2.6 Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen

In partikelbeladenen Strömungen wird der Transport einzelner Partikel sowohl von dem räumlich wie auch zeitlich veränderlichen Strömungsfeld als auch von interpartikulären Wechselwirkungen unmittelbar beeinflusst. Aus diesem Grund lässt sich das Auftreten von Kollisionen zwischen Partikeln nicht uneingeschränkt vorausberechnen. Die Erkennung und Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen erfolgt in dieser Arbeit auf Grundlage eines deterministischen Ansatzes. Unter der Annahme von binären, quasi instantanen, elastischen Stößen reduziert sich der Kontakt zwischen den sphärischen Teilchen auf einen Punkt.

### 2.6.1 Deterministisches Kollisionsmodell

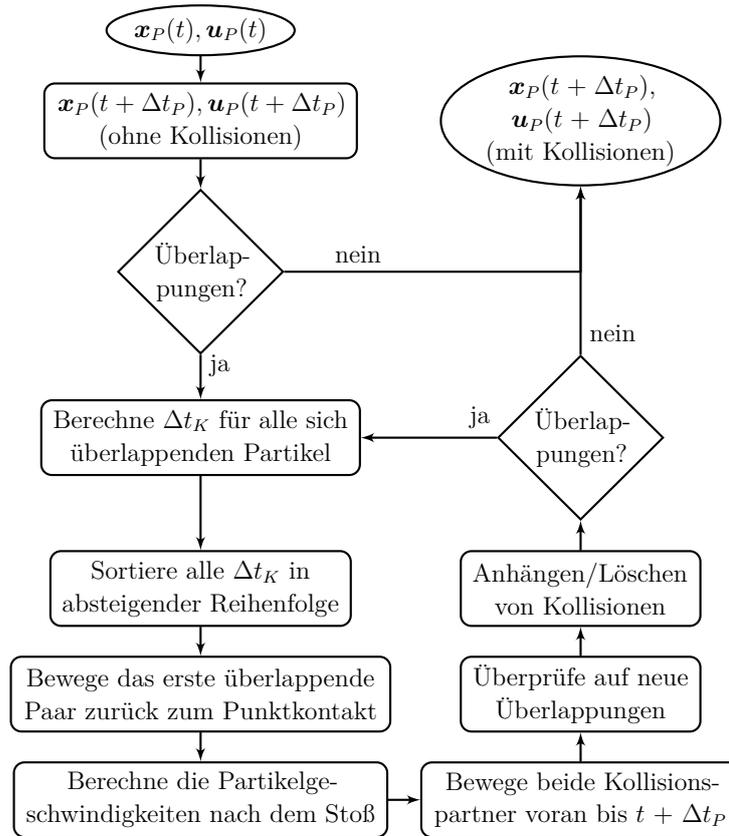
Die zeitlich sequenzielle Abarbeitung der während eines Zeitschritts stattfindenden Kollisionen basiert auf dem in Abbildung 2.10 dargestellten Kollisionsalgorithmus. In Analogie zu Sundaram & Collins (1996) werden die Partikel zunächst simultan mit dem jeweiligen Zeitschritt voranbewegt. Zur besseren Übersicht soll in den folgenden Ausführungen lediglich der für Punktpartikel geltende Partikelzeitschritt  $\Delta t_P$  als charakteristische Zeitschrittweite herangezogen werden, wenngleich dieses Kollisionsmodell auch für aufgelöste Partikel anwendbar ist. Durchdringen sich die Volumen zweier Partikel am Ende des Zeitintervalls  $\Delta t_P$ , liegt eine Partikel-Partikel-Kollision vor. Der Abstand zwischen den Massenzentren beider Kollisionspartner ist folglich kleiner oder gleich der Summe ihrer halben Durchmesser:

$$|\mathbf{x}_{P\alpha\beta}(t + \Delta t_P)| \leq \frac{d_{P\alpha} + d_{P\beta}}{2} \quad (2.83)$$

worin  $\mathbf{x}_{P\alpha\beta}$  die Relativposition zwischen den Partikeln  $\alpha$  und  $\beta$  ist. Die Überprüfung des in Gleichung (2.83) definierten Kollisionskriteriums ist für eine große Anzahl an möglichen Partikelpaaren sehr rechenintensiv, sodass die Bestimmung potentieller Kollisionspartner bei Punktpartikeln auf der Zell-Index-Methode beruht (Allen & Tildesley 1987; Donev *et al.* 2005). Aufgrund der Annahme  $d_P \ll \Delta x$  kann sich ein Partikel nur mit Partikeln überlappen, die sich entweder in der eigenen oder in den 26 benachbarten Fluidzellen befinden. Jede Fluidzelle verfügt daher über eine Liste mit den in ihr befindlichen Partikeln. Die untereinander verknüpften Listen werden am Ende eines jeden Zeitschritts entsprechend der Partikelbewegungen aktualisiert.

Nach Gleichung (2.83) sind Kollisionen nur dann detektierbar, wenn sich die Partikel während eines Zeitschritts nicht vollständig durchdringen. Um den Grad der Interpenetration zu begrenzen, sollte nach Sundaram & Collins (1996) die Partikel-Courant-Zahl  $Cu_P$  deutlich kleiner als eins sein:

$$Cu_P = \frac{|\mathbf{u}_P| \Delta t_P}{d_P} \quad (2.84)$$



**Abb. 2.10.** Programmablaufplan zur zeitlich sequentiellen Erkennung und Durchführung von Partikel-Partikel-Kollisionen nach Sundaram & Collins (1996).

Wie zuvor in Kapitel 2.3.2 diskutiert, hängt der für alle Partikel gültige Zeitschritt  $\Delta t_P$  nicht zuletzt vom Zeitmaß der Interpenetration  $T_I$  ab. Die Zeit bis zur vollständigen Durchdringung eines Partikels berechnet sich mit:

$$T_I = \frac{d_P}{|\mathbf{u}_P|} \quad (2.85)$$

Um der Forderung  $Cu_P \ll 1$  zu genügen, wird die kleinste Interpenetrationszeit durch:

$$T_{I\min} = 0,1 \min(T_I^{(1)}, \dots, T_I^{(n)}) \quad (2.86)$$

nochmals auf 1/10 reduziert und in Gleichung (2.46) bei der Bestimmung des Partikelzeitschritts  $\Delta t_P$  berücksichtigt. Da sich die Partikel innerhalb des Zeitschritts mit einer konstanten Geschwindigkeit bewegen, lässt sich die Kollisionszeit  $\Delta t_K$  durch Lösen der folgenden quadratischen Gleichung numerisch berechnen:

$$|\mathbf{x}_{P\alpha\beta}(t + \Delta t_P) - \mathbf{u}_{P\alpha\beta}(t + \Delta t_P) \Delta t_K| = \frac{d_{P\alpha} + d_{P\beta}}{2} \quad (2.87)$$

worin  $\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$  die Relativgeschwindigkeit der Kollisionspartner markiert. Die Kollisionszeiten aller relevanten Partikelpaare werden gemäß Abbildung 2.10 in einem Zwischenschritt in absteigender Reihenfolge sortiert. Bedingt durch die zeitlich sequentielle Abarbeitung der Kollisionen wird das Partikelpaar mit der größten Kollisionszeit um  $\Delta t_K$  in der Zeit zurück bis zum Kontaktpunkt bewegt.

Die anschließende Berechnung der Partikelgeschwindigkeiten nach dem Zusammenstoß basiert auf dem im folgenden Kapitel dargelegten Kollisionsoperator. Nach der Kollision werden beide Partikel um die Zeit  $\Delta t_K$  mit den neuen Geschwindigkeiten  $\mathbf{u}_{P\alpha}^*$  und  $\mathbf{u}_{P\beta}^*$  voranbewegt, um den gegenwärtigen Zeitschritt  $\Delta t_P$  zu vervollständigen (siehe Abbildung 2.10). Aufgrund der veränderten Endposition des Partikelpaares werden beide Teilchen auf neue Überlappungen überprüft und die Liste der Kollisionspartner aktualisiert. Dieses Berechnungsschema wird so lange durchgeführt, bis alle Kollisionen vollzogen sind.

### 2.6.2 Kollisionsoperator

Die Bestimmung der Partikelgeschwindigkeiten  $\mathbf{u}_{P\alpha}^*$  und  $\mathbf{u}_{P\beta}^*$  nach einer Kollision beruht auf den von Tanaka & Tsuji (1991) vorgestellten Stoßgesetzen. Unter Berücksichtigung der Impulserhaltung resultieren die neuen Komponenten der Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_P^*$  aus der Partikelgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_P$  vor der Kollision:

$$\mathbf{u}_{P\alpha}^* = \mathbf{u}_{P\alpha} + \frac{\mathbf{J}}{m_{P\alpha}} \quad (2.88)$$

$$\mathbf{u}_{P\beta}^* = \mathbf{u}_{P\beta} - \frac{\mathbf{J}}{m_{P\beta}} \quad (2.89)$$

mit dem Impuls  $\mathbf{J}$  und den Partikelmassen  $m_{P\alpha}$  und  $m_{P\beta}$ . Wie in Abbildung 2.11 gezeigt, setzt sich der bei einer Kollision auftretende Impuls aus einem Normal-  $J_n$  und einem Tangentialanteil  $J_t$  zusammen:

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t \quad (2.90)$$

Der von Partikel  $\alpha$  auf Partikel  $\beta$  gerichtete Normaleneinheitsvektor  $\mathbf{e}_n$  lautet:

$$\mathbf{e}_n = \frac{\mathbf{x}_{P\beta} - \mathbf{x}_{P\alpha}}{|\mathbf{x}_{P\beta} - \mathbf{x}_{P\alpha}|} \quad (2.91)$$

Demgegenüber basiert der Tangentialeinheitsvektor  $\mathbf{e}_t$  auf den Komponenten der tangentialen Schlupfgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}$  am Kontaktpunkt von Partikel  $\alpha$  und  $\beta$ :

$$\mathbf{e}_t = \frac{\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}}{|\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}|} \quad (2.92)$$

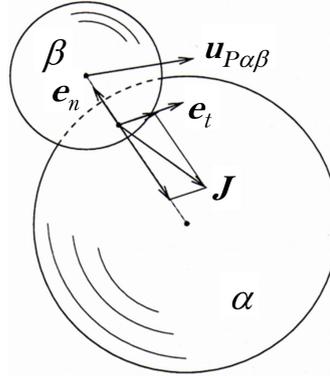


Abb. 2.11. Schematische Darstellung zweier kollidierender Partikel (Tanaka & Tsuji 1991).

worin  $\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}$  auf der Relativgeschwindigkeit beider Kollisionspartner beruht:

$$\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta} = \mathbf{u}_{P\alpha\beta} - (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}) \mathbf{e}_n \quad (2.93)$$

Durch Einführung des normalen Restitutionskoeffizienten  $c_R$  lassen sich die Normalanteile der Relativgeschwindigkeit vor und nach dem Aufprall auf folgende Weise in Beziehung setzen:

$$c_R = - \frac{\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}^*}{\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}} \quad (2.94)$$

Das Verhältnis aus Tangential- zu Normalanteilen der Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$  charakterisiert die Schiefe des Stoßes:

$$\psi = \frac{|\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}|}{\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}} \quad (2.95)$$

Bei einem Frontalzusammenstoß der Partikel ist der Schiefeparameter  $\psi$  gleich Null, wohingegen für  $\psi$  größer als Null eine schiefe Kollision vorliegt. Im Fall eines Haftstoßes wird der tangentielle Restitutionskoeffizient aufgrund der fehlenden tangentialen Schlupfgeschwindigkeit ebenfalls zu Null. Infolgedessen wird der dynamische Reibungskoeffizient  $\mu_d$  durch den statischen Reibungskoeffizient  $\mu_s$  ersetzt. Unter Beachtung dieser Annahmen reduziert sich  $\psi$  auf den Grenzschiefeparameter  $\psi_0$ :

$$\psi_0 = 3,5 \mu_s (1 + c_R) \quad (2.96)$$

Ist  $\psi \leq \psi_0$  kommt es zu einem Haftstoß. Die neuen Komponenten der Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_P^*$  werden in diesem Fall für beide Partikel mittels nachstehender Impulsbilanz bestimmt:

$$\mathbf{u}_{P\alpha}^* = \mathbf{u}_{P\alpha} - \frac{m_{Peff}}{m_{P\alpha}} \left[ (1 + c_R) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} |\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}| \mathbf{e}_t \right] \quad (2.97)$$

$$\mathbf{u}_{P\beta}^* = \mathbf{u}_{P\beta} + \frac{m_{Peff}}{m_{P\beta}} \left[ (1 + c_R) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} |\mathbf{u}_{Pt\alpha\beta}| \mathbf{e}_t \right] \quad (2.98)$$

worin die effektive Masse der Kollisionspartner mit:

$$m_{P\text{eff}} = \frac{m_{P\alpha} m_{P\beta}}{m_{P\alpha} + m_{P\beta}} \quad (2.99)$$

definiert ist. Dagegen tritt bei  $\psi > \psi_0$  ein Gleitstoß auf. Die Impulsbilanz zur Berechnung von  $\mathbf{u}_{P\alpha}^*$  und  $\mathbf{u}_{P\beta}^*$  hängt in diesem Fall zusätzlich vom dynamischen Reibungskoeffizienten  $\mu_d$  ab:

$$\mathbf{u}_{P\alpha}^* = \mathbf{u}_{P\alpha} - (1 + c_R) \frac{m_{P\text{eff}}}{m_{P\alpha}} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}) (\mathbf{e}_n - \mu_d \mathbf{e}_t) \quad (2.100)$$

$$\mathbf{u}_{P\beta}^* = \mathbf{u}_{P\beta} + (1 + c_R) \frac{m_{P\text{eff}}}{m_{P\beta}} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{u}_{P\alpha\beta}) (\mathbf{e}_n - \mu_d \mathbf{e}_t) \quad (2.101)$$

Eine detaillierte Herleitung des in diesem Kapitel eingeführten Kollisionsoperators ist Decker (2005) zu entnehmen. Für die Untersuchung von Kollisionsprozessen sind in den vorliegenden Studien ausschließlich vollkommen elastische, reibungsfreie Partikelstöße von Interesse. Aus diesem Grund nimmt der Restitutionskoeffizient einen konstanten Wert von  $c_R = 1,0$  an, die beiden Reibungskoeffizienten hingegen Festwerte von  $\mu_d = 0,0$  und  $\mu_s = 0,0$ .

## 2.7 Modellierung der Partikelagglomeration

Analog zur Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen basiert die Beschreibung der Agglomeration von Primärpartikeln auf einem deterministischen Agglomerationsmodell. Um die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln im Nahbereich kollidierender Partikel vollständig berücksichtigen zu können, werden für die Analyse der Agglomerationsprozesse ausschließlich Partikel mit aufgelösten Feststoff-Fluid-Phasengrenzen herangezogen. Das an der Agglomeration beteiligte Kollisionspaar kann sich hierbei aus zwei sphärischen Primärpartikeln, aus je einem Primärpartikel und Agglomerat oder aus zwei Agglomeraten zusammensetzen. Ein Agglomerat kann wiederum aus einer beliebigen Anordnung kugelförmiger Primärpartikel bestehen.

### 2.7.1 Deterministisches Agglomerationsmodell

Im Gegensatz zu dem in Gleichung (2.83) definierten Kollisionskriterium dürfen sich die Volumen der Partikel vor der Agglomeration nicht direkt berühren oder durchdringen, um eine eindeutige Differenzierbarkeit der Primärpartikel zu gewährleisten. Auf diese Weise lassen sich die Verteilungsfunktionen des Fluids  $f_{\sigma i}$  an der Feststoff-Fluid-Phasengrenze den jeweils gegenüberliegenden Feststoffknoten auch im weiteren Verlauf der Simulation zweifelsfrei zuordnen. Der minimale Abstand  $\Delta s$

zwischen den Oberflächen der Agglomerationspartner beträgt in den Berechnungen lediglich 0,02 % des mittleren Durchmessers  $\bar{d}_P$  der Primärpartikel, wodurch das in dem Spalt befindliche Fluid unter die Auflösungsgrenze des numerischen Rechengitters fällt. Es liegt eine Kollision vor, wenn der Betrag der Relativposition  $\mathbf{x}_{P12}$  zwischen den Massenzentren der Primärpartikel 1 und 2 am Ende des Zeitschritts  $\Delta t$  kleiner oder gleich dem nachstehenden Kriterium ist:

$$|\mathbf{x}_{P12}(t + \Delta t)| \leq \frac{d_{P1} + d_{P2}}{2} + \Delta s \quad (2.102)$$

Die Überprüfung aller potentiellen Kollisionspaare erfolgt demnach auf der Ebene der Primärpartikel, wobei die Kollisionspartner bereits in voneinander abweichenden Agglomeraten gebunden sein können. In diesem Zusammenhang bedeutet eine Kollision zugleich die Agglomeration der involvierten Primärpartikel. Die molekulare Anziehung zwischen den Primärpartikeln wird dabei als stark genug angenommen, um ein Anhaften der Kollisionspartner in jedem Fall zu legitimieren. Die einhergehenden Haftkräfte unter bereits agglomerierten Primärpartikeln verhindern zudem eine Umorientierung der Primärpartikel im Agglomerat sowie den Zerfall zuvor gebildeter Agglomerate.

Unter Anwendung eines additiven Wechselwirkungspotentials, bestehend aus Van-der-Waals Anziehung und elektrostatischer Abstoßung, lässt sich zudem das Anhaften oder Abprallen kollidierender Primärpartikel dediziert modellieren. Der relevante Bereich des resultierenden Gesamtpotentials liegt bei den in dieser Arbeit analysierten Dispersionen jedoch deutlich unter der Auflösungsgrenze des Rechengitters, sodass das Gesamtwechselwirkungspotential als Haftrandbedingung für die Primärpartikel ungeeignet ist. Unter vereinfachten Annahmen kann etwa mit Hilfe einer Energiebilanz diejenige kritische Geschwindigkeit bestimmt werden, oberhalb derer die Partikel von einer festen Oberfläche abprallen (Ho & Sommerfeld 2002). Darüber hinaus erlaubt die von Derksen (2012) vorgestellte rechtwinklige Sprungfunktion eine deutlich vereinfachte Modellierung des Potentialverlaufs. Aus Gründen der Vereinfachung wird das Abprallen von Primärpartikeln in den in Kapitel 6 vorgestellten Untersuchungen dennoch vernachlässigt.

### 2.7.2 Agglomerationsoperator

Die Berechnung der translatorischen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_A$  im Massenschwerpunkt des neu formierten Agglomerats folgt den Gesetzen eines vollkommen unelastischen Stoßes zweier Partikel unter Erhaltung des Gesamtimpulses:

$$\mathbf{u}_A = \frac{m_{P1} \mathbf{u}_{P1} + m_{P2} \mathbf{u}_{P2}}{m_A} \quad (2.103)$$

worin die Masse  $m_A$  des Agglomerats der Summe der an dem Stoß beteiligten Partikelmassen  $m_{P1}$  und  $m_{P2}$  entspricht. Analog zu dem Impulserhaltungssatz bei der Translation gilt für die Bestimmung der neuen Winkelgeschwindigkeit  $\boldsymbol{\omega}_A$  um den Massenschwerpunkt des aus dem unelastischen Stoß hervorgehenden Agglomerats der folgende Drehimpulserhaltungssatz:

$$\begin{aligned}\omega_{Ax} &= \frac{I_{P1xx} \omega_{P1x} + I_{P2xx} \omega_{P2x}}{I_{Axx}} \\ \omega_{Ay} &= \frac{I_{P1yy} \omega_{P1y} + I_{P2yy} \omega_{P2y}}{I_{Ayy}} \\ \omega_{Az} &= \frac{I_{P1zz} \omega_{P1z} + I_{P2zz} \omega_{P2z}}{I_{Azz}}\end{aligned}\quad (2.104)$$

mit den Trägheitsmomenten  $I_{xx}$ ,  $I_{yy}$  und  $I_{zz}$  der beiden Kollisionspartner 1 und 2 sowie des Agglomerats  $A$  um die raumfesten Koordinatenachsen  $(x, y, z)$ . Da für beliebig geformte Agglomerate keine analytische Lösung der Trägheitsmomente existiert, werden die diskreten Hauptdiagonalelemente  $I_{ii}$  des Trägheitstensors nach Hölzer (2007) wie folgt numerisch berechnet:

$$I_{ii} = \sum_n \rho_n \Delta V_n \left[ (x_{Pjn} - x_{Aj})^2 + (x_{Pkn} - x_{Ak})^2 \right], \quad i \neq j; i \neq k; j \neq k \quad (2.105)$$

Der Massenschwerpunkt  $\boldsymbol{x}_A$ , auch Massenmittelpunkt genannt, repräsentiert das gewichtete Mittel der Ortsvektoren  $\boldsymbol{x}_P$  aller agglomerierten Primärpartikel und kennzeichnet zugleich die charakteristische Position des Agglomerats.

### 2.7.3 Bewegungsgleichungen des Agglomerats

Ebenso wie sphärische Primärpartikel bewegen sich Agglomerate in einem Lagrangeschen Bezugssystem frei durch das ortsfeste Rechengitter. Das zweite Newtonsche Gesetz für die Translation sowie die kinematischen Gleichungen für die Position und Rotation sind für Agglomerate wie folgt definiert:

$$m_A \frac{d\boldsymbol{u}_A}{dt} = \boldsymbol{F} \quad (2.106)$$

$$\frac{d\boldsymbol{x}_A}{dt} = \boldsymbol{u}_A \quad (2.107)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\phi}_A}{dt} = \boldsymbol{\omega}_A \quad (2.108)$$

worin  $\boldsymbol{\phi}_A$  den Drehwinkel des Agglomerats kennzeichnet. Während für die Berechnung der Gleichungen (2.106)-(2.108) das raumfeste  $(x, y, z)$ -Koordinatensystem Anwendung findet, basieren die folgenden Eulerschen Bewegungsgleichungen für die Rotation

auf dem körperfesten Hauptachsenkoordinatensystem des Agglomerats, dessen Hauptträgheitsachsen mit  $(a, b, c)$  bezeichnet sind (Hölzer 2007):

$$\begin{aligned} I_{aa} \frac{d\omega_{Aa}}{dt} - (I_{bb} - I_{cc}) \omega_{Ab} \omega_{Ac} &= T_a \\ I_{bb} \frac{d\omega_{Ab}}{dt} - (I_{cc} - I_{aa}) \omega_{Ac} \omega_{Aa} &= T_b \\ I_{cc} \frac{d\omega_{Ac}}{dt} - (I_{aa} - I_{bb}) \omega_{Aa} \omega_{Ab} &= T_c \end{aligned} \quad (2.109)$$

Die Hauptträgheitsmomente des Agglomerats  $I_{aa}$ ,  $I_{bb}$  und  $I_{cc}$  sind mittels Gleichung (2.105) numerisch zu bestimmen. Die auf das Agglomerat wirkende Gesamtkraft  $\mathbf{F}$  und das Gesamtdrehmoment  $\mathbf{T}$  gehen aus der Summierung der einzelnen Primärpartikelkräfte  $\mathbf{F}_i$  hervor:

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^{N_{PP}} \mathbf{F}_i \quad (2.110)$$

$$\mathbf{T} = \sum_{i=1}^{N_{PP}} (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{Pi}) \times \mathbf{F}_i \quad (2.111)$$

Analog zu der Modellierung einzelner aufgelöster Primärpartikel (siehe Kapitel 2.4.2) wird eine Zufallsbewegung der Agglomerate infolge der Brownschen Diffusion bei der Berechnung von  $\mathbf{F}$  und  $\mathbf{T}$  nicht berücksichtigt. Die Bewegungsgleichungen (2.106)-(2.108) werden, wie zuvor in Kapitel 2.3.1 und 2.4.2 diskutiert, mit Hilfe eines Euler-Verfahrens erster Ordnung numerisch gelöst:

$$\mathbf{u}_A(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{F}}{m_A} \Delta t + \mathbf{u}_A(t) \quad (2.112)$$

$$\mathbf{x}_A(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{u}_A(t) + \mathbf{u}_A(t + \Delta t)}{2} \Delta t + \mathbf{x}_A(t) \quad (2.113)$$

$$\boldsymbol{\phi}_A(t + \Delta t) = \frac{\boldsymbol{\omega}_A(t) + \boldsymbol{\omega}_A(t + \Delta t)}{2} \Delta t + \boldsymbol{\phi}_A(t) \quad (2.114)$$

Der für die Berechnung der Eulerschen Bewegungsgleichungen gewählte Diskretisierungsansatz führt zu dem folgenden nicht-linearen Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \omega_{Aa}(t + \Delta t) &= \frac{1}{I_{aa}} [T_a + (I_{bb} - I_{cc}) \omega_{Ab}(t + \Delta t) \omega_{Ac}(t + \Delta t)] \Delta t + \omega_{Aa}(t) \\ \omega_{Ab}(t + \Delta t) &= \frac{1}{I_{bb}} [T_b + (I_{cc} - I_{aa}) \omega_{Ac}(t + \Delta t) \omega_{Aa}(t + \Delta t)] \Delta t + \omega_{Ab}(t) \\ \omega_{Ac}(t + \Delta t) &= \frac{1}{I_{cc}} [T_c + (I_{aa} - I_{bb}) \omega_{Aa}(t + \Delta t) \omega_{Ab}(t + \Delta t)] \Delta t + \omega_{Ac}(t) \end{aligned} \quad (2.115)$$

dessen Lösung für jeden Zeitschritt  $\Delta t$  iterativ erfolgt. Nach Gleichung (2.115) wird die Winkelgeschwindigkeit  $\boldsymbol{\omega}_A$  zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  im körperfesten Hauptachsenkoordinatensystem des Agglomerats berechnet, gleichwohl  $\boldsymbol{\omega}_A$  für die Ermittlung der Verschiebung des Drehwinkels  $\Delta\phi_A$  in der kinematischen Gleichung zur Rotation in einer raumfesten Koordinatenschreibweise benötigt wird. Umgekehrt ist das Gesamtdrehmoment, welches nach Gleichung (2.111) auf dem raumfesten Koordinatensystem beruht, für die Lösung der Eulerschen Bewegungsgleichungen (2.115) in eine körperfeste Hauptachsenkoordinatenschreibweise zu überführen. Aufgrund der asymmetrischen Struktur von Agglomeraten basiert die nachstehende Abbildungsvorschrift für die Drehung zwischen den raum- und körperfesten Koordinatensystemen wie auch für die Rotation des Agglomerats auf dem mathematischen Konzept der Quaternionen (Kuipers 2002; Johnson *et al.* 2008):

$$\boldsymbol{v}' = Q \boldsymbol{v} Q^{-1} = \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{v} \quad (2.116)$$

worin  $\boldsymbol{R}$  der Drehtensor,  $\boldsymbol{v}$  ein beliebiger zu rotierender Vektor und  $\boldsymbol{v}'$  der entsprechende Vektor nach der Drehung ist. Das Einheitsquaternion  $Q$  setzt sich hierbei aus den vier Koeffizienten  $q_0, q_1, q_2$  und  $q_3$  und den Einheitsvektoren der Hauptachsen  $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y$  und  $\boldsymbol{e}_z$  zusammen:

$$Q = q_0 + \boldsymbol{q} = q_0 + q_1 \boldsymbol{e}_x + q_2 \boldsymbol{e}_y + q_3 \boldsymbol{e}_z \quad (2.117)$$

Am Beispiel der dreidimensionalen Agglomeratdrehung werden die Komponenten des Einheitsquaternions, unter Zuhilfenahme der Verschiebung des Drehwinkels  $\Delta\phi_A$  mit  $\Delta\phi_A = \phi_A(t + \Delta t) - \phi_A(t)$  und des Vektors der Drehachse  $\boldsymbol{r}$ , wie folgt berechnet:

$$Q = \cos\left(\frac{|\Delta\phi_A|}{2}\right) + \sin\left(\frac{|\Delta\phi_A|}{2}\right) \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|} \quad (2.118)$$

Gemäß Gleichung (2.116) resultiert die für die neue Orientierung des Agglomerats erforderliche Abbildungsvorschrift aus der inversen Beziehung zwischen Drehtensor und Einheitsquaternion. Die dem Einheitsquaternion zugehörige Rotationsmatrix ergibt sich nach Zhao & van Wachem (2013) aus den folgenden Komponenten:

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 - 2(q_2^2 + q_3^2) & 2q_1q_2 - 2q_0q_3 & 2q_0q_2 + 2q_1q_3 \\ 2q_1q_2 + 2q_0q_3 & 1 - 2(q_1^2 + q_3^2) & 2q_2q_3 - 2q_0q_1 \\ 2q_1q_3 - 2q_0q_2 & 2q_0q_1 + 2q_2q_3 & 1 - 2(q_1^2 + q_2^2) \end{pmatrix} \quad (2.119)$$

Der wesentliche Vorteil von Quaternionen gegenüber gewöhnlichen Rotationsmatrizen besteht, neben der höheren rechnerischen Genauigkeit und Effizienz, in einer verbesserten Stabilität der numerischen Lösung infolge nicht vorhandener Singularitäten (Zhao & van Wachem 2013).

---

Zusammenfassend ermöglichen die in diesem Kapitel vorgestellten Berechnungs- und Auswertungsmethoden eine skalenübergreifende Analyse des Clustering-, Kollisions- und Agglomerationsverhaltens von Feststoffteilchen in Zweiphasenströmungen. Um die direkte numerische Simulation der einphasigen Fluidströmung bewerten zu können, werden im folgenden Kapitel sowohl laminare als auch turbulente Strömungskonfigurationen untersucht und mit in der Literatur verfügbaren Messdaten wie auch analytischen Approximationen verglichen.

## 3 Direkte numerische Simulation der Fluidströmung

In diesem Kapitel werden einphasige, in der Literatur häufig anzutreffende Testfälle untersucht. Für die Validierung des LBM basierten Strömungslösers wird im Abschnitt 3.1 die geschlossene, laminare Kanalströmung mit rückwärts-gewandter Stufe, auch als Backward-Facing Step (BFS) bezeichnet, berechnet und mit experimentellen Messdaten verglichen. Anschließend folgt im Abschnitt 3.2 die Analyse der unter Anwendung der Pseudo-Spektral-Methode künstlich angeregten Fluidturbulenz. Die erfassten statistischen Kenngrößen von drei homogenen isotropen Turbulenzfeldern werden unter anderem mit gemessenen wie auch modellierten Energiespektren verglichen.

### 3.1 Validierung des Strömungslösers

Obwohl in der Vergangenheit eine Vielzahl von Untersuchungen zur BFS-Strömung durchgeführt wurden, existiert bislang keine vollständige analytische Beschreibung des physikalischen Ursprungs von Strömungsseparation und Wirbelbildung im Nachlauf der Stufe. Dennoch ermöglichen sowohl experimentelle Analysen (Armaly *et al.* 1983; Jovic & Driver 1994) als auch numerische Simulationen (Biswas *et al.* 2004; Le *et al.* 1997), die sich an den Geometrien der zuvor genannten Versuchsaufbauten orientieren, einen detaillierten Einblick in die zugrundeliegenden Strömungsverhältnisse.

#### 3.1.1 Numerische Konfiguration

Die Geometrie des in dieser Studie betrachteten BFS entspricht den von Armaly *et al.* (1983) durchgeführten Messungen und ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt. Tabelle 3.1 fasst die in Abbildung 3.1 definierten Kanalabmessungen,  $L_x$ ,  $L_y$  und  $L_z$ , die Länge und Höhe der Stufe,  $L_S$  und  $h_S$ , sowie die charakteristischen Eigenschaften des Fluids zusammen. Neben der Einlass- und Auslassrandbedingung in Hauptströmungsrichtung stromaufwärts respektive stromabwärts der Stufe wird das anfänglich ruhende Fluid in  $y$ -Richtung durch Symmetrierandbedingungen sowie in  $z$ -Richtung durch feste Wände mit Hafttrandbedingung begrenzt. Unter Anwendung des Hagen-Poiseuille-Gesetzes folgt die  $x$ -Komponente der Strömungsgeschwindigkeit

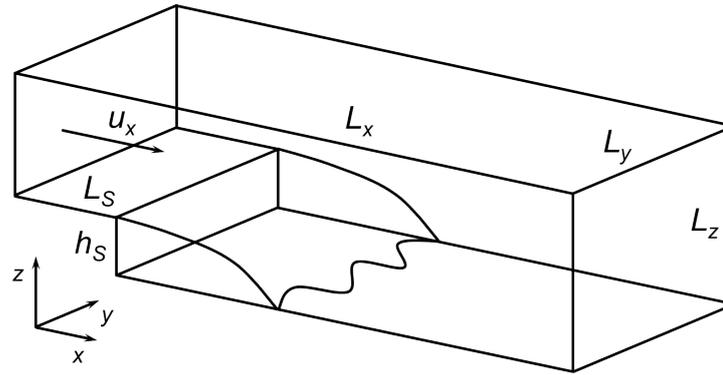


Abb. 3.1. Schematische Darstellung der Geometrie des Backward-Facing Step (Le *et al.* 1997).

am Kanaleinlass einem parabolischen Strömungsprofil:

$$u_x(z) = \begin{cases} u_{x,\max} \left( 1 - \left( \frac{h_S + 0,5 H_S - z}{0,5 H_S} \right)^2 \right), & z < h_S + 0,5 H_S \\ u_{x,\max} \left( 1 - \left( \frac{z - h_S - 0,5 H_S}{0,5 H_S} \right)^2 \right), & z \geq h_S + 0,5 H_S \end{cases} \quad (3.1)$$

mit  $H_S = L_z - h_S$  und  $u_{x,\max}$  als maximale Strömungsgeschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung. Im Gegensatz dazu sind die Komponenten  $u_y$  und  $u_z$  am Strömungseinlass über die gesamte Querschnittsfläche gleich Null. Um das Konvergenzverhalten der sich entwickelnden Kanalströmung beurteilen zu können, werden an verschiedenen Positionen im Nachlauf der Stufe lokale Strömungsparameter instantan ausgewertet. Die resultierende Reynolds-Zahl des BFS wird mit:

$$Re_{\text{BFS}} = \frac{\bar{u}_x d_h}{\nu} \quad (3.2)$$

berechnet, worin  $\bar{u}_x = 2/3 u_{x,\max}$  die x-Komponente der mittleren Fluidgeschwindigkeit am Strömungseinlass ist. Der hydraulische Durchmesser,  $d_h = 2(L_z - h_S)$ , bezieht sich auf die doppelte Höhe des Kanals stromaufwärts der Stufe (Armaly *et al.* 1983). In Abhängigkeit von  $u_{x,\max}$  und dem Stufenaufweitungsverhältnis  $L_z/(L_z - h_S)$  bilden sich stromabwärts der Stufe primäre und sekundäre Ablösungszonen aus.

Anhand von Messungen erstmals durch Armaly *et al.* (1983) beschrieben und nachfolgend mit Hilfe numerischer Simulationen näher analysiert (Williams & Baker 1997; Chiang & Sheu 1999; Barkley *et al.* 2002), weist die Strömung über eine rückwärtsgewandte Stufe für  $Re_{\text{BFS}}$  kleiner als 400 ein zweidimensionales Verhalten bezogen auf die x-z-Ebene auf. Um das Auftreten dreidimensionaler Strömungseffekte ausschließen zu können, wurde in dieser Studie eine Reynolds-Zahl unterhalb dieses Grenzwertes in Höhe von  $Re_{\text{BFS}} = 389,0$  realisiert (Tabelle 3.1).

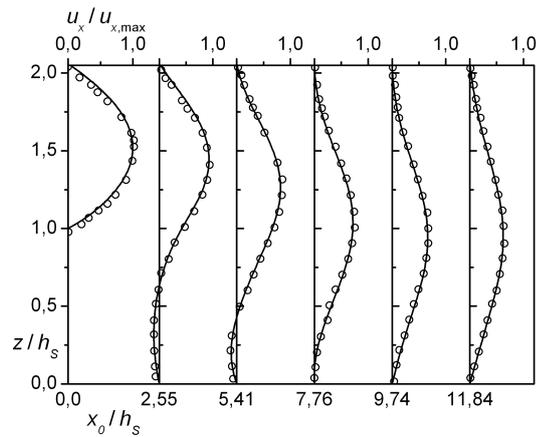
**Tab. 3.1.** Geometrische Abmessungen des Backward-Facing Step bezogen auf die räumliche Diskretisierung  $\Delta x$  des numerischen Gitters und charakteristische Eigenschaften des Fluids.

Symbol	Einheit	Kennwerte
$L_x/\Delta x$	[-]	1862
$L_y/\Delta x$	[-]	10
$L_z/\Delta x$	[-]	101
$L_S/\Delta x$	[-]	392
$h_S/\Delta x$	[-]	49
$L_z/(L_z - h_S)$	[-]	1,94
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	1,17
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	$1,47 \times 10^{-5}$
$\Delta t$	[s]	$3,40 \times 10^{-6}$
$Re_{\text{BFS}}$	[-]	389,0

### 3.1.2 Analyse der laminaren Fluidströmung

Abbildung 3.2 zeigt die Entwicklung des Geschwindigkeitsprofils in Hauptströmungsrichtung (*durchgezogene Linien*) in Abhängigkeit von der Höhe  $z$  über dem Kanalboden an verschiedenen Positionen stromabwärts des BFS. Demnach folgt die x-Komponente der Fluidgeschwindigkeit vor Erreichen der rückwärts-gewandten Stufe einem parabolischen Strömungsprofil, welches am Kanaleinlass unter Verwendung von Gleichung 3.1 initialisiert wurde und infolge der schlupffreien Haftungsbedingung an den oberen und unteren Kanalwänden bis zur Stufenkante bei  $x_0 = 0$  erhalten bleibt. Stromabwärts der Stufe weitet sich das Strömungsprofil allmählich auf. Bedingt durch diese Aufweitung entsteht eine ungleiche Druckverteilung über dem Kanalquerschnitt, sodass sich zwischen  $0 < x_0/h_S \leq 5,41$  eine primäre Ablösezone herausbildet, in der das Fluid mit bis zu  $0,2 u_{x,\text{max}}$  in die entgegengesetzte Richtung strömt (siehe Abbildung 3.2). Gleichwohl löst sich dieses Rezirkulationsgebiet durch viskose Effekte bis  $x_0/h_S = 7,76$  vollständig auf. Infolge der Wandhaftbedingung an der Kanalober- und -unterseite bildet sich schließlich weiter stromabwärts erneut ein parabolisches Strömungsprofil aus.

Darüber hinaus werden in Abbildung 3.2 die mittels LBM berechneten Geschwindigkeitsprofile (*durchgezogene Linien*) mit experimentellen Daten (*offene Kugeln*) verglichen, die auf Laser-Doppler-Anemometer (LDA)-Messungen beruhen (Armaly *et al.* 1983). Demnach weichen die Geschwindigkeitsprofile in Höhe der Stufe insbesondere in der Nähe der Kanalober- und -unterseite bis zu 12,7% voneinander ab. Neben nicht auszuschließenden Messungenauigkeiten könnte diese Abweichung beispielsweise



**Abb. 3.2.** Entwicklung der Fluidgeschwindigkeit  $u_x$  (obere Abzisse) über der Kanalhöhe  $h_S$  an verschiedenen Positionen  $x_0$  stromabwärts der rückwärtsgewandten Stufe (untere Abzisse): Vergleich der berechneten Geschwindigkeitsprofile (durchgezogene Linien) mit experimentellen Daten (offene Kugeln) aus Armaly *et al.* (1983).

in der Modellierung des Strömungsprofils am Kanaleinlass begründet liegen, welches nach Gleichung (3.1) auf dem Hagen-Poiseuille-Gesetz beruht. Im weiteren Verlauf gleichen sich beide Geschwindigkeitsprofile stetig an, sodass sie nach  $x_0/h_S = 11,84$  nahezu übereinstimmen. Auf Grundlage der guten Kongruenz mit den vorliegenden LDA-Messungen lässt sich schlussfolgern, dass der LBM basierte Strömungslöser physikalisch richtige Ergebnisse liefert.

## 3.2 Evaluation der Turbulenzanregung

In einem zweiten Schritt wird das in Kapitel 2.2 vorgestellte Verfahren zur Generierung homogener isotroper Turbulenz analysiert und bewertet. Unter Anwendung der Pseudo-Spektral-Methode (PSM) werden Geschwindigkeitskomponenten im Bereich kleiner Wellenzahlen durch das Hinzufügen von Energie künstlich beschleunigt (Eswaran & Pope 1988). Die auf diese Weise erzeugten großskaligen Wirbelelemente zerfallen im weiteren Verlauf der Simulation in Form einer Energiekaskade in zunehmend kleinere Strukturen, bis sie schließlich durch viskose Kräfte vollständig dissipieren. Die Notation der zur Charakterisierung verwendeten Kenngrößen folgt Pope (2000) und Davidson (2004).

**Tab. 3.2.** Zusammenfassung der zur Generierung homogener isotroper Turbulenz verwendeten Diskretisierungs- und Anregungsparameter.

Symbol	Einheit	V-64 <sup>3</sup>	V-128 <sup>3</sup>	V-256 <sup>3</sup>
$L$	[m]	0,128	0,128	0,128
$\Delta x$	[m]	$2,0 \times 10^{-3}$	$1,0 \times 10^{-3}$	$5,0 \times 10^{-4}$
$\Delta t$	[s]	$1,4 \times 10^{-3}$	$3,4 \times 10^{-4}$	$8,5 \times 10^{-5}$
$\kappa_0$	[1/m]	49,1	49,1	49,1
$\kappa_A$	[1/m]	$[2 \kappa_0, 6 \kappa_0]$	$[2 \kappa_0, 6 \kappa_0]$	$[2 \kappa_0, 6 \kappa_0]$
$\kappa_{\max}$	[1/m]	$1,6 \times 10^3$	$3,1 \times 10^3$	$6,3 \times 10^3$
$\sigma_A$	[m/s]	$9,4 \times 10^{-5}$	$1,6 \times 10^{-4}$	$3,9 \times 10^{-4}$
$T_A$	[s]	$1,4 \times 10^{-1}$	$3,4 \times 10^{-2}$	$8,5 \times 10^{-3}$

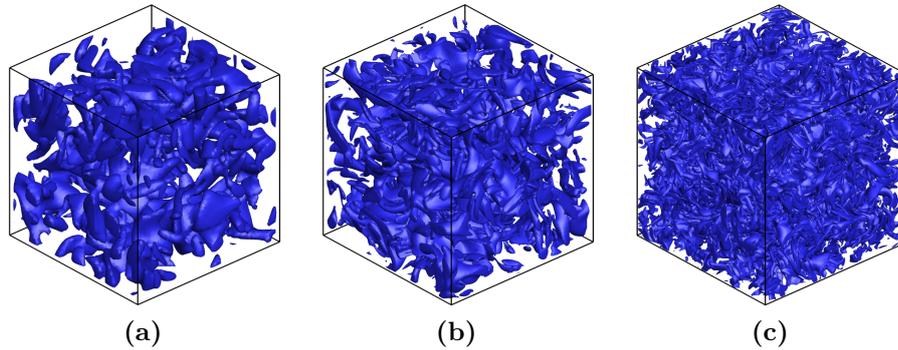
### 3.2.1 Numerische Konfiguration

Für die Evaluation der im Rahmen dieser Arbeit implementierten PSM wird ein würfelförmiges Rechengebiet mit Kantenlängen von  $L = 0,128$  m herangezogen. Die Fluiddomäne ist ausschließlich durch periodische Ränder begrenzt. Die gewählte Geometrie und Randbedingung der Fluiddomäne stellt eine etablierte Konfiguration zur Analyse homogener isotroper Turbulenz dar (Orszag & Patterson 1972; Eswaran & Pope 1988; Alvelius 1999), da zusätzliche Randeffekte etwa durch feste Wände, Einlass- und Auslassöffnungen entfallen. Um unterschiedliche Reynolds-Zahlen realisieren zu können, wird das Rechengebiet mit  $64^3$ ,  $128^3$  und  $256^3$  Gitterzellen diskretisiert. Die zugehörigen Gitterweiten und Fluidzeitschritte sind in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Für die in Tabelle 3.2 spezifizierten Testfälle V-64<sup>3</sup>, V-128<sup>3</sup> und V-256<sup>3</sup> wird eine Fluidichte von  $\rho = 1,17$  kg/m<sup>3</sup> und eine kinematische Viskosität von  $\nu = 1,47 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s gewählt.

Darüber hinaus beinhaltet Tabelle 3.2 die zur Generierung turbulenter Wirbelstrukturen verwendeten Anregungsparameter. Die Anregung der Fluidgeschwindigkeit erfolgt analog zu Février *et al.* (2005) und Fede & Simonin (2006) in einem Band kleiner Wellenzahlen von  $2 \kappa_0 \leq \kappa_A \leq 6 \kappa_0$ . Die Amplitude und das Zeitmaß der Anregung,  $\sigma_A$  und  $T_A$ , wurden für jeden Testfall anhand numerischer Voruntersuchungen individuell ermittelt, sodass sich die resultierende Reynolds-Zahl im Vergleich zur nächst kleineren Diskretisierung verdoppelt (vgl. Tabelle 3.3).

### 3.2.2 Kenngrößen der turbulenten Fluidströmung

Im folgenden Abschnitt werden die berechneten Strömungsfelder sowohl räumlich als auch zeitlich evaluiert und mit experimentellen Daten wie auch analytischen Modellen



**Abb. 3.3.** Dreidimensionale Verteilung der Wirbelstärke (*Isoflächen*) zum Zeitpunkt  $t$  in Abhängigkeit der räumlichen Diskretisierung: (a)  $V-64^3$ , (b)  $V-128^3$  und (c)  $V-256^3$ . Die Wirbelstärke ist mit Hilfe des Kolmogorov-Zeitmaßes  $\tau_\eta$  normiert. Die *Isoflächen* stellen einen Wert von  $(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\omega})^{1/2} \tau_\eta = 1$  dar.

verglichen. Abbildung 3.3 zeigt exemplarisch die dreidimensionale Verteilung der Wirbelstärke des Fluids zum Zeitpunkt  $t$  in den drei betrachteten Rechengebieten anhand gleichwertiger *Isoflächen*. Die lokale Wirbelstärke wird durch:

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} \quad (3.3)$$

mit  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}, t)$  definiert. Infolge einer engmaschigeren Auflösung der Wirbelelemente sind die *Isoflächen* der Wirbelstärke mit kleiner werdendem  $\Delta x$  zunehmend feiner fragmentiert (siehe Abbildung 3.3 von links nach rechts). Die im Rahmen dieser Studie generierten turbulenten Strömungsfelder werden unter Zuhilfenahme verschiedener Reynolds-Zahlen, Längen- und Zeitskalen sowie Energie- und Dissipationsspektren charakterisiert. Tabelle 3.3 fasst die wichtigsten Turbulenzkenngrößen zusammen, deren Berechnung nachfolgend erläutert wird.

Die Turbulenzbewegung des Fluids, welche aus einer Überlagerung von Wirbeln verschiedener Frequenz und Stärke hervorgeht, lässt sich durch die spektrale Zerlegung der orts- und zeitabhängigen Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  beschreiben. Die Ortsfunktion  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  zum Zeitpunkt  $t$  wird mit Hilfe des dreidimensionalen Energiespektrums  $E(\boldsymbol{\kappa})$  analysiert:

$$E(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{2 \pi \kappa^2}{\delta(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}')} \langle \hat{\mathbf{u}}^*(\boldsymbol{\kappa}) \cdot \hat{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\kappa}') \rangle, \quad \kappa \equiv (\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa})^{1/2} = |\boldsymbol{\kappa}| \quad (3.4)$$

worin  $\boldsymbol{\kappa}$  der dreidimensionale Wellenzahlvektor und  $\boldsymbol{\kappa}'$  eine von  $\boldsymbol{\kappa}$  unabhängige Variable ist (Davidson 2004). Ferner kennzeichnet  $\delta$  die dreidimensionale Dirac-Deltafunktion,  $\hat{\mathbf{u}}$  die Fourier-Transformierte und  $\hat{\mathbf{u}}^*$  die komplexe, Fourier-transformierte Konjugation

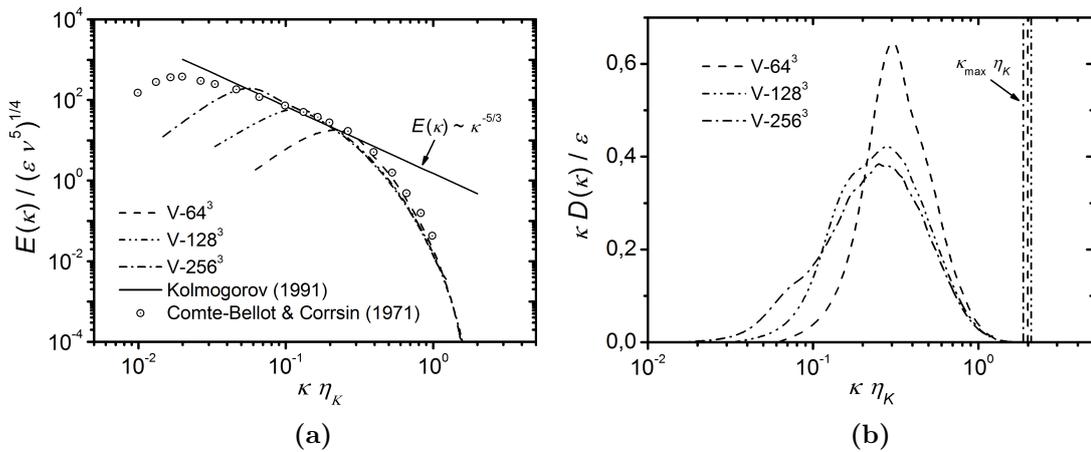
**Tab. 3.3.** Statistische Kenngrößen der erzeugten turbulenten Fluidströmungen auf Grundlage von Energie- und Dissipationsspektren sowie turbulenter Längen- und Zeitskalen.

Symbol	Einheit	V-64 <sup>3</sup>	V-128 <sup>3</sup>	V-256 <sup>3</sup>
$k$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	$6,15 \times 10^{-4}$	$4,46 \times 10^{-3}$	$4,46 \times 10^{-2}$
$\epsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	$1,22 \times 10^{-3}$	$1,62 \times 10^{-2}$	$3,99 \times 10^{-1}$
$u'$	[m/s]	$2,02 \times 10^{-2}$	$5,45 \times 10^{-2}$	$1,72 \times 10^{-1}$
$Re_L$	[-]	21,9	50,7	133,1
$L_f/L$	[-]	0,124	0,107	0,089
$L_g/L$	[-]	0,090	0,074	0,062
$\tau_e/\tau_\eta$	[-]	7,16	8,33	10,85
$\tau_E/\tau_e$	[-]	0,84	0,66	0,94
$\tau_W/\tau_e$	[-]	1,06	1,03	1,02
$Re_\lambda$	[-]	15,1	29,8	60,2
$\lambda_T/L_f$	[-]	0,69	0,59	0,45
$\eta_K/L_f$	[-]	0,080	0,049	0,026
$\kappa_{\max} \eta_K$	[-]	1,99	2,09	1,88
$\eta_K/\Delta x$	[-]	0,63	0,67	0,60
$\tau_\eta/\Delta t$	[-]	80,6	88,6	71,4
$u_\eta/u'$	[-]	0,57	0,41	0,29

von  $\mathbf{u}$ . Unter Verwendung von  $E(\kappa)$  ist das zugehörige Dissipationsspektrum  $D(\kappa)$  wie folgt definiert:

$$D(\kappa) = 2 \nu \kappa^2 E(\kappa) \quad (3.5)$$

Abbildung 3.4 zeigt den Verlauf der Energie- und Dissipationsspektren der untersuchten Diskretisierungen in Abhängigkeit der Wellenzahl. Demnach werden mit steigender Auflösung respektive kleiner werdendem  $\Delta x$  zunehmend größere Wirbelstrukturen mit hohem Energieanteil generiert, wodurch sich die Extremwerte von  $E(\kappa)$  zu kleineren Wellenzahlen verschieben. Demgegenüber stimmen die in Abbildung 3.4a dargestellten Kurvenverläufe von V-128<sup>3</sup> und V-256<sup>3</sup> im Bereich kleinskaliger Wirbel für  $\kappa \eta_K > 0,2$  gut überein. Die Abweichung von V-64<sup>3</sup> gegenüber den beiden feineren Rechengittern wird in Abbildung 3.4b anhand der zugehörigen Dissipationsspektren insbesondere im Trägheitsbereich bei  $\kappa \eta_K \approx 0,3$  verdeutlicht. Dieses Verhalten ist auf eine unzureichende Trennung der mehrskaligen Wirbelstrukturen infolge zu kleiner Domainabmessungen zurückzuführen, in Folge dessen Energie vermehrt dissipiert. Die vertikalen Strich-Punkt-Linien in Abbildung 3.4b kennzeichnen die kleinsten Wirbel-elemente je Testlauf, bei denen Energie durch viskose Kräfte vollständig dissipiert.



**Abb. 3.4.** Gegenüberstellung der durch direkte numerische Simulationen berechneten dreidimensionalen (a) Energiespektren  $E(\kappa)$  und (b) Dissipationsspektren  $D(\kappa)$ : V-64<sup>3</sup> ( $Re_\lambda = 15,1$ ), V-128<sup>3</sup> ( $Re_\lambda = 29,8$ ) und V-256<sup>3</sup> ( $Re_\lambda = 60,2$ ). Die Energiespektren werden mit experimentellen Messdaten (Comte-Bellot & Corrsin 1971) bei  $Re_\lambda = 60,7$  und einem analytischen Modellspektrum (Kolmogorov 1991) verglichen. Die vertikalen Strich-Punkt-Linien in Abbildung (b) kennzeichnen die jeweils größte aufgelöste Wellenzahl  $\kappa_{\max}$  bezogen auf das Kolmogorov-Längenmaß  $\eta_K$ . Die Spektren  $E(\kappa)$  und  $D(\kappa)$  sind mit Hilfe der kinematischen Viskosität  $\nu$ , der Dissipationsrate  $\epsilon$  und der Wellenzahl  $\kappa$  normiert.

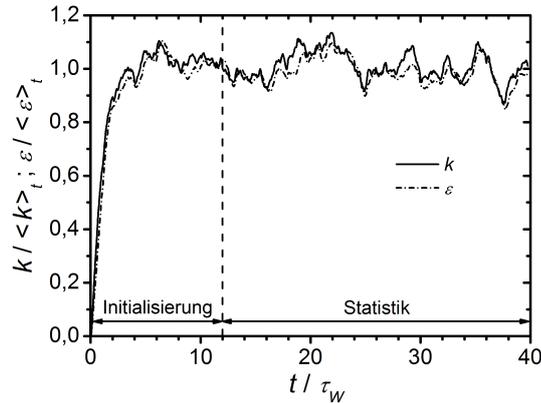
Diese Wirbelelemente besitzen nach Gleichung (3.23) das Längenmaß  $\eta_K$ . Da die mittels  $\kappa_{\max}$  normierten  $\eta_K$  oberhalb der abgebildeten Dissipationsspektren liegen, wird der Zerfall der kleinskaligen Wirbelstrukturen von allen drei Rechengittern hinreichend genau aufgelöst.

Neben den numerisch berechneten Energiespektren zeigt Abbildung 3.4a die von Comte-Bellot & Corrsin (1971) hinter einem Turbulenzgitter gemessene Energieverteilung bei einer Taylor-Reynolds-Zahl von  $Re_\lambda = 60,7$  sowie das von Kolmogorov (1991)<sup>6</sup> für den Trägheitsbereich entwickelte  $-5/3$ -Modellspektrum:

$$E(\kappa) = C_0 \epsilon^{2/3} \kappa^{-5/3} \quad (3.6)$$

in dem  $C_0 = 1,5$  die universelle Kolmogorov-Konstante (Sreenivasan 1995) und  $\epsilon$  die Dissipationsrate nach Gleichung (3.8) ist. Aufgrund vergleichbarer  $Re_\lambda$  weist der Testfall V-256<sup>3</sup> im Trägheitsbereich zwischen  $6,0 \times 10^{-2} < \kappa \eta_K < 3,0 \times 10^{-1}$  eine gute Übereinstimmung sowohl mit den Messdaten als auch dem Kolmogorov-Spektrum auf. Die beiden kleineren Rechengitter V-128<sup>3</sup> und V-64<sup>3</sup> weichen partiell von den Referenzwerten ab, da aufgrund der reduzierten Zellenanzahl kleinere Anregungsam-

<sup>6</sup>Der Fachartikel wurde von A. N. Kolmogorov ursprünglich in russischer Sprache verfasst und erstmals 1941 in *Doklady Akademii Nauk SSSR* veröffentlicht.



**Abb. 3.5.** Zeitliche Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie  $k$  und Dissipationsrate  $\epsilon$  im Verlauf der Simulation V-128<sup>3</sup>. Die Zeit  $t$  ist durch die Wirbelumdrehungszeit  $\tau_W$  normiert.

plituden realisiert und somit kleiner skalige Wirbelelemente generiert wurden. Unter Verwendung des Energiespektrums lassen sich die turbulente kinetische Energie  $k$  wie auch die Dissipationsrate  $\epsilon$  des Fluids wie folgt berechnen:

$$k = \int_0^{\kappa_{\max}} E(\kappa) d\kappa \quad (3.7)$$

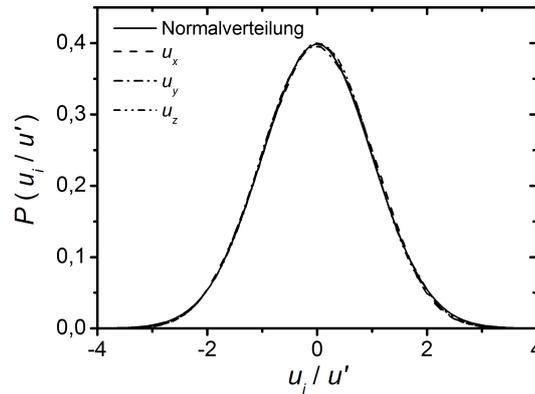
$$\epsilon = 2\nu \int_0^{\kappa_{\max}} \kappa^2 E(\kappa) d\kappa \quad (3.8)$$

Abbildung 3.5 fasst die zeitliche Entwicklung der turbulenten kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate des Fluids im Verlauf von V-128<sup>3</sup> zusammen. Ausgehend von einem ruhenden Fluid zum Zeitpunkt  $t/\tau_W = 0$  werden die Komponenten der Fluidgeschwindigkeit im Bereich kleiner Wellenzahlen künstlich angeregt. Infolgedessen nehmen  $k$  und  $\epsilon$  während der sogenannten Initialisierungsphase sukzessive zu. Nach einiger Zeit bildet sich schließlich ein statistisch stationäres Geschwindigkeitsfeld aus, in dem die Rate der dissipierten Energie gleich der Rate der künstlich hinzugefügten Energie entspricht (siehe Abbildung 3.5 ab  $t/\tau_W \approx 6$ ). Um die Phase der Initialisierung vollständig zu erfassen, beginnt die Berechnung der in Tabelle 3.3 dargelegten statistischen Kenngrößen in diesem Testfall ab  $t/\tau_W = 12$ .

Zur Beschreibung turbulenter Fluidströmungen wird die Fluidgeschwindigkeit  $u(\mathbf{x}, t)$  in einen gemittelten Term zerlegt, der von einer statistischen Schwankung überlagert wird:

$$u(\mathbf{x}, t) = \bar{u}(\mathbf{x}) + u'(\mathbf{x}, t) \quad (3.9)$$

worin  $\bar{u}(\mathbf{x})$  der Ensemblemittelwert und  $u'(\mathbf{x}, t)$  die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit ist. Unter Annahme homogener isotroper Turbulenz ist  $\bar{u}(\mathbf{x}) = 0$ , wodurch sich Gleichung (3.9) zu  $u(\mathbf{x}, t) = u'(\mathbf{x}, t)$  vereinfacht. Die auch als charakteristische



**Abb. 3.6.** Wahrscheinlichkeitsverteilung der Komponenten (Strich- und Strich-Punkt-Linien) der Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u}$  des Testfalls V-256<sup>3</sup>. Die durchgezogene Linie repräsentiert die theoretische Normalverteilung von  $u_x$ ,  $u_y$  und  $u_z$  mit  $\mathcal{N}(0, 1)$ . Die Fluidgeschwindigkeiten sowie die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion sind mit Hilfe der charakteristischen turbulenten Fluidgeschwindigkeit  $u'$  normiert.

turbulente Fluidgeschwindigkeit bezeichnete Schwankungsbewegung  $u'$  basiert im Fall homogener isotroper Turbulenz auf der turbulenten kinetischen Energie des Fluids:

$$u' = \left( \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (3.10)$$

Anhand der in Abbildung 3.6 dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Fluidgeschwindigkeit wird ersichtlich, dass die Komponenten  $u_x$ ,  $u_y$  und  $u_z$  zum Zeitpunkt  $t$  eine annähernd gleiche Normalverteilung um den Mittelwert  $\bar{u} = 0$  aufweisen. Ergänzend zu Abbildung 3.6 fasst Tabelle 3.4 die quadratischen Mittelwerte der Fluidgeschwindigkeitskomponenten der in dieser Studie untersuchten Strömungsfelder zusammen. Demnach weichen die quadratischen Mittel von  $u_x$ ,  $u_y$  und  $u_z$  in V-64<sup>3</sup>, als Testfall mit dem größten  $\Delta x$ , um maximal 3,4% von der charakteristischen turbulenten Fluidgeschwindigkeit ab. Mit kleiner werdendem  $\Delta x$  nimmt dieser Prozentsatz stetig ab, sodass bei V-256<sup>3</sup> die drei Komponenten lediglich 0,1% voneinander respektive von  $u'$  abweichen. Das stetige Angleichen der quadratischen Mittelwerte in Tabelle 3.4, insbesondere im Testfall V-256<sup>3</sup>, bekräftigt die Isotropie der Geschwindigkeitskomponenten in den statistisch stationären Strömungsfeldern.

In turbulenten Strömungen sind fluktuierende Größen wie die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit stets Funktionen von Raum und Zeit. Die Korrelation von  $\mathbf{u}'$  an verschiedenen Positionen im Strömungsgebiet zu gleichen Zeiten wird als Eulersche Zwei-Punkt-Raumkorrelation  $R_E(\mathbf{r})$  bezeichnet:

$$R_E(\mathbf{r}) = \frac{\langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \rangle}{\langle u'_i(\mathbf{x}, t)^2 \rangle} \quad (3.11)$$

**Tab. 3.4.** Normiertes quadratisches Mittel der Komponenten der Fluidgeschwindigkeit auf Grundlage der angeregten turbulenten Strömungsfelder.

Komponente	V-64 <sup>3</sup>	V-128 <sup>3</sup>	V-256 <sup>3</sup>
$(\overline{u_x^2})^{1/2}/u'$	0,966	0,991	1,000
$(\overline{u_y^2})^{1/2}/u'$	0,965	0,992	0,999
$(\overline{u_z^2})^{1/2}/u'$	0,981	0,987	0,999

worin  $r$  der Abstand zwischen zwei Punkten und  $\langle \cdot \rangle$  der Ensemblemittelungsoperator über eine diskrete Anzahl an Korrelationen ist. Die Korrelation der Schwankungsgeschwindigkeiten mit den Indizes  $i = j = 1$  wird als longitudinale Zwei-Punkt-Raumkorrelation  $f(r)$  bezeichnet, wohingegen mit den Indizes  $i = j = 2$  und  $i = j = 3$  eine transversale Zwei-Punkt-Raumkorrelation  $g(r)$  vorliegt. Im Allgemeinen sind die Schwankungsgeschwindigkeiten bei  $r = 0$  mit  $R_E = 1$  vollständig positiv korreliert, währenddessen bei  $R_E = -1$  eine vollständig negative Korrelation vorliegt. In homogener isotroper Turbulenz gilt zudem für  $r \rightarrow \infty$  ein Korrelationskoeffizient  $R_E = 0$ , da die fluktuierenden Geschwindigkeiten keinen Anteil an  $\bar{u}$  beitragen. Des Weiteren sollte die Funktion  $g(r)$  nach Hinze (1975) Bereiche mit negativem  $R_E$  aufweisen.

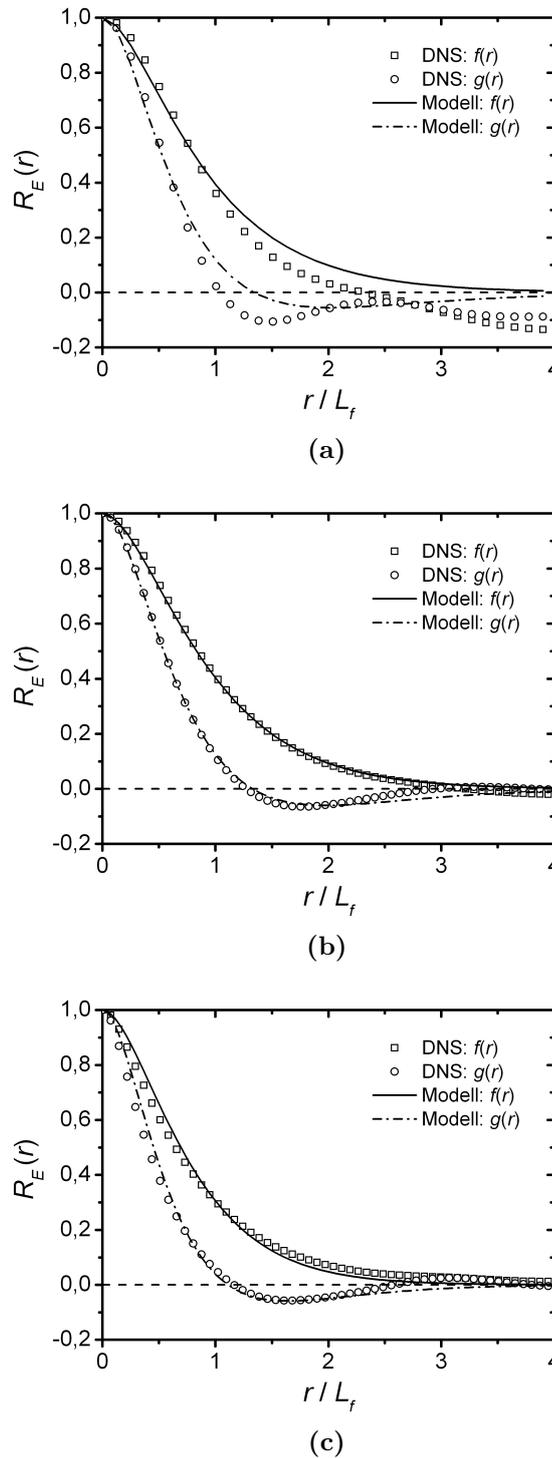
Abbildung 3.7 zeigt den Verlauf der DNS basierten Zwei-Punkt-Raumkorrelationen  $f(r)$  und  $g(r)$  in den betrachteten Strömungsgebieten zum Zeitpunkt  $t$  (siehe *offene Symbole*). Demnach korrespondieren die dargestellten Kurvenverläufe der untersuchten Testfälle mit den zuvor spezifizierten Annahmen wie  $R_E = 1$  bei  $r = 0$  und  $R_E = 0$  bei  $r \rightarrow \infty$ . Gleichwohl verschiebt sich das erstmalige Überschneiden der Funktionen  $f(r)$  und  $g(r)$  mit der Ordinate,  $R_E = 0$ , mit größer werdender Diskretisierung zu kleineren  $r$ .

Zur Bewertung der numerisch berechneten Korrelationskoeffizienten sind in Abbildung 3.7 weitere modellbasierte  $f(r)$  und  $g(r)$  dargestellt. Die durch Laviéville (1997) vorgeschlagene longitudinale Zwei-Punkt-Raumkorrelation beruht auf Untersuchungen von Sawford (1991):

$$f(r) = \frac{\lambda_T \exp\left(-\frac{r}{\lambda_T}\right) - (L_f - \lambda_T) \exp\left(-\frac{r}{L_f - \lambda_T}\right)}{2 \lambda_T - L_f} \quad (3.12)$$

in dem  $L_f$  das longitudinale, integrale Längenmaß (Gleichung (3.15)) und  $\lambda_T$  das Taylor-Längenmaß (Gleichung (3.21)) ist. Unter Annahme homogener isotroper Turbulenz stehen  $f(r)$  und  $g(r)$  in folgender Relation (Von Karman & Howarth 1938):

$$g(r) = f(r) + \frac{r}{2} \frac{df(r)}{dr} \quad (3.13)$$



**Abb. 3.7.** Verlauf der auf Grundlage direkter numerischer Simulationen (DNS) berechneten Eulerschen Zwei-Punkt-Raumkorrelationsfunktionen  $f(r)$  und  $g(r)$  in longitudinaler und transversaler Raumrichtung (*offene Symbole*): (a)  $V-64^3$ , (b)  $V-128^3$  und (c)  $V-256^3$ . Die durchgezogenen und Strich-Punkt-Linien kennzeichnen ein von Laviéville (1997) vorgeschlagenes Modell zur Beschreibung von  $f(r)$  und  $g(r)$ . Die Raumrichtung  $r$  ist mit Hilfe des integralen Längenmaßes  $L_f$  normiert.

Während die in Abbildung 3.7a dargestellten Modellkorrelationen deutlich von den Simulationsdaten abweichen, stimmen die in den Abbildungen 3.7b-c gezeigten Kurvenverläufe der longitudinalen wie auch transversalen Korrelationskoeffizienten hinreichend genau überein. Demzufolge werden in den Testfällen V-128<sup>3</sup> und V-256<sup>3</sup> sowohl die hochfrequenten Turbulenzstrukturen im Dissipationsbereich bei  $r \rightarrow 0$  als auch die langwelligen Wirbelanteile im Bereich von  $r \rightarrow \infty$  exakt durch die implementierte PSM modelliert.

In Ergänzung zu den Eulerschen Zwei-Punkt-Raumkorrelationen liefert die Eulersche Autokorrelation zweier Fluktuationsgeschwindigkeiten am gleichen Ort zu verschiedenen Zeiten eine Aussage über den Grad des zeitlichen Zusammenhangs eines Turbulenzsignals:

$$R_E(\tau) = \frac{\langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}, t + \tau) \rangle}{\langle u'_i(\mathbf{x}, t)^2 \rangle} \quad (3.14)$$

in dem  $\tau$  der diskrete Zeitschritt des entsprechenden Korrelationskoeffizienten ist. Durch Integration der Funktionsverläufe von  $R_E(\mathbf{r})$  und  $R_E(\tau)$  lassen sich charakteristische, makroskalige Längen- und Zeitmaße der Turbulenzstruktur gewinnen. Die longitudinalen und transversalen integralen Längenmaße,  $L_f$  und  $L_g$ , ergeben sich aus:

$$L_f = \int_0^{+\infty} f(r) \, dr \quad (3.15)$$

$$L_g = \int_0^{+\infty} g(r) \, dr \quad (3.16)$$

Im Fall homogener isotroper Turbulenz kann  $L_f$  zudem durch Integration des dreidimensionalen Energiespektrums  $E(\kappa)$  berechnet werden:

$$L_f = \frac{3}{4} \frac{\pi}{k} \int_0^{\kappa_{\max}} \frac{E(\kappa)}{\kappa} \, d\kappa \quad (3.17)$$

Die Länge  $L_f$  entspricht näherungsweise den mittleren Abmessungen der energietragenden Wirbel. Das Eulersche integrale Zeitmaß  $\tau_E$  resultiert analog zu  $L_f$  und  $L_g$  aus der Integration der Eulerschen Autokorrelationskoeffizienten über der Zeit:

$$\tau_E = \int_0^{+\infty} R_E(\tau) \, d\tau \quad (3.18)$$

Als Alternative zum Eulerschen integralen Zeitmaß wird aus Vereinfachungsgründen oftmals das Eulersche Makrozeitmaß  $\tau_e$  herangezogen:

$$\tau_e = \frac{L_f}{u'} \quad (3.19)$$

In Ergänzung zu den Längen- und Zeimaen setzt die turbulente Reynolds-Zahl  $Re_L$  die im Fluid auf makroskaliger Ebene vorherrschenden Trägheits- und Zähigkeitskräfte wie folgt in Relation:

$$Re_L = \frac{u' L_f}{\nu} \quad (3.20)$$

Die integralen Längen- und Zeimae beschreiben den langwelligen Anteil großräumiger Turbulenzstrukturen. Sie liefern jedoch keinen Aufschluss über die kurzwelligen Vorgänge im hochfrequenten Dissipationsbereich. Die mittleren Abmessungen der kleinsten in einer turbulenten Strömung auftretenden Wirbel werden durch die Mikrostrukturlänge  $\lambda_T$ , im Folgenden Taylor-Längenma genannt, charakterisiert:

$$\lambda_T = \frac{2 u'}{\int_0^{\kappa_{\max}} \kappa^2 E_x(\kappa) d\kappa} \quad (3.21)$$

worin  $E_x(\kappa)$  das eindimensionale Energiespektrum ist. In Analogie zu  $Re_L$  beschreibt die Taylor-Reynolds-Zahl  $Re_\lambda$  das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften auf mikroskaliger Ebene:

$$Re_\lambda = \frac{u' \lambda_T}{\nu} \quad (3.22)$$

In isotroper wie auch anisotroper Turbulenz wird die kleinste charakteristische Strukturlänge als Kolmogorov-Längenma  $\eta_K$  bezeichnet (Kolmogorov 1991). Neben  $\eta_K$  lassen sich zudem ein spezifisches Zeitma  $\tau_\eta$  sowie eine charakteristische Geschwindigkeit  $u_\eta$  definieren, die ebenso wie das Kolmogorov-Längenma ausschließlich durch die Dissipationsrate  $\epsilon$  und die kinematische Viskosität  $\nu$  bestimmt sind:

$$\eta_K = \left( \frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (3.23)$$

$$\tau_\eta = \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (3.24)$$

$$u_\eta = (\nu \epsilon)^{1/4} \quad (3.25)$$

Einen alternativen Ansatz zur Beschreibung eines mittleren charakteristischen Zeitmaes in turbulenten Strömungen stellt die Wirbelumdrehungszeit  $\tau_W$  dar (Wunsch 2009). Auf Grundlage des Eulerschen Makrozeitmaes wird Gleichung (3.19) durch einen zusätzlichen Term im Nenner erweitert, der sowohl die kleinste charakteristische Strukturlänge  $\eta_K$  als auch die größte makroskalige Länge  $L_f$  berücksichtigt:

$$\tau_W = \frac{L_f}{u' \left( 1 - \frac{\eta_K}{L_f} \right)^{2/3}} \quad (3.26)$$

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Energie- und Dissipationsspektren, Längen- und Zeitmaße sowie Reynolds-Zahlen ermöglichen eine skalenübergreifende Charakterisierung turbulenter Fluidströmungen. Die Turbulenzkenngrößen der in dieser Studie generierten Strömungsgebiete sind in Tabelle 3.3 dargelegt.

Zusammenfassend wurde in diesem Kapitel die direkte numerische Berechnung laminarer wie auch turbulenter Strömungen vorgestellt. Die aus den Simulationen hervorgehenden Kenngrößen wurden unter anderem mit in der Literatur verfügbaren Korrelationen und Messdaten verglichen. Im Hinblick auf die folgenden Untersuchungen lassen die vorliegenden Simulationsdaten auf eine korrekte Implementierung sowohl des LBM basierten Strömungslösers als auch der künstlich erzeugten homogenen isotropen Turbulenz insbesondere für die Testfälle V-128<sup>3</sup> und V-256<sup>3</sup> schließen.

## 4 Clustering und Kollision von Partikeln

In diesem Kapitel wird das Clustering- und Kollisionsverhalten von Lagrangeschen Partikeln in homogener isotroper Turbulenz auf Grundlage direkter numerischer Simulationen analysiert. Neben der Partikel-Stokes-Zahl wird in den Simulationen der Volumenanteil der dispersen Phase variiert und der Einfluss von Partikel-Partikel-Kollisionen auf die Bildung von Partikelclustern quantifiziert.

Im folgenden Abschnitt werden zunächst die charakteristischen Eigenschaften der kontinuierlichen und dispersen Phase vorgestellt. Anschließend werden im Abschnitt 4.2 die in der Partikelbewegungsgleichung zu berücksichtigenden Partikelkräfte spezifiziert sowie die Fluid- und Partikeleigenschaften entlang der zurückgelegten Partikeltrajektorien dargelegt. Im Abschnitt 4.3 folgen daraufhin Analysen zum Clustering der Teilchen unter Anwendung der globalen Partikelakkumulation, Korrelationsdimension, radialen Partikelpaarkorrelation und der Minkowski-Funktionale. Abschließend werden im Abschnitt 4.4 sowohl die gemessenen Kollisionszeiten als auch die resultierenden Relativgeschwindigkeiten kollidierender Teilchen charakterisiert.

### 4.1 Numerische Konfiguration

Die in dieser Studie angewandten Anfangs- und Randbedingungen orientieren sich an vorangegangenen Untersuchungen zum Bewegungsverhalten von Punktpartikeln in turbulenten Strömungen (Eaton & Fessler 1994; Sundaram & Collins 1997; Fede & Simonin 2006). In den folgenden beiden Abschnitten wird die numerische Konfiguration der kontinuierlichen und dispersen Phase spezifiziert.

#### 4.1.1 Kontinuierliche Phase

Die Berechnung der dreidimensionalen Fluidströmung erfolgt auf Grundlage der Lattice-Boltzmann-Methode. Das durch periodische Ränder begrenzte würfelförmige Rechengebiet mit Kantenlängen von  $L = 0,128\text{m}$  wird in Anlehnung an Testfall V-128<sup>3</sup> (vgl. Tabelle 3.2) durch 128<sup>3</sup> Gitterzellen räumlich diskretisiert. Turbulente Wirbelstrukturen werden unter Anwendung der Pseudo-Spektral-Methode künstlich angeregt (Eswaran & Pope 1988). Tabelle 4.1 fasst die zur Generierung der Fluidturbulenz herangezogenen Diskretisierungs- und Anregungsparameter zusammen. Im Vergleich zu V-128<sup>3</sup> wurden für S-128<sup>3</sup> die Anregungsparameter  $\sigma_A$  und  $T_A$  angepasst, um die kleinste charakteristische Strukturlänge der Turbulenz mit  $\eta_K/\Delta x \geq 1$  aufzulösen

**Tab. 4.1.** Zusammenfassung der für die Berechnung der turbulenten Fluidströmung angewandten Diskretisierungs- und Anregungsparameter.

Symbol	Einheit	S-128 <sup>3</sup>
$\Delta x$	[m]	$1,0 \times 10^{-3}$
$\Delta t$	[s]	$3,4 \times 10^{-4}$
$\kappa_0$	[1/m]	49,1
$\kappa_A$	[1/m]	$[2 \kappa_0, 6 \kappa_0]$
$\kappa_{\max}$	[1/m]	$3,1 \times 10^3$
$\sigma_A$	[m/s]	$6,5 \times 10^{-5}$
$T_A$	[s]	$3,4 \times 10^{-2}$

(Yeung & Pope 1989). In den Simulationsläufen zu S-128<sup>3</sup> betragen die Dichte und die kinematische Viskosität des Fluids gleich  $\rho = 1,17 \text{ kg/m}^3$  und  $\nu = 1,47 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ .

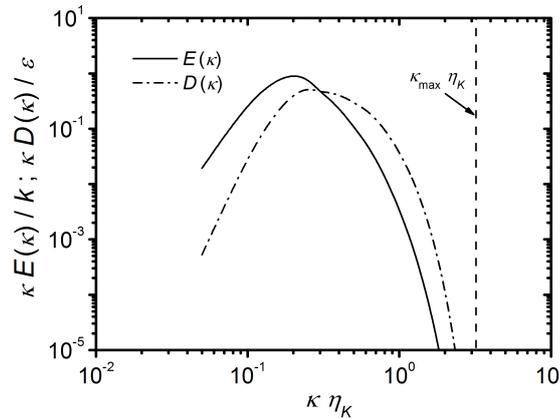
Abbildung 4.1 zeigt die Energie- und Dissipationsverteilung der Simulation S-128<sup>3</sup> zum Zeitpunkt  $t$  aufgetragen über der Wellenzahl  $\kappa$ . Eswaran & Pope (1988) folgend ist das Produkt aus größter aufgelöster Wellenzahl und Kolmogorov-Längenmaß mit  $\kappa_{\max} \eta_K = 3,2$  größer als eins. Darüber hinaus liegt der Scheitelpunkt des Dissipationsspektrums mit  $\kappa_S \eta_K = 0,2$  unterhalb des Grenzwertes von  $\kappa_S \eta_K \ll 1$  (Eswaran & Pope 1988). Folglich werden sowohl die größten energietragenden Wirbel als auch die kleinsten dissipativen Skalen hinreichend genau durch das Rechengitter erfasst.

Die Kenngrößen der homogenen isotropen Turbulenz sind in Tabelle 4.2 aufgeführt. Im Gegensatz zu Fedde & Simonin (2006), die ihre Analysen bei  $Re_\lambda = 34,1$  mit  $\eta_K/\Delta x = 0,68$  durchführten, wird in den vorliegenden Untersuchungen eine kleinere Anregungsamplitude gewählt, sodass das Auflösungskriterium mit  $\eta_K/\Delta x = 1,02$  erfüllt ist. Gleichwohl ist die Taylor-Reynolds-Zahl mit  $Re_\lambda = 18,0$  gegenüber Fedde & Simonin (2006) deutlich kleiner. Auf Grundlage der in Tabelle 4.2 aufgelisteten charakteristischen Makro- und Mikroskalen,  $\lambda_T/L_f = 0,67$  und  $\eta_K/L_f = 0,071$ , wird der kaskadenförmige Zerfall der verschiedenskalierten Wirbelelemente über drei Größenordnungen erfasst. Eine weitere Kenngröße zur Charakterisierung des Transportverhaltens einzelner Fluidteilchen in turbulenten Strömungen ist das Lagrangesche integrale Zeitmaß  $\tau_L^F$ :

$$\tau_L^F = \int_0^{+\infty} R_L^F d\tau \quad (4.1)$$

worin  $R_L^F$  die Lagrangesche Kreuzkorrelation der Fluidgeschwindigkeit im Zeitintervall  $\tau$  kennzeichnet:

$$R_L^F = \frac{\langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x} + \mathbf{u} \tau, t + \tau) \rangle}{\langle u'_i(\mathbf{x}, t)^2 \rangle} \quad (4.2)$$



**Abb. 4.1.** Dreidimensionales Energie- (*durchgezogene Linie*) und Dissipationsspektrum (*Strich-Punkt-Linie*) des Simulationslaufs S-128<sup>3</sup> als Funktion der Wellenzahl  $\kappa$ . Die *gestrichelte Linie* kennzeichnet die größte aufgelöste Wellenzahl  $\kappa_{\max}$  bezogen auf das Kolmogorov-Längenmaß  $\eta_K$ . Die Spektren  $E(\kappa)$  und  $D(\kappa)$  sind mit Hilfe der turbulenten kinetischen Energie  $k$ , der Dissipationsrate  $\epsilon$  sowie der Wellenzahl  $\kappa$  normiert.

Aus numerischen Untersuchungen in homogener isotroper Turbulenz ist bekannt, dass das Eulersche integrale Zeitmaß  $\tau_E$  im Vergleich zu  $\tau_L^F$  um das Ein- bis Zweifache größer ist (Hunt *et al.* 1987). In der vorliegenden Studie stehen gemäß Tabelle 4.2 beide Zeitmaße mit  $\tau_E/\tau_L^F = 2,2$  in Relation, was auf eine adäquate Dimensionierung der Anregungsparameter  $\sigma_A$  und  $T_A$  schließen lässt.

#### 4.1.2 Disperse Phase

Die diskreten Punktpartikel bewegen sich in einem Lagrangeschen Bezugssystem frei durch das ortsfeste Rechengitter des Fluids. Die sphärischen Partikel sind starr und besitzen eine monodisperse Größenverteilung. Der Partikeldurchmesser  $d_P$  ist mit  $0,2\eta_K$  kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß, wodurch die von Maxey & Riley (1983) eingeführte Bedingung zur Lösung der BBO-Bewegungsgleichung (2.29) mit  $d_P/\eta_K < 1$  Berücksichtigung findet. Im Vergleich zu numerisch aufgelösten Partikeln vereinigen Punktpartikel die gesamte Masse in ihrem Schwerpunkt. Aufgrund der großen Anzahl von bis zu  $5,0 \times 10^5$  simultan zu verfolgenden Partikeln stellt dieser Ansatz eine rechentechnisch notwendige Idealisierung der Teilchen dar. Da  $d_P$  kleiner als die kleinsten turbulenten Längenskalen ist, werden im Folgenden die Kolmogorov-Maße  $\eta_K$ ,  $\tau_\eta$  und  $u_\eta$  zur Normierung der spezifischen Partikeleigenschaften herangezogen.

Tabelle 4.3 fasst die in den Simulationen S-128<sup>3</sup> (A-U) angenommenen Eigenschaften der dispersen Phase zusammen. Um Partikelrelaxationszeiten im Bereich des Kolmogorov-Zeitmaßes zu erzielen, wird das Verhältnis von Partikel- zu Fluidichte

**Tab. 4.2.** Charakteristische Eigenschaften der in S-128<sup>3</sup> generierten homogenen isotropen Turbulenz. Die aufgeführten Kenngrößen wurden über drei Simulationsläufe gemittelt.

Symbol	Einheit	S-128 <sup>3</sup>
$k$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	$1,14 \times 10^{-3}$
$\epsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	$2,92 \times 10^{-3}$
$u'$	[m/s]	$2,75 \times 10^{-2}$
$Re_L$	[-]	27,0
$L_f/L$	[-]	0,113
$L_g/L$	[-]	0,084
$\tau_e/\tau_\eta$	[-]	7,41
$\tau_E/\tau_e$	[-]	0,65
$\tau_W/\tau_e$	[-]	1,05
$\tau_L^F/\tau_e$	[-]	0,30
$Re_\lambda$	[-]	18,0
$\lambda_T/L_f$	[-]	0,67
$\eta_K/L_f$	[-]	0,071
$\kappa_{\max} \eta_K$	[-]	3,21
$\eta_K/\Delta x$	[-]	1,02
$\tau_\eta/\Delta t$	[-]	208,5
$u_\eta/u'$	[-]	0,52

zwischen  $\rho_P/\rho = [4,73 \times 10^1; 4,73 \times 10^3]$  variiert. In den vorliegenden Studien wird das Clustering- und Kollisionsverhalten der Partikel anhand verschiedener Volumenanteile analysiert. Der Volumenbruch  $\alpha_P$  der dispersen Phase resultiert aus dem Volumen eines Einzelpartikels multipliziert mit der Anzahl  $N_P$  der injizierten Partikel:

$$\alpha_P = \frac{N_P \pi d_P^3}{6 L^3} \quad (4.3)$$

In den Simulationen S-128<sup>3</sup> (A-G) werden zunächst 50.066 Partikel in die turbulente Strömung injiziert. Dies entspricht einem Volumenanteil von  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-4}$ . Auf Grundlage der von Elghobashi (1994) eingeführten Klassifizierung ist die disperse Phase hierbei als verdünnt einzustufen. Darüber hinaus ist in den Fällen A-G die Massenbeladung mit  $m_{P_{\max}}/m = 0,9$  klein genug, um die lokale Entwicklung der Fluidströmung infolge der Partikelpräsenz nicht zu beeinflussen (Elghobashi 1994). Folglich findet in diesen Simulationen die sogenannte Ein-Wege-Kopplung Anwendung. Um den Einfluss von Partikel-Partikel-Kollisionen auf das Transportverhalten der Partikel auch für höhere  $\alpha_P$  bewerten zu können, wird der Volumenbruch der partikulären

**Tab. 4.3.** Dimensionslose Eigenschaften der Partikel in Abhängigkeit des Volumenanteils der dispersen Phase in den Simulationsläufen zu S-128<sup>3</sup>:  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-4}$  (Fall A-G),  $\alpha_P = 5,0 \times 10^{-4}$  (Fall H-N) und  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  (Fall O-U). Die aufgelisteten Partikel-Reynolds- und Partikel-Stokes-Zahlen sind über 12  $\tau_W$  gemittelt.

Fall	$\rho_P/\rho$	$m_P/m$	$Re_P$	$St_K$	$St_L$
A	$4,73 \times 10^1$	0,01	0,03	0,10	0,05
B	$2,36 \times 10^2$	0,05	0,11	0,50	0,23
C	$4,73 \times 10^2$	0,09	0,18	1,00	0,46
D	$5,91 \times 10^2$	0,11	0,20	1,25	0,57
E	$7,09 \times 10^2$	0,14	0,23	1,50	0,69
F	$9,46 \times 10^2$	0,18	0,27	2,00	0,92
G	$4,73 \times 10^3$	0,90	0,47	9,67	4,41
H	$4,73 \times 10^1$	0,05	0,03	0,10	0,05
I	$2,36 \times 10^2$	0,23	0,11	0,50	0,23
J	$4,73 \times 10^2$	0,45	0,18	1,00	0,46
K	$5,91 \times 10^2$	0,56	0,20	1,25	0,57
L	$7,09 \times 10^2$	0,68	0,23	1,50	0,69
M	$9,46 \times 10^2$	0,90	0,27	2,00	0,92
N	$4,73 \times 10^3$	4,51	0,47	9,67	4,41
O	$4,73 \times 10^1$	0,09	0,03	0,10	0,05
P	$2,36 \times 10^2$	0,45	0,11	0,50	0,23
Q	$4,73 \times 10^2$	0,90	0,18	1,00	0,46
R	$5,91 \times 10^2$	1,13	0,20	1,25	0,57
S	$7,09 \times 10^2$	1,35	0,23	1,50	0,69
T	$9,46 \times 10^2$	1,81	0,27	2,00	0,92
U	$4,73 \times 10^3$	9,03	0,47	9,67	4,41

Phase schrittweise auf  $5,0 \times 10^{-4}$  (Fall H-N) und  $1,0 \times 10^{-3}$  (Fall O-U) angehoben. In diesen Simulationsläufen werden 250.330 respektive 500.659 Partikel zeitlich simultan verfolgt. Zum Zwecke einer methodischen Vergleichbarkeit sowohl mit dem Referenzvolumenbruch (Fall A-G) als auch mit vorangegangenen Analysen (Sundaram & Collins 1997; Fede & Simonin 2006) wird in den Berechnungen H-U die Ein-Wege-Kopplung trotz höherer Massenbeladung (vgl. Tabelle 4.3) beibehalten. Diese Vereinfachung ist allerdings mit Fehlern verbunden, da die Zwei-Wege-Kopplung für größere  $\rho_P/\rho$  geeigneter ist. Die größeren  $m_P/m$  in den Fällen H-N und O-U stimmen gleichwohl mit den Massenbeladungen aus Sundaram & Collins (1997) überein. Schlussendlich wird die wahrscheinliche Position zweier kollidierender Partikel nicht durch ihre finite Größe beeinflusst, da Kollisionseffekte infolge zu dichter Teilchenpackungen durch die gewählten Volumenbrüche von kleiner als  $5,0 \times 10^{-2}$  weitestgehend auszuschließen sind (Fede & Simonin 2006).

Als Maß für das Folgevermögen der betrachteten Partikel in der umgebenden Strömung sind in Tabelle 4.3 zwei dimensionslose Partikel-Stokes-Zahlen,  $St_K$  und  $St_L$ , aufgelistet. Sie definieren das Verhältnis der Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  zu charakteristischen mikro- und makroskaligen Zeitmaßen der Turbulenz:

$$St_K = \frac{\langle \tau_P \rangle_P}{\tau_\eta} \quad (4.4)$$

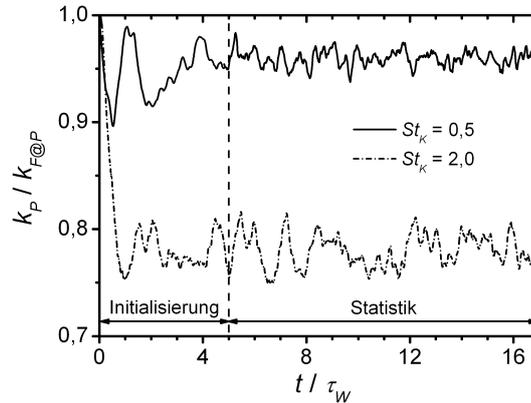
$$St_L = \frac{\langle \tau_P \rangle_P}{\tau_L^F} \quad (4.5)$$

worin  $\tau_\eta$  das Kolmogorov-Zeitmaß und  $\tau_L^F$  das Langrangesche integrale Zeitmaß ist. Der Operator  $\langle \cdot \rangle_P$  kennzeichnet den Ensemblemittelwert der injizierten Partikel. Die resultierenden Partikel-Stokes-Zahlen liegen gemäß Tabelle 4.3 in Bereichen von  $St_K = [0,10; 9,67]$  und  $St_L = [0,05; 4,41]$ .

Zu Beginn eines jeden Simulationslaufs werden die betrachteten Teilchen innerhalb des gesamten Rechengebietes mit zufälligen, sich nicht überschneidenden Positionen gleichzeitig injiziert. Das anfängliche Strömungsfeld ist in allen Simulationsläufen gleich und basiert auf den in Tabelle 4.2 genannten Turbulenzcharakteristika. Die initiale Partikelgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_P$  entspricht der instantanen Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{F@P}$  an der Position des Partikels (siehe Anhang A.1). Abbildung 4.2 zeigt exemplarisch die zeitliche Entwicklung der kinetischen Energie zweier Partikelsysteme. Die mittlere spezifische kinetische Energie  $k_P$  der Partikel zum Zeitpunkt  $t$  berechnet sich mit:

$$k_P = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}_P \cdot \mathbf{u}_P \rangle_P \quad (4.6)$$

Zum Zeitpunkt der Partikelinjektion entspricht  $k_P$  der spezifischen kinetischen Energie des Fluids  $k_{F@P}$  an der Position der Partikel (siehe Abbildung 4.2 bei  $t/\tau_W = 0$ ).



**Abb. 4.2.** Zeitliche Entwicklung der mittleren kinetischen Energie  $k_P$  der Partikel als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Der Volumenbruch der dispersen Phase beträgt  $\alpha_P = 5,0 \times 10^{-4}$ . Die kinetische Energie  $k_P$  der Partikel ist mit Hilfe der kinetischen Energie des Fluids  $k_{F@P}$  an der Position der Partikel normiert. Die Skalierung der Zeit  $t$  beruht auf der Wirbelumdrehungszeit  $\tau_W$ .

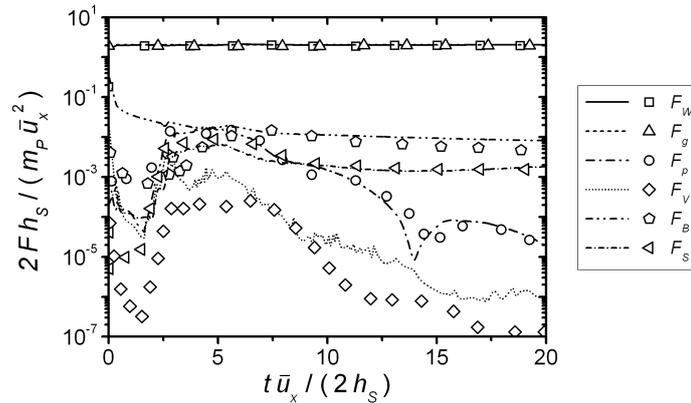
Nach einiger Zeit erreichen die Partikel eine ihrer Trägheit entsprechende, quasistationäre Verteilung im Rechengebiet, sodass  $k_P/k_{F@P}$  beginnt, um einen Mittelwert zu fluktuieren. Wie Abbildung 4.2 zeigt, sinkt die kinetische Energie  $k_P$  mit steigendem  $St_K$ , da die Partikel mit größer werdender Trägheit, die auf  $\rho_P/\rho$  zurückzuführen ist, in geringerem Maße den turbulenten Schwankungsbewegungen des Fluids folgen können. Die Initialisierung der in dieser Studie betrachteten Partikelsysteme ist gemäß Abbildung 4.2 innerhalb von  $5\tau_W$  abgeschlossen. Im Anschluss folgt über  $12\tau_W$  die Berechnung statistischer Kennwerte zum Transport-, Clustering- und Kollisionsverhalten der Partikel.

## 4.2 Lagrangesches Partikeltracking

Vor der Untersuchung des Clustering- und Kollisionsverhaltens werden im folgenden Abschnitt die in der Partikelbewegungsgleichung zu berücksichtigenden Partikelkräfte spezifiziert. Anschließend folgt eine Analyse der Fluid- und Partikeleigenschaften entlang der zurückgelegten Partikeltrajektorien.

### 4.2.1 Analyse der Partikelkräfte

Die in Kapitel 2.3 vorgestellten Modelle zur Verfolgung von Partikeln wurden im Kontext dieser Arbeit in das LBM basierte Simulationsprogramm implementiert. Die Berechnung der translatorischen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit basiert



**Abb. 4.3.** Vergleich der in einer Stufenkanalströmung aufgezeichneten Partikelkräfte (Maiss 2010), *Linien*, mit aus der Literatur verfügbaren Simulationsdaten (Barton 1995), *offene Symbole*, als Funktion der Zeit. Die durchgeführten Berechnungen basieren auf einer zweidimensionalen Betrachtung des in Kapitel 3.1 vorgestellten Backward-Facing Step. Die Höhe des am BFS-Einlass injizierten Einzelpartikels beträgt  $0,55(L_z - h_S)$ . Die Kraft  $F$  sowie die Zeit  $t$  sind anhand der Höhe  $h_S$  der rückwärtsgewandten Stufe, der x-Komponente der mittleren Strömungsgeschwindigkeit  $\bar{u}_x$  am Kanaleinlass sowie der Partikelmasse  $m_P$  normiert.

auf der BBO-Partikelbewegungsgleichung (2.29), die neben der Widerstandskraft  $F_W$  zusätzliche Terme wie die Kraft  $F_p$  durch Druckgradienten in der Strömung, die virtuelle Masse  $F_V$  des Fluids, die Basset-Kraft  $F_B$  sowie die Schwerkraft  $F_g$  mit Gravitation und Auftrieb berücksichtigt. Bewegen sich Partikel in einer Scherströmung, findet zudem die Saffman-Auftriebskraft  $F_S$  Anwendung. Die Implementierung der zuvor genannten Kraftterme in das Berechnungsprogramm wird in Maiss (2010) evaluiert. In den Untersuchungen werden einzelne Punktpartikel in die Strömung des in Kapitel 3.1 vorgestellten Backward-Facing Step (BFS) injiziert und mit numerischen Daten aus Barton (1995) verglichen.

Abbildung 4.3 stellt den zeitlichen Verlauf der aufgezeichneten Partikelkräfte eines am BFS-Einlass injizierten Partikels dar. Mit Ausnahme von  $F_V$  zeigen die resultierenden Kurvenverläufe der Partikelkräfte insbesondere ab  $t \bar{u}_x / (2 h_S) > 3$ , das heißt nach Verlassen des Einlaufkanals, eine gute Übereinstimmung mit den herangezogenen Vergleichsdaten. Die signifikanten Unterschiede von  $F_p$  und  $F_B$  im Bereich des Einlaufkanals sind auf abweichende, initiale Relativgeschwindigkeiten zwischen Fluid und Partikel zurückzuführen, die sich stromabwärts der Stufe sukzessive angleichen (siehe Abbildung 4.3). Diese Tendenz wurde bereits in Kapitel 3.1.2 anhand der vertikalen Profile der Fluidgeschwindigkeit diskutiert. Obwohl Abweichungen von bis zu einer Zehnerpotenz vorliegen, stimmen die Kurvenverläufe der virtuellen Masse des Fluids qualitativ mit Barton (1995) überein. Weiterführende Analysen

zeigen, dass sowohl die Definition des totalen Differentials (vgl. Kapitel 2.3.1) als auch die Fehlerordnung der zur Approximation der lokalen Fluidgeschwindigkeit angewandten Interpolationsmethode maßgeblich Einfluss auf  $F_V$  ausüben (Maiss 2010). Gleichwohl lässt der vorliegende Vergleich auf eine korrekte Implementierung der BBO-Partikelbewegungsgleichung schließen.

Beim Lagrangeschen Tracking werden die Teilchen entsprechend der auf die Partikel wirkenden Kräfte durch das Fluid bewegt. Im Fall von turbulenten Strömungen sind insbesondere jene Terme relevant, die die Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikeln beschreiben. Zu diesem Zweck werden in Anlehnung an Hjelmfelt & Mockros (1966) einzelne Kraftterme der BBO-Partikelbewegungsgleichung (2.29) vom Zeit- in den Frequenzbereich transformiert und anschließend schrittweise eliminiert. Die Grundgleichungen der im Folgenden vorgestellten Frequenzanalyse sind im Anhang A.2 aufgeführt. Die zur Frequenzanalyse angewandten Fluid- und Partikeleigenschaften sind in Kapitel 4.1 beschrieben.

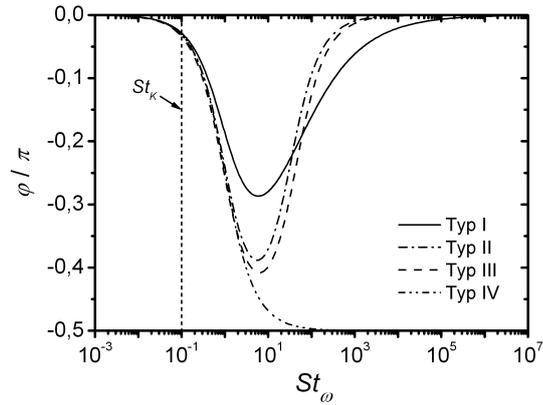
Abbildung 4.4 zeigt den analytischen Vergleich der spektralen Verteilung des Phasenwinkels unter Anwendung einer vereinfachten Partikelbewegungsgleichung (A.5): Typ I ( $F_n = F_W + F_p + F_V + F_B$ ), Typ II ( $F_n = F_W + F_p + F_V$ ), Typ III ( $F_n = F_W + F_p$ ) und Typ IV ( $F_n = F_W$ ). Der Verlauf des Phasenwinkels  $\varphi$  ist über der Partikel-Stokes-Zahl  $St_\omega$  aufgetragen, die das Produkt aus Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  im Stokes-Bereich und der Kreisfrequenz  $\omega_S$  eines Wirbels kennzeichnet<sup>7</sup>:

$$St_\omega = \tau_P \omega_S \quad (4.7)$$

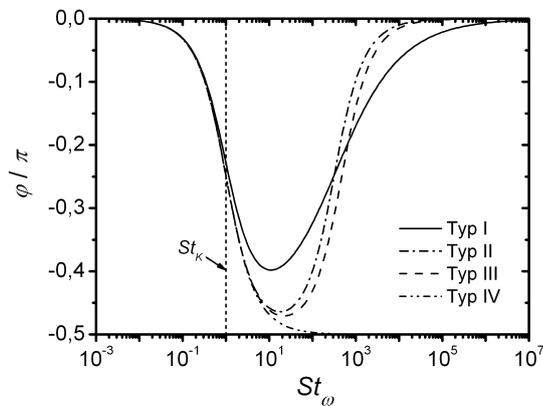
Ungeachtet der betrachteten Dichteverhältnisse sowie der Zusammensetzung der Gesamtkraft  $F_n$  nimmt  $\varphi$  mit steigender Kreisfrequenz bis  $St_\omega \approx 10$  stetig ab. Folglich können die Partikel den turbulenten Wirbelstrukturen aufgrund ihrer größer werdenden Trägheit zunehmend schlechter folgen. Im Allgemeinen überwiegt im Bereich kleiner  $St_\omega$  der Einfluss der Widerstandskraft auf das Transportverhalten der Partikel. Trotz schrittweiser Vereinfachung der Gesamtkraft fallen gemäß Abbildung 4.4a für  $St_\omega \leq 0,1$ , (b)  $St_\omega \leq 1$  und (c)  $St_\omega \leq 2$  die Kurven der Typen I-III mit dem Typ IV zusammen.

In Ergänzung zur spektralen Verteilung des Phasenwinkels sind in Abbildung 4.4 die jeweiligen Partikel-Stokes-Zahlen  $St_K$  auf Basis des Kolmogorov-Zeitmaßes  $\tau_\eta$  eingezeichnet (*vertikal gestrichelte Linien*). Diese ist mittels  $1/\tau_\eta$  in eine Kreisfrequenz überführbar. Anhand der dargestellten Grenzen wird ersichtlich, dass die Kräfte  $F_p$ ,  $F_V$  und  $F_B$  für  $St_\omega \leq St_K$  in Abbildung 4.4a-b vernachlässigbar sind und im Vergleich zu  $F_W$  (Typ IV) einen marginalen Einfluss auf das Transportverhalten der Partikel ausüben. Unter Annahme größerer Dichteunterschiede zwischen Fluid und Partikeln

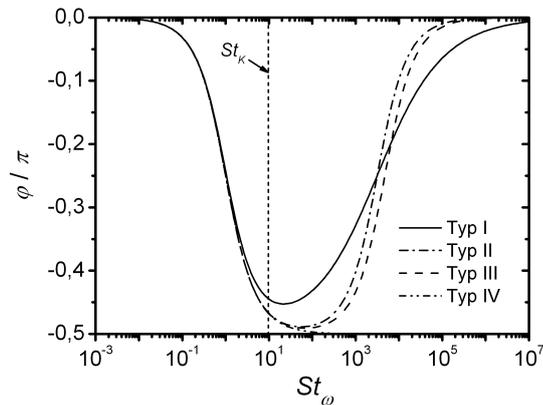
<sup>7</sup>Abweichend zu Gleichung (4.7) ist die von Hjelmfelt & Mockros (1966) eingeführte Partikel-Stokes-Zahl mit  $St_\omega = (\nu/(\omega_S d_P^2))^{1/2}$  definiert.



(a)

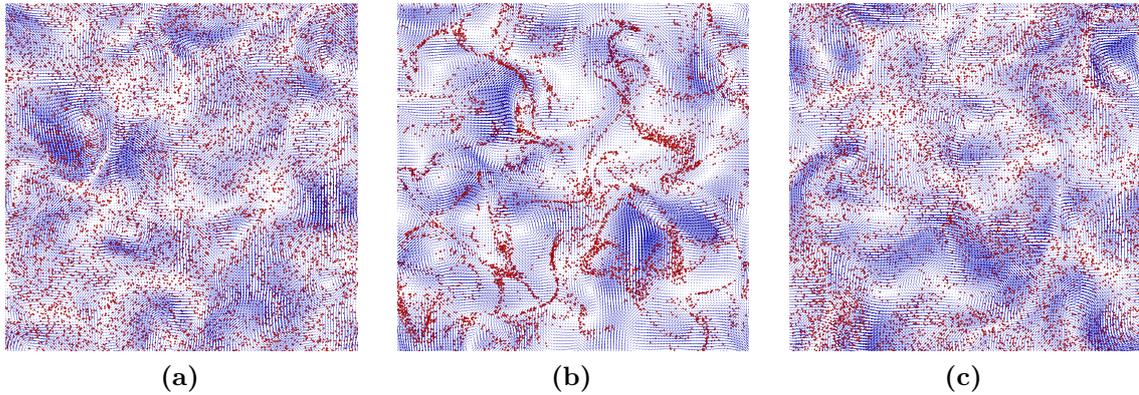


(b)



(c)

**Abb. 4.4.** Spektrale Verteilung des Phasenwinkels  $\varphi$  als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_\omega$ : Sphärische Partikel suspendiert in isotroper Turbulenz bei einem Dichteverhältnis  $\rho_P/\rho$  von (a)  $4,73 \times 10^1$ , (b)  $4,73 \times 10^2$  und (c)  $4,73 \times 10^3$ . In der vereinfachten Partikelbewegungsgleichung werden die Widerstandskraft  $F_W$ , die Kraft  $F_p$  durch Druckgradienten in der Strömung, die virtuelle Masse  $F_V$  des Fluids sowie die Basset-Kraft  $F_B$  wie folgt berücksichtigt: Typ I ( $F_n = F_W + F_p + F_V + F_B$ ), Typ II ( $F_n = F_W + F_p + F_V$ ), Typ III ( $F_n = F_W + F_p$ ) und Typ IV ( $F_n = F_W$ ). Die vertikal gestrichelten Linien kennzeichnen die jeweilige Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  des zugrundeliegenden Partikelsystems.



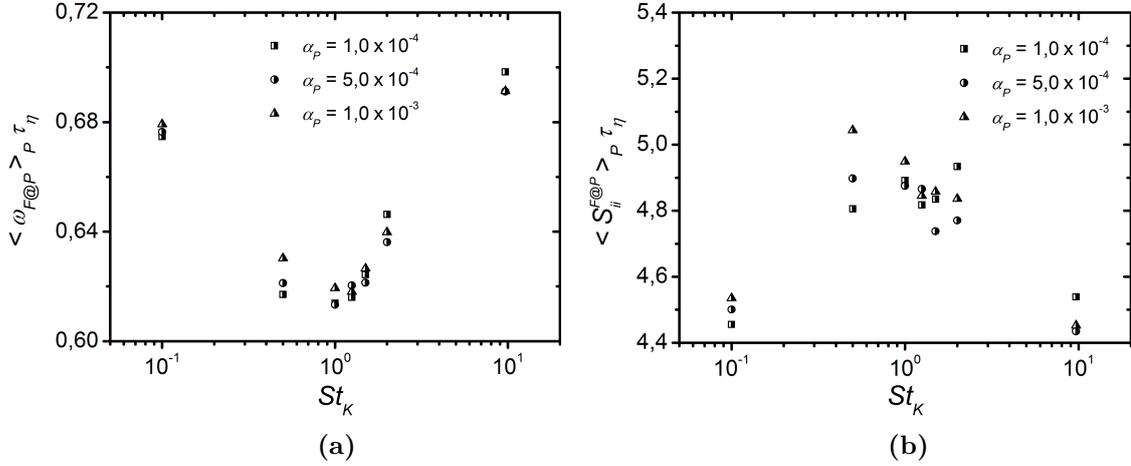
**Abb. 4.5.** Momentaufnahme des turbulenten Strömungsfeldes (*blaue Vektoren*) und der Partikelverteilung (*rote Punkte*) in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen: (a)  $St_K = 0,1$  (Fall O), (b)  $St_K = 1,0$  (Fall Q) und (c)  $St_K = 9,67$  (Fall U). Der Volumenbruch der dispersen Phase beträgt  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$ . Die Kantenlänge  $l$  und Tiefe  $s$  der Bildausschnitte betragen  $l/\eta_K = 128$  und  $s/\eta_K = 2$ . Der Teilchendurchmesser ist zur besseren Sichtbarkeit mit dreifacher Vergrößerung dargestellt.

führt die Vernachlässigung des Basset-Terms zwischen  $2 \leq St_\omega \leq St_K$  zu geringfügig abweichenden Phasenwinkeln (siehe Abbildung 4.4c).

Auf Grundlage der vorliegenden Frequenzanalyse werden im Folgenden die Basset-Kraft, die virtuelle Masse des Fluids sowie die Kraft durch einen Druckgradienten in der Strömung in der Partikelbewegungsgleichung vernachlässigt. Um einer bevorzugten Bewegungsrichtung der Partikel in der isotropen Turbulenz entgegenzuwirken, entfällt analog zu Sundaram & Collins (1997) und Fede & Simonin (2006) zudem der Gravitations- und Auftriebsterm. Demzufolge findet lediglich die Widerstandskraft in der Partikelbewegungsgleichung (2.29) Anwendung. Im nachstehenden Abschnitt werden die aus den Simulationen hervorgehenden Fluid- und Partikeleigenschaften vorgestellt und analysiert.

#### 4.2.2 Turbulenter Partikeltransport

Abbildung 4.5 zeigt typische quasi-zweidimensionale Momentaufnahmen der in den turbulenten Strömungsfeldern suspendierten Partikel. Wie in den Kapiteln 1.1 und 2.5 erläutert, neigen träge Partikel dazu, in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  charakteristische Verteilungen in der Strömung zu entwickeln. Einzelne fadenförmige Partikelcluster sind beispielsweise in Abbildung 4.5b bei  $St_K = 1,0$  erkennbar, wohingegen Partikel mit  $St_K = 0,1$  und  $9,67$  deutlich homogener in der gesamten Fluiddomäne verteilt sind (siehe Abbildung 4.5a und c).

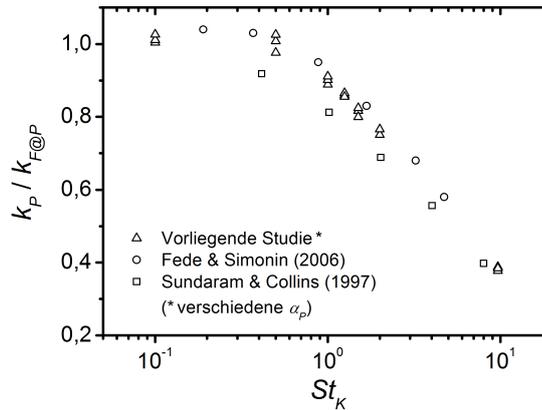


**Abb. 4.6.** Mittlere (a) Wirbelstärke  $\omega_{F@P}$  und (b) Dehnungsrate  $S_{ij}^{F@P}$  des Fluids an der Position der Partikel in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Sowohl  $\omega_{F@P}$  als auch  $S_{ij}^{F@P}$  sind mit Hilfe des Kolmogorov-Zeitmaßes  $\tau_\eta$  normiert.

Die vorliegenden Momentaufnahmen reproduzieren qualitativ aus der Literatur bekannte Verteilungen für Punktpartikel in homogener isotroper Turbulenz (Reade & Collins 2000; Bec 2005; Yoshimoto & Goto 2007). Wie Abbildung 4.5a zeigt, verhalten sich Partikel mit  $\rho_P/\rho \rightarrow 0$  wie Fluidtracer, da sie den zugrundeliegenden Stromlinien aufgrund ihrer geringen Trägheit nahezu ungehindert folgen. Im Ergebnis sind ihre Trajektorien gleichmäßig im Rechengebiet verteilt. Demgegenüber erfahren Partikel mit  $\rho_P/\rho \rightarrow \infty$  eine ballistische Bewegung, bei der sie infolge ihrer großen Trägheit kaum mit dem Trägerfluid interagieren. Die resultierende Partikelverteilung tendiert ebenfalls zu einer Gleichverteilung (siehe Abbildung 4.5c). Im mittleren Trägheitsbereich zwischen  $0,5 \leq St_K \leq 2,0$  treten die Partikel in Wechselwirkung mit den Strömungsstrukturen. Infolgedessen sammeln sich die Teilchen in Strömungsgebieten mit geringer Wirbelstärke und hoher Dehnungsrate an (vgl. Abbildung 4.5b). Zur Verdeutlichung dieses Sachverhalts sind zu den untersuchten  $St_K$  und  $\alpha_P$  in Abbildung 4.6 die mittlere Wirbelstärke  $\omega_{F@P}$  sowie die Dehnungsrate  $S_{ij}^{F@P}$  des Fluids an der Position der Partikel aufgetragen. Die Dehnungsgeschwindigkeit des Fluids basiert auf folgendem Tensor:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.8)$$

Ist eine bevorzugte Konzentration der Teilchen analog zu Abbildung 4.5b zu verzeichnen, erfahren die Partikel im Vergleich zu den beiden Grenzfällen  $St_K = 0,1$  und  $St_K = 9,67$  deutlich kleinere  $\omega_{F@P}$  und merklich größere  $S_{ij}^{F@P}$ . Abbildung 4.6

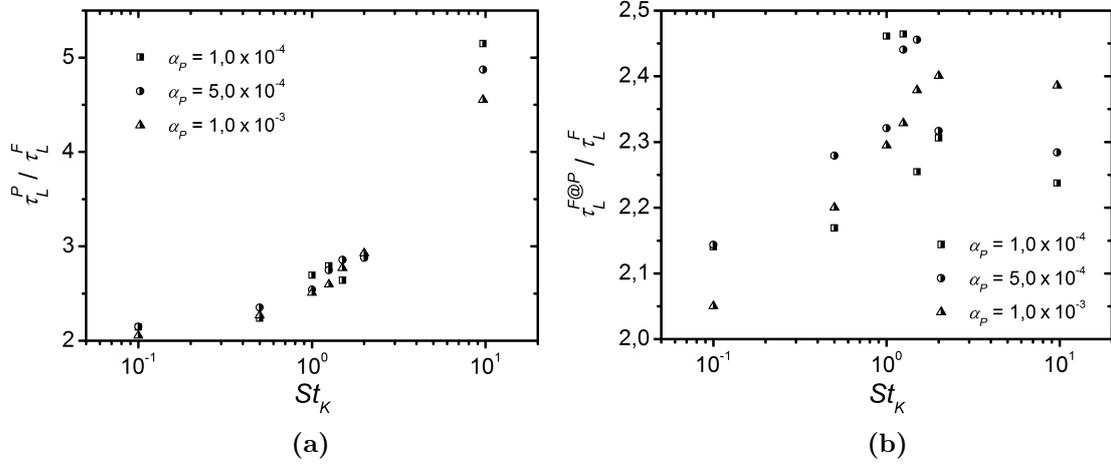


**Abb. 4.7.** Vergleich der mittleren spezifischen kinetischen Energie der Partikel  $k_P$  (Dreiecke,  $Re_\lambda = 18,0$ ) mit Daten weiterer direkter numerischer Simulationen in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$ : Fede & Simonin (2006) (Kreise,  $Re_\lambda = 34,1$ ) und Sundaram & Collins (1997) (Quadrate,  $Re_\lambda = 54,2$ ). Symbole gleichen Typs bei gleicher  $St_K$  repräsentieren  $k_P$  unterschiedlicher Volumenbrüche  $\alpha_P$ . Die mittlere spezifische kinetische Energie der Partikel ist mit Hilfe der mittleren turbulenten kinetischen Energie des Fluids  $k_{F@P}$  an der Position der Partikel normiert.

stellt darüber hinaus den Einfluss des Feststoffvolumenbruchs unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen dar. Obwohl die entnommenen  $\omega_{F@P}$  und  $S_{ij}^{F@P}$  keine eindeutige Differenzierung zwischen den betrachteten Volumenanteilen zulassen, lässt sich um  $St_K \approx 1$  stets ein Minimum der mittleren Wirbelstärke sowie ein Maximum der mittleren Dehnungsrate identifizieren.

In Ergänzung zu den mittleren Fluideigenschaften an den Partikelpositionen ist in Abbildung 4.7 das Verhältnis  $k_P/k_{F@P}$  über  $St_K$  aufgetragen, worin  $k_{F@P}$  der mittleren turbulenten kinetischen Energie des Fluids an der Position der Partikel entspricht. Da die Partikel mit steigender Trägheit den turbulenten Schwankungen des Fluids zunehmend weniger folgen können, nimmt  $k_P/k_{F@P}$  mit steigender  $St_K$  stetig ab. Darüber hinaus haben verschiedene  $\alpha_P$  keinen größeren Einfluss auf die gemessenen  $k_P/k_{F@P}$ . Dieses Verhalten ist bei den in dieser Studie betrachteten ideal elastischen Stößen zu erwarten, da  $k_P$  durch Partikel-Partikel-Kollisionen nicht beeinflusst wird.

Neben den LBM basierten  $k_P/k_{F@P}$  sind in Abbildung 4.7 Daten aus weiteren direkten numerischen Simulationen (Sundaram & Collins 1997; Fede & Simonin 2006) dargestellt. Demnach zeigen die berechneten Energieverhältnisse eine gute quantitative Übereinstimmung mit den in der Literatur verfügbaren Simulationsdaten. Der Versatz zwischen den einzelnen Datensätzen liegt in unterschiedlichen  $Re_\lambda$  begründet (Vorliegende Studie:  $Re_\lambda = 18,0$ ; Fede & Simonin (2006):  $Re_\lambda = 34,1$ ; Sundaram &



**Abb. 4.8.** Lagrangesches integrales Zeitmaß (a) der Partikel  $\tau_L^P$  und (b) des Fluids  $\tau_L^{F@P}$  an der Position der Partikel in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Die Zeitmaße  $\tau_L^P$  und  $\tau_L^{F@P}$  sind mit Hilfe des Lagrangeschen integralen Zeitmaßes des Fluids  $\tau_L^F$  normiert.

Collins (1997):  $Re_\lambda = 54,2$ ). Größere  $Re_\lambda$  implizieren in diesem Zusammenhang einen höheren Energiegehalt im Strömungsfeld. Aus diesem Grund ist insbesondere der aus Sundaram & Collins (1997) extrahierte Datensatz in Richtung kleinere  $k_P/k_{F@P}$  verschoben.

Abschließend werden in Abbildung 4.8 die mit  $\tau_L^F$  normierten Lagrangeschen integralen Zeitmaße  $\tau_L^P$  der Partikel wie auch des Fluids  $\tau_L^{F@P}$  an der Position der Partikel verglichen, die auf der Lagrangeschen Kreuzkorrelation von  $\mathbf{u}_P$  und  $\mathbf{u}_{F@P}$  basieren:

$$R_L^P = \frac{\langle u'_{Pi}(\mathbf{x}_P, t) u'_{Pi}(\mathbf{x}_P + \mathbf{u}_P \tau, t + \tau) \rangle_P}{\langle u'_{Pi}(\mathbf{x}_P, t)^2 \rangle_P} \quad (4.9)$$

$$R_L^{F@P} = \frac{\langle u'_{F@Pi}(\mathbf{x}_P, t) u'_{F@Pi}(\mathbf{x}_P + \mathbf{u}_P \tau, t + \tau) \rangle_P}{\langle u'_{F@Pi}(\mathbf{x}_P, t)^2 \rangle_P} \quad (4.10)$$

Zur Beschreibung der turbulenten Schwankungsbewegung der Partikel wird die Partikelgeschwindigkeit  $u_P(\mathbf{x}_P, t)$  analog zu Gleichung (3.9) mit Hilfe der Reynoldsschen-Zerlegung in einen gemittelten Term zerlegt, der von einer statistischen Fluktuation überlagert wird:

$$u_P(\mathbf{x}_P, t) = \overline{u_P}(\mathbf{x}_P) + u'_P(\mathbf{x}_P, t) \quad (4.11)$$

worin  $\overline{u_P}(\mathbf{x}_P)$  der Ensemblemittelwert und  $u'_P(\mathbf{x}_P, t)$  die turbulente Partikelschwankungsgeschwindigkeit ist. Unter Annahme homogener isotroper Turbulenz ist  $\overline{u_P}(\mathbf{x}_P)$  ebenfalls 0, wodurch sich Gleichung (4.11) zu  $u_P(\mathbf{x}_P, t) = u'_P(\mathbf{x}_P, t)$  vereinfacht. Die

zugehörigen Lagrangeschen integralen Zeitmaße,  $\tau_L^P$  und  $\tau_L^{F@P}$ , berechnen sich mit:

$$\tau_L^P = \int_0^{+\infty} R_L^P d\tau \quad (4.12)$$

$$\tau_L^{F@P} = \int_0^{+\infty} R_L^{F@P} d\tau \quad (4.13)$$

Anhand der in Abbildung 4.8a dargestellten Verläufe wird ersichtlich, dass sich die Geschwindigkeit der Partikel infolge ihrer größer werdenden Trägheit zunehmend langsamer ändert, wodurch  $\tau_L^P$  mit steigendem  $St_K$  monoton ansteigt. Im Gegensatz dazu nimmt  $\tau_L^{F@P}$  bis  $St_K \approx 1$  stetig zu, um anschließend zwischen  $1 < St_K \leq 9,67$  wieder abzufallen (siehe Abbildung 4.8b). Außerhalb der in dieser Studie untersuchten Partikel-Stokes-Zahlen steigt  $\tau_L^{F@P}$  für  $St_K > 10$  abermals an (Jung *et al.* 2008). Dieses nicht monotone Verhalten von  $\tau_L^{F@P}$  im Bereich großer  $St_K$  wird von Jung *et al.* (2008) anhand von Partikel-Wirbel-Wechselwirkungen begründet. Ist die Trägheit der Partikel demnach groß genug, um Partikel-Stokes-Zahlen zwischen  $1 < St_K < \tau_L^F/\tau_\eta$  zu erzielen, nimmt  $\tau_L^{F@P}$  in ähnlicher Weise ab wie unter Schwerkraft sedimentierende Partikel bei sich kreuzenden Trajektorien. Anhand der vorliegenden Verläufe lassen sich sowohl beim Lagrangeschen integralen Zeitmaß der Partikel als auch beim Lagrangeschen integralen Zeitmaß des Fluids an der Partikelposition keine eindeutigen Abhängigkeiten vom Volumenbruch  $\alpha_P$  ableiten.

### 4.3 Charakterisierung von Partikelclustern

Wie zuvor anhand von Abbildung 4.5 diskutiert, sind Partikel nicht gleichförmig in den homogenen isotropen Turbulenzfeldern verteilt. Das Clustering träger Partikel wird vorwiegend durch die Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und dem Volumenanteil  $\alpha_P$  der dispersen Phase beeinflusst. Darüber hinaus hat die Ab- und Anwesenheit von Partikel-Partikel-Kollisionen einen Einfluss auf die Partikelbewegung und folglich auf die bevorzugte Konzentration von Partikeln.

Die Bewegung von Partikeln mit kleinen  $St_K$  ist vollständig mit der des Fluids korreliert, wodurch sich die Teilchen nahezu gleichmäßig im Strömungsgebiet verteilen (siehe Abbildung 4.5a). Benachbarte Partikel bewegen sich demnach so lange im selben turbulenten Wirbel, bis sie miteinander kollidieren und anschließend rasch wieder ihre Geschwindigkeit dem des Trägerfluids annähern. Aus diesem Grund wird erwartet, dass sich die instantanen Partikelverteilungen mit und ohne Partikel-Partikel-Kollisionen kaum voneinander unterscheiden.

Partikel mit großen  $St_K$  tendieren ebenfalls dazu, sich gleichmäßig im Strömungsgebiet zu verteilen (siehe Abbildung 4.5c). In diesem Fall reduziert sich die Wechselwirkung der Partikel mit dem Fluid erheblich, sodass sich die Relativbewegung zwischen

Fluidstruktur und Partikeln mit steigendem  $St_K$  zunehmend unkorreliert verhält. Daher kollidieren die Partikel mit hohen Relativgeschwindigkeiten, was eine Redispergierung der am Stoß beteiligten Kollisionspartner im Raum bewirkt. Für große  $St_K$  sollten sich folglich Partikelverteilungen mit interpartikulären Wechselwirkungen kaum von Verteilungen ohne Partikel-Partikel-Kollisionen unterscheiden.

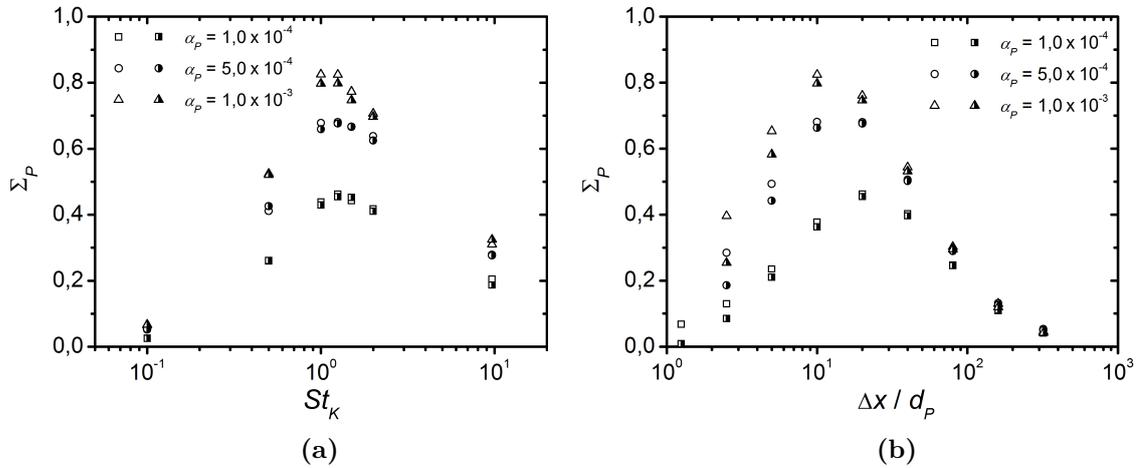
Partikel mit mittleren  $St_K$  konzentrieren sich hingegen bevorzugt in Regionen mit geringer Wirbelstärke oder an Rändern von Wirbelstrukturen (siehe Abbildung 4.5b). Dies bewirkt eine lokale Erhöhung der Kollisionswahrscheinlichkeit, wodurch die Partikel zur Redispergierung neigen. Auf Grund dessen wird eine Aufweitung der räumlichen Ausdehnung von Partikelclustern durch Partikel-Partikel-Kollisionen erwartet.

### 4.3.1 Globale Partikelakkumulation

Die statistische Verteilung der lokalen Partikelanzahldichte wird genutzt, um die relative Neigung der Partikel zur Entmischung und folglich zur bevorzugten Konzentration zu messen. Die Segregation der dispersen Phase wird gemäß Kapitel 2.5.1 mittelbar durch die globale Akkumulation  $\Sigma_P$  der Partikel bestimmt. Die Ergebnisse der in dieser Studie ermittelten  $\Sigma_P$  sind in Abbildung 4.9 zusammengefasst.

Unter Variation von  $\alpha_P$  ist in Abbildung 4.9a die Akkumulation über der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  aufgetragen. *Offene Symbole* kennzeichnen Simulationen ohne, *halb geschlossene Symbole* Simulationen mit Partikel-Partikel-Kollisionen. In Übereinstimmung mit Fessler *et al.* (1994), Février *et al.* (2001) und Fedde & Simonin (2010) strebt  $\Sigma_P$  für Partikelsysteme mit kleinen und großen  $St_K$  gegen Null. In diesen Fällen liegt eine zufällige Verteilung der Partikel vor. Im Bereich mittlerer  $St_K$  ist  $\Sigma_P$  größer als 0,4. Dies lässt auf eine bevorzugte Konzentration der Teilchen schließen. Während Fedde & Simonin (2010) eine größtmögliche Entmischung für  $St_K = 1$  beobachteten, liegt für die angenommenen  $\alpha_P$  ein maximales Clustering für  $St_K = 1,25$  vor.

Wie Abbildung 4.9a zeigt, steigt die Akkumulation mit größer werdendem  $\alpha_P$  ungeachtet der Ab- oder Anwesenheit von Partikel-Partikel-Kollisionen stetig an. Vielmehr wirken sich Kollisionen zwischen Teilchen nur marginal auf die Segregation aus. Im Vergleich zu Simulationen ohne Kollisionen ist eine geringe Abnahme von  $\Sigma_P$  lediglich für den größten untersuchten Volumenanteil erkennbar (siehe *dreieckige Symbole* in Abbildung 4.9a im Bereich  $1,0 \leq St_K \leq 1,5$ ). Diese wenn auch kleine Abnahme steht allerdings im Widerspruch zu den Interpretationen von Fedde & Simonin (2010), die eine Zunahme der Akkumulation und somit der bevorzugten Konzentration durch die Gegenwart von Partikel-Partikel-Kollisionen schlussfolgerten. Gemäß Abbildung 4.9a beruht der Anstieg von  $\Sigma_P$  bei gleichbleibenden  $St_K$  jedoch vorwiegend auf einer Erhöhung von  $\alpha_P$  und nicht auf interpartikuläre Kollisionen.



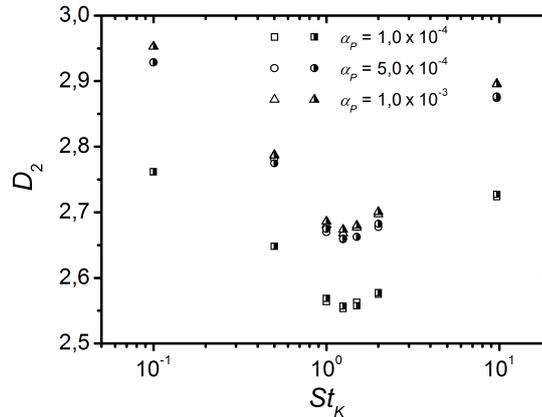
**Abb. 4.9.** Globale Akkumulation  $\Sigma_P$  der Partikel bei verschiedenen Volumenbrüchen  $\alpha_P$  in Abhängigkeit (a) der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und (b) der Boxgröße  $\Delta x$  für  $St_K = 1,25$ . Simulationen ohne (*offene Symbole*) und mit Partikel-Partikel-Kollisionen (*halb geschlossene Symbole*). Die Normierung der Boxgröße beruht auf dem Partikeldurchmesser  $d_P$ .

Gleichwohl liegt die zuvor diskutierte Zunahme von  $\Sigma_P$  im Verhalten der aus den betrachteten Partikelanzahlverteilungen berechneten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (WDF) begründet. Im Fall einer Poisson-Verteilung der Partikel entspricht die mittlere Partikelanzahl  $\lambda$  der Standardabweichung  $\sigma_{\text{Pois}}$ , wodurch sich Gleichung (2.72) zu:

$$\Sigma_P = \frac{\sigma}{\lambda} - 1 \quad (4.14)$$

vereinfacht. Erhöht sich die Teilchenanzahl im Rechengebiet, steigt  $\lambda$  nach Gleichung (2.74) linear mit der Gesamtanzahl  $N_{P_{\text{ges}}}$  an. Neigen Partikel zudem zur Clusterbildung, ist die Wahrscheinlichkeit, dass Partikel in Bereiche mit hoher Teilchenkonzentration migrieren, höher, als in partikelleere Gebiete. Infolgedessen nimmt mit steigendem  $\alpha_P$  die Anzahl an Boxen mit höherer Probenzahl zu, was eine Verbreiterung der WDF nach sich zieht. Dadurch ist die Zuwachsrate der WDF-Standardabweichung mit steigendem  $N_{P_{\text{ges}}}$  größer als die mittlere Partikelanzahl. Nach Gleichung 4.14 impliziert dies höhere  $\Sigma_P$ . Die Akkumulation nimmt daher mit größer werdendem Partikelvolumenbruch definitionsgemäß zu.

Vorangegangenen Analysen von Fessler *et al.* (1994) und Février *et al.* (2001) folgend wird der Nennwert der Akkumulation entscheidend durch die Gesamtanzahl der zur Messung der Partikelanzahlverteilung verwendeten Boxen geprägt. Aus diesem Grund wird  $\Sigma_P$  in dieser Studie mit unterschiedlichen Diskretisierungen der Boxen ermittelt und deren Maximalwert als Maß für die jeweilige Akkumulation herangezogen. Abbil-



**Abb. 4.10.** Korrelationsdimension  $D_2$  in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$ . Simulationen ohne (*offene Symbole*) und mit Partikel-Partikel-Kollisionen (*halb geschlossene Symbole*).

Abbildung 4.9b zeigt exemplarisch für  $St_K = 1,25$  die Abhängigkeit der Akkumulation von der Boxgröße  $\Delta x$ . Demnach verschiebt sich der Maximalwert der Akkumulation mit steigender Feststoffbeladung zu kleineren  $\Delta x$ . Dieses Verhalten stimmt mit den von Fedde & Simonin (2010) beobachteten  $\Sigma_P$  qualitativ überein und legt eine Verringerung der charakteristischen Clustergröße mit zunehmendem  $\alpha_P$  nahe. Unter Berücksichtigung der vorliegenden Ergebnisse würden die Partikelcluster folglich im Fall R mit  $St_K = 1,25$  und  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  eine charakteristische Abmessung von etwa  $10 d_P$  respektive  $2 \eta_K$  aufweisen. Zusammenfassend wird die Akkumulation von Partikeln bei gleichbleibender Partikel-Stokes-Zahl vornehmlich durch den Volumenbruch der dispersen Phase und weniger durch die Präsenz von Partikel-Partikel-Kollisionen bestimmt.

### 4.3.2 Korrelationsdimension

Neben der globalen Akkumulation von Partikeln liefert die von Grassberger & Procaccia (1984) zur Quantifizierung fraktaler Dimensionen eingeführte Korrelationsdimension  $D_2$  ebenso ein Längenmaß für die Struktur von Partikelclustern (siehe Kapitel 2.5.2). Abbildung 4.10 zeigt die in dieser Studie berechneten Korrelationsdimensionen  $D_2$  als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$  der dispersen Phase. In Analogie zu den für  $\Sigma_P$  beobachteten Maximalwerten erzielt  $D_2$  unabhängig vom angenommenen Feststoffanteil ein Minimum bei  $St_K = 1,25$ . Wie für gleichmäßigere Partikelverteilungen erwartet, strebt die Korrelationsdimension für  $St_K = 0,1$  und  $9,67$  dem Maximalwert von  $D_2 = 3$  für dreidimensionale Domainabmessungen entgegen.

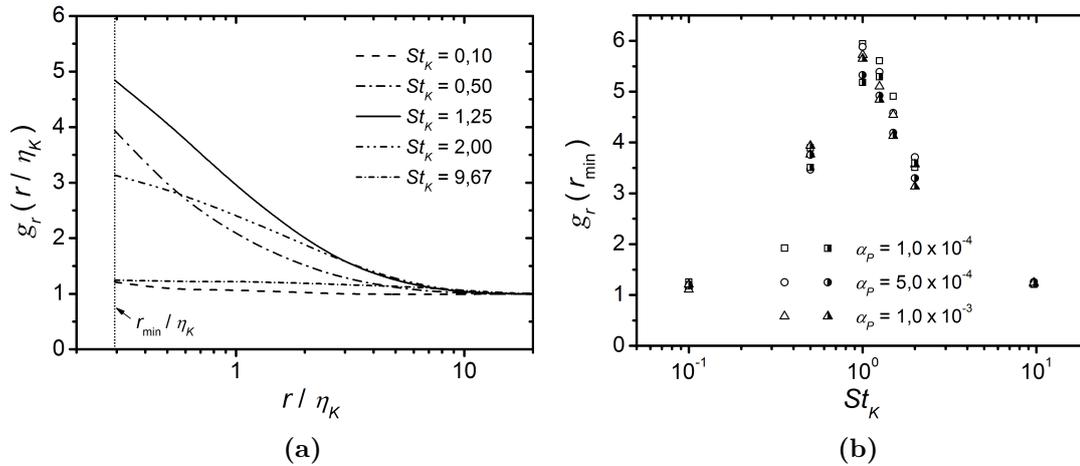
Darüber hinaus zeigt Abbildung 4.10 den Einfluss der Ab- (*offene Symbole*) und Anwesenheit (*halb geschlossene Symbole*) von Partikel-Partikel-Kollisionen auf die Korrelationsdimension. Ähnlich dem Verhalten des Akkumulationsparameters üben interpartikuläre Wechselwirkungen lediglich einen geringen Einfluss auf  $D_2$  aus. Dessen ungeachtet ist bei gleichbleibenden  $St_K$  ein Anstieg der Korrelationsdimension mit zunehmenden  $\alpha_P$  zu verzeichnen, wenngleich die Zuwachsrates von  $D_2$  für die beiden größeren Volumenanteile nachlässt (siehe Abbildung 4.10). Dieses Verhalten liegt in dem implementierten Boxcounting-Algorithmus begründet, da die Diskretisierung der Boxen mit der auszuwertenden Teilchenanzahl skaliert (Liebovitch & Toth 1989). Den Ergebnissen der Partikelakkumulation folgend wird die Korrelationsdimension im Fall vergleichbarer  $St_K$  im Wesentlichen durch die betrachteten Volumenbrüche der dispersen Phase beeinflusst, während sich Partikel-Partikel-Kollisionen nur marginal auf  $D_2$  auswirken.

### 4.3.3 Radiale Korrelation von Partikelpaaren

Eine weitere, häufig angewandte Methode zur Bestimmung der radialen Korrelation von Partikelpaaren beruht auf der Partikelpaarkorrelationsfunktion  $g_r(r)$  (siehe Kapitel 2.5.3), die im Folgenden als radiale Verteilungsfunktion (RVF) bezeichnet wird (Reade & Collins 2000). Abbildung 4.11 fasst die Ergebnisse der in dieser Studie ermittelten RVF zusammen.

In Abbildung 4.11a ist  $g_r$  für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  über dem normierten Separationsabstand  $r/\eta_K$  als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  aufgetragen. Anhand der für  $St_K = 0,1$  (*gestrichelte Linie*) und  $St_K = 9,67$  (*Strich-Punkt-Linie*) dargestellten Kurven wird ersichtlich, dass die radiale Verteilungsfunktion im Bereich kleiner und großer  $St_K$  nahezu linear zu  $g_r = 1$  verläuft und somit eine annähernd gleichmäßige Verteilung der Partikel vorliegt. Demgegenüber zeigt  $g_r$  für  $r \rightarrow r_{\min}$  im Fall mittlerer  $St_K$  einen signifikanten Anstieg, wodurch eine bevorzugte Konzentration der Partikel signalisiert wird. In den vorliegenden Berechnungen beträgt der kleinste, evaluierte Separationsabstand  $r_{\min}$  gleich  $0,3 \eta_K$  respektive  $3/2 d_P$ . Die Akkumulation von Partikeln erstreckt sich demnach ausgehend von der Kolmogorov-Skala bis etwa  $10 \eta_K$  (siehe Abbildung 4.11a).

Die Kurven verlaufen im Bereich großer Separationsabstände für Partikelrelaxationszeiten kleiner als das Kolmogorov-Zeitmaß horizontal und nehmen mit kleiner werdendem  $r$  unter Vergrößerung ihres Anstiegs allmählich zu. Für Partikel-Stokes-Zahlen größer als die des maximalen Clusterings reduziert sich  $g_r$  mit Vergrößerung des Separationsabstandes bis  $r/\eta_K \approx 1$  zunächst mit vergleichsweise geringem Anstieg, um anschließend für  $r \rightarrow \infty$  rasch auf  $g_r = 1$  abzufallen. Dieses im mittleren Bereich von  $St_K$  vorliegende Verhalten deckt sich mit Analysen von Goto & Vassilicos (2006).



**Abb. 4.11.** Radiale Verteilungsfunktion  $g_r$  in Abhängigkeit (a) des Separationsabstandes  $r$  für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  bei verschiedenen  $St_K$  (Linien) unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen und (b) der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  für den minimalen Separationsabstand,  $r_{\min} = 3/2 d_P$ , auf Grundlage verschiedener Volumenanteile  $\alpha_P$  der dispersen Phase ohne (offene Symbole) und mit Partikel-Partikel-Kollisionen (halb geschlossene Symbole). Der Separationsabstand  $r$  ist mit Hilfe des Kolmogorov-Längenmaßes  $\eta_K$  normiert.

Abbildung 4.11b zeigt die aus den RVF-Verläufen extrahierten Extremwerte als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl, des Volumenbruchs der Feststoffphase sowie der Ab- und Anwesenheit von Partikel-Partikel-Kollisionen. In Übereinstimmung mit den erhaltenen Partikelakkumulationen und Korrelationsdimensionen liegen für die verschiedenen  $\alpha_P$  Maximalwerte von  $g_r(r_{\min})$  um  $St_K \approx 1$  vor. Der Maximalwert von  $g_r(r_{\min})$  kennzeichnet demnach das maximale Clustering der Partikel. Darüber hinaus stimmen die in Abbildung 4.11b dargestellten  $g_r(r_{\min})$  mit denen von Karnik (2012) bei vergleichbaren Taylor-Reynolds-Zahlen quantitativ überein. Im Vergleich zu Berechnungen mit Partikel-Partikel-Kollisionen sind im Bereich des maximalen Clusterings ohne interpartikuläre Wechselwirkungen leicht größere  $g_r(r_{\min})$  zu verzeichnen. Unter Berücksichtigung der in Abbildung 4.11b dargestellten  $g_r(r_{\min})$  sind jedoch keine eindeutigen Effekte bezogen auf  $\alpha_P$  ableitbar.

#### 4.3.4 Minkowski-Funktionale

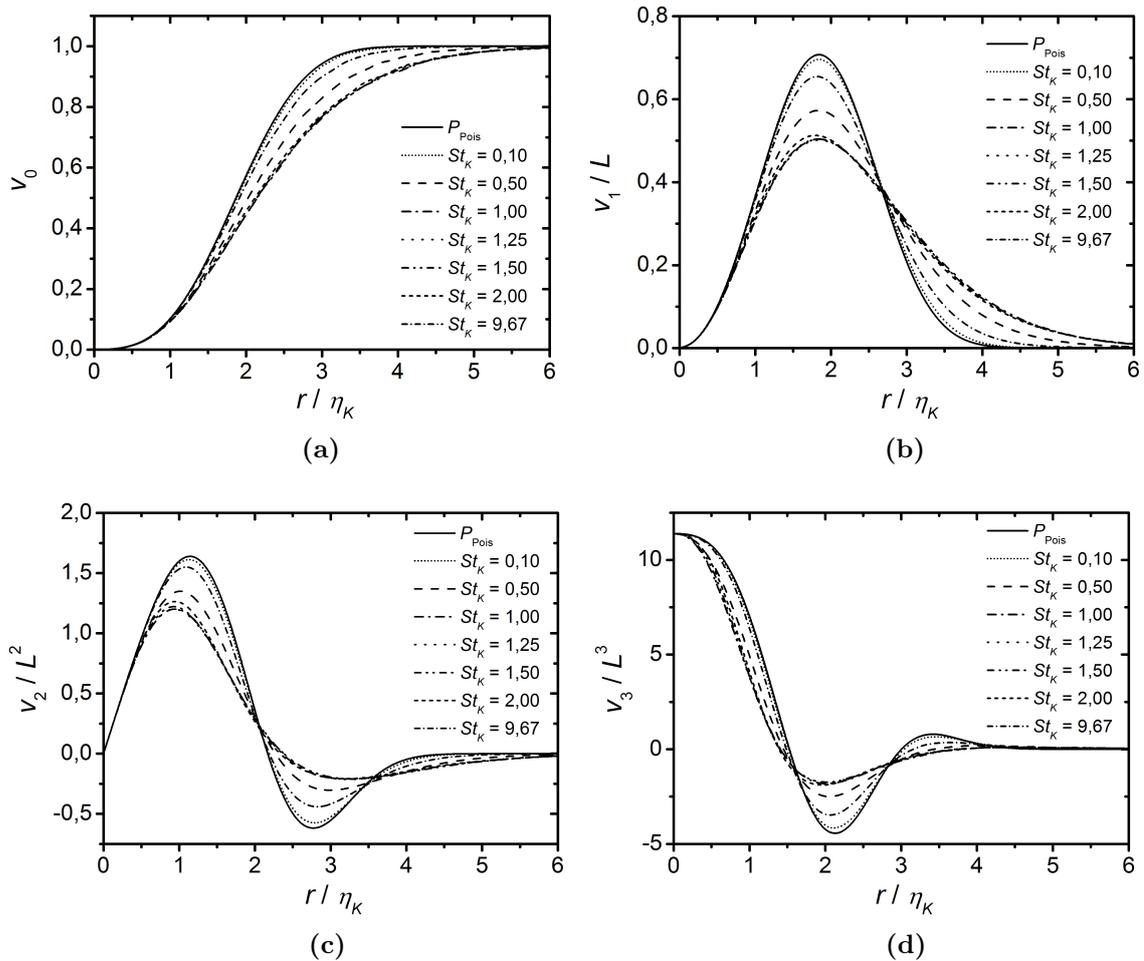
Weder die Akkumulation  $\Sigma_P$  von Partikeln noch die radiale Korrelation von Partikelpaaren auf Basis der Korrelationsdimension  $D_2$  und radialen Partikelverteilung  $g_r$  gewähren einen Einblick in die räumliche Struktur von Partikelclustern. Darüber hinaus können nach Calzavarini *et al.* (2008) strukturell unterschiedliche Partikelverteilungen ähnliche Werte von  $\Sigma_P$  und  $D_2$  annehmen. Daher wird in diesem Abschnitt die

Morphologie der in dieser Studie beobachteten Clusterstrukturen unter Anwendung der in Kapitel 2.5.4 eingeführten Raumdichten  $v_\mu$  der Minkowski-Funktionale analysiert. In Analogie zu den zuvor betrachteten Parametern  $\Sigma_P$ ,  $D_2$  und  $g_r$  werden in den vorliegenden Untersuchungen der Einfluss der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$ , des Volumenanteils  $\alpha_P$  der dispersen Phase sowie der Ab- und Anwesenheit von interpartikulären Wechselwirkungen quantifiziert. Zu Vergleichszwecken sind in Abbildung 4.12 die Raumdichten  $v_\mu(r)$  von Fluidtracern aufgetragen, die einer Poisson-Partikelverteilung  $P_{\text{Pois}}$  entsprechen (*durchgezogene Linien*).

Abbildung 4.12a zeigt die Volumendichte  $v_0$  der Vereinigungsmenge der um die Partikel aufgespannten Sphären als Funktion des Hüllradius  $r$  für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Das Volumen der Hüllkörper nimmt mit größer werdenden  $r$  stetig zu, bis in der Fluiddomäne ein Füllfaktor von  $v_0(r) = 1$  erzielt wird. Während sich Partikel mit  $St_K = 0,1$  annähernd wie Fluidtracer verhalten, zeigen die übrigen  $St_K$  eine deutliche Verzögerung gegenüber dem Verlauf der Poisson-Verteilung. Dieses Verhalten ist eine charakteristische Eigenschaft von clusternden Partikeln, welches durch Leerräume zwischen einzelnen Clustern hervorgerufen wird. Die in Abbildung 4.12a bei  $St_K \approx 1$  erkennbare Maximalverzögerung von  $v_0(r)$  kennzeichnet Verteilungen mit maximalem Partikelclustering. Dieser Bereich deckt sich mit Schlussfolgerungen, die aus den zuvor diskutierten Analysen von  $\Sigma_P$ ,  $D_2$  und  $g_r$  hervorgehen. Darüber hinaus sind Partikel mit  $St_K = 9,67$  im Vergleich zu  $St_K \approx 1$  gleichmäßiger verteilt, da ihre Volumendichte  $v_0(r)$  in Richtung  $P_{\text{Pois}}$  verschoben ist (siehe Abbildung 4.12a).

Das Funktional  $v_1$ , welches die Dichte der Oberfläche misst, nimmt mit größer werdenden  $r$  zu, bis die fortschreitende Überlappung der Hüllkörper das Wachstum von  $v_1$  verlangsamt und schließlich die Oberfläche ein Maximum erreicht (siehe Abbildung 4.12b). Im Fall träger Partikel führt das Clustering zu kleineren Oberflächen, was zu kleineren Höchstwerten von  $v_1$  führt. Der kleinste Höchstwert wird für  $St_K \approx 1$  erzielt und impliziert maximales Clustering. Mit ansteigendem Hüllradius nimmt  $v_1$  für alle  $St_K$  wieder ab, bis sich die Kurven bei  $r/\eta_K = 2,7$  in einem Punkt treffen und anschließend in punktsymmetrischer Reihenfolge weiter absinken. Wie Abbildung 4.12b zeigt, weisen die Hüllkörper der Feststoffpartikel im Vergleich zu denen der Fluidtracer ab  $r/\eta_K \geq 3$  größere Oberflächen auf, wodurch  $v_1(r)$  lokal konzentrierter Partikel in Bezug auf  $P_{\text{Pois}}$  einen gedrehten Verlauf hat. Folglich clustern Partikel im Bereich mittlerer Kolmogorov-Skalen zwischen  $3 \leq \eta_K \leq 5$  in lokal ebenen Strukturen, die durch Leerräume separiert sind, in denen die Oberflächen der Hüllkörper hineinwachsen. Schlussendlich füllen für  $r/\eta_K \rightarrow 6$  die Hüllkörper das Volumen der Fluiddomäne, bis keine freie Oberfläche detektierbar ist.

Die in Abbildung 4.12c gezeigten Dichten  $v_2(r)$  der integralen mittleren Krümmung ermöglichen eine Unterscheidung konvexer Strukturen von konkaven. Da die Hüllkörper

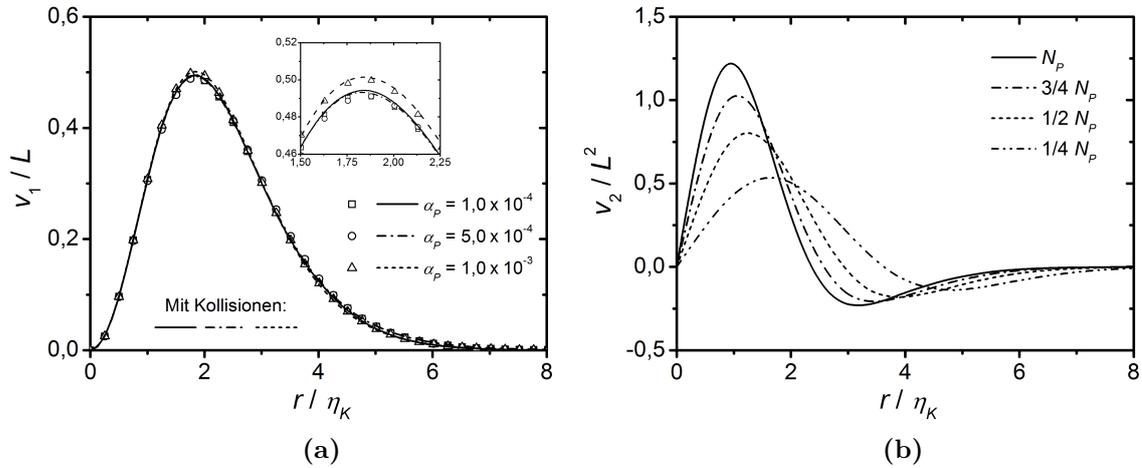


**Abb. 4.12.** Raumdichten der Minkowski-Funktionale als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen: (a) Volumen  $v_0$ , (b) Oberfläche  $v_1$ , (c) integrale mittlere Krümmung  $v_2$  und (d) Euler-Charakteristik  $v_3$ . Die Hüllradien  $r$  sind mit Hilfe des Kolmogorov-Längenmaßes  $\eta_K$  normiert. Die Raumdichten  $v_\mu$  beziehen sich auf die Kantenlängen  $L$  der würfelförmigen Fluiddomäne.

im Bereich kleiner Hüllradien zunächst ohne eine gegenseitige Durchdringung nach außen wachsen, ist ihr Beitrag zur integralen mittleren Krümmung infolge der konvexen Anteile positiv. Die untersuchten Partikelverteilungen erreichen mit größer werdenden  $r$  einen Höchstwert von  $v_2$ . Analog zu  $v_1$  impliziert der kleinste Höchstwert maximales Clustering bei  $St_K \approx 1$ . Mit zunehmenden  $r$  füllen sich die leeren Bereiche zwischen den Clustern stetig und die Struktur beginnt, in Hohlräume zu wachsen. Der Beitrag zur integralen mittleren Krümmung ist aufgrund von Löchern und Tunneln in der Struktur in dieser Phase negativ. Dieses Verhalten lässt sich durch einen Direktvergleich der Abbildungen 4.12c und d bei  $r/\eta_K = 2,8$  begründen, wonach die Minimalwerte für  $v_2$  mit einer steigenden Anzahl geschlossener Hohlräume,  $v_3 \approx 0$ , zusammenfallen. Im Vergleich zur Zufallsverteilung  $P_{\text{Pois}}$  sind die Minimalwerte für  $v_2$  und somit die Konkavität der Vereinigungsmenge der Feststoffpartikel reduziert. Die kleinste Konkavität liegt bei maximalem Clustering für  $St_K \approx 1$  vor. In Übereinstimmung mit  $v_1$  strebt  $v_2$  für  $r/\eta_K \rightarrow 6$  gegen Null.

Abbildung 4.12d zeigt die Änderung der auf der Euler-Charakteristik  $v_3$  beruhenden Konnektivität der Struktur als Funktion des Hüllradius. Im Bereich kleiner Radien,  $r/\eta_K \approx 0$ , bleiben die Hüllkörper separiert und die Volumendichte der Euler-Charakteristik entspricht bei  $v_3(r/\eta_K \approx 0)$  der Partikelanzahldichte. Mit größer werdenden  $r$  vereinigen sich die Hüllkörper und die Euler-Charakteristik nimmt aufgrund einer reduzierten Anzahl diskreter Objekte ab. Mit weiter anwachsenden Hüllradien bilden sich zunehmend Tunnel, infolgedessen  $v_3$  negative Werte annimmt. Schlussendlich werden mit  $r/\eta_K \rightarrow 6$  die Tunnel sukzessive versperert und geschlossene Hohlräume entstehen, wodurch  $v_3$  wieder zunimmt. Unter Annahme träger Feststoffpartikel reduziert sich  $v_3$  für kleine  $r/\eta_K$  schneller als bei Fluidtracern, was wiederum ein Anzeichen für Clustering ist. Die schnellste Abnahme von  $v_3$  liegt für  $St_K \approx 1$  vor, ein Bereich, in dem maximales Clustering zu verzeichnen ist. Darüber hinaus geht für große  $St_K$  der Trend zur Tunnelbildung und folglich zum Clustering zurück (siehe negative Werte von  $v_3$  in Abbildung 4.12d). Der Kurvenverlauf für Feststoffpartikel weist darauf hin, dass die Bildung von Tunneln durch die Vereinigungsmenge im Vergleich zu zufällig verteilten Partikeln früher beginnt. In Abbildung 4.12d tritt des Weiteren im Bereich mittlerer Radien,  $r/\eta_K \approx 3,5$ , für träge Partikel kein positives Maximum auf, was darauf hindeutet, dass in diesen Fällen kaum Hohlräume in der Struktur vorliegen. Dieser Effekt ist für  $St_K \approx 1$  stärker ausgeprägt. Im Fall zufällig verteilter Partikel ist hingegen ein zweites lokales Maximum von  $v_3(r)$  erkennbar (siehe  $P_{\text{Pois}}$  in Abbildung 4.12d bei  $r/\eta_K = 3,4$ ). Für  $r/\eta_K \rightarrow 6$  sind alle Flächen vereinigt und die Euler-Charakteristik ist Null.

Während anhand von Abbildung 4.12 ausschließlich der Einfluss von  $St_K$  auf die Raumdichten der Minkowski-Funktionale für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  betrachtet wird, zeigt Abbildung 4.13a den Verlauf von  $v_1$  für  $St_K = 1,25$  in Abhängigkeit des Volumenbruchs



**Abb. 4.13.** Beeinflussung des Raumdichtenverlaufs der Minkowski-Funktionale für  $St_K = 1,25$  durch (a) die Ab- (*offene Symbole*) und Anwesenheit (*Linien*) von Partikel-Partikel-Kollisionen unter Variation des Volumenbruchs  $\alpha_P$  der dispersen Phase und (b) den Stichprobenumfang  $N_P$ . Die Hüllradien  $r$  sind mit Hilfe des Kolmogorov-Längenmaßes  $\eta_K$  normiert. Die Normierung der Raumdichte der Oberfläche  $v_1$  sowie der integralen mittleren Krümmung  $v_2$  beruht auf den Kantenlängen  $L$  der würfelförmigen Fluiddomäne.

$\alpha_P$  sowie der Ab- (*offene Symbole*) und Anwesenheit (*Linien*) von Partikel-Partikel-Kollisionen. Demnach weichen die Kurvenverläufe der einzelnen Simulationen nur marginal voneinander ab, sodass unter Anwendung der Minkowski-Funktionale bei gleichem Stichprobenumfang keine signifikanten Effekte, hervorgerufen durch den Feststoffvolumenanteil und interpartikuläre Wechselwirkungen, ableitbar sind.

Darüber hinaus zeigt Abbildung 4.13b den Verlauf von  $v_2(r)$  für verschiedene Stichprobenumfänge  $N_P$ , mit denen die integrale mittlere Krümmung evaluiert wird. Anhand der dargestellten Kurven wird die besondere Bedeutung von  $N_P$  für den resultierenden Dichteverlauf ersichtlich. Aus diesem Grund wurden die in den Abbildungen 4.12 und 4.13a gezeigten Raumdichten der Minkowski-Funktionale mit jeweils gleicher Partikelanzahl,  $N_P = 50.066$ , berechnet.

In Ergänzung zu den globalen Parametern Partikelakkumulation, Korrelationsdimension und radiale Partikelverteilung erlaubt die auf den Minkowski-Funktionalen basierende topologische Methode eine Beschreibung der Morphologie von Partikelclustern in homogener isotroper Turbulenz. Unter Einsatz dieser Methoden lassen sich ideale Partikel-Stokes-Zahlen identifizieren, bei denen maximales Clustering und folglich ein optimales Kollisions- und Agglomerationsverhalten zu erwarten ist.

## 4.4 Partikel-Partikel-Wechselwirkungen

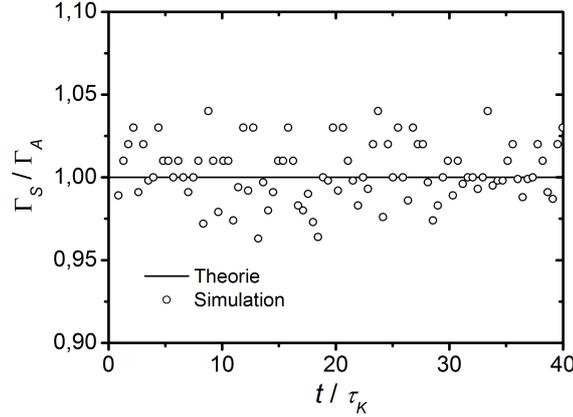
Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Partikel-Partikel-Kollisionen wird vor allem durch die fluktuierende Bewegung der Teilchen, den Volumenbruch der dispersen Phasen und die Trägheit der Partikel, die durch ihre Partikel-Stokes-Zahl quantifiziert wird, geprägt. Die folgenden Untersuchungen charakterisieren den Einfluss verschiedener Feststoffvolumenanteile als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl auf die mittlere Kollisionszeit und die Relativgeschwindigkeit kollidierender Partikel. In diesem Zusammenhang werden die erhaltenen Kollisionsraten und Kollisionsfrequenzen mit in der Literatur verfügbaren Simulationsdaten und Modellierungsansätzen verglichen. Als Folge der angewandten Lagrangeschen Betrachtungsweise finden kurzreichweitige fluiddynamische Phänomene, wie die Interaktion zwischen benachbarten Partikeln kurz vor ihrer Kollision, keine Berücksichtigung.

### 4.4.1 Validierung des deterministischen Kollisionsmodells

In Anlehnung an Sundaram & Collins (1997) wird zunächst das in Kapitel 2.6.1 vorgestellte deterministische Kollisionsmodell anhand eines fluidfreien Partikelsystems, im Folgenden granulares Medium genannt, validiert. Unter Annahme der Randbedingungen des Simulationslaufs  $Q$  (vgl. Tabelle 4.3) werden die sphärischen Partikel mit Anfangsgeschwindigkeiten basierend auf einer Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung injiziert (Sundaram & Collins 1997). Da keine Fluidkräfte in der Bewegungsgleichung Berücksichtigung finden, wird die Partikelbewegung ausschließlich durch die Kollisionen zwischen den Teilchen bestimmt. Partikel-Partikel-Stöße gelten gemäß Kapitel 2.6.2 als vollkommen elastisch und reibungsfrei. Aus diesem Grund sollte sowohl der Gesamtimpuls zweier kollidierender Partikel als auch die gesamte kinetische Energie der dispersen Phase erhalten bleiben.

In Abbildung 4.14 wird die zeitabhängige Entwicklung der in dem granularen Partikelsystem berechneten Kollisionsrate  $\Gamma_S$  mit einer theoretischen Kollisionsrate  $\Gamma_A$  auf Grundlage der kinetischen Gastheorie verglichen. Die kinetische Gastheorie beruht auf einer vollständig unkorrelierten Relativbewegung der Teilchen (Abrahamson 1975). Wie Abbildung 4.14 zeigt, schwankt das Verhältnis  $\Gamma_S/\Gamma_A$  um die analytische Lösung (*durchgezogene Linie*). Demnach beträgt die Abweichung der erhaltenen  $\Gamma_S$  im Vergleich zu  $\Gamma_A$  maximal 4,1%, die auf eine fluktuierende Verteilung der Partikel innerhalb des Rechengebietes zurückzuführen ist.

Zur weiteren Verifizierung des Kollisionsverhaltens der Partikel werden in Abbildung 4.15 die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (WDF) des geometrischen Kollisionswinkels und der Relativgeschwindigkeit zweier kollidierender Partikel,  $\alpha$  und  $\beta$ , mit analytischen Verteilungsfunktionen verglichen. Der geometrische Kollisionswinkel  $\theta_{\alpha\beta}$



**Abb. 4.14.** Fluktuation der in einem granularen Medium berechneten Kollisionsrate  $\Gamma_S$  (*offene Kreise*) als Funktion der normierten Zeit  $t/\tau_K$ , worin  $\tau_K$  die mittlere Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Kollisionen eines Partikels ist. Die *durchgezogene Linie* kennzeichnet die zu Vergleichszwecken herangezogene theoretische Kollisionsrate  $\Gamma_A$ , die nach Gleichung (4.24) auf der kinetischen Gastheorie (Abrahamson 1975) beruht.

(*offene Kreise*), der mit:

$$\theta_{\alpha\beta} = \arccos \left( \frac{\mathbf{x}_{P\alpha} \cdot \mathbf{x}_{P\beta}}{|\mathbf{x}_{P\alpha}| |\mathbf{x}_{P\beta}|} \right) \quad (4.15)$$

definiert ist, folgt nach Abbildung 4.15a vollständig der sinusförmigen Verteilungsfunktion  $N_{\theta_{\alpha\beta}}$  (*durchgezogene Linie*), die auf der kinetischen Gastheorie beruht (Hänel 2004):

$$N_{\theta_{\alpha\beta}}(\theta_{\alpha\beta}) = \begin{cases} -4 n_P^2 d_P^2 \sqrt{\pi T_P} \sin(2\theta_{\alpha\beta}), & \theta_{\alpha\beta} \in [0; \frac{\pi}{2}] \\ 0 & \end{cases} \quad (4.16)$$

worin  $n_P$  die Partikelanzahlkonzentration und  $T_P$  die Agitation der Partikel ist:

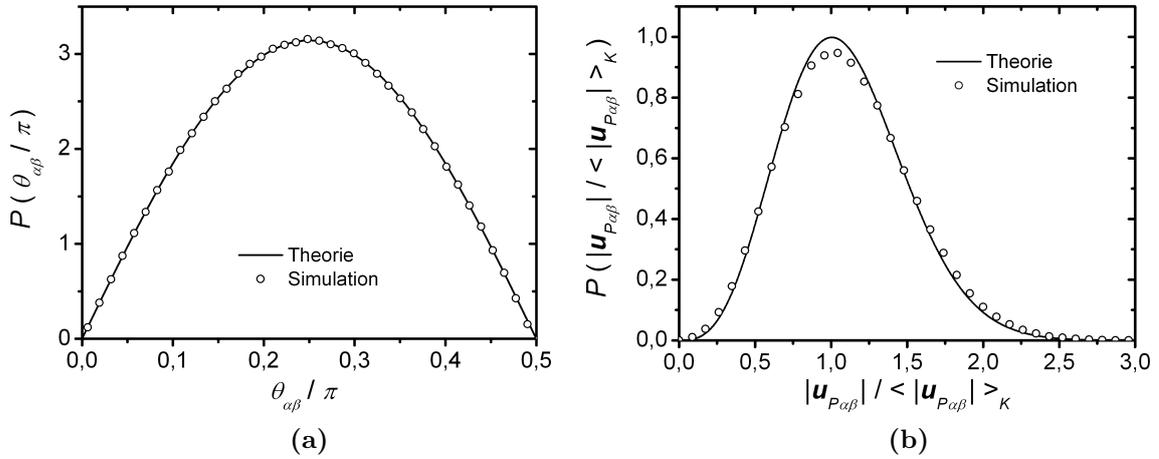
$$T_P = \frac{1}{3} \left( \langle u_{Px} u_{Px} \rangle_P + \langle u_{Py} u_{Py} \rangle_P + \langle u_{Pz} u_{Pz} \rangle_P \right) \quad (4.17)$$

Liegt ein quasi-stationärer Gleichgewichtszustand im partikulären System vor, vereinfacht sich die Partikelagitation zu:

$$T_P = \langle u_{Px} u_{Px} \rangle_P = \langle u_{Py} u_{Py} \rangle_P = \langle u_{Pz} u_{Pz} \rangle_P \quad (4.18)$$

Darüber hinaus zeigt Abbildung 4.15b die WDF der Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$  zweier kollidierender Partikel auf Basis von:

$$\mathbf{u}_{P\alpha\beta} = \mathbf{u}_{P\beta} - \mathbf{u}_{P\alpha} \quad (4.19)$$



**Abb. 4.15.** Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (a) des geometrischen Kollisionswinkels  $\theta_{\alpha\beta}$  und (b) der Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$  zweier kollidierender Partikel in einem granularen Medium mit den theoretischen Verteilungsfunktionen  $N_{\theta_{\alpha\beta}}$  und  $N_{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}}$  auf Grundlage der kinetischen Gastheorie.

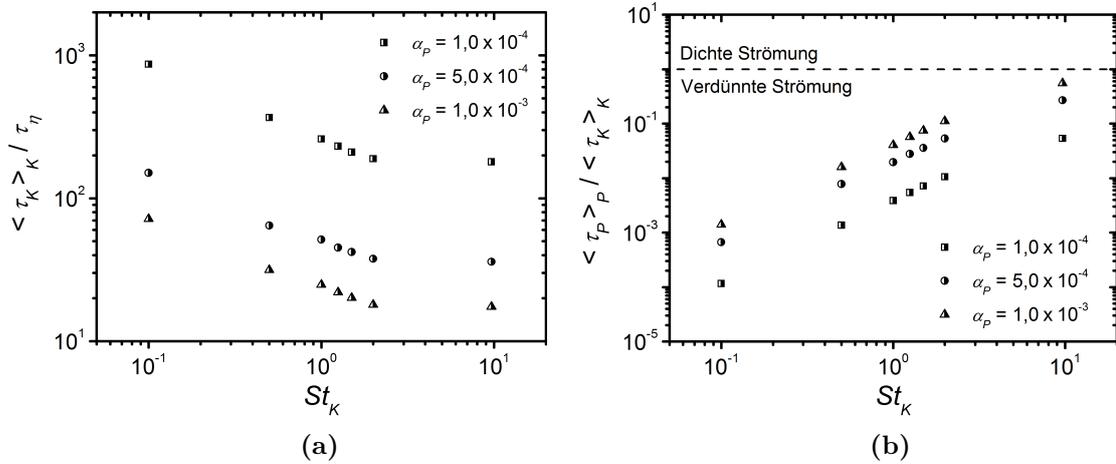
Zu Vergleichszwecken ist in Abbildung 4.15b zudem die analytische Verteilungsfunktion  $N_{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}}$  auf Grundlage der kinetischen Gastheorie dargestellt, die nach Hänel (2004) wie folgt definiert ist:

$$N_{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}}(\mathbf{u}_{P\alpha\beta}) = 4 n_P^2 d_P^2 \sqrt{\pi T_P} \frac{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}^3}{8 T_P^2} \exp\left(-\frac{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}^2}{4 T_P}\right) \quad (4.20)$$

Der Operator  $\langle \cdot \rangle_K$  in Abbildung 4.15b kennzeichnet den Ensemblemittelwert über alle detektierten Partikel-Partikel-Kollisionen. Als Ergebnis zeigt die WDF von  $|\mathbf{u}_{P\alpha\beta}|$  eine adäquate Übereinstimmung mit  $N_{\mathbf{u}_{P\alpha\beta}}$ . Dieses Verhalten lässt die Schlussfolgerung zu, dass der Energiegehalt im betrachteten granularem Medium unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen erhalten bleibt. Die in den Abbildungen 4.14 und 4.15 diskutierten Ergebnisse deuten folglich auf eine korrekte Implementierung sowohl des deterministischen Kollisionsmodells als auch des zugrundeliegenden Kollisionsoperators hin.

#### 4.4.2 Analyse des Kollisionsverhaltens

Dieser Abschnitt beinhaltet Untersuchungen zum Kollisionsverhalten der in homogener isotroper Turbulenz suspendierten Partikel. In einem ersten Schritt wird zunächst die mittlere Zeit  $\tau_K$  zwischen zwei aufeinander folgenden Kollisionen eines Partikels, im Folgenden Kollisionszeit genannt, analysiert. Abbildung 4.16a zeigt die



**Abb. 4.16.** Einfluss der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$  der dispersen Phase auf die mittlere Kollisionszeit  $\tau_K$  bezogen auf (a) das Kolmogorov-Zeitmaß  $\tau_\eta$  und (b) die mittlere Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$ . Die Mittelwerte von  $\tau_K$  und  $\tau_P$  resultieren aus den Ensemblemittlungen  $\langle \cdot \rangle_K$  und  $\langle \cdot \rangle_P$ .

mit dem Kolmogorov-Zeitmaß  $\tau_\eta$  normierte Kollisionszeit als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  und des Volumenbruchs  $\alpha_P$  der dispersen Phase. Demnach nimmt die Kollisionszeit mit zunehmender Partikelträgheit und folglich steigenden  $St_K$  kontinuierlich ab, bis sich  $\tau_K/\tau_\eta$  ab  $St_K \approx 2$  einem finiten Wert asymptotisch annähert. Bei gleichbleibender Partikel-Stokes-Zahl nimmt  $\tau_K$  zudem mit größer werdenden  $\alpha_P$  ab. Dieser Trend gilt für den gesamten Bereich der betrachteten Partikel-Stokes-Zahlen.

In Ergänzung zu  $\tau_K/\tau_\eta$  ist in Abbildung 4.16b das Verhältnis aus mittlerer Partikelrelaxationszeit zu mittlerer Kollisionszeit als Funktion des Feststoffvolumenbruchs über  $St_K$  aufgetragen. Als Ergebnis nimmt  $\tau_P/\tau_K$  mit steigenden  $St_K$  wie auch größer werdenden  $\alpha_P$  stetig zu. Es ist hervorzuheben, dass die ermittelten  $\tau_P/\tau_K$  in dem doppellogarithmischen Diagramm bei gleichbleibendem  $\alpha_P$  einen nahezu linearen Anstieg aufweisen. Dieses Verhalten deckt sich mit vorangegangenen Analysen von Sundaram & Collins (1997). Darüber hinaus unterscheiden sich die gedachten Geraden einzelner  $\alpha_P$  lediglich durch einen skalierbaren Versatz, der wiederum einer quadratischen Abhängigkeit folgt.

Nach Crowe (1981) sind unter Zuhilfenahme der in Abbildung 4.16b dargestellten Verhältnisse zwei Transportregime für Partikel in Fluidströmungen identifizierbar. In verdünnten Zweiphasenströmungen beruht der Partikeltransport auf einem vorwiegend kinetischen Regime, infolgedessen  $\tau_P/\tau_K$  Werte kleiner als eins annimmt. Für  $\tau_P/\tau_K > 1$  liegt hingegen ein kollisionsdominierter Partikeltransport vor. In diesem Regime, das auch als dichte Zweiphasenströmung bezeichnet wird, können die Teilchen der

Fluidströmung aufgrund fortwährender Kollisionen nicht vollständig folgen. Wie Abbildung 4.16b zeigt, sind in der vorliegenden Studie die mittleren Kollisionszeiten stets größer als die mittleren Partikelrelaxationszeiten. Daher beruhen die betrachteten Partikelsysteme ausnahmslos auf dem kinetischen Regime, in dem die Bewegung der Partikel hauptsächlich durch kleinskalige, fluiddynamische Phänomene wie Scher- und Beschleunigungsmechanismen bestimmt wird (Crowe 1981).

Zwei weitere, häufig angewandte Kenngrößen zur Beschreibung des Kollisionsverhaltens von Partikeln sind die Kollisionsfrequenz und die Kollisionsrate. Die Kollisionsfrequenz  $f_K$  entspricht dem Kehrwert der mittleren Kollisionszeit:

$$f_K = \left\langle \frac{1}{\tau_K} \right\rangle_K \quad (4.21)$$

worin  $\langle \cdot \rangle_K$  den Ensemblemittelwert über alle in einem Simulationslauf detektierten Partikel-Partikel-Kollisionen kennzeichnet. Weiterführend quantifiziert die Kollisionsrate  $\Gamma_S$  die Häufigkeit, mit denen Partikel in einem spezifischen Volumen je Zeiteinheit kollidieren:

$$\Gamma_S = f_K L^3 \quad (4.22)$$

In der Literatur sind zwei Grenzfälle bekannt, die die Kollisionsrate von Partikeln für kleine und große Partikel-Stokes-Zahlen beschreiben. Die von Saffman & Turner (1956) eingeführte Approximation beschreibt die Kollisionsrate  $\Gamma_{ST}$  monodisperser Tropfen in atmosphärischer Turbulenz:

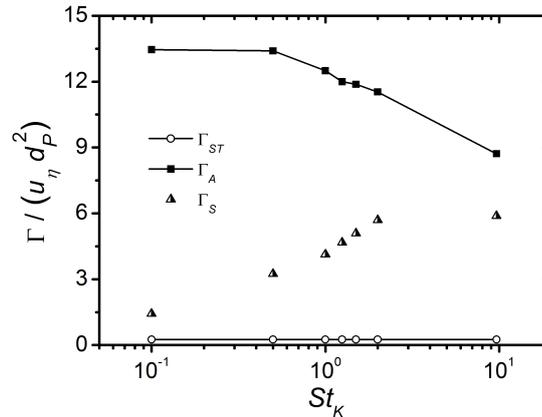
$$\Gamma_{ST} = d_P^3 \left( \frac{8 \pi \epsilon}{15 \nu} \right)^{1/2} \quad (4.23)$$

Da in der theoretischen Analyse der Partikeldurchmesser deutlich kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß ist, können die angenommenen Tropfen der isotropen Fluidturbulenz uneingeschränkt folgen (Saffman & Turner 1956). Diese Näherung ist für  $St_K \rightarrow 0$  gültig. Die Bewegung träger Partikel in hochintensiver Turbulenz unter Vernachlässigung externer Kräfte wurde von Abrahamson (1975) untersucht. Gemäß kinetischer Gastheorie bewegen sich diese Teilchen gänzlich unkorreliert gegenüber der Fluidbewegung. In diesem Fall strebt  $St_K$  gegen unendlich. Unter Annahme isotroper Komponenten der Partikelschwankungsgeschwindigkeit berechnet sich die resultierende Kollisionsrate  $\Gamma_A$  mit:

$$\Gamma_A = 2^{3/2} d_P^2 \left( 2 \pi \overline{u_P'^2} \right)^{1/2} \quad (4.24)$$

Nach Abrahamson (1975) korreliert die Schwankungsgeschwindigkeit  $u_P'$  der Partikel in Gleichung (4.24) mit der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit  $u'$  des Fluids:

$$\overline{u_P'^2} = \frac{u'^2}{1 + 1,5 \frac{\tau_P \epsilon}{u'^2}} \quad (4.25)$$

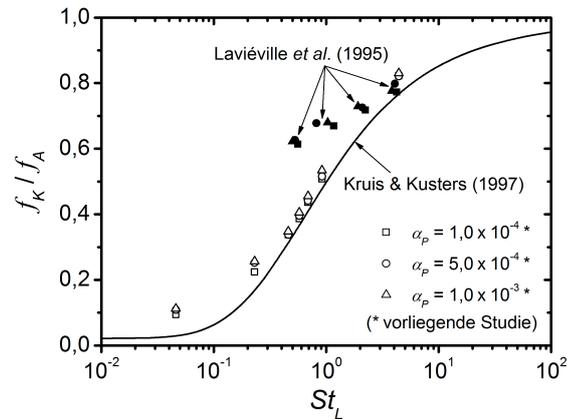


**Abb. 4.17.** Vergleich der für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  ermittelten Kollisionsraten  $\Gamma_S$ , *halb geschlossene Symbole*, mit analytischen Approximationen,  $\Gamma_{ST}$  und  $\Gamma_A$ , auf Grundlage der Grenzkollisionsrate nach Saffman & Turner (1956), *geschlossene Kreise*, und der kinetischen Gastheorie (Abrahamson 1975), *geschlossene Quadrate*, als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$ .

Zur Bewertung der in den Simulationsläufen ermittelten Kollisionsraten werden in Abbildung 4.17 die für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-3}$  vorliegenden  $\Gamma_S$  mit den beiden zuvor diskutierten Grenzfällen,  $\Gamma_{ST}$  und  $\Gamma_A$ , verglichen. Da die Punktpartikel eine finite Trägheit besitzen und daher nur partiell mit den turbulenten Schwankungen des Fluids wechselwirken, sollten die in den Simulationen gemessenen Kollisionsraten zwischen den beiden analytischen Approximationen liegen.

Wie Abbildung 4.17 zeigt, liegen die DNS basierten  $\Gamma_S$  bei  $St_K = 0,1$  nahe  $\Gamma_{ST}$ , nehmen dann mit steigender  $St_K$  rasch zu und streben für  $St_K \gtrsim 2$  schließlich  $\Gamma_A$  entgegen. Gemäß Gleichung (4.23) wird die Kollisionsrate der Saffman und Turner-Grenze mit  $(\epsilon/\nu)^{1/2} = 1/\tau_\eta$  durch das kleinste charakteristische Zeitmaß der turbulenten Wirbel kontrolliert. Ein ähnliches Verhalten ist in dieser Studie zu verzeichnen, da die Kollisionszeit nach Abbildung 4.16a für  $St_K = 0,1$  im Wesentlichen durch die Fluidstruktur im Bereich der Kolmogorov-Skala beeinflusst wird. Demgegenüber beruhen nach Gleichung (4.24) die Kollisionsraten aus der theoretischen Gastheorie auf der Partikelschwankungsgeschwindigkeit  $u'_p$ . Dieser Grenzwert wird in den vorliegenden  $\Gamma_S$  lediglich für  $St_K = 9,67$  näherungsweise erreicht, da die Partikel mit größer werdender Trägheit nur in allmählich abnehmendem Maß auf die turbulenten Fluidschwankungen reagieren (siehe Abbildung 4.17).

In Abbildung 4.18 werden die in dieser Studie ermittelten Kollisionsfrequenzen mit weiteren numerischen wie auch analytischen Daten verglichen. Die herangezogenen  $f_K$  sind in diesem Diagramm über der Partikel-Stokes-Zahl  $St_L$  aufgetragen, die auf dem Langrangeschen integralen Zeitmaß  $\tau_L^F$  des Fluids beruht. Darüber hinaus



**Abb. 4.18.** Vergleich der DNS basierten Kollisionsfrequenzen, *offene Symbole*, mit Daten aus Large-Eddy-Simulationen (Laviéville *et al.* 1995), *geschlossene Symbole*, und analytischen Approximationen (Kruis & Kusters 1997), *durchgezogene Linie*, mit der Partikel-Stokes-Zahl  $St_L$  und dem Feststoffvolumenbruch  $\alpha_P$  als Parameter. Symbole verschiedenen Typs repräsentieren unterschiedliche  $\alpha_P$ . Die dargestellten Kollisionsfrequenzen  $f_K$  sind mit Hilfe ihrer zugehörigen Kollisionsfrequenz  $f_A$  auf Basis der kinetischen Gastheorie (Abrahamson 1975) normiert.

sind die dargestellten  $f_K$  durch ihre zugehörige Grenzkollisionsfrequenz  $f_A$  normiert, welche eine ideale Umsetzung der kinetischen Gastheorie nach Abrahamson (1975) repräsentiert.

Die DNS basierten Kollisionsfrequenzen nehmen für größer werdende  $St_L$  stetig zu. Da die Partikel infolge ihrer geringen Trägheit bei  $St_L = 0,05$  fast vollständig mit der zugrundeliegenden Fluidbewegung korrelieren, weichen die resultierenden  $f_K$  analog zu Abbildung 4.17 deutlich von  $f_A$  ab. Mit steigender Partikelträgheit werden die auf die Teilchen wirkenden Zentrifugalkräfte zunehmend größer. Infolgedessen sind die Geschwindigkeiten der Partikel gegenüber denen des Fluids an gleicher Position zunehmend unkorreliert. Aus diesem Grund nähern sich die numerisch berechneten  $f_K$  mit größer werdenden Partikel-Stokes-Zahlen  $f_A$  sukzessive an, bis die Kollisionsfrequenzen für  $St_L = 4,41$  um etwa 17% von  $f_K$  abweichen. Zugleich nehmen die ermittelten  $f_K$  für vergleichbare  $St_L$  mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu, wengleich die unterschiedlichen  $\alpha_P$  keinen signifikanten Einfluss auf die erzielten Kollisionsfrequenzen ausüben.

Zur Bewertung der in den Simulationsläufen ermittelten Kollisionsfrequenzen werden zunächst numerische Daten aus Large-Eddy-Simulationen (LES) herangezogen, obgleich die von Laviéville *et al.* (1995) publizierte Kollisionsstatistik keine Differenzierung der untersuchten  $\alpha_P$  erlaubt. Anhand der in Abbildung 4.18 dargestellten  $f_K/f_A$  (*geschlossene Symbole*) wird ersichtlich, dass die LES basierten Kollisionsfrequenzen insbesondere für  $St_L < 1$  erheblich von denen der DNS abweichen. Lediglich

für  $St_L \approx 4$  sind gute Übereinstimmungen der Frequenzverhältnisse feststellbar. Im Vergleich zur DNS werden bei der LES kleinskalige Turbulenzstrukturen nicht direkt durch das Rechengitter aufgelöst, sondern für gewöhnlich mittels Langevin- oder Eddy-Lifetime-Modellen nachgebildet (Fede & Simonin 2006). In den von Laviéville *et al.* (1995) durchgeführten LES-Berechnungen findet jedoch keines der zuvor genannten Modelle Anwendung. Da die komplexe Wechselwirkung zwischen Partikeln und den kleinsten turbulenten Wirbelstrukturen in der vorliegenden LES nicht modelliert wird, weicht der Partikeltransport und infolgedessen die resultierenden Kollisionsfrequenzen im Bereich kleiner  $St_L$  von den direkten numerischen Simulationen ab. Demgegenüber nimmt die Bedeutung kleinskaliger Geschwindigkeitsgradienten im Fluid mit steigenden  $St_L$  ab, da die Partikel aufgrund ihrer größeren Trägheit in geringerem Maß den turbulenten Wirbelstrukturen folgen. Daher gleichen sich in Abbildung 4.18 die Kollisionsfrequenzen von LES und DNS für große  $St_L$  an.

In einem zweiten Schritt werden die DNS basierten Kollisionsereignisse mit einer weiteren approximierten Kollisionsrate verglichen. Das von Kruijs & Kusters (1997) vorgeschlagene Modell zur Berechnung der Kollisionsrate stellt eine Erweiterung der von Williams & Crane (1983) eingeführten Formulierung dar. Im Gegensatz zu den in den Gleichungen (4.23) und (4.24) definierten Grenzkollisionsraten  $\Gamma_{ST}$  und  $\Gamma_A$  basiert die Kollisionsrate  $\Gamma_{KK}$  auf der Relativgeschwindigkeit  $u_{P_{i\alpha\beta}}$  der gleich großen Partikel  $\alpha$  und  $\beta$  (Kruijs & Kusters 1997):

$$\Gamma_{KK} = d_P^2 \left( \frac{16 \pi}{3} \overline{(u_{P_{i\alpha\beta}})^2} \right)^{1/2} \quad (4.26)$$

Den Schlussfolgerungen Kruijs & Kusters (1997) folgend findet in der vorliegenden Analyse lediglich der Beschleunigungsmechanismus zur Berechnung von  $u_{P_{i\alpha\beta}}$  Anwendung:

$$\begin{aligned} \overline{(u_{P_{i\alpha\beta}})^2} &= u^2 (1 - b)^2 \frac{\gamma}{\gamma - 1} \\ &\times \left( \frac{1}{(1 + St_{L\alpha})(1 + St_{L\beta})} - \frac{1}{(1 + \gamma St_{L\alpha})(1 + \gamma St_{L\beta})} \right) \\ &\times \left( \frac{(St_{L\alpha} + St_{L\beta})^2 - 4 St_{L\alpha} St_{L\beta} \left( \frac{1 + St_{L\alpha} + St_{L\beta}}{(1 + St_{L\alpha})(1 + St_{L\beta})} \right)^{1/2}}{(St_{L\alpha} + St_{L\beta})} \right) \end{aligned} \quad (4.27)$$

worin  $b$  der Auftriebskoeffizient nach Yuu (1984) ist:

$$b = \frac{3 \rho}{2 \rho_P + \rho} \quad (4.28)$$

und  $\gamma$  ein Zeitskalenverhältnis des Fluids kennzeichnet (Kruis & Kusters 1997):

$$\gamma = 2 \left( \frac{\tau_L^F}{\tau_L^\epsilon} \right)^2 \quad (4.29)$$

Das Lagrangesche Dissipationszeitmaß  $\tau_L^\epsilon$  des Fluids wird nach Hinze (1975) mit:

$$\tau_L^\epsilon = u' \left( \frac{\tau_\eta}{0,5808 \epsilon} \right)^{1/2} \quad (4.30)$$

berechnet. Die Kollisionsrate  $\Gamma_{KK}$  berücksichtigt weder Effekte durch viskose Fluidscherung noch einen Schlupf der Teilchen infolge Brownscher Diffusion. Darüber hinaus werden fluiddynamische Wechselwirkungen der Partikel mit dem Fluid sowie Partikel-Partikel-Kollisionen vernachlässigt (Kruis & Kusters 1997).

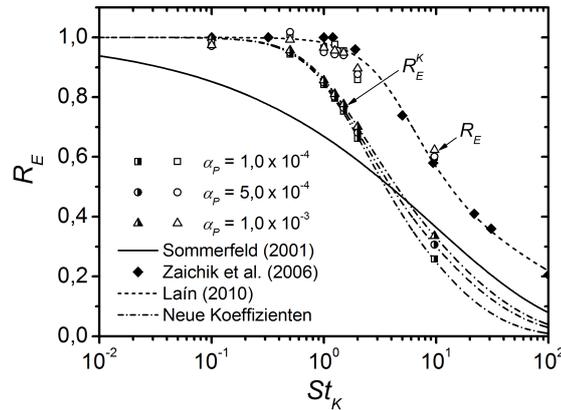
Wie Abbildung 4.18 zeigt, stimmen die von Kruis & Kusters (1997) approximierten Kollisionsfrequenzen (*durchgezogene Linie*) mit den für  $\alpha_P = 1,0 \times 10^{-4}$  ermittelten Kollisionsfrequenzen (*offene Symbole*) insbesondere im Bereich mittlerer  $St_L$  gut überein. Ungeachtet dessen sind zusätzliche Kollisionseffekte infolge höherer Feststoffvolumenanteile aufgrund der zuvor genannten Modelllimitierungen nicht mittels  $\Gamma_{KK}$  abbildbar.

#### 4.4.3 Zwei-Partikel-Raumkorrelation der Partikelgeschwindigkeit

Unabhängig von den zuvor in Kapitel 4.4.2 diskutierten Approximationen der Kollisionsrate sind für die Beschreibung von Partikel-Partikel-Kollisionen in technischen Zweiphasenströmungen Modelle für die korrelierte Bewegung benachbarter Teilchen und ihre bevorzugte Konzentration unerlässlich. In diesem Zusammenhang haben sich für die Vorhersage von Partikelpaarstatistiken in homogener isotroper Turbulenz sogenannte Zwei-Partikel-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (WDF) etabliert (Zaichik *et al.* 2008). Neben der fundamentalen theoretischen Bedeutung liefern Zwei-Partikel-WDFs akzeptable Korrelationen für die Weiterentwicklung von Berechnungsmodellen zur Vorhersage technischer Zweiphasenströmungen. Ein Ansatz für die häufig in Euler-Lagrange-Verfahren angewandte stochastische Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen beruht beispielsweise auf der Eulerschen Zwei-Partikel-Raumkorrelation  $R_E(St_K)$ , mit deren Hilfe die turbulente Partikelschwankungsgeschwindigkeit fiktiver Kollisionspartner bestimmt wird:

$$R_E(St_K) = \exp \left( \alpha \left( \frac{\tau_\eta St_K}{\tau_L^F} \right)^\beta \right) \quad (4.31)$$

worin die Koeffizienten  $\alpha = -0,55$  und  $\beta = 0,4$  von Sommerfeld (2001) durch langwieriges Ausprobieren aus LES-Daten (Laviéville *et al.* 1995) ermittelt wurden. Unter



**Abb. 4.19.** Eulersche Zwei-Partikel-Raumkorrelation  $R_E$  der Partikelgeschwindigkeit als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$ . *Halb geschlossene Symbole* kennzeichnen  $R_E^K$  für kollidierende Partikel, *offene Symbole* hingegen  $R_E$  im Abstand von  $r \leq 3/2 d_P$  bei unterschiedlichen Feststoffvolumenbrüchen  $\alpha_P$  unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Die *durchgezogene Linie* zeigt die analytische Zwei-Koeffizienten-Korrelation für  $R_E$  nach Sommerfeld (2001), die *gestrichelte Linie* die analytische Drei-Koeffizienten-Korrelation für  $R_E$  gemäß Laín (2010) und die *Strich-Punkt-Linien* die für verschiedene  $\alpha_P$  erweiterte analytische Drei-Koeffizienten-Korrelation für  $R_E^K$ . *Geschlossene Symbole* repräsentieren von Laín (2010) durchgeführte Berechnungen, die auf einem von Zaichik *et al.* (2006) entwickelten Zwei-Punkt-WDF-Modell beruhen.

Einbeziehung der in Abbildung 4.18 gegenübergestellten Kollisionsfrequenzen wird jedoch ersichtlich, dass im Vergleich zu den vorliegenden DNS-Daten der LES basierte Datensatz von Laviéville *et al.* (1995) für  $St_L \lesssim 1$  signifikante Unregelmäßigkeiten in der resultierenden Zwei-Partikel-Raumkorrelation hervorruft.

Eine weitere von Laín (2010) vorgestellte Zwei-Partikel-Raumkorrelation basiert auf numerischen Analysen eines von Zaichik *et al.* (2006) entwickelten Zwei-Punkt-WDF-Modells. Im Gegensatz zu Sommerfeld (2001) wurden zum Fitting des zugrundeliegenden Datensatzes drei Koeffizienten genutzt:

$$R_E(St_K) = \exp\left(-\frac{\alpha St_K^2}{1 + \gamma St_K^\beta}\right) \quad (4.32)$$

die mit  $\alpha = 0,019$ ,  $\beta = 1,725$  und  $\gamma = 0,044$  definiert sind (Laín 2010). In Abbildung 4.19 sind die von Sommerfeld (2001) und Laín (2010) vorgeschlagenen Zwei- (*durchgezogene Linie*) und Drei-Koeffizienten-Korrelationen (*gestrichelte Linie*) über der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  aufgetragen. Darüber hinaus zeigt Abbildung 4.19 den von Laín (2010) zur Entwicklung der Drei-Koeffizienten-Korrelation herangezogenen Datensatz (*geschlossene Symbole*). Neben den analytischen Näherungen sind in Abbildung 4.19 die in dieser Studie ermittelten  $R_E$  für  $r \leq 3/2 d_P$  dargestellt. Die

zugehörige Zwei-Partikel-Raumkorrelation der Partikelgeschwindigkeit ist für beliebige  $\mathbf{r}$  wie folgt definiert:

$$R_E(\mathbf{r}) = \frac{3}{2 k_P} B_u^P(\mathbf{r}) \quad (4.33)$$

worin  $B_u^P$  die longitudinale Komponente des Eulerschen Korrelationstensors ist. Der verallgemeinerte Zwei-Punkt-Korrelationstensor  $B_{ij}^P(\mathbf{r})$  beschreibt die Selbstähnlichkeit von  $u_{Pi}$  im Abstand  $\mathbf{r}$  (Zaichik *et al.* 2008):

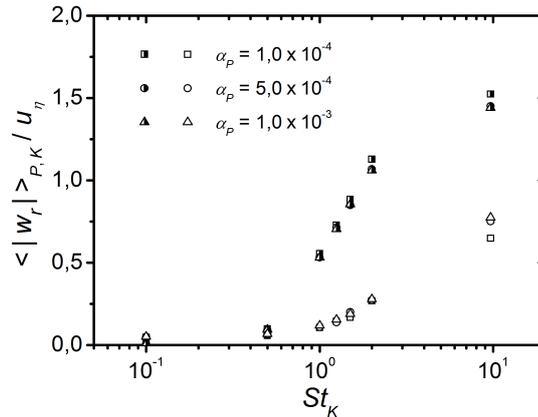
$$B_{ij}^P(\mathbf{r}) = \langle u_{Pi}(\mathbf{x}_P, t) u_{Pj}(\mathbf{x}_P + \mathbf{r}, t) \rangle_P \quad (4.34)$$

Da in dieser Studie das Clustering- und Kollisionsverhalten von Partikeln in homogener isotroper Turbulenz betrachtet wird, kann Gleichung (4.11) mit  $\overline{u_P}(\mathbf{x}_P) = 0$  zu  $u_P(\mathbf{x}_P, t) = u'_P(\mathbf{x}_P, t)$  reduziert werden. In Gleichung (4.34) findet aus Vereinfachungsgründen daher die instantane Partikelgeschwindigkeit  $u_P(\mathbf{x}_P, t)$  Anwendung. Neben der Raumkorrelation  $R_E$  direkt benachbarter Teilchen (*offene Symbole*) zeigt Abbildung 4.19 die Raumkorrelation  $R_E^K$  kollidierender Teilchen (*halb geschlossene Symbole*), die auf dem nachstehenden Korrelationstensor basiert:

$$B_{ij}^P \left( r = \frac{d_{P\alpha} + d_{P\beta}}{2} \right) = \langle u_{Pi\alpha}(\mathbf{x}_{P\alpha}, t) u_{Pj\beta}(\mathbf{x}_{P\beta}, t) \rangle_K \quad (4.35)$$

worin  $\langle \cdot \rangle_K$  den Ensemblemittelwert über alle detektierten Partikel-Partikel-Kollisionen kennzeichnet. Die in Abbildung 4.19 dargestellten Zwei-Partikel-Korrelationsverläufe streben den Vorhersagen von Saffman & Turner (1956) folgend im Bereich kleiner  $St_K$  gegen Eins. Die Geschwindigkeiten zweier benachbarter Teilchen sind in diesem Fall aufgrund der Wechselwirkung mit der selben lokalen Fluidströmung partiell korreliert. Mit steigender Partikel-Stokes-Zahl nimmt die Korrelation  $R_E$  der Partikelgeschwindigkeiten langsam ab. Für große  $St_K$  tendiert die Zwei-Partikel-Korrelation gegen Null, da die Geschwindigkeiten benachbarter Teilchen den Annahmen molekularer Chaos' (Abrahamson 1975) folgen.

Wie Abbildung 4.19 zeigt, stimmt die Drei-Koeffizienten-Korrelation von Laín (2010) mit den DNS basierten  $R_E$  zweier benachbarter Partikel gut überein. Aus diesem Grund ist das von Zaichik *et al.* (2008) eingeführte Zwei-Punkt-WDF-Modell zur Beschreibung der Eulerschen Raumkorrelation nahe gelegener Teilchen gut geeignet. Darüber hinaus zeigen die in dieser Studie ermittelten  $R_E$  im angenommenen Bereich von  $St_K$  keine signifikante Streuung in Bezug auf den Feststoffvolumenbruch. Demgegenüber weicht die von Sommerfeld (2001) eingeführte Zwei-Koeffizienten-Korrelation aufgrund der im LES-Datensatz (Laviéville *et al.* 1995) unberücksichtigten kleinskaligen Turbulenzmechanismen merklich von den übrigen  $R_E$  ab. Des Weiteren sind in Abbildung 4.19 die Raumkorrelationen  $R_E^K$  kollidierender Teilchen in Abhängigkeit



**Abb. 4.20.** Mittlerer Betrag der radialen Komponente der Relativgeschwindigkeit  $\langle |w_r| \rangle$  zweier Partikel aufgetragen über der Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$  in Abhängigkeit des Volumenbruchs  $\alpha_P$  der dispersen Phase. *Halb geschlossene Symbole* kennzeichnen kollidierende Partikel, während *offene Symbole* Partikelpaare mit einem Separationsabstand von  $r \leq 3/2 d_P$  repräsentieren. Die Berechnungen erfolgen unter Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen. Die Relativgeschwindigkeit  $w_r$  ist mit Hilfe des Kolmogorov-Geschwindigkeitsmaßes  $u_\eta$  normiert.

des Feststoffvolumenbruchs aufgetragen, die im Vergleich zu  $R_E$  deutlich kleinere Werte aufweisen. Diese Abweichung wird im Folgenden näher diskutiert.

Die Abnahme der Geschwindigkeitskorrelation benachbarter respektive kollidierender Teilchen mit steigenden  $St_K$  wird in der Literatur für gewöhnlich mit einer Vergrößerung der Relativgeschwindigkeit zwischen den Partikelpaaren erklärt, die wiederum auf eine Zunahme der Partikelträgheit zurückzuführen ist (Février *et al.* 2005). Die radiale Komponente der Relativgeschwindigkeit  $w_r$  zweier Partikel beruht, analog zur Berechnung der radialen Partikelverteilung  $g_r$  (vgl. Kapitel 2.5.3), auf dem mittels  $\mathbf{r}$  spezifizierten Separationsabstand:

$$w_r(\mathbf{r}) = (\mathbf{u}_{P2}(\mathbf{x}_P + \mathbf{r}, t) - \mathbf{u}_{P1}(\mathbf{x}_P, t)) \cdot \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|} \quad (4.36)$$

In Abbildung 4.20 ist der mittlere Betrag der radialen Komponente der Relativgeschwindigkeit  $\langle |w_r| \rangle$  über  $St_K$  aufgetragen. Die radiale Relativgeschwindigkeit  $w_r$  ist hierbei mit der kleinskaligen Kolmogorov-Geschwindigkeit  $u_\eta$  normiert. Im Vergleich zu  $\langle |w_r| \rangle$  zweier benachbarter Teilchen (*offene Symbole*) erfährt der mittlere Betrag der radialen Relativgeschwindigkeit kollidierender Teilchen (*halb geschlossene Symbole*) mit steigender Partikelträgheit zwischen  $0,5 \leq St_K \leq 2,0$  einen rapiden Anstieg. Diese Zunahme liegt in den resultierenden Kollisionsfrequenzen begründet, die für  $St_K \geq 0,5$  ebenfalls signifikant ansteigen (siehe Abbildung 4.18 für  $St_L \geq 0,23$ ). Für  $St_K > 10$  wird nach Zaichik *et al.* (2006) eine Abnahme von  $\langle |w_r| \rangle$  erwartet, da die Partikel aufgrund ihrer unkorrelierten Interaktion mit dem Fluid langsamer werden.

**Tab. 4.4.** Koeffizienten der analytischen Drei-Koeffizienten-Korrelation  $R_E(St_K)$  der Partikelgeschwindigkeit kollidierender Partikel als Funktion des Feststoffvolumenbruchs  $\alpha_P$ .

$\alpha_P$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
$1,0 \times 10^{-4}$	0,258	1,503	0,548
$5,0 \times 10^{-4}$	0,246	1,554	0,541
$1,0 \times 10^{-3}$	0,233	1,556	0,555

Das Verhalten der in Abbildung 4.19 dargestellten Raumkorrelation  $R_E^K$  kollidierender Partikel verdient Aufmerksamkeit. Wie zuvor diskutiert, werden Kollisionen zwischen Teilchen mit geringer Trägheit durch die turbulente Fluidscherung bestimmt. Daher sind in Abbildung 4.19 für  $St_K = 0,1$  keine nennenswerten Abweichungen der ermittelten  $R_E$  und  $R_E^K$  feststellbar. Beide Raumkorrelationen unterscheiden sich jedoch bereits bei mittleren  $St_K$ , wonach  $R_E^K$  signifikant schneller abfällt als  $R_E$ . Dieses Verhalten liegt darin begründet, dass nicht alle Partikelpaare im dreidimensionalen Raum, die nah genug für eine Interaktion sind, auch zwangsläufig miteinander kollidieren. Vielmehr ist für eine tatsächliche Kollision der sich annähernden Teilchen die passende Relativgeschwindigkeit ausschlaggebend.

Während der Mittelwert der radialen Relativgeschwindigkeit für benachbarte Partikel Null ist, kollidieren Teilchen im Mittel mit negativen  $w_r$ . Aus diesem Grund ist der gemittelte Betrag der radialen Relativgeschwindigkeit kollidierender Partikel in Abbildung 4.20 tendenziell größer als für direkt benachbarte Teilchen. Als Folge dessen ist  $R_E^K$  im Vergleich zu  $R_E$  kleiner. Da  $\langle |w_r| \rangle$  mit größer werdenden  $St_K$  zunimmt, vergrößert sich der Abstand beider Zwei-Partikel-Raumkorrelationen mit steigender Partikelträgheit. Darüber hinaus nimmt in Abbildung 4.19 die Raumkorrelationen kollidierender Partikel für gleiche  $St_K$  mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu, während  $\langle |w_r| \rangle$  von interagierenden Teilchen mit größer werdenden  $\alpha_P$  in Abbildung 4.20 abnimmt.

Nach Abbildung 4.19 sollte für die Modellierung der turbulenten Partikelschwankungsgeschwindigkeit des fiktiven Kollisionspartners in stochastischen Kollisionsmodellen nicht  $R_E$  sondern  $R_E^K$  Anwendung finden, infolgedessen die Relativgeschwindigkeiten der Kollisionspartner in geringerem Maß korreliert. Funktionale Formen einer solchen Korrelation wurden aus den vorliegenden DNS-Daten entwickelt. Tabelle 4.4 zeigt exemplarisch für  $R_E^K$  angepasste Koeffizienten der Drei-Koeffizienten-Korrelation nach Gleichung (4.32) für die in dieser Studie untersuchten Feststoffvolumenbrüche. Die zugehörigen Kurven (*Strich-Punkt-Linien*) dieser Fittings sind zu Vergleichszwecken ebenfalls in Abbildung 4.19 dargestellt.

Zusammenfassend ist anhand der vorliegenden Analysen ein maximales Clustering der in homogener isotroper Turbulenz suspendierten Teilchen bei  $St_K \approx 1$  zu beobachten. Ferner deuten die ermittelten Parameter der Akkumulation und Korrelationsdimension auf eine größtmögliche Entmischung der untersuchten Partikelkonzentrationen bei  $St_K = 1,25$  hin. Unter Berücksichtigung vergleichbarer Partikel-Stokes-Zahlen wird das Clustering der Partikel im Wesentlichen durch die betrachteten Volumenbrüche geprägt, wohingegen Partikel-Partikel-Kollisionen die bevorzugte Konzentration der Teilchen nur marginal beeinflussen.

Des Weiteren steigt die Frequenz interpartikulärer Wechselwirkungen mit zunehmender Partikelträgheit sukzessive an. Zugleich nehmen die ermittelten Kollisionsraten für vergleichbare  $St_K$  mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu, wenngleich unterschiedliche  $\alpha_P$  nur einen geringen Einfluss auf die erzielten Kollisionsfrequenzen ausüben. Anhand der Raumkorrelation von Partikelpaaren wird darüber hinaus ersichtlich, dass die Relativgeschwindigkeiten kollidierender Teilchen für große  $St_K$  deutlich von denen benachbarter Teilchen abweichen. Dieses Verhalten ist insbesondere für die Weiterentwicklung stochastischer Kollisionsmodelle zu berücksichtigen.

Während in diesem Kapitel die Analyse des Clustering- und Kollisionsverhaltens von Punktpartikeln auf mesoskaliger Teilchenebene im Fokus stand, wird in den beiden folgenden Kapiteln das Transport-, Kollisions- und Agglomerationsverhalten von Partikeln mit numerisch aufgelösten Oberflächen auf mikroskaliger Teilchenebene untersucht.

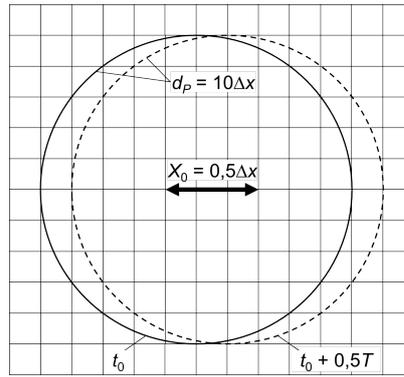
## 5 Fluiddynamische Wechselwirkung von Partikeln

Die angewandte Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) wurde ursprünglich für die Analyse von Widerstands-, Auftriebs- und Drehmomentbeiwerten sphärischer und nicht-sphärischer Teilchen wie Kugeln, Würfel und Quader (Hölzer & Sommerfeld 2009) sowie Zylinder (Hölzer & Sommerfeld 2010) und Agglomerate (Dietzel & Sommerfeld 2013) entwickelt. In diesem Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelten und in den LBM-Strömungslöser implementierten Modelle zur Beschreibung des Bewegungs- und Kollisionsverhaltens von Partikeln mit numerisch aufgelösten Oberflächen evaluiert. Zu diesem Zweck wurden aus der Literatur bekannte Testfälle numerisch berechnet und mit verfügbaren Mess- und Simulationsdaten verglichen.

Im folgenden Abschnitt wird zunächst die Behandlung bewegter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen anhand der aufgeprägten Oszillation eines sphärischen Partikels untersucht. Anschließend folgen im Abschnitt 5.2 Analysen zum Sedimentationsverhalten einzelner Kugeln in einem geschlossenen Behälter. Die Anwendbarkeit eines neu entwickelten Rekonstruktionsverfahrens für die Annäherung und Kollision aufgelöster Feststoff-Fluid-Phasengrenzen wird im Abschnitt 5.3 anhand der Sedimentation zweier initial übereinander angeordneter Teilchen demonstriert. Im Abschnitt 5.4 folgen abschließend Studien zur Annäherung und Kollision sphärischer Partikel in laminaren Scherströmungen. In diesem Zusammenhang sind die Effekte viskoser Kräfte auf die Bewegung sich annähernder Teilchen kurz vor ihrer Kollision von besonderem Interesse.

### 5.1 Oszillation eines sphärischen Partikels

Der erste Testfall betrachtet zunächst die LBM basierte Modellierung der schlupffreien Bewegung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen. Dies impliziert die Initialisierung neuer Fluidknoten hinter einem sich bewegenden, sphärischen Partikel (siehe Kapitel 2.4.3). Um Nebeneffekte wie Schwankungen strömungsinduzierter Partikelkräfte zu vermeiden, wird die Bewegung des Partikels durch eine sinusförmige Oszillation künstlich aufgeprägt.



**Abb. 5.1.** Schematische Darstellung der Oszillation eines kugelförmigen Partikels über das raumfeste, äquidistante Rechengitter.

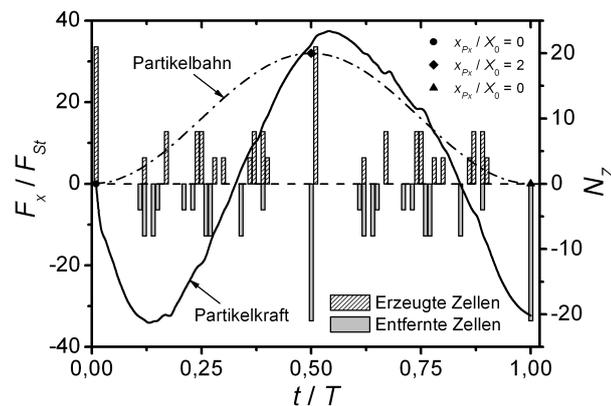
### 5.1.1 Numerische Konfiguration

Die Bewegung des um das Zentrum des Rechengebiets oszillierenden Partikels wird in Abbildung 5.1 anhand dessen Position zu den Zeitpunkten  $t_0$  und  $t_0 + 0,5 T$  veranschaulicht. Die x-Komponente der Position  $x_{Px}$  und Geschwindigkeit  $u_{Px}$  des Partikels zum Zeitpunkt  $t$  wird nach Seo & Mittal (2011) wie folgt vorgegeben:

$$x_{Px}(t) = x_{Px}(0) + X_0 [1 - \cos(2 \pi f_0 t)] \quad (5.1)$$

$$u_{Px}(t) = U_0 \sin(2 \pi f_0 t) \quad (5.2)$$

worin  $f_0 = 1/T$  die Grundfrequenz und  $U_0 = 2 \pi f_0 X_0$  die Grundgeschwindigkeit der Oszillation ist. Seo & Mittal (2011) folgend beträgt die Grundamplitude der Oszillation gleich  $X_0 = 0,05 d_P$ . Darüber hinaus nehmen die Partikel-Strouhal-Zahl,  $Sr_P = f_0 d_P / U_0$ , und die Partikel-Reynolds-Zahl,  $Re_P = U_0 d_P \rho / \eta$ , Werte von  $Sr_P = 3,2$  und  $Re_P = 31,0$  an. Das Partikel bewegt sich in einem Fluid mit der Dichte von  $\rho = 10 \text{ kg/m}^3$  und einer dynamischen Viskosität von  $\eta = 5,07 \times 10^{-2} \text{ Ns/m}^2$ . Das Rechengebiet entspricht einer würfelförmigen Box mit einer Kantenlänge von  $4 d_P$ , welches durch ein äquidistantes Gitter mit  $40 \times 40 \times 40$  Rechenzellen diskretisiert wird. An den äußeren Gebietsgrenzen finden Neumann-Randbedingungen mit Null-Gradienten der Fluidgeschwindigkeit Anwendung (Seo & Mittal 2011). Die gekrümmte Kontur des Partikels wird mit Hilfe von  $d_P / \Delta x = 10$  Gitterzellen numerisch aufgelöst. Um das häufige Erzeugen respektive Entfernen von Fluidzellen während eines Zeitschrittes an verschiedenen Stellen vor und hinter der sich bewegenden Partikel-Fluid-Phasengrenze zu minimieren, wurde der angewandte Fluidzeitschritt auf  $\Delta t = 0,0314 \Delta x / U_0$  reduziert. Nach einer Periodendauer von  $T = 100 \Delta t$  wird die Simulation gestoppt.



**Abb. 5.2.** Zeitlicher Verlauf der in Bewegungsrichtung auf das Partikel wirkenden strömungsinduzierten Gesamtkraft  $F_x$  (*durchgezogene Linie*), normiert durch die Stokes-Widerstandskraft  $F_{St}$  auf Basis der Grundgeschwindigkeit der Oszillation  $U_0$ . Das *Balkendiagramm* kennzeichnet die Anzahl  $N_Z$  an Fluidzellen, die infolge der bewegten Fluid-Partikel-Phasengrenze erzeugt (*gestreifte Balken*) respektive entfernt werden (*graue Balken*). Die *Strich-Punkt-Linie* beschreibt qualitativ die Bahn des Partikels einschließlich seiner Extrempositionen (*geschlossene Symbole*) im Verlauf der Oszillation.

### 5.1.2 Analyse der strömungsinduzierten Partikelkraft

Abbildung 5.2 zeigt die zeitabhängige Änderung der resultierenden Gesamtkraft des Fluids, welche auf die Oberfläche des oszillierenden Partikels wirkt. Die dargestellte x-Komponente der Partikelkraft  $F_x$  wurde unter Verwendung der Widerstandskraft im Stokes-Regime,  $F_{St} = 3 \pi \eta d_P U_0$ , normiert. Aufgrund der Trägheit des Fluids folgt der Verlauf der strömungsinduzierten Partikelkraft (*durchgezogene Linie*) dem der aufgeprägten Partikelbahn (*Strich-Punkt-Linie*) mit einer zeitlichen Verzögerung. Abgesehen von diesem Phasenversatz weist die gemessene Partikelkraft innerhalb ihres Kurvenverlaufs nur einige wenige Schwankungen auf, welche auf transiente Umschaltvorgänge der beiden Zellstatus an der Phasengrenzfläche zwischen Fluid und Partikel zurückzuführen sind.

Zur Verdeutlichung dieses Zusammenhangs wurde in Abbildung 5.2 neben der Partikelkraft die Anzahl  $N_Z$  an Fluidzellen quantifiziert, die infolge der Bewegung des Partikels über das stationäre Rechengitter sowohl erzeugt (*gestreifte Balken*) als auch entfernt (*graue Balken*) werden. Durch Vergleich der Graphen wird ersichtlich, dass Schwankungen im Kraftverlauf in denselben Bereichen auftreten, in denen Zellen ihren Status von Fluid auf Feststoff und umgekehrt ändern. Individuelle Effekte lassen sich an dieser Stelle gleichwohl nicht eindeutig identifizieren, da ein Großteil der Schwankungen im Übergangsbereich zwischen zumeist einseitigen Änderungen der Zellstatus zu verzeichnen sind (vgl. Abbildung 5.2 bei  $t/T = 0,75$ ).

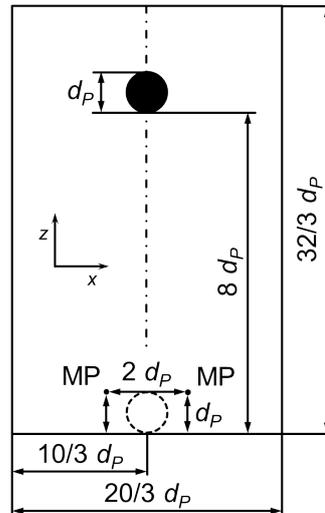
Ferner treten die von der Umschaltung betroffenen Zellen an den jeweils gegenüberliegenden Seiten des Partikels auf. Die Generierung von Feststoffzellen findet folglich in Bewegungsrichtung vor dem Partikel, die Initialisierung neuer Fluidzellen hingegen hinter dem Partikel statt. Dessen ungeachtet verdeutlicht Abbildung 5.2, dass die zeitliche Entwicklung der strömungsinduzierten Partikelkraft trotz der Erzeugung und Entfernung von in Summe mehr als 40 Fluidzellen zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten, beispielsweise bei  $t/T = 0,5$ , lediglich geringen Schwankungen unterworfen ist.

## 5.2 Sedimentation von Einzelpartikeln

Neben der Modellierung von Feststoff-Fluid-Phasengrenzen soll im Folgenden der LBM basierte Ansatz des Lagrangeschen Transports von numerisch aufgelösten Partikeloberflächen evaluiert werden. Zu diesem Zweck wird die Sedimentation eines sphärischen Partikels in einem geschlossenen Behälter betrachtet. Die Analyse sedimentierender Partikel hat sich in der Literatur als fundamentaler Testfall zur Validierung bewegter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen etabliert (Feng *et al.* 1994; Harada *et al.* 2000; Feng & Michaelides 2009). Mit Hilfe der nachstehenden Untersuchungen wird insbesondere die Berechnung der strömungsinduzierten Partikelkraft im Kontext bewegter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen analysiert. Die numerische Konfiguration des Testfalls folgt den Vorgaben von Ten Cate *et al.* (2002), wodurch ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit Particle Image Velocimetry (PIV)-Messungen ermöglicht wird.

### 5.2.1 Numerische Konfiguration

In Analogie zu Ten Cate *et al.* (2002) werden die Simulationen in einem geschlossenen, vertikalen Kanal mit den Abmessungen  $20/3d_P \times 20/3d_P \times 32/3d_P$  realisiert (siehe Abbildung 5.3). Die sinkende Nylonkugel besitzt einen Durchmesser von  $d_P = 15$  mm und eine Dichte von  $\rho_P = 1120$  kg/m<sup>3</sup>. Die Sedimentation der Kugel startet in allen nachfolgend untersuchten Fällen in einer Höhe von  $8d_P$  über dem Boden des Behälters im Zentrum des Kanalquerschnitts. Zu Beginn einer jeden Simulation befinden sich Fluid und Partikel in Ruhe. Da weder Einlass- noch Auslassöffnungen existieren, wird die Bewegung des Partikels hauptsächlich durch die Erdbeschleunigung  $g$  und die Wechselwirkung mit der Fluidströmung, welche ausschließlich durch feste Wände begrenzt wird, beeinflusst. Um verschiedene stationäre Sinkgeschwindigkeiten des Partikel zu erzielen, findet in Übereinstimmung mit Ten Cate *et al.* (2002) Silikonöl unterschiedlicher Viskosität als Arbeitsfluid Anwendung. Die im Einzelnen variierten Eigenschaften wie Fluidichte  $\rho$ , dynamische Viskosität  $\eta$  und gemeinsamer Zeit-



**Abb. 5.3.** Abmessungen der Kanengeometrie und Startposition des sedimentierenden Partikels normiert auf den Partikeldurchmesser  $d_P$ . Position der Messpunkte (MP) zur Aufzeichnung der instationären Fluidgeschwindigkeit.

schritt  $\Delta t$  für Fluid und Partikel sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst<sup>8</sup>. Die ebenfalls in Tabelle 5.1 spezifizierten Partikel-Reynolds-Zahlen der sedimentierenden Kugeln berechnen sich mit:

$$Re_P = \frac{|u_P^S| d_P \rho}{\eta} \quad (5.3)$$

in der  $u_P^S$  die stationäre Sinkgeschwindigkeit eines sphärischen Partikels in einem infiniten, ruhenden Fluid unter Annahme einer ausschließlich gravitativen Sedimentation kennzeichnet:

$$|u_P^S| = \left( \frac{4 \rho_P d_P g}{3 \rho c_W} \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_P} \right) \right)^{1/2} \quad (5.4)$$

Die Bestimmung des Widerstandsbeiwertes  $c_W$  beruht auf der in Gleichung (2.33) definierten Korrelation nach Schiller & Naumann (1933). Anhand der Gleichungen (5.3)-(5.4) und (2.33) wird deutlich, dass  $u_P^S$  iterativ zu berechnen ist.

Wie  $u_P^S$  in Tabelle 5.1 zeigt, weichen die Sedimentationszeiten der Partikel bis zum Erreichen des Behälterbodens aufgrund der unterschiedlichen Silikonöle voneinander ab. Aus diesem Grund werden die Simulationen erst nach Erreichen der zuvor ermittelten maximalen Sedimentationszeit von 5,0 s beendet. Um zusätzliche Effekte wie

<sup>8</sup>Durch Einsetzen der von Ten Cate *et al.* (2002) vorgegebenen Ausgangsparameter in Gleichung (5.3) resultieren Partikel-Reynolds-Zahlen  $Re_P$ , die um drei Zehnerpotenzen größer als die in Ten Cate *et al.* (2002) spezifizierten  $Re_P$  sind. Um mit Ten Cate *et al.* (2002) vergleichbare  $Re_P$  zu erzielen, wurde die dynamische Viskosität  $\eta$  in dieser Studie mit dem Faktor  $1,0 \times 10^{-3}$  multipliziert.

**Tab. 5.1.** Fluid- und Partikeleigenschaften der betrachteten Sedimentationsläufe eines sphärischen Partikels in Analogie zu Ten Cate *et al.* (2002).

Fall	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$\eta$ [N s/m <sup>2</sup> ]	$\Delta t/\tau_P$	$ u_P^S $ [m/s]	$Re_P$
E1	970,0	$3,73 \times 10^{-1}$	$3,46 \times 10^{-4}$	$0,41 \times 10^{-1}$	1,6
E2	965,0	$2,12 \times 10^{-1}$	$3,45 \times 10^{-4}$	$0,64 \times 10^{-1}$	4,3
E3	962,0	$1,13 \times 10^{-1}$	$3,44 \times 10^{-4}$	$0,94 \times 10^{-1}$	12,0
E4	960,0	$0,58 \times 10^{-1}$	$3,43 \times 10^{-4}$	$1,29 \times 10^{-1}$	32,0

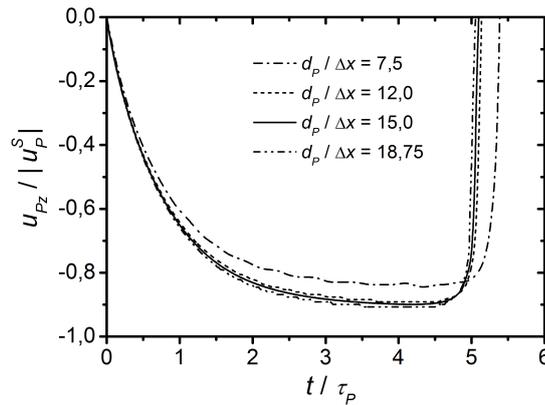
subskalige Rückstellkräfte unterhalb der Auflösungsgrenze des Fluids (siehe Kapitel 2.4.4) während der Annäherung des Partikels an den Behälterboden auszuschließen, wird das Lagrangesche Tracking vor Eintritt des Partikels in die letzte Fluidzelle gestoppt. Folglich beträgt die minimale Spaltweite zwischen Partikeloberfläche und unterer Wand gleich  $\Delta s/\Delta x = 1$ .

### 5.2.2 Einfluss der räumlichen Diskretisierung

In einem ersten Schritt wird zunächst der Einfluss der Diskretisierung des Rechengebiets auf den Sedimentationsverlauf des Partikels betrachtet. Bedingt durch das äquidistante Rechengitter werden sowohl das Partikel als auch das umgebende Fluid gleichermaßen durch die Zellenweite  $\Delta x$  räumlich diskretisiert. Durch schrittweises verkleinern der Zellenweite wird die Genauigkeit der numerischen Lösung sukzessive erhöht, bis ein zuvor definiertes Residuum erreicht ist. Tabelle 5.2 fasst die im Einzelnen untersuchten Diskretisierungen zusammen.

Der Sedimentationsprozess im Allgemeinen wird durch drei Regime gekennzeichnet: (I) Beschleunigung des Partikels, (II) Sedimentation bei einer konstanten Geschwindigkeit und (III) Verzögerung des Partikels bei Erreichen des Bodens bis zum Wandkontakt. Abbildung 5.4 veranschaulicht diese Regime anhand der normierten Partikelsinkgeschwindigkeit  $u_{Pz}$  im Fall E4 (siehe Tabelle 5.1) bei einer Diskretisierung bezogen auf den Partikeldurchmesser von  $d_P/\Delta x = 15,0$  (*durchgezogene Linie*):  $t/\tau_P < 3,5$  (Beschleunigung);  $3,5 \leq t/\tau_P < 4,5$  (stationäre Sinkgeschwindigkeit) und  $t/\tau_P \geq 4,5$  (Verzögerung).

Abbildung 5.4 verdeutlicht zudem den Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf den Sedimentationsverlauf. Demnach wird die auf das Partikel wirkende Gesamtkraft bei zu groben  $\Delta x$  überschätzt, sodass bei  $d_P/\Delta x = 7,5$  das Partikel gegenüber feineren Diskretisierungen eine deutlich geringere stationäre Sinkgeschwindigkeit erreicht. Ab  $d_P/\Delta x \geq 12$  nähert sich  $u_{Pz}(t)$  einem nahezu konstanten Verlauf mit einer relativen Abweichung zwischen  $d_P/\Delta x = 12,0$  und  $d_P/\Delta x = 18,75$  von maximal 1,83 %. Als



**Abb. 5.4.** Einfluss der Diskretisierung auf den dimensionslosen zeitlichen Verlauf der Sinkgeschwindigkeit  $u_{Pz}$  des Partikel basierend auf Fall E4 (siehe Tabelle 5.1), normiert durch die ungestörte stationäre Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$ .

**Tab. 5.2.** Räumliche Diskretisierung des vertikalen Kanals und der sedimentierenden Kugel.

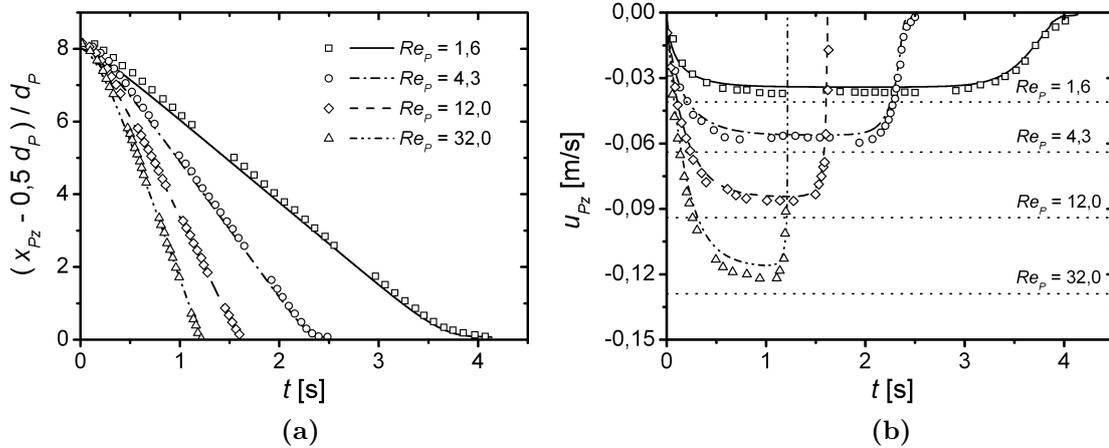
Fall	$L_x/\Delta x$	$L_y/\Delta x$	$L_z/\Delta x$	$d_P/\Delta x$
D1	50	50	80	7,5
D2	80	80	128	12,0
D3	100	100	160	15,0
D3	125	125	200	18,75

Kompromiss zwischen bestmöglicher Auflösung des Berechnungsgebietes und benötigter Rechenzeit wurde für die nachstehenden Untersuchungen eine Diskretisierung von  $d_P/\Delta x = 15,0$  gewählt. Dies entspricht einer Auflösung des Kanals mit  $100 \times 100 \times 160$  Gitterzellen.

### 5.2.3 Evaluation mit experimentellen Daten

Abbildung 5.5 zeigt die Partikeltrajektorien und die zeitlichen Verläufe der Sinkgeschwindigkeit der betrachteten  $Re_P$  (siehe Tabelle 5.1). Die Sedimentationsgeschwindigkeiten der Partikel werden durch Verwendung verschiedener Silikonöle als Arbeitsfluid erzielt (Ten Cate *et al.* 2002). Wie Abbildung 5.5b zeigt, steigt die maximale Sinkgeschwindigkeit  $u_{Pz}$  (*Linien*) mit sinkender Viskosität, wodurch das Partikel zunehmend weniger Zeit bis zum Erreichen des Behälterbodens benötigt (vgl. Abbildung 5.5a).

Ferner zeigen die numerisch berechneten Trajektorien und Sinkgeschwindigkeiten der drei kleineren Partikel-Reynolds-Zahlen in allen Sedimentationsphasen eine gute

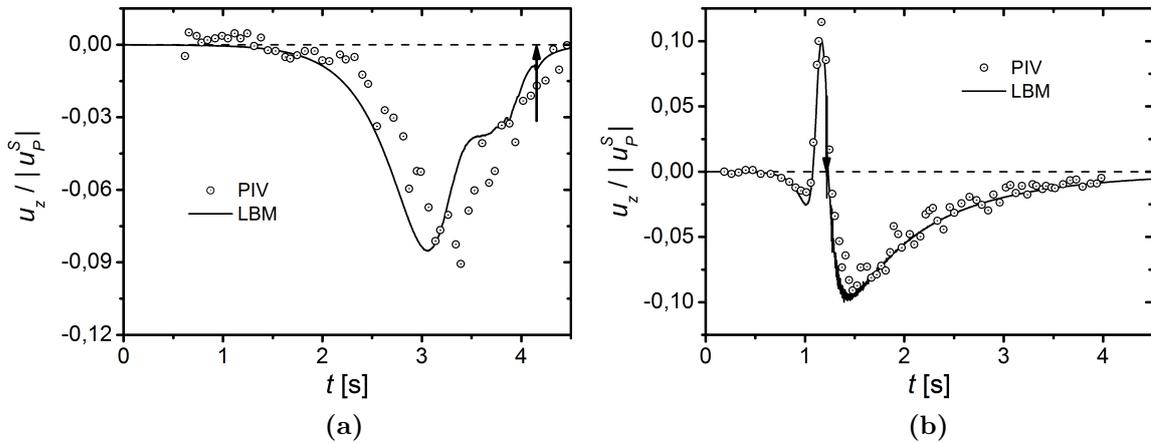


**Abb. 5.5.** Vergleich des zeitlichen Verlaufs der z-Komponenten der (a) normierten Trajektorie  $x_{Pz}$  und (b) Sinkgeschwindigkeit  $u_{Pz}$  eines sedimentierenden Partikels (*Linien*) mit Particle Image Velocimetry-Messungen (*Symbole*), entnommen aus Ten Cate *et al.* (2002), und theoretischen Approximationen (*horizontal gepunktete Linien*) als Funktion der Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_P$ .

Übereinstimmung mit den ebenfalls in Abbildung 5.5 dargestellten PIV-Messdaten (*Symbole*). Marginale Unterschiede sind im anfänglichen Verlauf der Partikelbahnen, insbesondere bei  $Re_P = 1,6$ , zu verzeichnen, die sich bis zur Kollision der Partikel mit dem Behälterboden fortsetzen. Diese liegen in den Anfangsbedingungen der einzelnen PIV-Messreihen begründet, wonach die Starthöhe des Partikels partiell vom Vorgabewert abweicht (Ten Cate 2002).

Bei der größten Partikel-Reynolds-Zahl,  $Re_P = 32,0$ , wird die stationäre Sinkgeschwindigkeit gegenüber den gemessenen Vergleichswerten etwas zu hoch vorhergesagt, währenddessen sich die zugehörigen Trajektorien nahezu überlagern. Dieses Verhalten resultiert aus dem in Kapitel 2.4.3 dargelegten Interpolationsschema, welches für die Reinitialisierung neu entstandener Fluidknoten hinter dem sich bewegenden Partikel Anwendung findet. Die approximierten Fluidgeschwindigkeit ist an dieser Stelle kleiner als der experimentell ermittelte Referenzwert, wodurch die Impulsbilanz der diskreten Verteilungsfunktionen entlang der Partikeloberfläche nach Gleichung (2.58) und (2.60) zu einer größeren Widerstandskraft auf das Partikel führt und das Partikel folglich langsamer sedimentiert.

Gleichwohl ist in allen untersuchten Fällen die theoretisch approximierten, stationäre Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  (*horizontal gepunktete Linien*) deutlich größer als die zugehörigen gemessenen und berechneten Vergleichswerte (siehe Abbildung 5.5b). Diese Abweichung beruht auf der Wechselwirkung des Fluids mit den Behälterwänden,

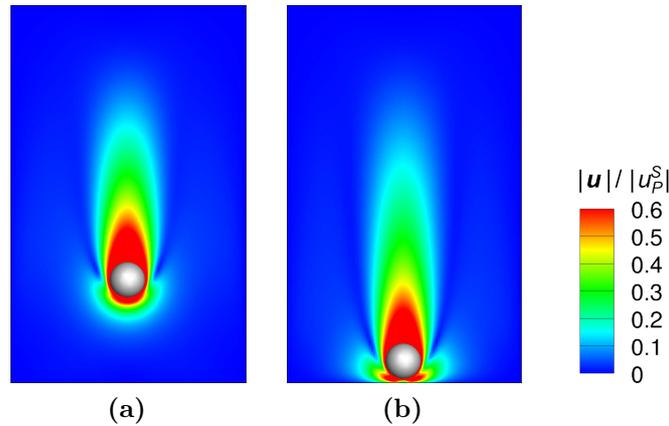


**Abb. 5.6.** Vergleich des zeitlichen Verlaufs der berechneten (*durchgezogene Linie*) und gemessenen (Ten Cate *et al.* 2002)  $z$ -Komponente der Fluidgeschwindigkeit (*Symbole*) an den in Abbildung 5.3 definierten Messpunkten bei verschiedenen Partikel-Reynolds-Zahlen: (a)  $Re_P = 1,6$  und (b)  $Re_P = 32,0$ . Der *vertikale Pfeil* kennzeichnet den Zeitpunkt, an dem das Partikel jeweils mit dem Boden kollidiert und zur Ruhe kommt.

wodurch sich unter Realbedingungen der  $c_W$ -Wert und somit die auf das Partikel wirkende Widerstandskraft erhöht. Demzufolge werden gegenüber  $u_P^S$  geringere stationäre Sinkgeschwindigkeiten erreicht.

Abbildung 5.6 zeigt die zeitliche Entwicklung der vertikalen Komponente der Fluidgeschwindigkeit  $u_z$  (*durchgezogene Linie*) bei  $Re_P = 1,6$  und  $32,0$  an diskreten Messpunkten im Berechnungsgebiet. Die Fluidgeschwindigkeit wurde entsprechend Abbildung 5.3 an vier Messpunkten innerhalb der Fluiddomäne zeitlich aufgezeichnet, anschließend über die Gesamtanzahl der Messpunkte räumlich gemittelt und mit Hilfe der approximierten, ungestörten stationären Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  normiert.

Im Fall kleiner  $Re_P$  wird die negativ-wertige Fluidgeschwindigkeit, deren Vorzeichen sich auf das in Abbildung 5.3 definierte Koordinatensystem bezieht, allmählich kleiner (siehe Abbildung 5.6a). Sie erzielt ihr Minimum bei  $t = 3,1$  s, kurz bevor die Vorderkante des Partikels die Messpunkte von  $u_z$  passiert. Im weiteren Verlauf der Sedimentation wird das zwischen frontseitiger Partikeloberfläche und unterer Wand befindliche Fluid zunehmend seitlich verdrängt. Infolgedessen nimmt  $u_z$  wieder zu, ehe das Partikel bei  $t = 3,2$  s die vertikale Position der Messpunkte erreicht. Der *vertikale Pfeil* in Abbildung 5.6a bei  $t = 4,2$  s kennzeichnet den Zeitpunkt, in dem das Partikel den Boden berührt. Mit fortschreitender Sedimentationszeit wird die Fluidgeschwindigkeit kontinuierlich größer, bis sie schließlich nach  $t = 4,5$  s nahezu Null ist. Die zeitliche Entwicklung der simulierten Fluidgeschwindigkeit besitzt ein ähnliches Profil wie die ebenfalls in Abbildung 5.6a dargestellten PIV-Messwerte



**Abb. 5.7.** Momentaufnahmen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes in der Umgebung eines sedimentierenden Partikels ( $Re_P = 32,0$ ) zu den Zeitpunkten (a)  $t/\tau_P = 0,9$  ( $\Delta s/d_P = 2,4$ ) und (b)  $t/\tau_P = 1,2$  ( $\Delta s/d_P = 0,1$ ). Der Betrag der Fluidgeschwindigkeit  $|\mathbf{u}|$  ist durch die ungestörte stationäre Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  des Partikels normiert. Die Spaltweite  $\Delta s$  zwischen Partikeloberfläche und Behälterboden bezieht sich auf den Partikeldurchmesser  $d_P$ .

(*Symbole*). Der zeitliche Versatz beider Kurven ist, wie zuvor in Abbildung 5.5a diskutiert, auf marginal abweichende Anfangsbedingungen zurückzuführen.

Im Gegensatz zu  $Re_P = 1,6$  stimmen Simulation und Messung der in Abbildung 5.6b bei  $Re_P = 32,0$  dargestellten Kurvenverläufe deutlich besser überein. Aufgrund der höheren Sinkgeschwindigkeit des Partikels ändert sich die Fluidgeschwindigkeit gegenüber kleinerer  $Re_P$  ebenfalls schneller. Darüber hinaus weicht das Geschwindigkeitsprofil merklich von dem zuvor betrachteten Verlauf ab. Noch bevor die Vorderkante des Partikels die vertikale Position der Geschwindigkeitsmesspunkte passiert, nimmt  $u_z$  anfänglich negative und daraufhin für kurze Zeit positive Werte an, bis das Partikel nach  $t = 1,2$  s auf den Boden trifft (siehe *vertikaler Pfeil*). Gemäß Abbildung 5.7a wird das Fluid infolge der abwärtsgerichteten Partikelbewegung zunächst ebenfalls nach unten gedrückt und anschließend aufgrund des zunehmend kleiner werdenden Spalts zwischen frontseitiger Partikeloberfläche und unterer Wand schräg nach oben reflektiert (siehe Abbildung 5.7b). Zum Zeitpunkt  $t = 1,1$  s passiert die Vorderkante des Partikels die vertikale Position der Messpunkte von  $u_z$ . Zeitgleich erreicht der Aufwärtsstrom sein Maximum (siehe Abbildung 5.6b). Infolge seiner eigenen Trägheit wird das Fluid nach der Kollision des Partikels mit dem Behälterboden erneut nach unten gezogen. Der Betrag des erzielten Minimums ist dabei um ein vierfaches größer als zu Beginn bei  $t = 1,0$  s. Die Dissipation der im Fluid enthaltenen Energie benötigt aufgrund der kleineren dynamischen Viskosität deutlich mehr Zeit gegenüber Fall E1, um wieder in den ruhenden Ausgangszustand zu gelangen.

Begründet durch die gute Übereinstimmung der in diesem Abschnitt vorgestellten Simulationsdaten mit PIV-Messungen (Ten Cate *et al.* 2002) lässt sich schlussfolgern, dass der vorliegende LBM basierte Modellierungsansatz für den Lagrangeschen Transport von numerisch aufgelösten Partikeloberflächen zu vertrauenswürdigen Ergebnissen führt. Im folgenden Kapitel wird die Bewegung zweier sich annähernder Partikel betrachtet, um die Funktionalität des in Kapitel 2.4.4 vorgestellten Schemas zur Rekonstruktion fehlender Fluidverteilungsfunktionen im Nahbereich benachbarter Feststoff-Feststoff-Phasengrenzen zu evaluieren.

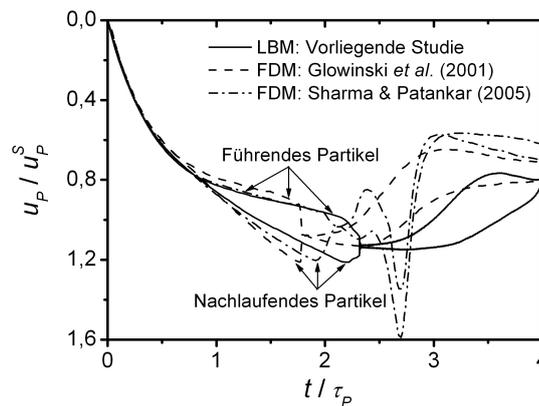
### 5.3 Sedimentation von Partikelpaaren

Die Annäherung, Kollision und anschließende Taumelbewegung zweier hintereinander sedimentierender Kugeln wird in der Literatur als Drafting-Kissing-Tumbling (DKT)-Phänomen bezeichnet. Die DKT-Bewegung sphärischer Partikel hat sich in den letzten Jahren als Standardtestfall für die Evaluierung numerischer Modellierungsansätze etabliert (Feng *et al.* 1994; Sharma & Patankar 2005; Zhang & Prosperetti 2012).

#### 5.3.1 Numerische Konfiguration

In der vorliegenden Studie wurde eine numerische Konfiguration gewählt, die sich an Glowinski *et al.* (2001) und Sharma & Patankar (2005) orientiert. Der rechtwinklige, vertikale Kanal hat einen quadratischen Querschnitt von  $6 d_P \times 6 d_P$  sowie eine Höhe von  $24 d_P$  und ist durch feste Wände begrenzt. Dies entspricht einer räumlichen Diskretisierung von  $64 \times 64 \times 256$  Gitterzellen. Die Dichte und dynamische Viskosität des anfänglich ruhenden Fluids betragen  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  und  $\eta = 1,0 \times 10^{-3} \text{ Ns/m}^2$ .

Unter Anwendung aufgelöster, schlupffreier Feststoff-Fluid-Phasengrenzen werden die Partikelzentren zu Beginn der Simulation entlang der vertikalen Kanalmittellinie in einer Höhe von  $18,96 d_P$  respektive  $21,0 d_P$  über dem Kanalboden positioniert. In der vorliegenden Simulation wurden Kugeln gewählt, die einen Durchmesser von  $d_P/\Delta x = 10 \frac{2}{3}$  sowie eine Dichte von  $\rho_P = 1140 \text{ kg/m}^3$  besitzen. Die anfänglichen translatorischen und rotatorischen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit sind Null. Für ideal elastische Stöße zwischen den Partikeln wurde der Restitutionskoeffizient auf  $c_R = 1,0$  und der statische wie auch dynamische Reibungskoeffizient auf  $\mu_s = \mu_d = 0,0$  gesetzt. Gleichung (5.3) folgend beträgt die Partikel-Reynolds-Zahl gleich  $Re_P = 84,8$  und basiert nach Gleichung (5.4) auf der Sinkgeschwindigkeit eines Einzelpartikels in einem infiniten, ruhenden Medium. Der gewählte Zeitschritt von  $\Delta t/\tau_P = 6,93 \times 10^{-4}$  garantiert, dass keine Mehrfachkollisionen zwischen den Partikeln innerhalb eines Zeitschrittes auftreten.

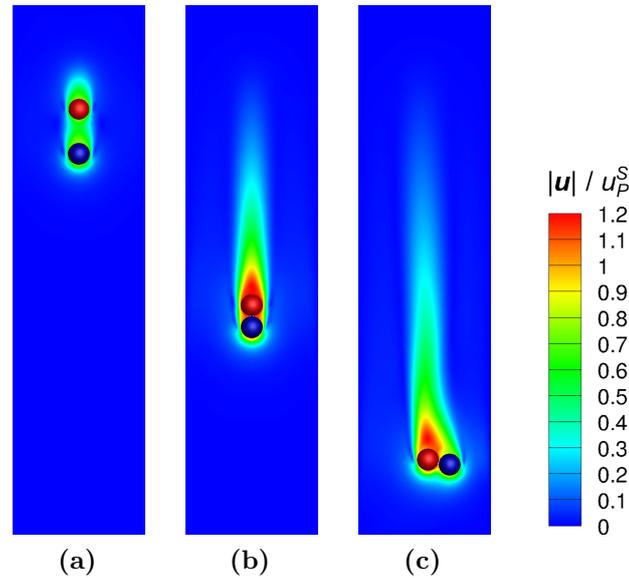


**Abb. 5.8.** Zeitabhängige Entwicklung der  $z$ -Komponente der Sinkgeschwindigkeiten  $u_{P,z}$  des sedimentierenden Partikelpaares (*durchgezogene Linien*), normiert durch die ungestörte stationäre Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$ . Gegenüberstellung der extrahierten Kurvenverläufe mit Simulationsdaten von Glowinski *et al.* (2001), *gestrichelte Linien*, und Sharma & Patankar (2005), *Strich-Punkt-Linien*, auf Grundlage der Fiktiven-Domain-Methode (FDM).

### 5.3.2 Evaluation anhand numerischer Daten

Abbildung 5.8 zeigt den zeitlichen Verlauf der vertikalen Geschwindigkeitskomponenten  $u_{P,z}$  des sinkenden Partikelpaares (*durchgezogene Linien*). Aufgrund der wirkenden Gravitation beschleunigen beide Partikel zu Beginn der Simulation aus ihrer Ruhelage (siehe Abbildung 5.9a). Während das führende Partikel nach unten sinkt, generiert es in seinem Nachlauf eine Welle mit geringerer Druckverteilung. Da sich das nachlaufende Partikel in dieser Welle bewegt, erfährt es im Vergleich zu dem führenden Partikel einen geringeren Strömungswiderstand und beschleunigt demzufolge schneller (siehe  $0 \leq t/\tau_P < 2,2$  in Abbildung 5.8). Diese Phase wird als Annäherung (engl. Drafting) bezeichnet.

Infolge der höheren Sinkgeschwindigkeit des nachlaufenden Partikels kollidieren beide Partikel miteinander, wobei das führende Teilchen vom nachlaufenden Partikel durch häufige Kontakte vorangetrieben wird (Abbildung 5.8:  $t/\tau_P = 2,3$ ). Abbildung 5.9b veranschaulicht das auch als „Kissing“ bezeichnete Stadium der Sedimentation anhand einer Momentaufnahme des Konturplots der Fluidgeschwindigkeit. In dieser Phase bilden beide Partikel eine Dublette mit der Mittelachse in Hauptrichtung ihrer Bewegung, während sie mit nahezu gleicher Geschwindigkeit weitersinken. Infolge von Symmetriebrechungen wie fluktuierende Wellen ist dieser Zustand jedoch instabil, wodurch die Dublette nach einer finiten Zeit aufbricht und das Partikelpaar beginnt zu taumeln (engl. Tumbling). Ab  $t/\tau_P > 2,4$  induziert die taumelnde Bewegung der Partikel eine Anisotropie in das Strömungsfeld, sodass beide Partikel beginnen, sich voneinander zu separieren (siehe Abbildung 5.9c). Im weiteren Verlauf der



**Abb. 5.9.** Momentaufnahmen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes im Umfeld des sedimentierenden Partikelpaares während (a) der Annäherung ( $t/\tau_P = 0,7$ ), (b) häufig wechselseitiger Kollisionen ( $t/\tau_P = 2,3$ ) und (c) taumelnder Bewegung ( $t/\tau_P = 3,5$ ). Der Betrag der Fluidgeschwindigkeit  $|\mathbf{u}|$  ist mittels ungestörter stationärer Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  eines Einzelpartikels normiert. Schnitt durch das Zentrum des Strömungsgebiets.

Sedimentation tauschen die Partikel miteinander ihre Positionen und der gesamte DKT-Prozess beginnt von Neuem (Zhang & Prosperetti 2012).

Neben den vorliegenden LBM basierten Sinkgeschwindigkeiten beinhaltet Abbildung 5.8 weitere Simulationsdaten, die auf der Fiktiven-Domain-Methode (FDM) beruhen und aus Glowinski *et al.* (2001), *gestrichelte Linien*, und Sharma & Patankar (2005), *Strich-Punkt-Linien*, entnommen wurden. Demnach beschleunigen die Partikelpaare im frühen Stadium der Annäherungsphase gleichermaßen. Anschließend folgen die mittels LBM (vorliegende Studie) und FDM (Sharma & Patankar 2005) berechneten Sinkgeschwindigkeiten des führenden Partikels ab  $t/\tau_P > 0,4$  einem nahezu identischen Kurvenverlauf. Demgegenüber beschleunigt das nachlaufende Partikel in der LBM deutlich langsamer als in den FDM basierten Simulationen. Dieses Phänomen wurde bereits im vorangegangenen Kapitel 5.2.3 bei größeren Partikel-Reynolds-Zahlen beobachtet. Wie zuvor diskutiert, sollte die Extrapolation von Fluideigenschaften bei der Reinitialisierung neu entstandener Fluidknoten hinter einem sich bewegenden Partikel, insbesondere für  $Re_P \gg 10$ , verbessert werden. Dessen ungeachtet erreichen die drei nachlaufenden Partikel gemäß Abbildung 5.8 eine vergleichbare, maximale Sinkgeschwindigkeit von  $u_{Pz}/u_P^S \approx 1,2$ .

Die abweichende Beschleunigung der nachlaufenden Partikel führt im weiteren Verlauf der Sedimentation zu einer zeitlichen Verzögerung der Partikel-Partikel-Kollisionen mit einer maximalen Abweichung von  $t/\tau_P = 21,7\%$ . Abbildung 5.8 folgend treten Partikelkontakte erstmalig bei  $t/\tau_P = 1,8$  (*gestrichelte Linie*),  $2,1$  (*Strich-Punkt-Linie*) und  $2,3$  (*durchgezogene Linie*) auf. Zum Zeitpunkt der Kollisionen besitzen die Partikelpaare der betrachteten Testfälle trotz zeitlicher Verzögerung eine vergleichbare Sinkgeschwindigkeit. Die maximale Abweichung beträgt  $u_{Pz}/u_P^S = 8,9\%$ . Im Vergleich zu Glowinski *et al.* (2001) beginnen die Partikel in der vorliegenden Studie wie auch in den Simulationen von Sharma & Patankar (2005) deutlich früher ihre Sinkgeschwindigkeiten anzupassen. Diese Form der Annäherung scheint aus anwendungsorientiertem Gesichtspunkt mit Blick auf die wirkende fluiddynamische Wechselwirkung zwischen den Partikeloberflächen jedoch realistischer.

Im Anschluss an die Kollisionsphase lässt sich anhand der in Abbildung 5.8 dargestellten Verläufe von  $u_{Pz}$  ein Taumeln der Partikel in allen drei betrachteten Testfällen erkennen. Allerdings weisen die Sinkgeschwindigkeiten der Partikel in der letzten Phase des DKT-Prozesses signifikante Unterschiede in ihrem zeitlichen Verlauf auf. Wie zuvor diskutiert, ist die Entstehung der Taumelbewegung sowohl von Symmetriebrechungen als auch von den angewandten Anfangs- und Randbedingungen abhängig. Aufgrund dieser Imponderabilitäten wird eine exakte Übereinstimmung der Geschwindigkeitsverläufe daher nicht erwartet.

In den vorliegenden Simulationen deckt sich die Diskretisierung des numerischen Rechengitters mit den Vorgaben von Glowinski *et al.* (2001) und Sharma & Patankar (2005). Die im Wesentlichen gute Übereinstimmung von FDM und LBM weist demnach auf eine korrekte Modellierung der Partikelbewegung unter Berücksichtigung der fluiddynamischen Wechselwirkung im Nahbereich sich annähernder Partikel in der Lattice-Boltzmann-Methode hin. Dies impliziert, dass der LBM basierte Ansatz für die Berechnung strömungsinduzierter Partikelkräfte auch für Spaltabstände unterhalb der Auflösungsgrenze des Rechengitters zu physikalisch zuverlässigen Ergebnissen führt.

## 5.4 Annäherung von Partikeln in Scherströmungen

Mit Hilfe des letzten Testfalls wird die Bewegung sich nähernder Partikel untersucht, um den Einfluss viskoser Kräfte auf die kurzreichweitige fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Partikeln kurz vor ihrer Kollision zu bewerten. Zu diesem Zweck wird der strömungsinduzierte Transport zweier sphärischer Partikel in einer ebenen Scherströmung analysiert. Die Partikel besitzen anfänglich einen relativen Versatz zueinander, sodass sie sich zu Beginn ihrer Bewegung auf Kollisionskurs befinden.

### 5.4.1 Numerische Konfiguration

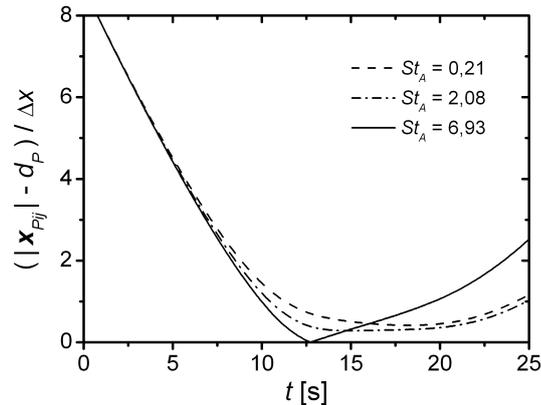
Als Rechengebiet dient ein horizontaler Kanal mit rechtwinkligem Querschnitt von  $5 d_P \times 5 d_P$  und einer räumlichen Ausdehnung von  $10 d_P$ . Die Fluiddomäne ist mittels  $60 \times 60$  Gitterzellen in Querrichtung und 120 Gitterzellen in Längsrichtung diskretisiert. Neben gegenüberliegenden Einlass- und Auslassrandbedingungen als horizontale Berandungen, wird die Scherströmung durch Symmetrierandbedingungen in der Tiefe, einer feststehenden Wand an der Unterseite und einer künstlich bewegten Wand an der Oberseite des Kanals räumlich begrenzt. Die Geschwindigkeit der bewegten Wand wird mit der anfänglich aufgeprägten Geschwindigkeit des nächst benachbarten Fluidknotens initialisiert. Die nodale Fluidgeschwindigkeit in den Gitterzellen des Einlasses sowie der Fluiddomäne wird mittels:

$$\mathbf{u}(x_z) = \dot{\gamma} x_z \mathbf{e}_x \quad (5.5)$$

definiert, in der die Scherrate der Strömung mit  $\dot{\gamma} = 0,1 \text{ 1/s}$  vorgegeben ist. Der Ursprung der  $z$ -Koordinate liegt in der vertikalen Mitte des Strömungskanals. Unter Vernachlässigung der Gravitation bewegen sich die Partikel in einer Flüssigkeit mit der Dichte von  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  und der dynamischen Viskosität von  $\eta = 1,0 \times 10^{-3} \text{ Ns/m}^2$ . Zu Beginn der Simulationen entspricht die Partikelgeschwindigkeit gleich der lokalen, ungestörten Geschwindigkeit des Fluids an der Position der Partikelzentren. Die Partikelzentren  $\mathbf{x}_P$  werden in der Nähe der Einlassbegrenzung mit relativem Versatz in Hauptströmungsrichtung sowie quer zur Hauptströmung in vertikaler Richtung wie folgt zueinander positioniert:  $\mathbf{x}_{P\alpha} = (3,0 d_P, 2,5 d_P, 2,07 d_P)$  und  $\mathbf{x}_{P\beta} = (1,5 d_P, 2,5 d_P, 2,93 d_P)$ . Der Index  $\alpha$  repräsentiert das langsamere, führende Partikel, welches an der unteren Position injiziert wird, Index  $\beta$  hingegen das schnellere, nachlaufende Partikel, dessen Injektion an höherer Position erfolgt. Ohne Berücksichtigung der fluiddynamischen Wechselwirkung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase, die auch als Ein-Wege-Kopplung bezeichnet wird, führen die initialen Positionen der Partikel nach Gleichung (4.15) stromabwärts zu einem fiktiven Kollisionswinkel von  $\theta_{\alpha\beta} = 60^\circ$ . Die Oberfläche der gleichgroßen Feststoffkugeln wird mit  $d_P/\Delta x = 12$  Gitterzellen numerisch diskretisiert. Die Partikel-Reynolds-Zahl bezogen auf die Fluidscherung beträgt nach Gleichung (2.43) mit  $|\boldsymbol{\omega}_{F@P}| = \dot{\gamma}/2$  gleich  $Re_S = 7,2$ .

Um das Bewegungsverhalten der Partikel zu verändern, wird die Trägheit der Partikel anhand ihrer Dichte  $\rho_P$  zwischen  $[300 \text{ kg/m}^3; 10000 \text{ kg/m}^3]$  sukzessive variiert. Innerhalb einer Simulation nimmt  $\rho_P$  für beide Partikel den gleichen Wert an. Die resultierende Partikel-Stokes-Zahl  $St_A$ , die sich auf die relative Advektion der Partikel  $\alpha$  und  $\beta$  bezieht, variiert im Bereich  $[0,21; 6,93]$  und berechnet sich mit:

$$St_A = \frac{\tau_P u_{P\alpha\beta}}{d_P} \quad (5.6)$$

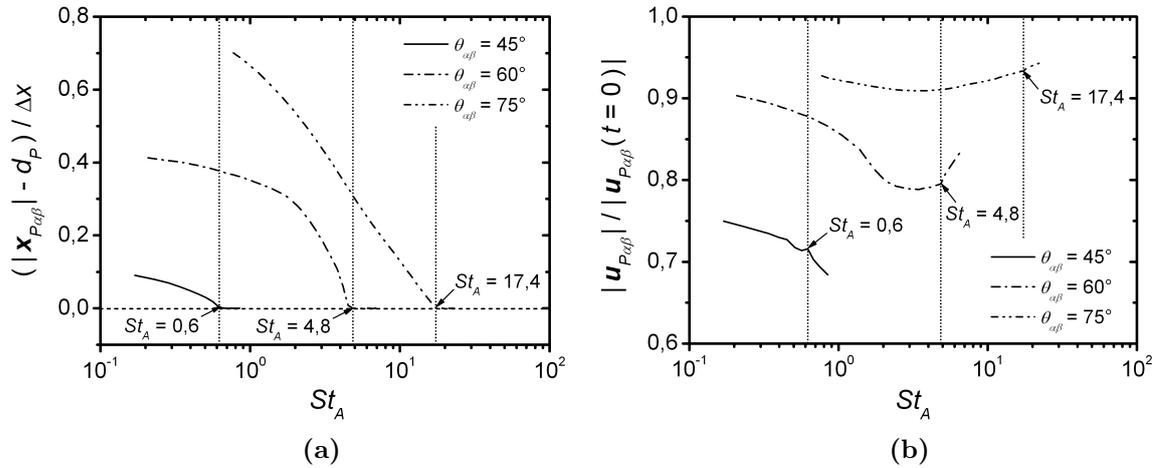


**Abb. 5.10.** Zeitliche Entwicklung des relativen Abstandes zwischen zwei sich in einer ebenen Scherströmung annähernden Partikeln  $\alpha$  und  $\beta$  als Funktion der advektiven Partikel-Stokes-Zahl  $St_A$ . Die Differenz  $(|\mathbf{x}_{P\alpha\beta}| - d_P)$  entspricht dem Abstand zwischen beiden Partikeloberflächen und ist mit Hilfe der räumlichen Diskretisierung  $\Delta x$  normiert. Unter Annahme einer Ein-Wege-Kopplung beträgt der fiktive Kollisionswinkel in allen drei Fällen gleich  $\theta_{\alpha\beta} = 60^\circ$ .

worin  $\tau_P = \rho_P d_P^2 / (18 \eta)$  die Partikelrelaxationszeit ohne eine Korrektur des Strömungswiderstandes kennzeichnet. Der Parameter  $u_{P\alpha\beta}$  entspricht dem Betrag der Relativgeschwindigkeit zwischen den Partikeln  $\alpha$  und  $\beta$  zum Zeitpunkt ihrer Initialisierung. Um zu gewährleisten, dass die Verdrängung des Fluids während der Annäherung der Partikeloberflächen mittels zeitlicher Diskretisierung detailliert erfasst wird, beträgt der Zeitschritt beider Phasen unter Berücksichtigung der größtmöglichen Partikeldichte gleich  $\Delta t / \tau_P = 4,8 \times 10^{-5}$ . Analog zu Kapitel 5.3 werden die Koeffizienten des Kollisionsoperators auf  $c_R = 1,0$  und  $\mu_s = \mu_d = 0,0$  gesetzt. Dies entspricht einem ideal elastischen Stoß.

#### 5.4.2 Einfluss viskoser Fluidkräfte

Abbildung 5.10 stellt die zeitliche Entwicklung des relativen Abstandes zwischen den sich annähernden Partikeln in Abhängigkeit von der advektiven Partikel-Stokes-Zahl dar. Die Bewegung beider Partikel wird demnach deutlich durch die Trägheit der Teilchen und somit durch  $St_A$  beeinflusst. Wie Abbildung 5.10 zeigt, erreichen lediglich träge Partikel, wie  $St_A = 6,9$  bei  $t = 12,7$  s (*durchgezogene Linie*), einen Relativabstand von Null. Folglich sind die viskosen Kräfte, die durch die Verdrängung des im Spalt zwischen den Partikeloberflächen befindlichen Fluids induziert werden, in diesem Fall nicht ausreichend, um einer Kollision beider Partikel entgegenzuwirken. Infolge der Ablenkung beider Partikel vergrößert sich der Abstand nach der Kollision gegenüber den Vergleichskurven ohne Kollision deutlich.



**Abb. 5.11.** Einfluss der advektiven Partikel-Stokes-Zahl  $St_A$  auf (a) den kleinsten Partikelabstand und (b) der zu diesem Zeitpunkt gemessenen Relativgeschwindigkeit zwischen den sich in einer ebenen Scherströmung bewegendenden Partikeln  $\alpha$  und  $\beta$  in Abhängigkeit des fiktiven Kollisionswinkels  $\theta_{\alpha\beta}$ . Die Differenz  $(|\mathbf{x}_{P_{\alpha\beta}}| - d_P)$  entspricht dem Abstand zwischen den beiden Partikeloberflächen und ist mittels räumlicher Diskretisierung  $\Delta x$  normiert. Die Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{P_{\alpha\beta}}$  zum Zeitpunkt des kleinsten Abstandes ist durch die zu Beginn der Simulation initialisierte Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{P_{\alpha\beta}}(t=0)$  normalisiert. Unter Annahme einer Ein-Wege-Kopplung betragen die fiktiven Kollisionswinkel gleich  $\theta_{\alpha\beta} = 45^\circ$  (*durchgezogene Linien*),  $\theta_{\alpha\beta} = 60^\circ$  (*Strich-Punkt-Linien*) und  $\theta_{\alpha\beta} = 75^\circ$  (*Strich-Punkt-Punkt-Linien*). Die vertikal *gepunkteten Linien* kennzeichnen den jeweils erstmaligen Kontakt beider Partikel.

Demgegenüber werden weniger träge Partikel von ihrem ursprünglichen Kollisionspfad aufgrund der Verdrängung des im zunehmend kleiner werdendem Spalt befindlichen Fluids abgelenkt (siehe Kurvenverlauf bei  $St_A = 0,2$  und  $2,1$  in Abbildung 5.10). Gleichwohl fällt bei diesen Konfigurationen der minimale Abstand zwischen den Partikeloberflächen unter die Diskretisierungsgrenze  $\Delta x$  des Fluids, zum Beispiel  $(|\mathbf{x}_{P_{\alpha\beta}}| - d_P) = 0,4 \Delta x$  bei  $t = 18,2$  s (*gestrichelte Linie*) und  $(|\mathbf{x}_{P_{\alpha\beta}}| - d_P) = 0,3 \Delta x$  bei  $t = 14,9$  s (*Strich-Punkt-Linie*). In den Fällen  $St_A = 0,2$  und  $2,1$  überholt das nachlaufende Partikel nach der Minimalnäherung das zuvor führende Partikel, wobei beide Teilchen ihre ursprüngliche Position in der aufgeprägten Scherströmung verlassen.

Die Trägheit der Partikel ist allerdings nicht allein ausschlaggebend, ob Partikel während ihrer Annäherung von ihrem ursprünglichen Kollisionspfad aufgrund der wirkenden Fluidkräfte abgelenkt werden. So ist neben der Viskosität des Fluids die relative Ausgangsposition der Partikel ebenfalls entscheidend für die weitere Bewegung der sich nähernden Teilchen. Abbildung 5.11a verdeutlicht den Einfluss des anfänglichen Versatzes beider Partikel auf den kleinsten während einer Simulation

gemessenen Partikelabstand als Funktion des fiktiven Kollisionswinkels  $\theta_{\alpha\beta}$ . Demnach verschiebt sich der erstmalige Kontakt von Partikeln mit größer werdendem  $\theta_{\alpha\beta}$  zu höheren advektiven Partikel-Stokes-Zahlen:  $St_A = 0,6$  bei  $\theta_{\alpha\beta} = 45^\circ$ ,  $St_A = 4,8$  bei  $\theta_{\alpha\beta} = 60^\circ$  und  $St_A = 17,4$  bei  $\theta_{\alpha\beta} = 75^\circ$ .

Wie Abbildung 5.11b zeigt, bewirken die viskosen Kräfte, die zum Zeitpunkt der in Abbildung 5.11a dargestellten Minimalabstände gemessen wurden, eine deutliche Reduzierung der anfänglich aufgeprägten Relativgeschwindigkeiten. So verringert sich  $\mathbf{u}_{P\alpha\beta}$  im Fall kleiner  $\theta_{\alpha\beta}$  um bis zu 28 %. Demnach werden die geringsten Relativgeschwindigkeiten erreicht, noch bevor die Partikel erstmalig miteinander kollidieren.

Anhand dieser Betrachtung zeigt sich, dass größere  $\theta_{\alpha\beta}$  den Einfluss viskoser Kräfte im Spalt zwischen sich nähernden Partikeln verstärken und somit die Ablenkung der Partikelbahnen ohne direkten Kontakt der Teilchen wahrscheinlicher wird. Darüber hinaus haben in den vorliegenden Simulationen viskose Kräfte einen zusätzlichen Effekt auf die Bewegung sich nähernder Partikel. Demnach weichen die in Abbildung 5.10 dargestellten Kurven bereits bei einem Partikelabstand von  $5 \Delta x$  voneinander ab. Die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen kollidierenden Partikeln sollte folglich in jenen Fällen Berücksichtigung finden, in denen Elementarprozesse wie die Kollision und Agglomeration von Teilchen die wesentliche Charakteristik der zu betrachtenden Zweiphasenströmung bestimmen. Der Einfluss viskoser Kräfte in Verbindung mit interpartikulären Wechselwirkungen, wie die molekulare Anziehung und elektrostatische Abstoßung von Primärteilchen, erfordert gesonderte Aufmerksamkeit und ist daher nicht Bestandteil dieser Arbeit.

Unter Berücksichtigung der in diesem Kapitel untersuchten Testfälle wird zusammenfassend ersichtlich, dass die im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelten und in den LBM-Strömungslöser implementierten Modelle zur Beschreibung des Bewegungs- und Kollisionsverhaltens von Partikeln mit numerisch aufgelösten Oberflächen zu Ergebnissen führen, die mit in der Literatur verfügbaren Mess- und Simulationsdaten vergleichbar sind. Um die Anwendbarkeit des LBM-Programms auf Systeme mit mehreren Primärpartikeln und Agglomeraten zu demonstrieren, wird im folgenden Kapitel der Transport sowie das Wachstum und die Morphologie agglomerierter Partikel analysiert.

## 6 Transport, Wachstum und Morphologie von Agglomeraten

In diesem Kapitel wird die Agglomeration und der Transport von Primärpartikeln und Agglomeraten mit numerisch aufgelösten Oberflächen in verschiedenen laminaren Strömungen unter Quantifizierung der resultierenden Agglomeratmorphologien analysiert. Zu diesem Zweck wird die Agglomeration in Clustern mit mono- und polydispersen, sphärischen Primärpartikeln direkt numerisch berechnet. Um die LBM basierte Behandlung strömungsinduzierter Partikelkräfte für Spaltweiten zwischen den Primärpartikeln, die unterhalb der Auflösungsgrenze des numerischen Rechengitters liegen, zu evaluieren, wird zunächst im folgenden Abschnitt die Umströmung im Raum fixierter Agglomerate mit Finite-Element-Simulationen verglichen. Die darüber hinaus angenommenen Strömungskonfigurationen berücksichtigen zum einen in Abschnitt 6.2 die Sedimentation von Teilchen in einem ruhenden Fluid, zum anderen in Abschnitt 6.3 die Bewegung von Partikeln in ebenen Scherschichten, in denen strömungsinduzierte Partikel-Partikel-Wechselwirkungen vermehrt erwartet werden.

### 6.1 Fluiddynamische Wechselwirkung in Agglomeraten

In Ergänzung zu der in Kapitel 5.3 diskutierten Sedimentation von Partikelpaaren wird mit Hilfe des folgenden Abschnitts das im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Verfahren zur Rekonstruktion fehlender Fluidverteilungsfunktionen für Spaltabstände unterhalb der Auflösungsgrenze des Rechengitters auch für komplexe Geometrien mit mehrfach gekrümmten Oberflächen evaluiert. Hierzu wird die Umströmung verschiedenartig strukturierter Agglomerate in schleichenden Scherströmungen analysiert. Zu diesem Zweck wurde in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Computergestützte Analyse Technischer Systeme, RWTH Aachen und dem Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik, TU München ein Vergleich verschiedener Modellierungsansätze durchgeführt. Neben der in dieser Arbeit vorgestellten Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) zählen hierzu eine ebenfalls hochauflösende Finite-Element-Methode (FEM) sowie eine auf Massepunkte basierende Stokessche-Dynamik (Schlauch *et al.* 2013).

Um die mittels LBM ermittelten Strömungsfelder und Partikelkräfte bewerten zu können, werden die resultierenden Ergebnisse mit denen der FEM verglichen. Im Gegensatz zur LBM löst die FEM die diskrete Form der Stokes-Gleichungen (Behr & Tezduyar 1994). Zudem werden die strömungsinduzierten Partikelkräfte und -momente

mit Hilfe von Oberflächenintegralen des Spannungstensors evaluiert. Weiterführende Details zur angewandten FEM werden in Becker *et al.* (2009) beschrieben.

### 6.1.1 Numerische Konfiguration

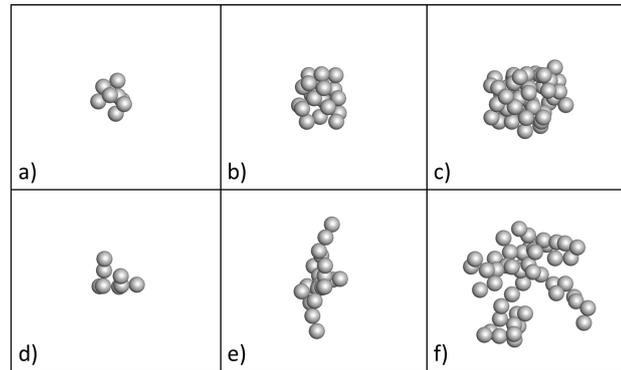
Sowohl in der LBM als auch in der FEM wird zu Beginn der Simulationen ein vordefiniertes Agglomerat in den würfelförmigen Strömungskanal mit den Kantenlängen  $81,63 d_P$  injiziert, worin  $d_P$  den Durchmesser der gleich großen Primärpartikel kennzeichnet. Das Massenzentrum des Agglomerats stimmt in jedem der untersuchten Konfigurationen mit dem geometrischen Mittelpunkt der Fluiddomäne überein. Die Scherströmung wird durch eine in positive x-Richtung bewegte, obere Wand und eine mit gleichem Geschwindigkeitsbetrag in negative x-Richtung bewegte, untere Wand künstlich aufgeprägt. Neben den in x-Richtung gegenüberliegenden Einlass- und Auslassöffnungen wird das Strömungsgebiet durch ebenfalls künstlich bewegte Seitenwände begrenzt. Der anhand von Voruntersuchungen ermittelte Abstand zwischen Agglomerat und angrenzenden Wänden ist groß genug, um Einflüsse der Domainbegrenzung auf die Strömung um das Agglomerat zu vernachlässigen (Schlauch *et al.* 2013).

Die Geschwindigkeit auf den Wandknoten wird durch die anfänglich aufgeprägte Geschwindigkeit des Fluids an der Position des zum jeweiligen Wandknoten nächst gelegenen Fluidknotens initialisiert. Die Geschwindigkeit  $\mathbf{u}(x_z)$  am Strömungseinlass und in der Fluiddomäne wird mittels Gleichung (5.5) initialisiert und am Strömungseinlass als konstant angenommen. Der Ursprung der z-Koordinate liegt in der vertikalen Mitte des Strömungskanals. Die Lösung der Stokes-Gleichungen in der FEM bedingt eine Reynolds-Zahl von nahezu Null. Aus diesem Grund nimmt die Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  in der schleichenden Scherströmung, die durch:

$$Re_S = \frac{\dot{\gamma} d_P^2 \rho}{2 \eta} \quad (6.1)$$

definiert ist, einen Wert von  $5,4 \times 10^{-5}$  an. Darüber hinaus wird das Fluid anhand der dynamischen Viskosität und Dichte,  $\eta = 1,0 \times 10^{-3}$  Ns/m<sup>2</sup> und  $\rho = 1000$  kg/m<sup>3</sup>, sowie der Scherrate von  $\dot{\gamma} = 50$  1/s charakterisiert.

Für die Untersuchungen werden zwei Agglomerattypen herangezogen, die sich im Wesentlichen durch den Grad ihrer Kompaktheit unterscheiden. Die erste Gruppe beruht auf einer diffusionslimitierten Agglomeration von Primärpartikeln mit Clustern nach Witten & Sander (1983), aus denen offen strukturierte Agglomerate hervorgehen. Die zweite Gruppe wurde mit Hilfe eines von Becker *et al.* (2009) und Seto *et al.* (2011) angepassten Diffusionsprozesses generiert, wodurch eine deutlich größere Anzahl an Primärpartikeln in das Cluster diffundieren und dadurch kompaktere Agglomeratstrukturen entstehen. Abbildung 6.1 zeigt typische offene und kompakte

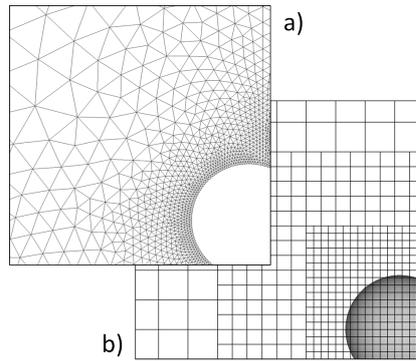


**Abb. 6.1.** Typische kompakte (*obere Reihe*) und offene Strukturen (*untere Reihe*) der für diese Studie generierten Agglomerate bestehend aus 8, 20 und 50 gleich großen Primärpartikeln (von links nach rechts).

Strukturen der für diese Studie generierten Agglomerate, die sich aus 8, 20 und 50 gleich großen Primärpartikeln zusammensetzen. Zu Beginn der Simulationen werden die starren Agglomerate jeweils im Zentrum des Strömungskanal injiziert und in ihrer Position fixiert. Da die agglomerierten Primärpartikel keine Relativbewegung zueinander erfahren, werden zusätzliche Rückstellkräfte etwa durch Flüssigkeitsfilme zwischen den Teilchen nicht berücksichtigt.

Wie Abbildung 6.2b zeigt, basiert die Diskretisierung des Rechengebiets in der LBM auf einem aus Würfeln bestehenden strukturierten Gitter, wohingegen für die FEM gemäß Abbildung 6.2a ein vierflächiges Gitter Anwendung findet, welches anhand eines Voronoi-Delaunay-Algorithmus generiert wird (Becker *et al.* 2009). Sowohl LBM als auch FEM nutzen im Bereich der Primärpartikel lokale Gitterverfeinerungen, um die trägheitsbehaftete Fluidströmung im Bereich der Agglomeratstrukturen möglichst genau zu erfassen. Im Fall der LBM wird das Rechengitter durch vier Verfeinerungsebenen stufenweise präzisiert, in dem sich die anfängliche Diskretisierung  $\Delta x$  auf  $\Delta x/\Delta x_{\min} = 16$  reduziert (siehe Abbildung 6.2b). Auf der feinsten Gitterebene führt dies zu einer räumlichen Auflösung der Primärpartikel von  $d_P/\Delta x_{\min} = 14,7$ . Unter Berücksichtigung aller Verfeinerungsebenen wird das Rechengebiet durch  $1,44 \times 10^6$  Gitterzellen räumlich diskretisiert. Weiterführende Beschreibungen zur angewandten Multiskalen-Lattice-Boltzmann-Methode sind Dietzel & Sommerfeld (2010) und Teike *et al.* (2012) zu entnehmen.

Während in der LBM die gekrümmte Oberfläche der Primärpartikel mit Hilfe einer Bounce-Back-Randbedingung modelliert wird, nutzt die FEM ein tetraedrisches Gitter zur Diskretisierung der Phasengrenzflächen. Unter Verwendung dieses vierflächigen Gitters werden die Oberflächenintegrale des Spannungstensors evaluiert und die



**Abb. 6.2.** Schematische Darstellung des diskretisierten Rechengebiets bei (a) Finite-Element-Methode (links) und (b) Lattice-Boltzmann-Methode (rechts) unter Berücksichtigung lokaler Gitterverfeinerungen im Bereich der Primärpartikel.

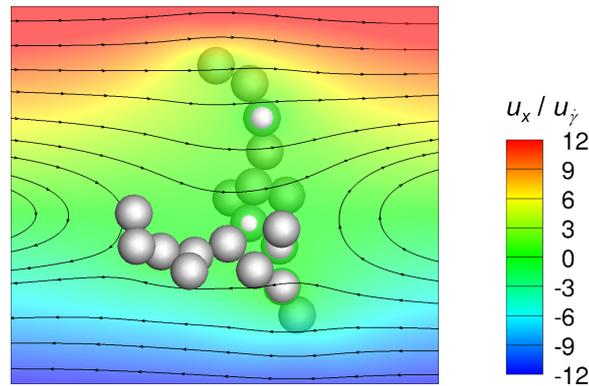
strömungsinduzierten Partikelkräfte und -momente berechnet. Um die Feststoff-Fluid-Phasengrenzen mittels FEM-Gitter vollständig diskretisieren zu können, ist ein Spalt zwischen den Oberflächen der Primärpartikel von  $2,0 \times 10^{-4} d_P$  erforderlich. Trotz Verwendung lokaler Gitterverfeinerungen in der LBM ist die Auflösung des Fluids durch die feinste Gitterweite  $\Delta x_{\min}$  zu gering, um das Fluid in dem Spalt zwischen den Primärpartikeln ohne Modellierung vollständig zu diskretisieren. Bezogen auf die zu ermittelnden Partikelkräfte im Agglomerat ist der numerische Fehler der FEM daher kleiner als bei der LBM.

### 6.1.2 Einfluss der Partikel auf das Strömungsfeld

Zunächst werden die numerischen Lösungen der mittels LBM und FEM berechneten Strömungsfelder am Beispiel der Umströmung des offen strukturierten Agglomerats aus Abbildung 6.1e miteinander verglichen. Abbildung 6.3 zeigt das LBM basierte Konturdiagramm der Strömungsgeschwindigkeit sowie die Stromlinien des Fluids in der Umgebung des aus 20 Primärpartikeln bestehenden Agglomerats. Die Pfeile an den Stromlinien kennzeichnen die Richtung der Scherung. Zur Normierung der x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit  $u_x$  wird die ungestörte Fluidgeschwindigkeit  $u_\gamma$  an der Position eines sphärischen Teilchens herangezogen, die im Fall von Fluidscherung wie folgt definiert ist:

$$u_\gamma = \frac{d_P}{2} \dot{\gamma} \quad (6.2)$$

Infolge der fluiddynamischen Wechselwirkung zwischen Fluid und Agglomerat weisen die Stromlinien eine erhöhte Krümmung im Umfeld der Primärpartikel auf



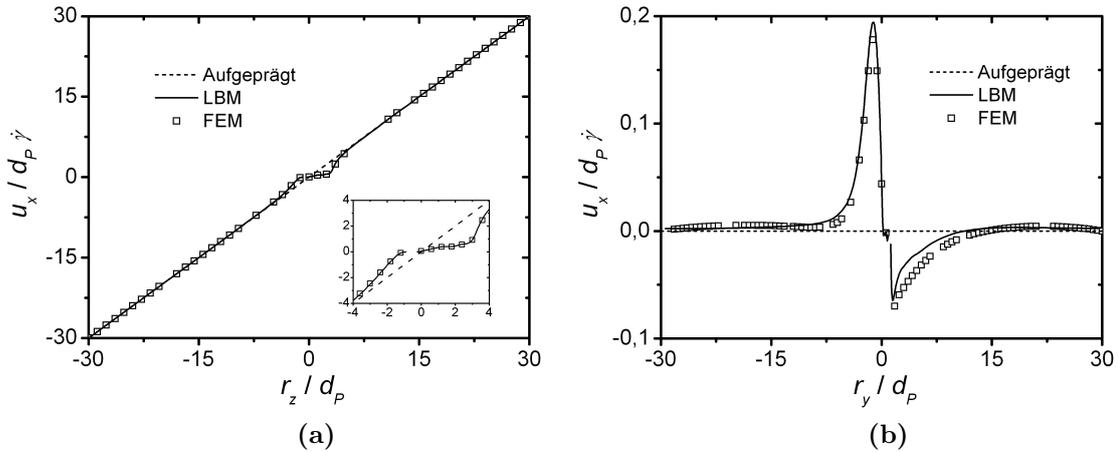
**Abb. 6.3.** Konturdiagramm der Strömungsgeschwindigkeit mit Stromlinien des Fluids im Umfeld des aus 20 Primärpartikeln bestehenden offen strukturierten Agglomerats aus Abbildung 6.1e. Die x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit  $u_x$  ist anhand der ungestörten Fluidgeschwindigkeit  $u_\gamma$  normiert. Vergrößerter Schnitt durch das Zentrum des Strömungsgebiets.

(siehe Abbildung 6.3). Darüber hinaus existieren im Zentrum des Kanals Bereiche, in denen Fluidteilchen mit der Partikeloberfläche kollidieren und infolgedessen mit geringer Geschwindigkeit in die jeweils entgegengesetzte Scherrichtung strömen.

Um die aus LBM und FEM resultierenden Strömungsfelder direkt miteinander vergleichen zu können, wird  $u_x$  senkrecht zur Hauptströmungsrichtung entlang der beiden Hauptsichtachsen  $r_y$  und  $r_z$  extrahiert und gemeinsam mit der ungestörten Geschwindigkeit der initial aufgeprägten Fluidscherung aufgetragen. Wie Abbildung 6.4 zeigt, wird die Fluidströmung vorwiegend im näheren Umfeld des Agglomerats zwischen  $-5 \leq r_z/d_P \leq 5$  und  $-15 \leq r_y/d_P \leq 15$  gestört, während sie im übrigen Teil der Fluiddomäne dem induzierten Geschwindigkeitsprofil (*gestrichelte Linie*) folgt. In diesem Zusammenhang markieren Unterbrechungen im Kurvenverlauf der LBM- (*durchgezogene Linie*) und FEM-Daten (*offene Quadrate*) aufgelöste Primärpartikel etwa bei  $r_z/d_P \approx -0,5$  (Abbildung 6.4a). Geringfügige Unterschiede im Verlauf von  $u_x$  sind auf abweichende Implementierungen der Auslassrandbedingung und deren Rückwirkung auf das gesamte Strömungsfeld zurückzuführen (Schlauch *et al.* 2013). Gleichwohl zeigen beide Berechnungsansätze eine gute Übereinstimmung der in Abbildung 6.4 dargestellten Strömungsgeschwindigkeiten.

### 6.1.3 Widerstandskräfte und Drehmomente auf Partikel

In Ergänzung zu den auf Grundlage von LBM und FEM berechneten Fluidgeschwindigkeiten werden im Folgenden die auf die Partikel wirkenden Widerstandskräfte und Drehmomente gegenübergestellt. Abbildung 6.5 zeigt die Verteilung der Widerstandskraft  $F_x$  zu den in den Abbildungen 6.1a-f dargestellten Agglomeraten in Abhängigkeit



**Abb. 6.4.** Vergleich der mittels Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), *durchgezogene Linie*, und Finite-Element-Methode (FEM), *offene Quadrate*, berechneten Strömungsgeschwindigkeit mit der ungestörten Geschwindigkeit der initial aufgeprägten Fluidscherung (*gestrichelte Linie*) im Umfeld des aus 20 Primärpartikeln bestehenden, offen strukturierten Agglomerats aus Abbildung 6.1e: Schnitt durch das Zentrum des Strömungsgebiets entlang der normierten (a) vertikalen z-Achse  $r_z$  und (b) horizontalen y-Achse  $r_y$  quer zur Hauptströmungsrichtung.

der Primärpartikelposition  $r_z$  in Richtung des Schergradienten. Die Partikelkraft wird nach Gleichung (2.60) durch Summierung aller lokalen Kräfte entlang der Partikeloberfläche berechnet. In Abbildung 6.5 ist  $F_x$  durch die Widerstandskraft  $F_{St}$  im Stokes-Bereich normiert, welche sich auf die ungestörte Schergeschwindigkeit  $u_{\dot{\gamma}}$  an der Position eines sphärischen Teilchens mit dem Durchmesser  $d_P$  bezieht:

$$F_{St} = 3 \pi \eta d_P u_{\dot{\gamma}} \quad (6.3)$$

Wie Abbildung 6.5 zeigt, sind in den äußeren Bereichen des Agglomerats aufgrund der betragsmäßig höheren Strömungsgeschwindigkeiten größere Widerstandskräfte als im Agglomeratzentrum zu verzeichnen, in dem  $u_x$  und infolgedessen  $F_x$  nahezu Null ist. Darüber hinaus korreliert die Verteilung der Widerstandskraft mit der zugrundeliegenden Geschwindigkeitsverteilung annähernd linear. Diese Abhängigkeit ist für kleine Agglomerate bestehend aus acht Primärpartikeln ungeachtet des betrachteten Strukturtyps am deutlichsten ausgeprägt (siehe Abbildung 6.5a-b). Mit steigender Primärpartikelanzahl nimmt diese Linearität stetig ab. Aufgrund der Abschirmung durch äußere und direkt benachbarte Primärpartikel korrelieren die Widerstandskräfte der inneren Teilchen nicht länger mit dem Verlauf der zugrundeliegenden Fluidgeschwindigkeit. In den vorliegenden Untersuchungen sind die Primärpartikel kompakt strukturierter Agglomerate zwischen  $-2 \leq r_z/d_P \leq 2$  positioniert, während sich die dendritischen Strukturen der offenen Agglomerate über einen Bereich von

$-5 \leq r_z/d_P \leq 4$  ausdehnen. Da der Abschirmungseffekt mit größer werdenden  $u_x$  an Bedeutung gewinnt, ist  $F_x$  an den äußeren Verästelungen offener Agglomerate partiellen Schwankungen unterworfen, wie  $r_z/d_P < -3,5$  in Abbildung 6.5f.

Ungeachtet dessen stimmen die mittels FEM und LBM berechneten Widerstandskräfte insbesondere im Bereich von  $-2 \leq r_z/d_P \leq 2$  gut überein. Gleichwohl sind an den äußeren Rändern der Agglomeratstrukturen geringfügige Divergenzen zu verzeichnen. Diese sind auf abweichende Strömungsgeschwindigkeiten zurückzuführen, die in einer unterschiedlichen Implementierung der Auslassrandbedingung und deren Rückkopplung auf das Strömungsfeld begründet liegen (Schlauch *et al.* 2013).

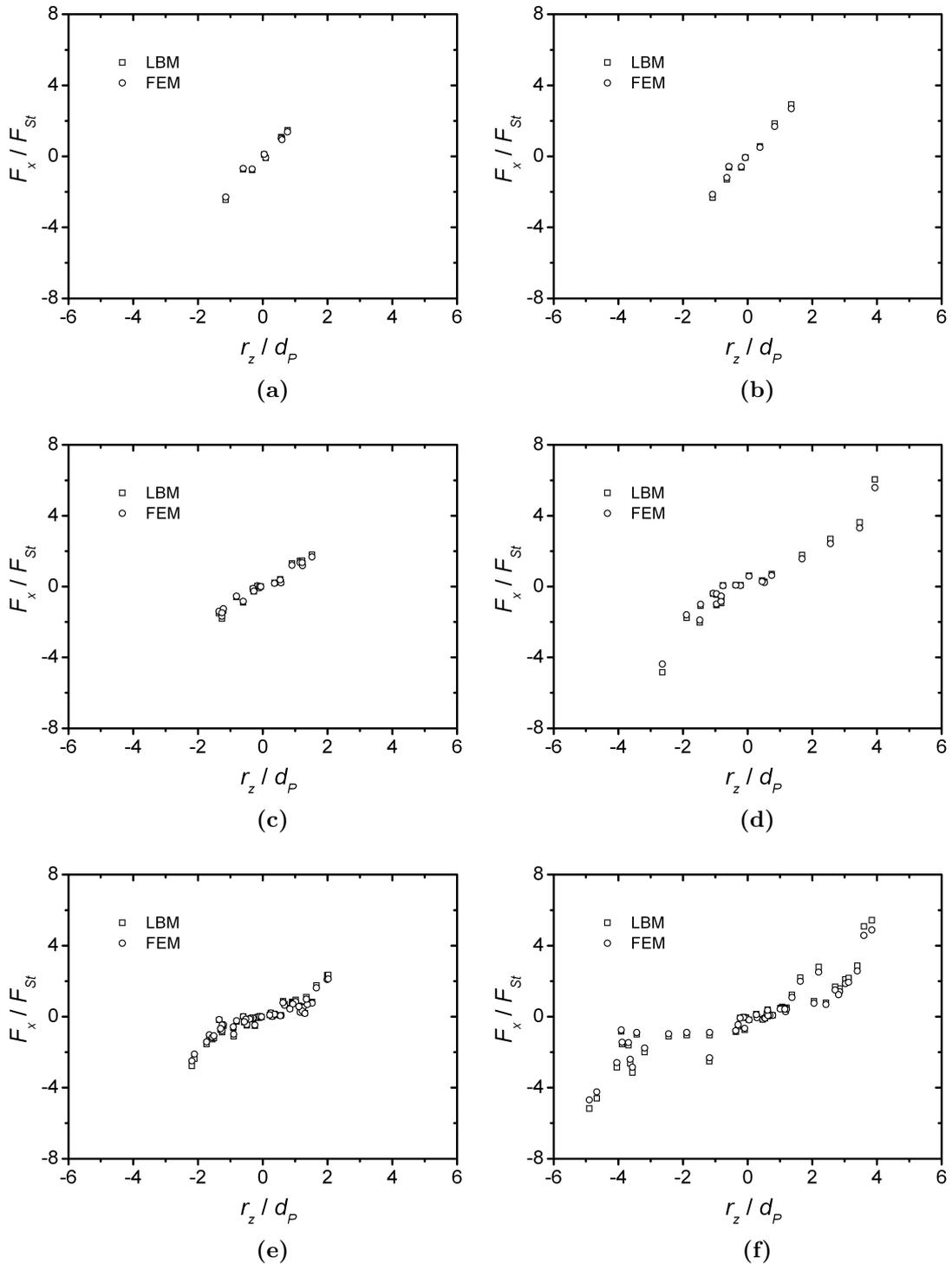
Unter Berücksichtigung der auf die einzelnen Primärpartikel wirkenden Kräfte  $\mathbf{F}^{(n)}$  und Drehmomente  $\mathbf{T}^{(n)}$  zeigt Abbildung 6.6 die y-Komponente des auf die Agglomerate wirkenden Gesamtdrehmoments, welche als Summe der jeweils angreifenden Kräfte und Drehmomente mit:

$$T_y = \sum_{n=1}^N \left( T_y^{(n)} + r_z^{(n)} F_x^{(n)} - r_x^{(n)} F_z^{(n)} \right), \quad N \in \{8, 20, 50\} \quad (6.4)$$

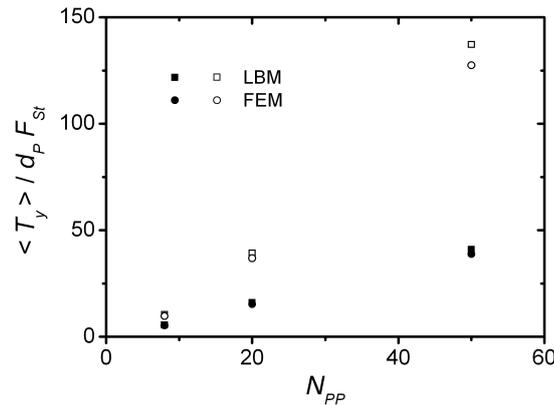
berechnet wird und den größten Anteil am Gesamtdrehmoment  $\mathbf{T}$  beiträgt. Zur Erhöhung der statistischen Sicherheit wurden die in Abbildung 6.6 gezeigten  $T_y$  über jeweils zehn Agglomerate gleicher Größe und gleichen Strukturtyps gemittelt. Der Operator  $\langle \cdot \rangle$  in Abbildung 6.6 kennzeichnet die zu diesem Zweck durchgeführte Ensemblemittelung. Die zur Berechnung von  $\langle T_y \rangle$  generierten Agglomerate sind in den Abbildungen A.2 und A.3 zusammengefasst (siehe Anhang A.3).

Erwartungsgemäß steigt das Gesamtdrehmoment mit steigender Anzahl agglomerierter Primärpartikel stetig an, wenngleich der Anstieg im Fall offener Agglomerate aufgrund der dendritischen Strukturen größer ist als bei den kompakten (siehe Abbildung 6.6). In Analogie zu den analysierten Widerstandskräften der einzelnen Primärpartikel ergeben sich insbesondere für offene Agglomerate mit  $N_{PP} \geq 20$  Abweichungen zwischen LBM und FEM von bis zu 7,1%, die wiederum auf eine unterschiedliche Implementierung der Auslassrandbedingung zurückzuführen sind (Schlauch *et al.* 2013). Demgegenüber stimmen die Gesamtdrehmomente der kompakt strukturierten Agglomerate für die drei untersuchten  $N_{PP}$  gemäß Abbildung 6.6 mit einer maximalen Abweichung von 5,1% besser überein.

Zusammenfassend zeigen die mittels LBM berechneten Strömungsfelder wie auch die auf die Partikel wirkenden Widerstandskräfte und Drehmomente hinreichend gute Übereinstimmungen mit den zum Vergleich herangezogenen FEM-Daten. Anhand der vorliegenden Ergebnisse lässt sich daher schlussfolgern, dass das neu entwickelte LBM-Verfahren zur Rekonstruktion fehlender Verteilungsfunktionen des Fluids für Spaltabstände unterhalb der Auflösungsgrenze des Rechengitters auch für Agglomerate zu richtigen Ergebnissen führt.



**Abb. 6.5.** Vergleich scherinduzierter Widerstandskräfte auf Primärpartikel in kompakten (*linke Spalte*) und offenen Agglomeraten (*rechte Spalte*), nach Abbildung 6.1, bestehend aus 8, 20 und 50 Primärpartikeln (*von oben nach unten*) unter Anwendung der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), *offene Quadrate*, und Finite-Element-Methode (FEM), *offene Kreise*. Die Widerstandskraft  $F_x$  ist mit Hilfe des Stokes-Widerstandes  $F_{St}$  normiert.



**Abb. 6.6.** Scherinduziertes Gesamtdrehmoment auf kompakte (*geschlossene Symbole*) und offene Agglomerate (*offene Symbole*) in Abhängigkeit der Anzahl  $N_{PP}$  agglomerierter Primärpartikel. *Quadratische Symbole* resultieren aus Berechnungen mit der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), *kreisrunde Symbole* aus Simulationen der Finite-Element-Methode (FEM). Das Gesamtdrehmoment  $\langle T_y \rangle$  ist mit Hilfe des Durchmessers  $d_P$  der Primärpartikel und des Stokes-Widerstandes  $F_{St}$  normiert.

## 6.2 Agglomeration sedimentierender Partikel

Neben der Analyse räumlich fixierter Agglomerate wird in den folgenden beiden Abschnitten die Anwendbarkeit des im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelten Agglomerationsmodells auf Zweiphasensysteme mit mehreren bewegten Partikeln demonstriert. Dieser Abschnitt stellt zunächst die Sedimentation eines aus 50 Primärpartikeln bestehenden Partikelclusters in ruhendem Fluid vor. In der Simulation bleiben kollidierende Teilchen stets aneinander haften. Agglomerierte Primärpartikel setzen nach dem Anlagerungsvorgang ihre Sedimentation als starre Struktur fort. Dieser Ansatz ermöglicht eine Erweiterung der in Kapitel 5 beschriebenen Studien zum Bewegungsverhalten sphärischer Einzelpartikel mit Hilfe nicht-sphärischer Partikel wie Agglomerate. Im folgenden Unterabschnitt wird die numerische Konfiguration des Testfalls kurz zusammengefasst. Anschließend wird das Wachstum der Agglomerate zunächst qualitativ analysiert, gefolgt durch eine quantitative Charakterisierung der entstandenen Agglomeratstrukturen.

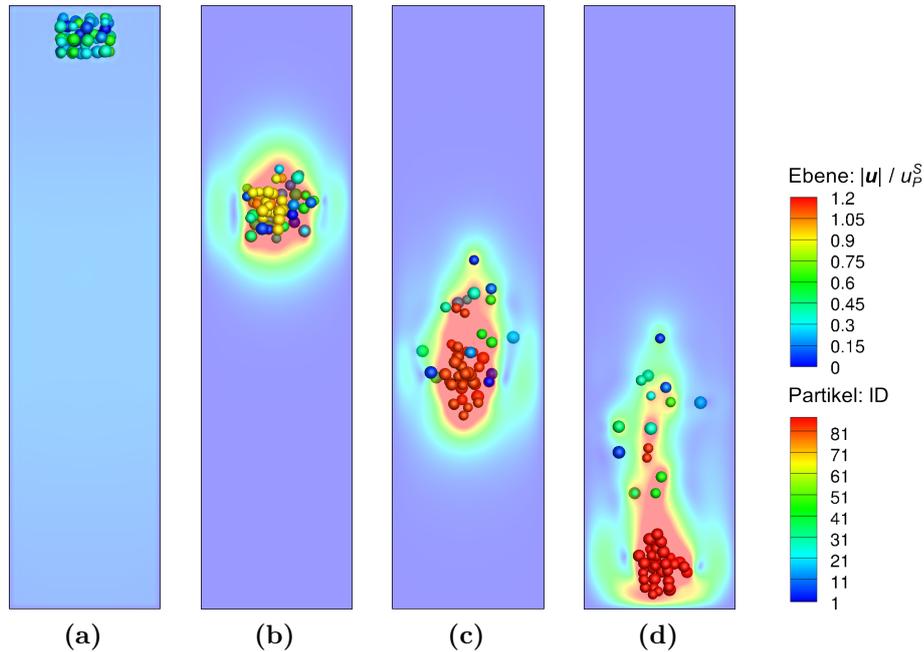
### 6.2.1 Numerische Konfiguration

Die Primärpartikel sedimentieren in einem vertikalen, ausschließlich durch feste Wände begrenzten Kanal mit quadratischem Querschnitt von  $12 \bar{d}_P \times 12 \bar{d}_P$  und einer Höhe von  $48 \bar{d}_P$ , worin  $\bar{d}_P$  dem mittleren Durchmesser aller injizierten Primärpartikel entspricht. Das Rechengebiet wird im Querschnitt mit  $60 \times 60$  Gitterzellen, in der

Höhe mit 240 Gitterzellen äquidistant diskretisiert. Die Dichte und dynamische Viskosität des Fluids betragen  $\rho = 1,2 \text{ kg/m}^3$  und  $\eta = 1,8 \times 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$ . Die zu initialisierenden Primärpartikel werden zufällig, ohne gegenseitigen Kontakt in einem Cluster platziert. Wie Abbildung 6.7a zeigt, wird der Schwerpunkt des Clusters längs der Kanalmittellinie in einer Höhe von  $45,6 \bar{d}_P$  über dem Boden positioniert. Alle 50 Primärpartikel besitzen die gleiche Dichte von  $\rho_P = 700 \text{ kg/m}^3$ . Eine polydisperse Größenverteilung der Primärpartikel von  $\bar{d}_P/\Delta x \approx 5 \pm 15\%$  ermöglicht unterschiedliche Sinkgeschwindigkeiten der Teilchen. Darüber hinaus beruht die Diskretisierung der Partikel auf bewegten, schlupffreien Feststoff-Fluid-Phasengrenzen (siehe Kapitel 2.4.1). Die charakteristische Partikel-Reynolds-Zahl des sedimentierenden Clusters beträgt nach Gleichung (5.3) gleich  $Re_P = 0,2$  und basiert auf der Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  einer Kugel mit dem Durchmesser  $\bar{d}_P$  in einem infiniten, ruhenden Medium.

Zu Beginn der Simulation befinden sich die kontinuierliche wie auch die disperse Phase in Ruhe. Nach Freigabe beider Phasen beginnen alle injizierten Primärpartikel zeitgleich zu sinken. Da weder Einlass- noch Auslassöffnungen existieren, wird die Bewegung der Partikel im Wesentlichen durch die Erdbeschleunigung  $g$ , die Bewegung benachbarter Partikel unter Berücksichtigung von Agglomerationen und ihre Wechselwirkung mit der Fluidströmung im geschlossenen Kanal beeinflusst. Neben der translatorischen Bewegung können die Primärpartikel und Agglomerate frei rotieren. Da die Partikeldichte deutlich größer als die des Fluids ist und der Partikeldurchmesser die mittlere freie Weglänge der Fluidmoleküle um Größenordnungen überschreitet, wird eine zufällige Bewegung infolge Brownscher Diffusion vernachlässigt.

Sind abstoßende, kurzreichweitige Effekte wie die fluiddynamische Wechselwirkung zu gering, um die Trajektorien sich annähernder Teilchen zu verändern, können Partikel im Verlauf der Sedimentation miteinander kollidieren. Unter Berücksichtigung der in Kapitel 2.7.1 diskutierten Modellannahmen führt eine Berührung in jedem Fall zur Agglomeration der involvierten Kollisionspartner. Ein Kollisionspaar kann sich aus zwei Primärpartikeln, je einem Primärpartikel und Agglomerat oder zwei Agglomeraten zusammensetzen. Darüber hinaus wird die molekulare Anziehung zwischen den Teilchen als stark genug angenommen, um ein Anhaften der Kollisionspartner stets zu rechtfertigen. Die einhergehenden Haftkräfte unter bereits agglomerierten Primärpartikeln verhindern zudem eine Umlagerung der Primärpartikel innerhalb des Agglomerats sowie den Zerfall zuvor gebildeter Agglomerate. Um das mehrfache Agglomerieren von Partikeln innerhalb eines Zeitschrittes zu verhindern, wurde der Zeitschritt im Vergleich zu vorangegangenen Simulationen nochmals reduziert. Er beträgt in der Simulation lediglich  $\Delta t/\tau_P = 6,17 \times 10^{-6}$ . Die Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  beruht hierbei auf dem gemittelten Durchmesser  $\bar{d}_P$ . Die Simulation wird gestoppt, wenn eines der sinkenden Partikel die angrenzenden Kanalwände oder den Boden des Kanals berührt.

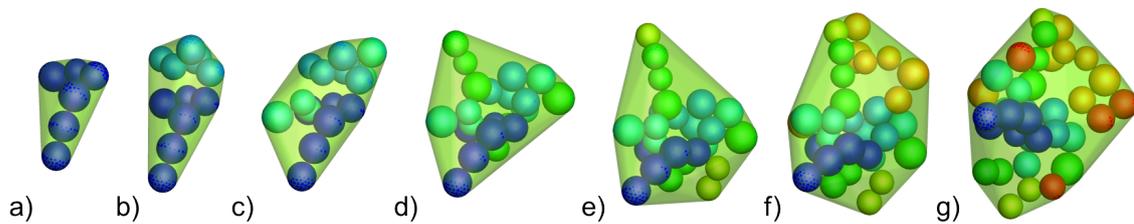


**Abb. 6.7.** Momentaufnahmen des Geschwindigkeitsfelds (*Konturdiagramm*) mit zugehöriger Verteilung der sinkenden Primärpartikel und Agglomerate (*Kugeln*) zu verschiedenen Zeitpunkten (von links nach rechts):  $t/\tau_P = 0, 2, 7, 4, 0$  und  $5, 3$ . Der Betrag der Fluidgeschwindigkeit  $|u|$  ist mittels ungestörter stationärer Sinkgeschwindigkeit  $u_P^S$  eines Einzelpartikels normiert. Kugeln gleicher Farbe (*Partikel-ID*) sind Bestandteil eines Agglomerats. Schnitt durch das Zentrum des Strömungsgebiets.

## 6.2.2 Transientes Agglomerationsverhalten

Im folgenden Abschnitt wird das transiente Agglomerationsverhalten der sedimentierenden Partikel zunächst qualitativ betrachtet. Die Farbcodierung der in Abbildung 6.7 dargestellten Partikel folgt einer fortlaufenden Nummerierung. Primärpartikel einer Farbe sind demnach einem individuellen Agglomerat zugeordnet. Kollidiert dieses Agglomerat mit weiteren Primärpartikeln oder Agglomeraten, erhält das entstandene Agglomerat einen neuen Farbcode. Erwartungsgemäß benötigt das injizierte Partikelcluster etwas Zeit um zu beschleunigen. Ein Teil der potentiellen Energie wird dabei von den Partikeln auf das umgebende Fluid übertragen und schließlich dissipiert. Um diesen Energietransfer zu veranschaulichen, zeigt Abbildung 6.7 vier Momentaufnahmen des durch die sinkenden Partikel induzierten Geschwindigkeitsfeldes.

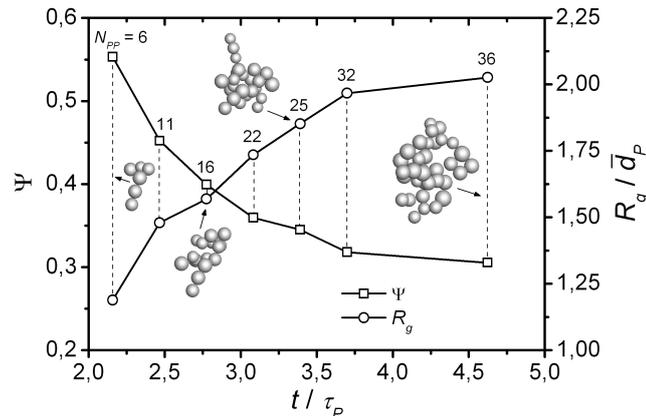
Dem Konzept der Rayleigh-Taylor-Instabilität folgend, beginnen die im Kern des Partikelclusters platzierten Primärpartikel schneller zu sedimentieren als die äußeren



**Abb. 6.8.** Zeitabhängiges Wachstum eines Agglomerats infolge der Kollision mit benachbarten Primärpartikeln und Agglomeraten unter Beibehaltung des Blickwinkels und Zoomniveaus (von links nach rechts):  $t/\tau_P = 2,2, 2,5, 2,8, 3,1, 3,4, 3,7$  und  $4,6$ . Kugeln gleicher Farbe gehören zu Agglomeraten, die sich bildeten, noch bevor sie mit dem betrachteten Agglomerat kollidierten. Die *grünen Schattierungen* zeigen die konvexen Hüllen der wachsenden Agglomeratstruktur.

(Vinningland *et al.* 2007). Aufgrund dieses Phänomens sollte der Ursprung des Agglomeratwachstums nahe der vertikalen Kanalmittellinie liegen. Durch Analyse der in Abbildung 6.7 dargestellten Agglomerate kann diese Hypothese zu einem gewissen Grad bestätigt werden. Demnach führt die schnelle Formierung von Dubletten und Ketten, die aus drei oder mehr Primärpartikeln bestehen, innerhalb kürzester Zeit zur Bildung größerer Agglomerate. Abbildung 6.7b verdeutlicht diese Tendenz anhand des gelben, dendritisch-strukturierten Agglomerats im Zentrum des Kanals. Im weiteren Verlauf der Simulation beginnt diese starre Partikelstruktur frei zu rotieren, um seine Orientierung hinsichtlich des modifizierten Massenschwerpunkts und der sich fortwährend ändernden strömungsinduzierten Partikelkräfte immer wieder von Neuem auszugleichen. Während der translatorischen und insbesondere rotierenden Bewegung kollidieren die sedimentierenden Agglomerate mit weiteren Primärpartikeln und Agglomeraten, wodurch komplexere Partikelstrukturen entstehen (siehe Abbildung 6.7c). Das in Abbildung 6.7d rot eingefärbte Agglomerat beschleunigt mit zunehmender Gesamtmasse schneller als die übrigen Teilchen und überholt schließlich alle verbleibenden Primärpartikel und Agglomerate. Am Ende der Simulation setzt sich dieses Agglomerat aus 36 Primärpartikeln zusammen und kollidiert schließlich als erstes Partikel mit dem Boden.

Abbildung 6.8 zeigt die Wachstumshistorie sowie die während dieses Zeitraums vollzogene Rotationsbewegung des in Abbildung 6.7d dargestellten roten Agglomerats. Die Farbcodierung innerhalb des Agglomerats offenbart, dass das zur Analyse herangezogene Agglomerat im Verlauf der Simulation vornehmlich mit kleineren Agglomeraten und nur sporadisch mit einzelnen Primärpartikeln kollidiert. Darüber hinaus dreht sich das zu Beginn aus sechs Primärpartikeln bestehende dunkelblaue Agglomeratstruktur während der Sedimentation um nahezu  $90^\circ$  in die Bildebene (vgl. Abbildungen 6.8a-g).



**Abb. 6.9.** Zeitliche Entwicklung der Sphärizität  $\Psi$  (offene Quadrate) und des durch  $\bar{d}_P$  normierten Schwerpunktradius  $R_g$  (offene Kreise) der in Abbildung 6.8 dargestellten Agglomeratstrukturen. Die Sedimentationszeit  $t$  ist mit Hilfe der Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  normalisiert, die auf dem mittleren Durchmesser  $\bar{d}_P$  der injizierten Primärpartikel beruht. Die angegebenen Nummern repräsentieren die Anzahl  $N_{PP}$  der im Agglomerat gebundenen Primärpartikel.

Ferner veranschaulicht Abbildung 6.8 anhand der *grünen Schattierungen* die transiente Entwicklung der konvexen Hülle des wachsenden Agglomerats. Die Hülle wird durch Approximation der Agglomeratoberfläche unter Verwendung einer finiten Anzahl an Punkten, die iterativ zu Tetraedern verbunden werden, gebildet. Der Algorithmus formt ein geschlossenes, stetig wachsendes, konvexes Teilvolumen, welches schlussendlich die konvexe Hülle repräsentiert, sobald alle Oberflächenpunkte verarbeitet wurden. Das Volumen dieser Hüllen wird nachfolgend genutzt, um die Morphologie der entstandenen Agglomerate zu charakterisieren.

### 6.2.3 Charakterisierung der Agglomeratmorphologie

Um die im Verlauf der Simulation entstandenen Agglomerate miteinander vergleichen zu können, ist eine Quantifizierung ihrer Morphologien erforderlich. Die resultierenden Agglomerateigenschaften bilden die Grundlage für eine Beurteilung des strömungsinduzierten Transportverhaltens, beispielsweise anhand aerodynamischer Koeffizienten (Dietzel & Sommerfeld 2013). Darüber hinaus lassen sich unter Verwendung dieser Charakteristika Korrelationen zwischen adäquaten Strukturparametern und Strömungseigenschaften von Agglomeraten entwickeln.

Im Folgenden werden die in Abbildung 6.8 dargestellten Agglomerate mit Hilfe verschiedener Strukturparameter analysiert. Zu den grundlegenden Eigenschaften eines Agglomerats zählen dessen Oberfläche und Volumen, die für die Berechnung weiterer Parameter, wie die volumenspezifische Oberfläche und Sphärizität, herangezogen

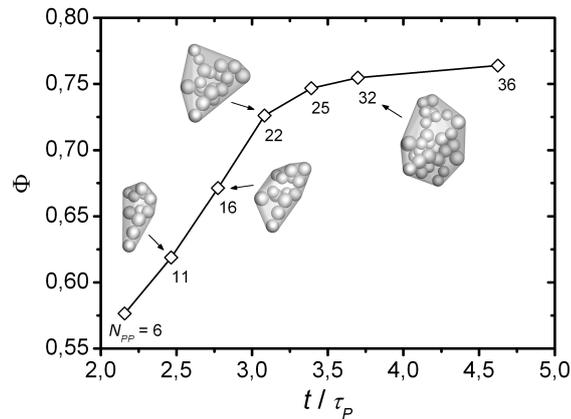
werden können. Wadell (1935) folgend ist die Sphärizität  $\Psi$  eines Agglomerats als Verhältnis von Oberfläche  $A_v$  der volumenäquivalenten Kugel zur Gesamtoberfläche  $A_A$  des Agglomerats definiert:

$$\Psi = \frac{A_v}{A_A} = \frac{\pi d_v^2}{\pi \sum_{i=1}^{N_{PP}} d_{P_i}^2} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N_{PP}} d_{P_i}^3\right)^{2/3}}{\sum_{i=1}^{N_{PP}} d_{P_i}^2} \quad (6.5)$$

in der  $N_{PP}$  die Anzahl der agglomerierten Primärpartikel eines Agglomerats kennzeichnet. Abbildung 6.9 stellt die zeitliche Entwicklung der Sphärizität (*offene Quadrate*) des in Abbildung 6.8 gezeigten Agglomeratwachstums dar. Erwartungsgemäß reduziert sich die Sphärizität mit zunehmender Anzahl an Primärpartikeln, da  $A_v$  nach Gleichung (6.5) langsamer zunimmt als  $A_A$ . Die Sphärizität beinhaltet jedoch weder Hinweise zur räumlichen Ausdehnung noch Informationen zu der Agglomeratstruktur. Ein Maß für die Verteilung der Masse innerhalb eines Agglomerats liefert der Schwerpunktradius  $R_g$ . In den vorliegenden Untersuchungen basiert  $R_g$  auf dem quadratischen Mittelwert des Abstandes  $\mathbf{x}_{P_i}$  der einzelnen Primärpartikel zum Massenschwerpunkt  $\mathbf{x}_A$  des Agglomerats:

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N_{PP}} \sum_{i=1}^{N_{PP}} |\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{P_i}|^2} \quad (6.6)$$

Neben dem zeitlichen Verlauf der Sphärizität (*offene Quadrate*) beinhaltet Abbildung 6.9 darüber hinaus die zeitliche Entwicklung des Schwerpunktradius (*offene Kreise*) sowie die Anzahl der im Agglomerat gebundenen Primärpartikel. Wie Abbildung 6.8a zeigt, besteht das erste Agglomerat zunächst aus sechs Primärpartikeln, wobei sich die agglomerierten Primärpartikel nahe  $\mathbf{x}_A$  konzentrieren. In der frühen Phase der Sedimentation führt die kompakte Struktur der Agglomerate zu kleinen Schwerpunktradien (siehe Abbildung 6.9 bei  $t/\tau_P \leq 2,5$ ). Infolge der Kollision mit vorwiegend kleineren Agglomeraten wächst das betrachtete Agglomerat im weiteren Verlauf der Sedimentation zügig in alle Raumrichtungen (siehe Abbildung 6.8b-e), wodurch  $R_g$  rasch zunimmt. Während das sinkende Agglomerat in seiner mittleren Wachstumsphase vornehmlich dendritische Strukturen ausbildet, kollidiert es am Ende der Simulation lediglich mit vereinzelt Primärpartikeln. In Übereinstimmung mit Abbildung 6.8f-g füllen sich die oberflächennahen Leerräume des Agglomerats zunehmend. Infolgedessen nimmt der Schwerpunktradius gegenüber den anfänglichen Wachstumsraten langsamer zu (siehe Abbildung 6.9 bei  $t/\tau_P \geq 3,7$ ). Am Ende der Simulation hat sich  $R_g$  im Vergleich zum ersten Agglomerat nahezu verdoppelt. Darüber hinaus strebt  $R_g$  aufgrund der kleiner werdenden Anzahl an verbleibenden Primärpartikeln und Agglomeraten einem Grenzwert entgegen. Gemäß des in Abbildung 6.9 diskutierten Kurvenverlaufs gilt der Schwerpunktradius als geeigneter Indikator zur Beschreibung des Übergangs von anfänglich kompakten Strukturen zu flockig strukturierten Agglomeraten am Simulationsende.



**Abb. 6.10.** Verlauf der Porosität  $\Phi$  (*offene Rauten*) des wachsenden Agglomerats als Funktion der Zeit unter Angabe der Anzahl  $N_{PP}$  der zum Zeitpunkt  $t$  agglomerierten Primärpartikel. Die verstrichene Sedimentationszeit  $t$  ist durch die Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  normiert, die auf dem mittleren Durchmesser der injizierten Primärpartikel basiert.

Unter Zuhilfenahme der Porosität zeigen die untersuchten Agglomeratstrukturen hingegen ein anderes Verhalten. Die Porosität  $\Phi$  wird in dieser Arbeit als Verhältnis von Hohlraumvolumen zu verdrängtem Agglomeratvolumen wie folgt quantifiziert:

$$\Phi = \frac{V_V}{V} = \frac{V_V}{V_S + V_V} = 1 - \frac{V_S}{V_H} \quad (6.7)$$

Das durch das Agglomerat verdrängte Volumen  $V$  setzt sich nach Gleichung 6.7 aus dem Feststoffvolumen  $V_S$  der Primärpartikel und dem verbleibenden Hohlraumvolumen  $V_V$  zwischen den Primärpartikeln zusammen. Die Summe aus  $V_S$  und  $V_V$  wird im Folgenden als Volumen  $V_H$  der konvexen Hülle um das Agglomerat angenommen. Das Verfahren zur Generierung der konvexen Hülle sowie zur Berechnung von  $V_H$  wird in Dietzel & Sommerfeld (2013) detailliert beschrieben. Die konvexen Hüllen der in diesem Kapitel untersuchten Agglomerate werden in Abbildung 6.8 anhand der *grünen Schattierungen* veranschaulicht.

Wie Abbildung 6.10 zeigt, lässt sich die Morphologie der entstandenen Agglomerate anhand der resultierenden Porositäten deutlich unterscheiden. Demnach besitzen kompakte Agglomerate, wie sie in der anfänglichen Phase der Sedimentation entstanden sind, kleine Porositäten. Mit steigender Anzahl agglomerierter Primärpartikel nimmt  $\Phi$  indessen schnell zu, insbesondere bis  $t/\tau_P < 3,0$ . Die Kollision des betrachteten Agglomerats mit vorwiegend kleineren Agglomeraten begünstigt in dieser Phase der Sedimentation die Entwicklung dendritischer Strukturen. Nach  $t/\tau_P = 3,0$  bleibt die Porosität, wie auch die zuvor betrachteten Eigenschaften, nahezu konstant. Dieser Verlauf deutet auf eine reduzierte Wachstumsrate der Dendriten hin. Zeitgleich wer-

den die Hohlräume zwischen den Verästelungen durch einzelne Primärpartikel gefüllt (siehe Abbildung 6.8e-f), wodurch  $N_{PP}$  weiterhin ansteigt. Der verhältnismäßig kleine Wert der Porosität am Ende der Simulation von  $\Phi = 0,76$  resultiert gleichwohl aus dem initialen Größenspektrum der injizierten Primärpartikel.

Im Fall dendritisch geformter Agglomerate könnte das durch die konvexe Hülle definierte Volumen zu zweifelhaften Leerraumfraktionen führen, da der Raum zwischen einzelnen Dendriten die Definition von Poren im physikalischen Sinn nicht erfüllt. Dessen ungeachtet sind andere aus der Literatur bekannte Definitionen der Porosität, wie die umhüllende Kugel im Vergleich zur konvexen Hülle, weniger sinnvoll. Die Porosität auf Basis der konvexen Hülle ist folglich ein nutzbringender Parameter für den Vergleich von Agglomeratstrukturen. Weitere gebräuchliche Strukturparameter wie die fraktale Dimension (Brasil *et al.* 2001) sind in dieser Studie aufgrund der geringen Anzahl injizierter Primärpartikel nicht zweckmäßig.

### 6.3 Scherinduzierte Agglomeration von Partikeln

Zusätzlich zur Entstehung von Agglomeraten in einem sedimentierenden Partikelcluster wird in diesem Abschnitt die Agglomeration von Primärpartikeln mit numerisch aufgelösten Feststoff-Fluid-Phasengrenzen in laminaren Scherströmungen analysiert. Neben der Viskosität des Fluids wird in den vorliegenden Simulationen der Einfluss sowohl der Partikelträgheit als auch der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel auf das Agglomerationsverhalten untersucht. Der folgende Abschnitt skizziert kurz die numerische Konfiguration der einzelnen Berechnungen. Anschließend folgt anhand eines ausgewählten Beispiels eine Einführung in die transiente Entwicklung des Agglomerationsprozesses. Die Morphologie der wachsenden Agglomerate wird abschließend mit Hilfe verschiedener Strukturparameter charakterisiert.

#### 6.3.1 Numerische Konfiguration

Die Simulationen werden in einem horizontalen Kanal mit rechteckigem Querschnitt von  $12,5 \bar{d}_P$  in der Höhe und  $10,0 \bar{d}_P$  in der Breite realisiert, worin  $\bar{d}_P$  den mittleren Durchmesser der injizierten Primärpartikel definiert. Die Länge des Kanals beträgt  $81 \frac{1}{3} \bar{d}_P$ . Der Kanalquerschnitt wird mit  $75 \times 60$  Gitterzellen äquidistant diskretisiert. In horizontaler Ausdehnung finden 500 gleichgroße Gitterzellen Anwendung, sodass der Kanal in Summe mit  $2,25 \times 10^6$  Gitterzellen diskretisiert wird.

Die Scherströmung wird durch eine in positive x-Richtung bewegte, obere Wand und eine ruhende, untere Wand induziert. Neben den in Hauptströmungsrichtung gegenüberliegenden Einlass- und Auslassberandungen wird das Strömungsfeld durch ebenfalls in positive x-Richtung bewegte Seitenwände künstlich begrenzt. Die Ge-

schwindigkeit auf den Wandknoten wird durch die anfänglich aufgeprägte Geschwindigkeit des Fluids an der Position des zum jeweiligen Wandknoten nächst gelegenen Fluidknotens initialisiert. Am Einlass wird die knotenbezogene Geschwindigkeit  $\mathbf{u}(x_z)$  mittels Gleichung (5.5) bestimmt und als konstant angenommen. Die Dichte  $\rho$  und Scherrate  $\dot{\gamma}$  des Fluids sind in allen Simulationen gleich und betragen  $1000 \text{ kg/m}^3$  und  $560 \text{ 1/s}$ .

Um den Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung vor Partikel-Partikel-Kollisionen bewerten zu können, werden in den Simulationen unterschiedliche dynamische Viskositäten  $\eta$  und Partikeldichten  $\rho_P$  angenommen. Die zugehörigen Fluid- und Partikeleigenschaften sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. In der vorliegenden Studie werden die scherinduzierte Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  und die konvektive Partikel-Stokes-Zahl  $St$  durch:

$$Re_S = \frac{\dot{\gamma} \bar{d}_P^2 \rho}{2 \eta} \quad (6.8)$$

und:

$$St = \frac{\tau_P \bar{u}_{Px}}{\bar{d}_P} \quad (6.9)$$

bestimmt, worin  $\tau_P = \rho_P \bar{d}_P^2 / (18 \eta)$  die Partikelrelaxationszeit kennzeichnet und  $\bar{u}_{Px}$  die in Hauptströmungsrichtung über alle Primärpartikel gemittelte Komponente der initialen Partikelgeschwindigkeit ist. Die Geschwindigkeit  $u_{Px}$  entspricht folglich der ungestörten initialen Geschwindigkeit des Fluids an der Position des Partikelschwerpunkts. Wie Tabelle 6.1 zeigt, variiert  $Re_S$  zwischen  $[0,1; 10,1]$ ;  $St$  im Bereich von  $[0,1; 13,8]$ .

Der Einfluss der Partikeldichte auf das Agglomerationsverhalten der Teilchen wird in der vorliegenden Studie mit Hilfe der Simulationen R, D1 und D2 untersucht. Hingegen ermöglichen die Simulationen R, V1 und V2 eine Analyse des Agglomerationsverhaltens in Abhängigkeit der dynamischen Viskosität. Beide zuvor genannten Parametergruppen beinhalten, neben Simulationen mit einer monodispersen Größenverteilung der injizierten Primärpartikel (vgl. Fälle R-M, D-M und V-M), auch Berechnungen mit einer für die Fälle R-P, D-P und V-P jeweils gleich definierten polydispersen Größenverteilung der Ausgangsteilchen von  $d_P \pm 30 \%$ . Ungeachtet der angewandten numerischen Konfiguration werden die Primärpartikel in allen Berechnungen stets mit  $\bar{d}_P / \Delta x = 6$  Gitterzellen diskretisiert.

Die im Partikelcluster zufällig angeordneten Primärpartikel werden zu Beginn einer Simulation unabhängig von ihrem Durchmesser stets an gleicher Position injiziert. Das Partikelcluster, welches in der Nähe des Kanaleinlasses positioniert wird, besteht aus jeweils 50 sich nicht überlappenden Primärpartikeln. Wie Abbildung 6.11 zeigt, besitzt der Massenschwerpunkt des Clusters einen minimalen negativen Versatz, bezogen

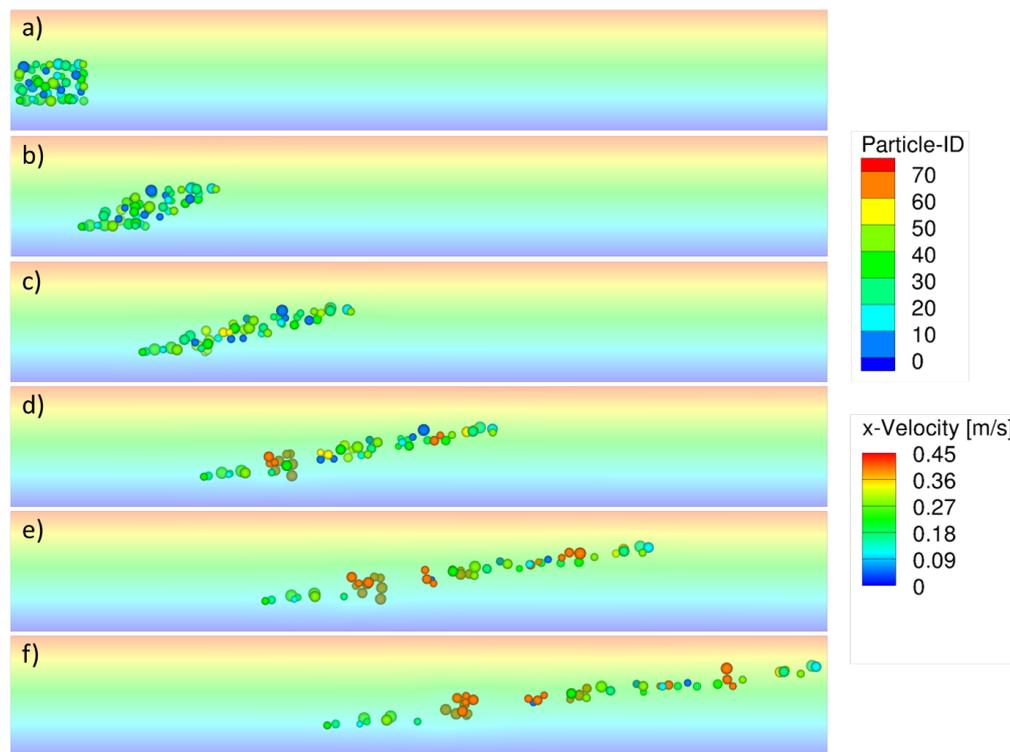
**Tab. 6.1.** Zusammenfassung der zur Agglomeration in Scherströmungen modifizierten Fluid- und Partikeleigenschaften: Referenzkonfiguration (R), variierte Partikeldichte (D1 und D2) und dynamische Viskosität des Fluids (V1 und V2) mit mono- (M) und polydisperser Größenverteilung (P) der injizierten Primärpartikel.

Fall	$\eta$ [N s/m <sup>2</sup> ]	$\bar{d}_P/\Delta x$	$\rho_P/\rho$	$\Delta t/\tau_P$	$Re_S$	$St$
R-M	$1,0 \times 10^{-3}$	6,0	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	1,0	1,4
R-P	$1,0 \times 10^{-3}$	$6,0 \pm 1,8$	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	1,0	1,4
D1-M	$1,0 \times 10^{-3}$	6,0	1,0	$2,5 \times 10^{-3}$	1,0	0,6
D2-M	$1,0 \times 10^{-3}$	6,0	5,0	$2,5 \times 10^{-3}$	1,0	2,8
D1-P	$1,0 \times 10^{-3}$	$6,0 \pm 1,8$	1,0	$5,0 \times 10^{-4}$	1,0	0,6
D2-P	$1,0 \times 10^{-3}$	$6,0 \pm 1,8$	5,0	$5,0 \times 10^{-4}$	1,0	2,8
V1-M	$1,0 \times 10^{-2}$	6,0	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	0,1	0,1
V2-M	$1,0 \times 10^{-4}$	6,0	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	10,1	13,8
V1-P	$1,0 \times 10^{-2}$	$6,0 \pm 1,8$	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	0,1	0,1
V2-P	$1,0 \times 10^{-4}$	$6,0 \pm 1,8$	2,5	$1,0 \times 10^{-3}$	10,1	13,8

auf die horizontale Kanalmittellinie. Dieser Versatz wurde anhand von Testläufen vorab ermittelt und zieht den durch Fluidscherung induzierten Auftrieb der Partikel in Betracht, wodurch Kollisionen mit der oberen Kanalwand vermieden werden. Die initiale Geschwindigkeit der Primärpartikel entspricht der lokalen ungestörten Geschwindigkeit des Fluids an der Position der Partikelzentren. In den vorliegenden Untersuchungen werden sowohl die Gravitation als auch die Brownsche Zufallsbewegung der Teilchen vernachlässigt. Darüber hinaus bilden kollidierende Partikel stets ein starres Agglomerat, dessen Struktur sich weder verformen noch aufbrechen kann. Um Mehrfachkollisionen innerhalb eines Zeitschrittes auszuschließen, wurden kleine Zeitschritte gewählt, die gemäß Tabelle 6.1 im Bereich zwischen  $\Delta t/\tau_P = [0,1; 10,1]$  variieren. Die Bewegung wie auch die Agglomeration der aufgelösten Teilchen basiert auf den in den Kapiteln 2.4 und 2.7 erläuterten Modellierungsansätzen.

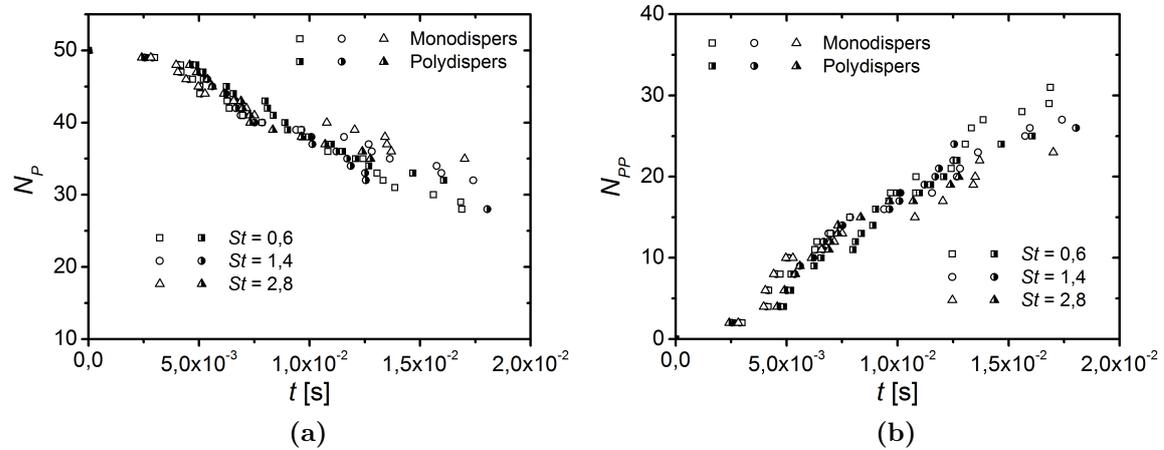
### 6.3.2 Transientes Wachstum von Agglomeraten

Im folgenden Abschnitt wird das transiente Wachstum der Agglomerate analysiert. Die Farbcodierung der in Abbildung 6.11 dargestellten Partikel folgt der des vorangegangenen Kapitels: Primärpartikel mit gleichem Farbcode sind Bestandteil des selben Agglomerats. Abbildung 6.11a-f zeigt sechs Momentaufnahmen aus dem scherinduzierten Agglomerationsverlauf der Referenzkonfiguration R-P unter Berücksichtigung von Primärpartikeln mit polydisperser Größenverteilung.



**Abb. 6.11.** Momentaufnahmen der x-Komponente der Fluidgeschwindigkeit (*Konturdiagramm*) mit zugehöriger polydispenser Größenverteilung der Primärpartikel und Agglomerate (*Kugeln*) bei  $Re_S = 1,0$  und  $St = 1,4$  (Konfiguration R-P) zu verschiedenen Zeitpunkten (von oben nach unten):  $t/t_{ges} = 0,0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8$  und  $1,0$ . Kugeln gleicher Farbe besitzen die selbe *Partikel-ID* und sind Bestandteil eines Agglomerats. Schnitt durch das Zentrum des Strömungsgebiets.

Zu Beginn der Simulation bilden die Primärpartikel ein quaderförmiges Cluster (siehe Abbildung 6.11a). Aufgrund ihrer Position innerhalb der Scherschicht bewegen sich die oberen Primärpartikel schneller als die unteren. Dies führt gemäß Abbildung 6.11b zu einer zunehmenden Verformung der ursprünglichen Clusteranordnung, wodurch Kollisionen zwischen Partikeln vermehrt auftreten (siehe Abbildungen 6.11c-d). Die rasche Formierung von Dubletten und Tripletten bildet die Basis für das Wachstum größerer Agglomerate. Das in Abbildung 6.11d rot eingefärbte Agglomerat beginnt beispielsweise frei zu rotieren, um seine Orientierung infolge der sich fortwährend ändernden scherinduzierten Partikelkräfte neu auszubalancieren. Im weiteren Verlauf der Simulation kollidiert dieses Agglomerat mit weiteren Primärpartikeln und Agglomeraten (siehe Abbildung 6.11e-f). Am Ende der Simulation liegen schließlich bei  $t/t_{ges} = 1,0$  mehrere Agglomerate, bestehend aus drei oder mehr Primärpartikeln, vor.



**Abb. 6.12.** Zeitliche Entwicklung (a) der Gesamtanzahl der in der Fluiddomäne verbleibenden Partikel (Agglomerate und Primärpartikel) und (b) der in Agglomeraten gebundenen Primärpartikel als Funktion der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  (Fälle R und D in Tabelle 6.1) bei  $Re_S = 1,0$  unter Berücksichtigung monodisperser (*offene Symbole*) und polydisperser Partikelgrößenverteilungen (*halb geschlossene Symbole*).

Neben der strömungsinduzierten Widerstandskraft erfahren die sich bewegenden Partikel eine zusätzliche transversale Auftriebskraft, die durch eine ungleiche Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikeln hervorgerufen wird (Saffman 1965). Die resultierende inhomogene Druckverteilung entlang der Partikeloberfläche führt zu einer Auftriebskraft, die in Richtung der höheren Schlupfgeschwindigkeit wirkt. Die Abbildungen 6.11a und f verdeutlichen dieses Phänomen anhand des vertikalen Versatzes zwischen den initialen und finalen Positionen der oberen Partikel.

Ein einfaches Maß zur Bewertung des Agglomeratwachstums stellt die Gesamtanzahl  $N_P$  der in der Fluiddomäne verbleibenden Partikel wie auch die Gesamtanzahl  $N_{PP}$  der in Agglomeraten gebundenen Primärpartikel dar. Der für  $N_P$  verwendete Term „Partikel“ impliziert in dieser Studie einzelne Primärpartikel wie auch vollständige Agglomerate. Abbildung 6.12 vergleicht das in den Simulationsgruppen R und D ermittelte Agglomeratwachstum anhand der zuvor genannten Kenngrößen  $N_P$  und  $N_{PP}$ .

Im Fall von gleich großen Primärpartikeln nimmt  $N_P$  während der ersten Rechenhälfte in gleichem Maße und somit unabhängig von  $St$  ab (siehe Abbildung 6.12a). Dieses Verhalten liegt darin begründet, dass Partikel mit unterschiedlichem Ansprechverhalten während des Anfangsstadiums der Simulation mit geringen Relativgeschwindigkeiten kollidieren. In dieser Phase spielt die Trägheit beider Agglomerationspartner in Bezug auf die fluiddynamische Wechselwirkung der sich annähernden Partikel nur

eine untergeordnete Rolle. Die Anzahl der in der Domäne verbleibenden Partikel nimmt mit steigender Partikel-Stokes-Zahl ab  $t > 0,01$  s jedoch deutlich langsamer ab (Abbildung 6.12a). Infolge der größer werdenden Trägheit benötigen Agglomerate mit steigender  $N_{PP}$  zunehmend mehr Zeit, um ihre durch Fluid-scherung induzierte Rotation der sich verändernden Agglomeratstruktur anzupassen. Im Vergleich zu kleineren  $St$  führt dies wiederum zu einem langsameren Wachstum der Agglomerate, da Kollisionen mit benachbarten Teilchen zeitlich verzögert auftreten. Infolgedessen nimmt die Anzahl agglomerierter Primärpartikel für  $t > 0,01$ s mit steigender  $St$  ab (siehe Abbildung 6.12b).

Im Gegensatz dazu agglomerieren Primärpartikel mit polydisperser Größenverteilung gemäß Abbildung 6.12a in kürzeren Zeitintervallen, wodurch der Agglomerationsprozess nach  $t = 0,013$  s weitestgehend abgeschlossen ist. Nachfolgend werden Primärpartikel nur noch sporadisch von Agglomeraten eingefangen. Wie Abbildung 6.12 anhand der *halb geschlossenen Symbole* zeigt, besitzt  $St$  nur einen marginalen Einfluss auf das resultierende Agglomerationsverhalten. Ferner weist der zeitliche Verlauf von  $N_P$  gegenüber gleich großen Primärpartikeln weniger Schwankungen auf. Der geringe Einfluss der Partikelträgkeit, welche durch  $St$  abgebildet wird, zeigt sich in Abbildung 6.12b an einem nahezu linearen Anstieg der individuellen Agglomerationsereignisse.

Neben der in Abbildung 6.12 diskutierten Verläufe von  $N_{PP}$  lässt sich das zeitabhängige Wachstum der Agglomerate darüber hinaus zur Evaluation der Agglomerationsfrequenz  $f_A$  heranziehen:

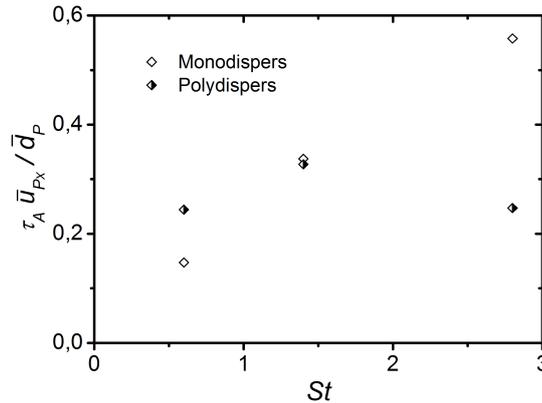
$$f_A = \frac{dN_{PP}}{dt} \quad (6.10)$$

In den vorliegenden Untersuchungen findet statt  $f_A$  die mittlere Zeit  $\tau_A$  zwischen zwei aufeinanderfolgenden Agglomerationsereignissen, im Folgenden als Agglomerationszeit bezeichnet, Anwendung:

$$\tau_A = \frac{1}{\langle f_A \rangle_A} \quad (6.11)$$

worin  $\langle \cdot \rangle_A$  den Mittelungsoperator über alle beobachteten Agglomerationsereignisse symbolisiert. Die in Abbildung 6.13 dargestellten  $\tau_A$  basieren auf den in Abbildung 6.12b gezeigten Agglomerationsereignissen.

Im Fall gleich großer Primärpartikel nimmt die Agglomerationszeit mit steigender Partikel-Stokes-Zahl stetig zu, währenddessen  $\tau_A$  unter Berücksichtigung eines Größenspektrums der Primärpartikel sein Maximum bei  $St = 1,4$  erreicht (siehe Abbildung 6.13). Hervorgerufen durch die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen werden Partikel mit kleineren  $St$  aufgrund ihrer geringeren Trägheit schneller von ihrer ursprünglichen Flugbahn abgelenkt, wodurch sie ihre Lage

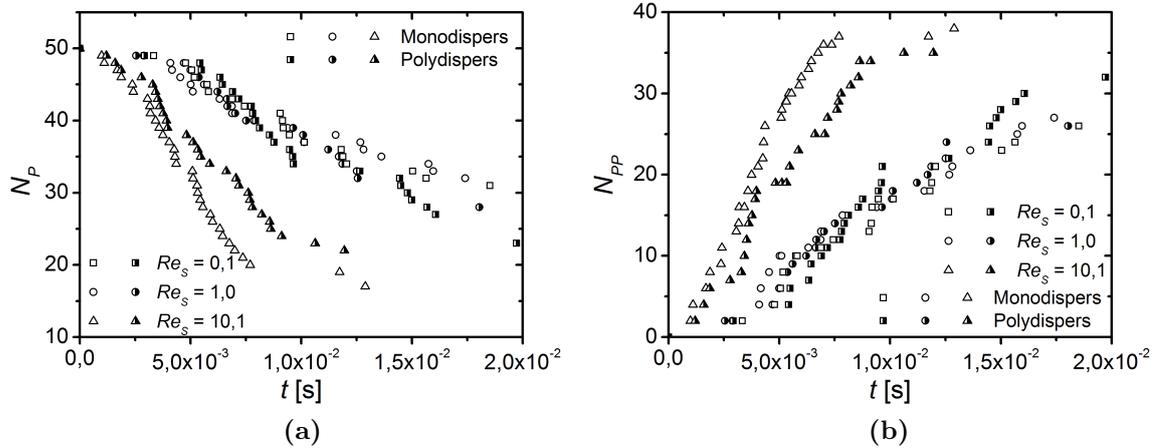


**Abb. 6.13.** Agglomerationszeit in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  und der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel bei  $Re_S = 1,0$ . Die Agglomerationszeit  $\tau_A$  ist mit Hilfe des mittleren advektiven Partikelzeitmaßes,  $\bar{d}_P / \bar{u}_{Px}$ , normiert.

in der Scherschicht verlassen und daraufhin mit anderen Partikeln kollidieren. Das vermehrte Auftreten von Kollisionen führt in Abbildung 6.13 zu einer Reduzierung der Agglomerationszeit. Im Gegensatz dazu werden die Trajektorien von Partikeln mit größeren  $St$  aufgrund der zunehmenden Partikelträgheit in abnehmendem Maße durch die fluiddynamische Wechselwirkung mit benachbarten Teilchen beeinflusst. Als Folge dessen sind in Abbildung 6.13 größere Agglomerationszeiten zu verzeichnen.

Der polydisperse Fall D2-P ( $St = 2,8$ ) stellt gegenüber der zuvor diskutierten Entwicklung eine Ausnahme dar. Während dieser Berechnung formieren sich bis zum zweiten Simulationsdrittel mehrere größere Agglomerate (siehe  $t \leq 1,25 \times 10^{-2}$  s in Abbildung 6.12a), wodurch die Agglomerationsfrequenz bis  $t = 1,25 \times 10^{-2}$  s deutlich größer als die monodisperse Bezugsconfiguration D2-M ( $St = 2,8$ ) ist. Da sich im weiteren Verlauf merklich weniger potentielle Kollisionskandidaten in dieser Strömung befinden, kollidieren im letzten Simulationsdrittel keine weiteren Partikel (siehe  $t > 1,25 \times 10^{-2}$  s in Abbildung 6.12a). Wie Abbildung 6.13 zeigt, ist die resultierende Agglomerationszeit daher deutlich kleiner als bei der vergleichbaren monodispersen Größenverteilung.

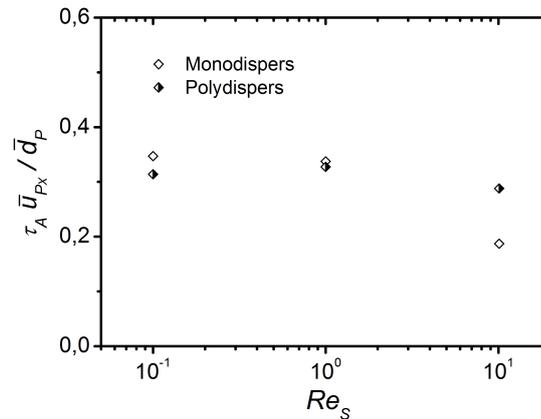
Die abweichenden Agglomerationszeiten für mono- und polydisperse Systeme resultieren zum einen aus Trägheitseffekten der Partikel, die durch größer werdende Agglomeratstrukturen zusätzlich verstärkt werden, zum anderen aus der fluiddynamischen Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen, insbesondere bei der Kollision von kleinen mit großen Partikeln. Anhand der in Abbildung 6.13 diskutierten  $\tau_A$  wird darüber hinaus ersichtlich, dass der durch Fluidscherung induzierte Agglomerationsprozess bei gleich bleibender Partikel-Reynolds-Zahl in starkem Maße durch die Trägheit und Größenverteilung der injizierten Primärpartikel beeinflusst wird.



**Abb. 6.14.** Zeitliche Entwicklung (a) der Gesamtanzahl der in der Fluiddomäne verbleibenden Partikel (Agglomerate und Primärpartikel) und (b) der in Agglomeraten gebundenen Primärpartikel in Abhängigkeit der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  (Fälle R und V in Tabelle 6.1) unter Berücksichtigung monodisperser (*offene Symbole*) und polydisperser Partikelgrößenverteilungen (*halb geschlossene Symbole*).

Neben der Partikel-Stokes-Zahl wird in der vorliegenden Studie das Wachstum der Agglomerate anhand verschiedener scherinduzierter Partikel-Reynolds-Zahlen analysiert, die sich entsprechend Tabelle 6.1 über drei Größenordnungen erstrecken (vgl. Fälle R und V). Analog zu Abbildung 6.12a verhält sich die zeitabhängige Entwicklung der Partikelanzahl  $N_P$  in Abbildung 6.14a für kleine bis mittlere Partikel-Reynolds-Zahlen wie  $Re_S = 0,1$  und  $1,0$  nahezu unabhängig von der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel. Das Agglomerationsverhalten ändert sich jedoch merklich, wenn  $Re_S > 1,0$  ist. Gemäß Abbildung 6.14 sind die für  $Re_S = 10,1$  angenommenen Größenverteilungen klar gegenüber  $Re_S \leq 1,0$  abgrenzbar, wonach gleich große Primärpartikel schneller agglomerieren als jene mit vorgegebenem Größenspektrum. Im letzten Drittel beider Simulationsphasen kollidieren nur noch wenige Partikel, da bereits etwa 70 % aller Primärpartikel in verschiedenen Agglomeratstrukturen gebunden sind. Infolgedessen liegen die in Abbildung 6.14 dargestellten Dreiecke ab  $t > 8,0 \times 10^{-3}$  s (*offene Symbole*) und  $t > 9,0 \times 10^{-3}$  s (*halb geschlossene Symbole*) nicht mehr auf einer gedachten Linie.

Abbildung 6.15 zeigt die resultierenden Agglomerationszeiten unter Verwendung der in Abbildung 6.14b dargestellten Verläufe von  $N_{PP}$ . Im Fall von gleich großen Primärpartikeln nimmt  $\tau_A$  mit steigender Partikel-Reynolds-Zahl sukzessive ab, wenngleich die relative Abweichung zwischen der größten und den beiden kleineren  $Re_S$  deutlich größer ist. In diesem Zusammenhang implizieren ansteigende Partikel-Reynolds-Zahlen



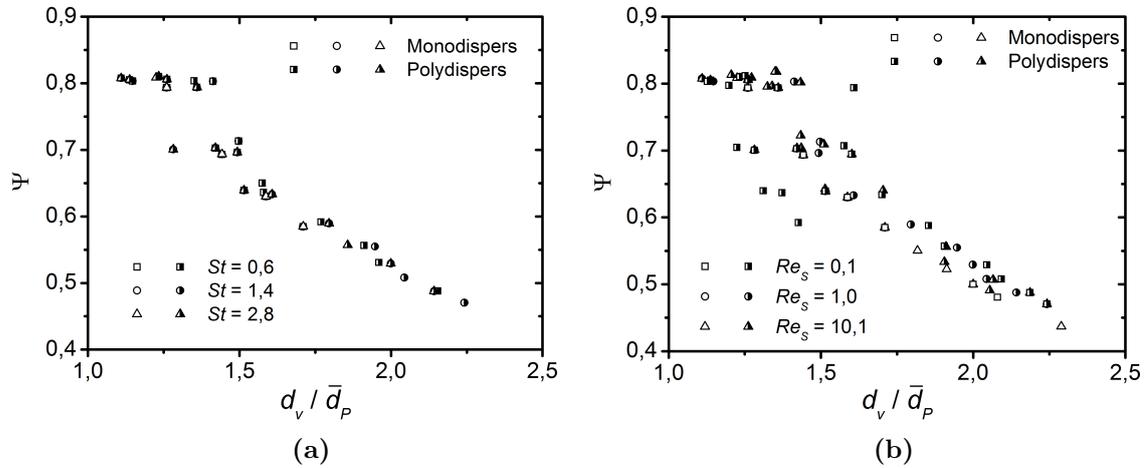
**Abb. 6.15.** Agglomerationszeit als Funktion der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  sowie der Größenverteilung der injizierten Primärpartikel. Die Agglomerationszeit  $\tau_A$  ist mit Hilfe des mittleren advektiven Partikelzeitmaßes,  $\bar{d}_P/\bar{u}_{Px}$ , normiert.

kleiner werdende dynamische Viskositäten (vgl. Tabelle 6.1) und folglich einen geringeren Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung im Nahbereich benachbarter Partikel. Aus diesem Grund werden bei  $Re_S = 10,1$  sich annähernde Partikel nur marginal durch das zu verdrängende Fluid von ihrer ursprünglichen Flugbahn abgelenkt. Zeitgleich erfahren die Partikel einen geringeren Reibungswiderstand gegen das Fluid, wodurch Agglomerate bei  $Re_S = 10,1$  gegenüber mittleren und kleinen  $Re_S$  höhere Winkelgeschwindigkeiten erzielen können. Infolge der schnelleren Rotation kollidieren Agglomerate häufiger mit angrenzenden Teilchen (vgl. maximale  $N_{PP}$  in Abbildung 6.14b). Zusammenfassend sinkt  $\tau_A$  mit steigender  $Re_S$ .

Im Gegensatz dazu bleiben die Agglomerationszeiten unter Annahme einer polydispersen Größenverteilung der Primärpartikel auf nahezu gleichem Niveau. Während die Agglomerationszeiten für  $Re_S \leq 1,0$  mit denen des monodispersen Größenspektrums vergleichbar sind, ist  $\tau_A$  bei  $Re_S > 1,0$  gegenüber gleich großen Partikeln um 54,0% erhöht. Trotz des geringen Umfangs an verfügbaren Daten lässt sich schlussfolgern, dass die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen mit steigender  $Re_S$  deutlich an Bedeutung verliert und infolgedessen Partikel vermehrt agglomerieren. Das Vorhandensein verschieden großer Primärpartikel wirkt dieser Tendenz partiell entgegen, insbesondere bei der Annäherung von kleinen an große Partikel ( $Re_S = 10,1$  in Abbildung 6.15).

### 6.3.3 Charakterisierung der Agglomeratmorphologie

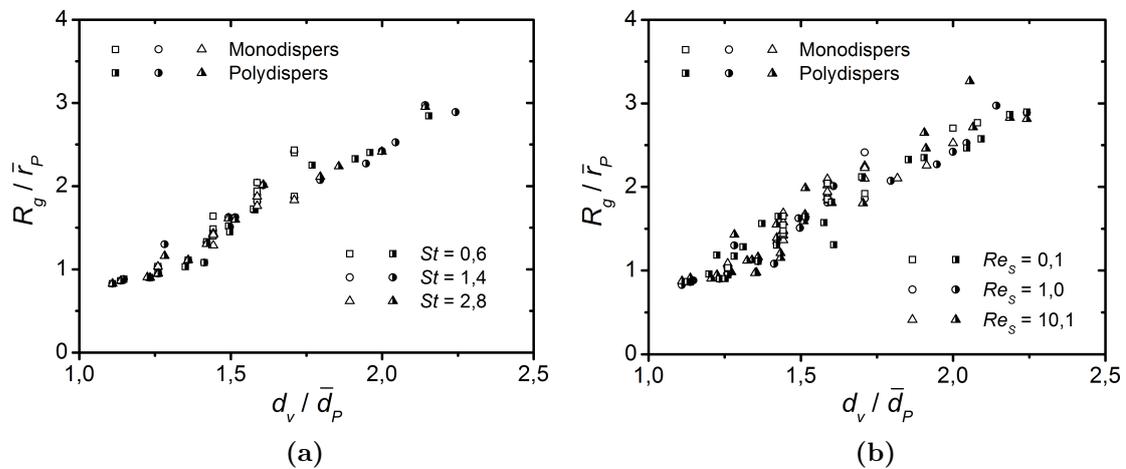
In Ergänzung zu der zuvor untersuchten zeitlichen Entwicklung im Fluid verbleibender Partikel wie auch agglomerierter Primärpartikel wird im folgenden Abschnitt



**Abb. 6.16.** Vergleich der Sphärizität  $\Psi$  von Agglomeraten als Funktion des Durchmessers  $d_v$  der volumenäquivalenten Kugel unter Variation (a) der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  und (b) der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_s$ . Offene Symbole kennzeichnen eine monodisperse, halb geschlossene Symbole eine polydisperse Größenverteilung der injizierten Primärpartikel. Der Kugeldurchmesser  $d_v$  ist mit Hilfe des mittleren Durchmessers  $\bar{d}_P$  normiert.

die Morphologie der entstandenen Agglomerate mit Hilfe verschiedener Strukturparameter charakterisiert. Für die Analysen werden dabei alle während einer Simulation gebildeten Agglomerate herangezogen. Wie bereits in Kapitel 6.2.3 diskutiert, wird die Sphärizität  $\Psi$  eines Agglomerats als Verhältnis von Oberfläche der volumenäquivalenten Kugel zu Gesamtoberfläche der agglomerierten Primärpartikel definiert. Abbildung 6.16 zeigt die Sphärizität der Agglomerate, die im Verlauf der in Tabelle 6.1 genannten Simulationen gebildet wurden, in Abhängigkeit des zum jeweiligen Agglomerat zugehörigen Durchmessers  $d_v$  der volumenäquivalenten Kugel. Die vorgenommene Normierung der Abszisse basiert auf dem mittleren Durchmesser  $\bar{d}_P$  der injizierten Primärpartikel.

Entsprechend Abbildung 6.16 nimmt  $\Psi$  mit größer werdendem  $d_v$  und daraus folgend mit steigender Anzahl im Agglomerat gebundener Primärpartikel exponentiell ab. Dieses Verhalten resultiert aus der in Gleichung (6.5) definierten Berechnung der Sphärizität, wonach die Oberfläche der volumenäquivalenten Kugel mit wachsender Agglomeratgröße langsamer zunimmt als die Gesamtoberfläche der gebundenen Primärpartikel. Darüber hinaus besitzen Agglomerate mit gleicher Primärpartikelanzahl bei monodispersen Konfigurationen den gleichen  $d_v$  und somit die gleiche, von  $St$  und  $Re_s$  unabhängige Sphärizität. Demgegenüber weicht die Sphärizität von Agglomeraten mit polydisperser Größenverteilung von denen mit gleich großen Primärpartikeln bei vergleichbarem  $d_v$  ab (siehe Abbildung 6.16). Besonderes Augenmerk liegt auf dem



**Abb. 6.17.** Entwicklung des Schwerpunktradius in Abhängigkeit des Durchmessers  $d_v$  der volumenäquivalenten Kugel mit (a) der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  und (b) der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_s$  als Parameter. *Offene Symbole* kennzeichnen eine monodisperse, *halb geschlossene Symbole* eine polydisperse Größenverteilung der injizierten Primärpartikel. Der Schwerpunktradius  $R_g$  ist anhand des mittleren Radius  $\bar{r}_P$ , der Kugeldurchmesser  $d_v$  hingegen durch den mittleren Durchmesser  $\bar{d}_P$  normiert.

Bereich  $1,0 < d_v/\bar{d}_P \leq 1,4$ , in dem  $\Psi$  für verschiedene  $d_v/\bar{d}_P$  um 0,8 streut. Jedes der in Abbildung 6.16 dargestellten *halb geschlossenen Symbole* repräsentiert eine Dublette bestehend aus zwei unterschiedlich großen Primärpartikeln.

Allgemein ist die Sphärizität von Agglomeraten bestehend aus gleich großen Primärpartikeln kleiner als vergleichbare Konfigurationen mit verschiedenen Primärpartikelgrößen, insbesondere für  $d_v/\bar{d}_P > 1,4$ . Das vorliegende Verhalten lässt sich partiell auf die fluiddynamische Partikel-Partikel-Wechselwirkung zurückführen, wonach kleinere und damit weniger träge Partikel häufiger von ihrer Ausgangsflugbahn abgelenkt werden, sobald sie sich größeren Teilchen nähern. Demzufolge werden Partikel aus kleineren Größenklassen in geringerem Umfang von Agglomeraten eingefangen, was wiederum zu größeren  $\Psi$  führt. Gleichwohl üben die im Rahmen dieser Studie untersuchten  $St$  und  $Re_s$  keinen signifikanten Einfluss auf die Sphärizität wachsender Agglomerate aus. Marginale Unterschiede lassen sich lediglich innerhalb des polydispersen Systems identifizieren, in dem die aus den Partikel-Reynolds-Zahlen resultierenden  $\Psi$  breiter streuen als für verschiedene Partikel-Stokes-Zahlen. Abschließend gilt festzuhalten, dass mit Hilfe der Sphärizität weder Hinweise zur räumlichen Ausdehnung noch Informationen zu der Agglomeratstruktur ableitbar sind.

Ein Maß für die Massenverteilung in Agglomeraten ist der Schwerpunktradius  $R_g$ , der nach Gleichung (6.6) anhand des Abstandes der im Agglomerat gebundenen

**Tab. 6.2.** Zusammenfassung der von Brasil *et al.* (2001) zur Vorhersage von Cluster-Cluster- (C-C) und Partikel-Cluster-Kollisionen (P-C) verwendeten Vorfaktoren.

Methode	$k_f$	$D_f$
C-C	$1,27 \pm 0,07$	1,82
P-C	$0,51 \pm 0,02$	2,75

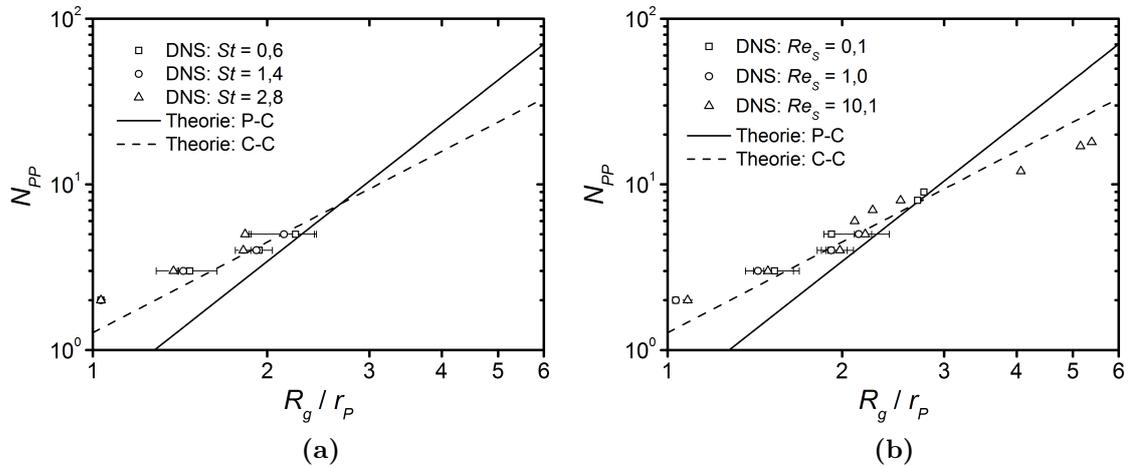
Primärpartikel zum Massenschwerpunkt des Agglomerates berechnet wird. Wie im vorangegangenen Kapitel 6.3.2 diskutiert, bestehen die Agglomerate zu Beginn der Simulationen zumeist aus nur zwei oder drei Primärpartikeln. In dieser Phase führt die kompakte Struktur der Agglomerate zu kleinen  $R_g$  (siehe Abbildung 6.17). Im Fall von Dubletten bestehend aus gleich großen Primärpartikeln beträgt das Verhältnis  $R_g/\bar{r}_P$  gleich 1,0 (siehe *offene Symbole* bei  $d_v/\bar{d}_P = 1,26$  in Abbildung 6.17). Der resultierende Massenschwerpunkt stimmt demnach mit dem Kontaktpunkt zwischen den beiden Partikeloberflächen,  $R_g = r_P$ , überein. Im Gegensatz dazu schwankt  $R_g/\bar{r}_P$  um 1,0 für Dubletten mit unterschiedlich großen Primärpartikeln.

Infolge der Kollision mit weiteren Partikeln wachsen die Agglomerate in alle Raumrichtungen, wodurch  $R_g$  rasch zunimmt. Das in Abbildung 6.17a und b aus verschiedenartigen Symbolen geformte Band folgt unter Berücksichtigung einer diskreten Streubreite einem nahezu linearen Anstieg. In Analogie zur Sphärizität lassen sich auch im Fall des Schwerpunktradius keine klaren Abhängigkeiten innerhalb der untersuchten  $St$  und  $Re_S$  feststellen. Jedoch weisen die Schwerpunktradien mit  $Re_S$  als Parameter eine größere Schwankungsbreite als die untersuchten  $St$  auf.

Die Struktur fraktaler Agglomerate, welche durch Cluster-Cluster- (C-C) und Partikel-Cluster-Kollisionen (P-C) entstanden sind, wurde neben anderen Autoren von Brasil *et al.* (2001) untersucht (vgl. Kapitel 6.1.1). In diesem Kontext wird eine aus mehreren Agglomeraten gebildete Struktur als Cluster zusammengefasst. Die aus diesen Untersuchungen abgeleiteten Korrelationen beruhen auf einer vereinfachten Modellierung der Dynamik molekularer Systeme, auch als Langevin-Dynamik bezeichnet, ohne die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln zu berücksichtigen. Nach Brasil *et al.* (2001) skaliert die theoretische Anzahl gleich großer Primärpartikel in Agglomeraten in Abhängigkeit vom Schwerpunktradius  $R_g$ :

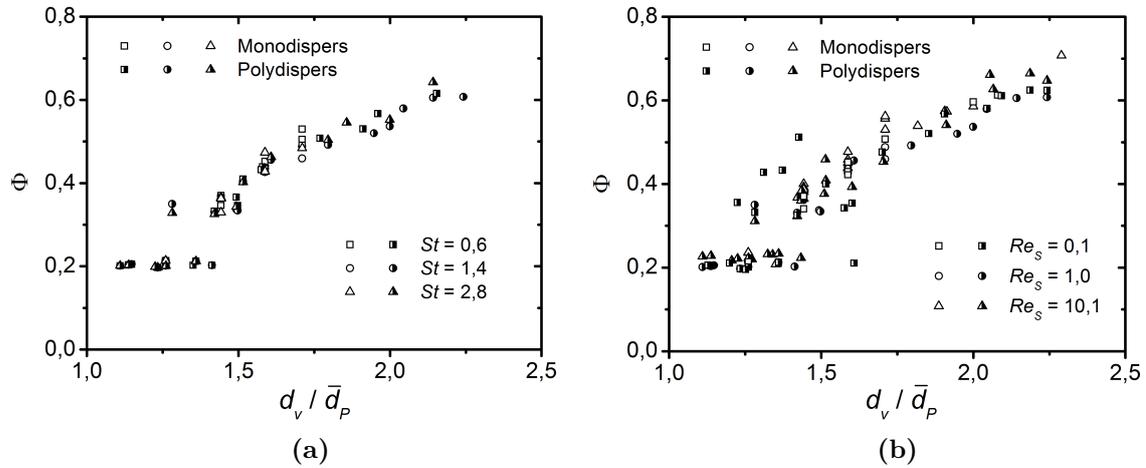
$$N_{PP} = k_f \left( \frac{R_g}{r_P} \right)^{D_f} \quad (6.12)$$

worin  $r_P$  der Radius gleich großer Primärpartikel,  $k_f$  ein Strukturkoeffizient und  $D_f$  die fraktale Dimension der Agglomerate ist. Die fraktalen Vorfaktoren  $k_f$  und  $D_f$  sind für Cluster-Cluster- und Partikel-Cluster-Kollisionen in Tabelle 6.2 zusammengefasst.



**Abb. 6.18.** Vergleich der gemittelten DNS basierten Anzahl  $N_{PP}$  monodisperser Primärpartikel je Agglomerat (*offene Symbole*) mit theoretischen Vorhersagen von Brasil *et al.* (2001) als Funktion des Schwerpunktradius mit (a) der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  und (b) der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  als Parameter. Die Vorhersagen beziehen sich auf Agglomerate, die durch Partikel-Cluster- (P-C, *durchgezogene Linie*) und Cluster-Cluster-Kollisionen (C-C, *gestrichelte Linie*) entstanden sind. Der Schwerpunktradius  $R_g$  ist mit Hilfe des Primärpartikelradius  $r_P$  normiert und berücksichtigt die detektierten Minimal- und Maximalwerte (*horizontale Balken*).

Die aus Gleichung (6.12) resultierenden C-C- und P-C-Approximationen von  $N_{PP}$  werden in Abbildung 6.18 mit den vorliegenden DNS-Daten verglichen. Demnach korrelieren die aus den Abbildungen 6.12b, 6.14b und 6.17 verknüpften Daten trotz der geringen Anzahl agglomerierter Primärpartikel tendenziell mit den aus dem Cluster-Cluster-Modell stammenden  $N_{PP}$ , wohingegen das Partikel-Cluster-Modell keine Übereinstimmung mit den Simulationsdaten aufweist. Während in der von Brasil *et al.* (2001) angewandten Langevin-Dynamik sich annähernde Teilchen aufgrund der unberücksichtigten fluiddynamischen Wechselwirkung in jedem Fall kollidieren, können Partikel in der DNS gegebenenfalls von ihrem ursprünglichen Kollisionskurs abgelenkt werden. Dies führt insbesondere im Vergleich zum Partikel-Cluster-Modell zu geringeren  $N_{PP}$ . Darüber hinaus ist in der LBM basierten DNS eine Kollision zwischen Agglomeraten durch die zugrundeliegenden Trägheitseffekte wahrscheinlicher, wodurch das Cluster-Cluster-Modell gegenüber dem Partikel-Cluster-Modell besser mit den Simulationsdaten korreliert. Wie Abbildung 6.18 zeigt, haben viskose Kräfte einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die Annäherung und Kollision von Teilchen. Sie sollten daher besondere Beachtung bei der Modellierung von Agglomerationsprozessen finden.



**Abb. 6.19.** Verteilung der Porosität  $\Phi$  von Agglomeraten als Funktion des Durchmessers  $d_v$  der volumenäquivalenten Kugel mit (a) der Partikel-Stokes-Zahl  $St$  und (b) der scherinduzierten Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_S$  als Parameter. *Offene Symbole* kennzeichnen eine monodisperse, *halb geschlossene Symbole* eine polydisperse Größenverteilung der injizierten Primärpartikel. Der Kugeldurchmesser  $d_v$  ist mit Hilfe des mittleren Durchmessers  $\bar{d}_P$  normiert.

Neben dem Schwerpunktradius wird die Porosität als zweiter morphologischer Parameter zur Charakterisierung der entstandenen Agglomerate herangezogen. Die Porosität  $\Phi$  definiert sich nach Gleichung (6.7) aus dem Verhältnis von Hohlraumvolumen zu verdrängtem Agglomeratvolumen (Dietzel & Sommerfeld 2013). Gemäß Abbildung 6.19 besitzen kompakte Strukturen wie Dubletten und Triplets, die während der ersten Simulationsphase entstanden sind, kleine Porositäten. Mit steigender Anzahl agglomerierter Primärpartikel und somit größer werdender Agglomeratstruktur steigt  $\Phi$  sukzessive an. Infolge der Kollision mit Primärpartikeln und weiteren Agglomeraten liegen im Bereich  $d_v/\bar{d}_P < 2,0$  flockig strukturierte Agglomerate vor, die über einen Maximalwert von  $\Phi = 0,63$  bei den betrachteten  $St$  (siehe Abbildung 6.19a) und  $\Phi = 0,71$  mit  $Re_S$  als Parameter (siehe Abbildung 6.19b) verfügen. Wie schon bei Sphärizität und Schwerpunktradius sind auch bei der Porosität der analysierten Agglomerate keine klaren Tendenzen bezogen auf die Größenverteilung der Primärpartikel sowie die variierten  $St$  und  $Re_S$  identifizierbar. Lediglich die Streubreite der Porosität ist bei vergleichbarem  $d_v/\bar{d}_P$  im Fall verschiedener  $Re_S$  größer als bei den analysierten  $St$ .

Die mittels LBM ermittelten Partikelkräfte und Drehmomente zeigen zusammenfassend eine gute Übereinstimmung mit den herangezogenen FEM-Daten. Aus diesem Grund ist das im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Verfahren zur Rekonstruktion fehlender Verteilungsfunktionen des Fluids für Spaltabstände unterhalb der Auf-

lösungsgrenze des Rechengitters auch für strukturierte Teilchen wie Agglomerate geeignet.

Anhand der transienten Analyse des Agglomerationsverhaltens eines aus 50 Primärpartikeln bestehenden Clusters wurde zudem die Leistungsfähigkeit der vorliegenden LBM für größere Partikelanzahlverteilungen demonstriert. Die in diesem Zusammenhang vorgestellten Strukturparameter ermöglichten darüber hinaus detaillierte Einblicke in den Entstehungsprozess der Agglomerate.

Der Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung auf die Agglomeration von Primärpartikeln wurde in ebenen, laminaren Scherschichten durch einen Vergleich der Agglomerationszeiten für mono- und polydisperse Systeme bei verschiedenen Partikel-Stokes- und Partikel-Reynolds-Zahlen diskutiert. In dieser Studie wurde gezeigt, dass die Kollision zwischen Primärpartikeln und Agglomeraten durch die fluiddynamische Wechselwirkung maßgeblich beeinflusst wird. Aus den analysierten Strukturparametern der Agglomerate lassen sich jedoch keine stichhaltigen Rückschlüsse auf fluiddynamische Effekte ziehen.

## 7 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht das Clustering sowie die Kollision- und Agglomeration von Feststoffteilchen in laminaren und turbulenten Strömungen. Unter Anwendung direkter numerischer Simulationen (DNS) wurde der Einfluss verschiedener Randbedingungen wie die Trägheit der Teilchen, der Volumenanteil der dispersen Phasen sowie die Gegenwart von Partikel-Partikel-Kollisionen auf das mesoskalige Bewegungs- und Clusteringverhalten sphärischer Partikel analysiert. Darüber hinaus wurde mit Hilfe eines zweiten mikroskaligen DNS-Ansatzes die fluiddynamische Wechselwirkung von aufgelösten Partikeln kurz vor ihrer Kollision sowie die strömungsinduzierte Agglomeration aufgelöster Primärpartikel ausgewertet und die aus den Simulationen hervorgehenden Agglomeratstrukturen morphologisch charakterisiert.

Das zu diesem Zweck eingesetzte Berechnungsprogramm basiert auf der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) und wurde ursprünglich für die Bestimmung von Widerstands-, Auftriebs- und Drehmomentbeiwerten sphärischer und nicht-sphärischer Teilchen entwickelt. Die LBM beschreibt das Verhalten von Fluiden auf mesoskopischer Ebene und eignet sich daher im Besonderen für die Analyse meso- und mikroskaliger Partikelsysteme mit komplexen Geometrien. In den vorgestellten Untersuchungen wurde der strömungsinduzierte Transport der Partikel in verschiedenen Strömungs- und Turbulenzstrukturen auf Grundlage einer meso- und mikroskopischer Betrachtungsweise der Teilchen untersucht, deren zugrundeliegende Modellierungsansätze in Kapitel 2 detailliert dargelegt wurden. In Kapitel 3 wurde der einphasige Strömungslöser mit Hilfe experimentell ermittelter Fluidgeschwindigkeitsprofile, die in einer laminaren Kanalströmung mit rückwärtsgerandeter Stufe gemessen wurden, validiert.

Da die mesoskopische Betrachtung zehntausender Einzelpartikel mit numerisch aufgelösten Oberflächen aufgrund des erheblichen Rechenaufwandes derzeit technisch nicht möglich ist, wurde der LBM-Strömungslöser um ein auf der Diskreten-Partikel-Methode basierendes Modul erweitert. Die Berechnung der Partikelbahnen erfolgte hierbei in einem Lagrangeschen Bezugssystem, in dem die diskreten Teilchen als Partikel angenommen wurden. Um eine zeitlich gekoppelte Berechnung von Fluidströmung und Partikelbewegung zu realisieren, wurde ein adaptives Verfahren zur sequentiellen Bestimmung der Partikelzeitschritte entwickelt. Die sequentielle Erkennung und Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen beruhte in den Simulationen auf einem deterministischen Kollisionsmodell. Dessen Funktionsweise wurde in Kapitel 4 in einem fluidfreien Partikelsystem anhand verschiedener analytischer Ver-

teilungsfunktionen validiert. Der Transport der Partikel erfolgte in instationärer, homogener isotroper Turbulenz. Auf diese Weise wurden äußere Einflüsse auf die partikelbeladene Strömung durch beispielsweise Einlass- und Auslassrandbedingungen ausgeschlossen. Das im Rahmen dieser Studie implementierte stochastische Anregungsverfahren basiert auf der Pseudo-Spektral-Methode. Das Anregungsverfahren wurde in Kapitel 3 mit Hilfe unterschiedlich diskretisierter Rechengebiete evaluiert und die berechneten Energiespektren mit in der Literatur verfügbaren Mess- und Korrelationsdaten verglichen.

Um die Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzen und die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln bei Kollisions- und Agglomerationsereignissen detailliert zu erfassen, erfolgte die Behandlung von Teilchen auf mikroskaliger Ebene mit Hilfe aufgelöster Partikeloberflächen. Die zur Modellierung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen angewandte stationäre Bounce-Back-Randbedingung wurde um eine sogenannte Refill-Methode erweitert. In Verbindung mit ebenfalls ergänzten Bewegungsgleichungen für die Translation und Rotation konnten sich die Primärpartikel und Agglomerate in den Simulationen frei durch das Strömungsgebiet bewegen. Darüber hinaus wurde ein LBM basiertes Rekonstruktionsschema für fehlende Verteilungsfunktionen des Fluids entwickelt, um eine artifizielle Anziehung der Partikel unterhalb der Auflösungsgrenze des Fluids zu verhindern. Die Modellierung der Agglomeration von Partikeln erfolgte analog zu den Partikel-Partikel-Kollisionen auf Grundlage eines deterministischen Agglomerationsmodells.

Das Clustering sphärischer Partikel wurde in Kapitel 4 unter Anwendung der globalen Partikelakkumulation, Korrelationsdimension, radialen Partikelpaarkorrelation sowie der Minkowski-Funktionale analysiert. Mit Hilfe dieser Methoden wurde der Effekt von Partikel-Partikel-Kollisionen, des Feststoffvolumenbruchs  $\alpha_P$  und der Partikelträgheit, repräsentiert durch die Partikel-Stokes-Zahl  $St_K$ , quantifiziert und diskutiert. Beispielsweise wurde anhand des Verhaltens der Minkowski-Funktionale gezeigt, dass Partikel mit kleinen und großen Partikel-Stokes-Zahlen tendenziell einer Poisson-Verteilung folgten und somit nahezu gleichmäßig im würfelförmigen Rechengebiet suspendiert waren, während Teilchen mit mittleren  $St_K$  zur Bildung lokal ebener Strukturen und folglich zur Clusterbildung neigten. Zusammenfassend wurde anhand der vorliegenden Analysen ein maximales Clustering der in homogener isotroper Turbulenz suspendierten Teilchen bei  $St_K \approx 1$  beobachtet. Ferner deuteten die ermittelten Parameter der Akkumulation und Korrelationsdimension auf eine größtmögliche Entmischung der untersuchten Partikelkonzentrationen bei  $St_K = 1,25$  hin, wohingegen die radialen Partikelverteilungen für minimale Separationsabstände den in der Literatur mehrheitlich genannten Wert von  $St_K = 1$  aufwiesen. Unter Berücksichtigung vergleichbarer Partikel-Stokes-Zahlen wurde das Clustering der Partikel im Wesentlichen durch die betrachteten Volumenbrüche geprägt, wohingegen

Partikel-Partikel-Kollisionen die bevorzugte Konzentration der Teilchen insbesondere im Bereich kleiner  $St_K$  nur marginal beeinflussten. Eine Aufweitung der räumlichen Ausdehnung von Partikelclustern infolge interpartikulärer Wechselwirkungen wurde lediglich bei mittleren Partikel-Stokes-Zahlen für den größten untersuchten Volumenanteil beobachtet. Diese wenn auch kleine Reduzierung steht allerdings im Widerspruch zu den Interpretationen von Fede & Simonin (2010), die durch Partikel-Partikel-Kollisionen eine Zunahme der Akkumulation und somit des Clusterings schlussfolgerten.

Des Weiteren stieg die Frequenz interpartikulärer Wechselwirkungen mit zunehmender Partikelträgheit sukzessive an. Zugleich nahmen die ermittelten Kollisionsraten für vergleichbare  $St_K$  mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu, wenngleich unterschiedliche  $\alpha_P$  nur einen geringen Einfluss auf die erzielten Kollisionsfrequenzen ausübten. Anhand der Eulerschen Raumkorrelation von Partikelpaaren wurde darüber hinaus ersichtlich, dass die Relativgeschwindigkeiten kollidierender Teilchen für große  $St_K$  aufgrund ihrer größeren mittleren radialen Komponenten deutlich von den Relativgeschwindigkeiten benachbarter Partikel abwichen. Dieses Verhalten ist insbesondere für die Weiterentwicklung stochastischer Kollisionsmodelle von großer Bedeutung, da die turbulenten Partikelschwankungsgeschwindigkeiten fiktiver Kollisionspartner bislang auf korrelierten Relativgeschwindigkeiten benachbarter Teilchen beruhen. Aus diesem Grund wurden für die in dieser Studie untersuchten Feststoffvolumenbrüche funktionale Formen entwickelt, die die Eulerschen Raumkorrelationen kollidierender Teilchen in Abhängigkeit von  $\alpha_P$  und  $St_K$  approximieren.

Die Modellierung der LBM basierten Bewegung und Kollision aufgelöster Partikel wurde in Kapitel 5 schrittweise überprüft. In einem ersten Schritt wurde zunächst die Bewegung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen mit Hilfe eines oszillierenden Partikels evaluiert. Trotz der Erzeugung und Entfernung von in Summe mehr als 40 Fluidzellen zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten war die strömungsinduzierte Partikelkraft während einer künstlich aufgeprägten Oszillationsperiode lediglich geringen Schwankungen unterworfen. In einem zweiten Schritt wurde in mehreren Simulationsläufen die Sedimentation eines sphärischen Partikels in Behältern untersucht, die mit verschiedenen Silikonölen gefüllt waren. Die für die Lagrangesche Partikelbewegung entwickelten Bewegungsgleichungen führten in diesen Untersuchungen zu Sinkgeschwindigkeiten der Partikel, die gut mit Particle Image Velocimetry-Messungen übereinstimmten. Für die Bewertung der strömungsinduzierten Wechselwirkung zwischen aufgelösten Partikeln wurde im Anschluss die Annäherung, Kollision und Taumelbewegung zweier hintereinander sedimentierender Kugeln analysiert. Die im Wesentlichen gute Kongruenz der ermittelten Sinkgeschwindigkeiten mit Simulationsdaten auf Basis Fiktiver-Domain-Methoden demonstrierten vergleichbare fluiddynamische Wechselwirkungen im Nahbereich der sich annähern-

den Teilchen sowie eine physikalisch plausible Berechnung der Partikelkräfte für Spaltabstände unterhalb der Auflösungsgrenze des numerischen Rechengitters.

Im letzten Testfall dieses Kapitels wurde die Bewegung sich annähernder Partikel in ebenen Scherströmungen untersucht, um den Einfluss viskoser Kräfte auf die kurzreichweitigen fluiddynamischen Verdrängungseffekte zu quantifizieren. In den Berechnungen stieg die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Partikel-Partikel-Kollisionen sowohl mit zunehmender Trägheit als auch mit kleiner werdendem initialen Partikelversatz an. Darüber hinaus demonstrierten die Ergebnisse, dass die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen kollidierenden Teilchen für die Bildung von Agglomeraten insbesondere bei geringer Trägheit der Partikel bedeutsam ist.

Abschließend wurde in Kapitel 6 die Agglomeration und der Transport von Primärpartikeln und Agglomeraten mit aufgelösten Oberflächen in verschiedenen laminaren Strömungen direkt numerisch simuliert. Um die LBM basierte Behandlung strömungsinduzierter Partikelkräfte für Spaltweiten zwischen den Primärpartikeln, die unterhalb der Auflösungsgrenze des numerischen Rechengitters liegen, zu evaluieren, wurde im ersten Schritt die Umströmung im Raum fixierter Agglomerate mit Berechnungen einer Finiten-Element-Methode (FEM) verglichen. Die mittels LBM bestimmten Partikelkräfte und Drehmomente zeigten zusammenfassend eine gute Übereinstimmung mit den herangezogenen FEM-Daten, sodass das im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Rekonstruktionsverfahren auch für komplex strukturierte Teilchen wie Agglomerate geeignet ist.

Im Anschluss wurde die Sedimentation und Agglomeration eines aus 50 Primärpartikeln bestehenden Clusters analysiert und dadurch die Leistungsfähigkeit der vorliegenden LBM für größere Partikelanzahlverteilungen demonstriert. Die in diesem Zusammenhang vorgestellten Strukturparameter ermöglichten darüber hinaus detaillierte Einblicke in den Entstehungsprozess der Agglomerate. Der Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung auf die Agglomeration von Primärpartikeln wurde abschließend in ebenen, laminaren Scherschichten durch einen Vergleich der Agglomerationszeiten für mono- und polydisperse Systeme bei verschiedenen Partikel-Stokes- und Partikel-Reynolds-Zahlen diskutiert. In dieser Studie wurde gezeigt, dass die Kollision zwischen Primärpartikeln und Agglomeraten durch die fluiddynamische Wechselwirkung maßgeblich beeinflusst wird. Aus den analysierten Strukturparametern der Agglomerate lassen sich jedoch keine stichhaltigen Rückschlüsse auf fluiddynamische Effekte ziehen.

Gleichwohl sind weitere Simulationen in komplexeren Strömungs- und Turbulenzstrukturen erforderlich, um die Agglomeration von Partikeln im prozessrelevanten Industriemaßstab vorhersagen zu können. Im Gegensatz zu anderen hochauflösenden Methoden, wie die FEM, bietet die LBM zur Anpassung zeitveränderlicher Partikel-Fluid-Phasengrenzen eine sehr effiziente Methodologie, da die Grundstruktur des

regulären, äquidistanten Rechengitters unverändert bleibt. Um eine Vergleichbarkeit mit den in dieser Arbeit vorgestellten DPM-Analysen in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Teilchen zu erzielen, ist eine Auflösung der kleinsten turbulenten Längenskalen mit mindestens zehn Fluidzellen erforderlich, infolgedessen das würfelförmige Rechengbiet mit  $1.024^3$  Gitterzellen zu diskretisieren wäre. Mit Blick auf die zu erwartenden Rechenzeiten bedingt dies jedoch eine effizientere Parallelisierung des Strömungslösers.

Weiterführende Untersuchungen sollten darüber hinaus, neben einem additiven Wechselwirkungspotenzial bestehend aus Van-der-Waals-Anziehung und elektrostatischer Abstoßung, eine künstliche Rückstellkraft berücksichtigen, die den Teil des Fluids modelliert, der nicht direkt durch das numerische Rechengitter aufgelöst wird. Unter Berücksichtigung verschiedener Mechanismen, wie fluiddynamische Verdrängungseffekte sowie Van-der-Waals-Anziehung und elektrostatische Abstoßung, sollte es schließlich möglich sein, Agglomerationsvorgänge realitätsnah direkt numerisch zu simulieren. In den Berechnungen könnten neben der Entstehung, die Restrukturierung und der Zerfall von Agglomeraten betrachtet werden. Durch eine Vielzahl von Simulationen könnten schließlich Korrelationen entwickelt werden, um die Agglomeratmorphologie in Abhängigkeit der gewählten Randbedingungen realistisch vorherzusagen.

Eine Erhöhung des Volumenanteils in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Punktpartikel könnte mit einer Steigerung der Kollisionsrate in den Partikelclustern einhergehen, sodass die Teilchen durch Kollision mit ebenfalls im Cluster befindlichen Partikeln am Verlassen des Clusters gehindert werden. Dieser Mechanismus würde jedoch eine kollektive Bewegung der Partikel in den Clustern voraussetzen, bei dem Mehrfachkollisionen zwischen den selben Partikelpaaren auftreten. Darüber hinaus könnte sich die mittlere radiale Relativgeschwindigkeit zwischen häufig kollidieren Partikelpaaren nochmals erhöhen, wenn Teilchen eines Partikelpaares zwischen aufeinanderfolgenden Kollisionen mit weiteren Teilchen kollidieren und dadurch beschleunigt werden. In diesem Kontext ist die Kollisionsrate von Partikelpaaren sowie die Verweilzeit von Partikeln in individuellen Clustern von besonderem Interesse. Diese Analysen könnten ein von Larsen *et al.* (2014) mit Hilfe von Niederschlagsmessern beobachtetes Phänomen fundieren, wonach kleine Regentropfen mit bis zu 60 % höheren Geschwindigkeiten zur Erde fallen als es theoretisch möglich wäre.

# A Anhang

## A.1 Trilineare Interpolationsmethode

Die trilineare Interpolation wird in dieser Arbeit angewandt, um einen lokalen Wert an der Position  $\mathbf{x}$  in einem strukturierten, äquidistanten, dreidimensionalen Rechengitter zu approximieren. Abbildung A.1 zeigt die zur Interpolation der lokalen Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{F@P}$  an der Partikelposition  $\mathbf{x}_P$  zum Zeitpunkt  $t$  verwendeten Eck- und Stützpunkte. Der Eckpunkt  $\mathbf{x}_{BSW}$  entspricht in diesem Schema der Position des Fluidknotens in der Gitterzelle, in der sich  $\mathbf{x}_P$  befindet. Ferner kennzeichnen die verbleibenden sieben Eckpunkte die Position der in positiver Achsrichtung nächstgelegenen Fluidknoten. Der normierte Relativabstand  $\boldsymbol{\beta}$  zwischen  $\mathbf{x}_P$  und  $\mathbf{x}_{BSW}$  ist mit:

$$\begin{aligned}\beta_x &= \frac{x_P - x_{BSW}}{\Delta x}, \\ \beta_y &= \frac{y_P - y_{BSW}}{\Delta x}, \\ \beta_z &= \frac{z_P - z_{BSW}}{\Delta x}\end{aligned}\tag{A.1}$$

definiert, worin  $\Delta x$  der räumlichen Diskretisierung der jeweiligen Gitterzelle entspricht. Auf Basis vier linearer Interpolationen entlang der x-Achsen werden zunächst die Fluidgeschwindigkeiten an den Positionen  $\mathbf{x}_{BS}$ ,  $\mathbf{x}_{BN}$ ,  $\mathbf{x}_{TS}$  und  $\mathbf{x}_{TN}$  approximiert:

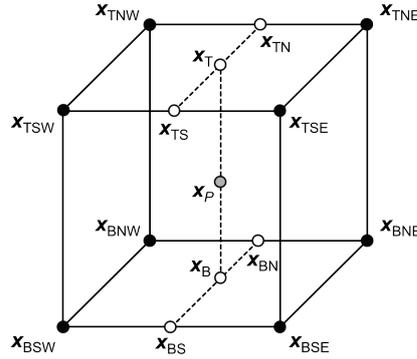
$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{BS} &= (1 - \beta_x) \mathbf{u}_{BSW} + \beta_x \mathbf{u}_{BSE}, \\ \mathbf{u}_{BN} &= (1 - \beta_x) \mathbf{u}_{BNW} + \beta_x \mathbf{u}_{BNE}, \\ \mathbf{u}_{TS} &= (1 - \beta_x) \mathbf{u}_{TSW} + \beta_x \mathbf{u}_{TSE}, \\ \mathbf{u}_{TN} &= (1 - \beta_x) \mathbf{u}_{TNW} + \beta_x \mathbf{u}_{TNE}\end{aligned}\tag{A.2}$$

Im zweiten Schritt erfolgt die Berechnung der vektoriellen Geschwindigkeitsanteile des Fluids an den Positionen  $\mathbf{x}_B$  und  $\mathbf{x}_T$  unter Anwendung zweier linearer Interpolationen in y-Richtung:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_B &= (1 - \beta_y) \mathbf{u}_{BS} + \beta_y \mathbf{u}_{BN}, \\ \mathbf{u}_T &= (1 - \beta_y) \mathbf{u}_{TS} + \beta_y \mathbf{u}_{TN}\end{aligned}\tag{A.3}$$

Die Fluidgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_{F@P}$  an der Partikelposition  $\mathbf{x}_P$  wird abschließend mit Hilfe einer weiteren linearen Interpolation in z-Richtung bestimmt:

$$\mathbf{u}_{F@P} = (1 - \beta_z) \mathbf{u}_B + \beta_z \mathbf{u}_T\tag{A.4}$$



**Abb. A.1.** Indizierung der zur trilinearen Interpolation eines Wertes an der Partikelposition  $\mathbf{x}_P$  verwendeten Eck- und Stützpunkte.

In diesem Zusammenhang ist das Ergebnis der trilinearen Interpolation,  $\mathbf{u}_{F@P}$ , unabhängig von der Reihenfolge der zuvor definierten Interpolationsschritte.

## A.2 Grundgleichungen der Frequenzanalyse

Die Berechnung von Partikelbahnen unter Verfolgung diskreter Massepunkte basiert auf den in Kapitel 2.3.1 definierten Partikelbewegungsgleichungen. Die nach Basset, Boussinesq und Oseen benannte und von Maxey & Riley (1983) angepasste BBO-Partikelbewegungsgleichung (2.29) beinhaltet verschiedene Kraftterme. Den Beitrag einzelner Kräfte an dem Bewegungsverhalten von Partikeln in viskosen Fluiden lässt sich mit Hilfe der von Hjelmfelt & Mockros (1966) vorgeschlagenen Frequenzanalyse ermitteln. Zu diesem Zweck wird die BBO-Bewegungsgleichung wie folgt vereinfacht:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}_P}{dt} + A \mathbf{u}_P + C \int_0^t \frac{d\mathbf{u}_P}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \\ = A \mathbf{u}_{F@P} + B \frac{d\mathbf{u}_{F@P}}{dt} + C \int_0^t \frac{d\mathbf{u}_{F@P}}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

worin  $A$ ,  $B$  und  $C$  Koeffizienten vom Typ I sind<sup>9</sup>:

$$\begin{aligned} A &= \frac{18 \nu}{\left(\frac{\rho_P}{\rho} + \frac{1}{2}\right) d_P^2}, \\ B &= \frac{3}{2 \left(\frac{\rho_P}{\rho} + \frac{1}{2}\right)}, \\ C &= \frac{9}{\left(\frac{\rho_P}{\rho} + \frac{1}{2}\right) d_P} \left(\frac{\nu}{\pi}\right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Die Vernachlässigung des Basset-Terms führt zu den Koeffizienten des Typs II:

$$A = \frac{18 \nu}{\left(\frac{\rho_P}{\rho} + \frac{1}{2}\right) d_P^2}, \quad B = \frac{3}{2 \left(\frac{\rho_P}{\rho} + \frac{1}{2}\right)}, \quad C = 0 \quad (\text{A.7})$$

Wird sowohl die virtuelle Masse des Fluids als auch der Basset-Term vernachlässigt, vereinfachen sich die Koeffizienten zum Typ III:

$$A = \frac{18 \nu \rho}{d_P^2 \rho_P}, \quad B = \frac{\rho}{\rho_P}, \quad C = 0 \quad (\text{A.8})$$

Eine zusätzliche Vernachlässigung von Druckgradienten in der Strömung resultiert schließlich zu:

$$A = \frac{18 \nu \rho}{d_P^2 \rho_P}, \quad B = C = 0 \quad (\text{A.9})$$

welche als Typ IV-Approximation bezeichnet wird. Unter Annahme eines stationären Zustands der Strömung lassen sich die in Gleichung (A.5) enthaltenen Fluid- und Partikelgeschwindigkeiten,  $u_{F@P}$  und  $u_P$ , durch ihre Fourier-Integrale darstellen (Hinze 1975):

$$\begin{aligned} u_{F@P} &= \int_0^\infty [a \cos(\omega_S t) + b \sin(\omega_S t)] d\omega_S, \\ u_P &= \int_0^\infty [a_P \cos(\omega_S t) + b_P \sin(\omega_S t)] d\omega_S \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Die Substitution von  $u_{F@P}$  und  $u_P$  aus Gleichung (A.10) in Gleichung (A.5) ergibt für das Fourier-Integral der Partikelgeschwindigkeit folgende Fourier-Koeffizienten:

$$\begin{aligned} a_P &= (1 + f_1) a + f_2 b, \\ b_P &= -f_2 a + (1 + f_1) b \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

<sup>9</sup>In der von Hjelmfelt & Mockros (1966) vorgestellten Herleitung ist der Partikeldurchmesser  $d_P$  zur Berechnung des Koeffizienten  $C$  in Gleichung (A.6) nicht enthalten.

worin  $f_1$  und  $f_2$  mit:

$$f_1 = \frac{\omega_S \left( \omega_S + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right) (B - 1)}{\left( A + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right)^2 + \left( \omega_S + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right)^2},$$

$$f_2 = \frac{\omega_S \left( A + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right) (B - 1)}{\left( A + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right)^2 + \left( \omega_S + C \sqrt{\frac{\pi \omega_S}{2}} \right)^2}$$
(A.12)

definiert sind (Hjelmfelt & Mockros 1966). Durch Einführung des Phasenwinkels  $\varphi$  und des Amplitudenverhältnisses  $\hat{y}$  vereinfacht sich das Fourier-Integral der Partikelgeschwindigkeit unter Anwendung des Fourier-Integrals der Fluidgeschwindigkeit und der Kreisfrequenz  $\omega_S$  nach Hjelmfelt & Mockros (1966) zu:

$$u_P = \int_0^\infty \{ \hat{y} [a \cos(\omega_S t + \varphi) + b \sin(\omega_S t + \varphi)] \} d\omega_S$$
(A.13)

mit:

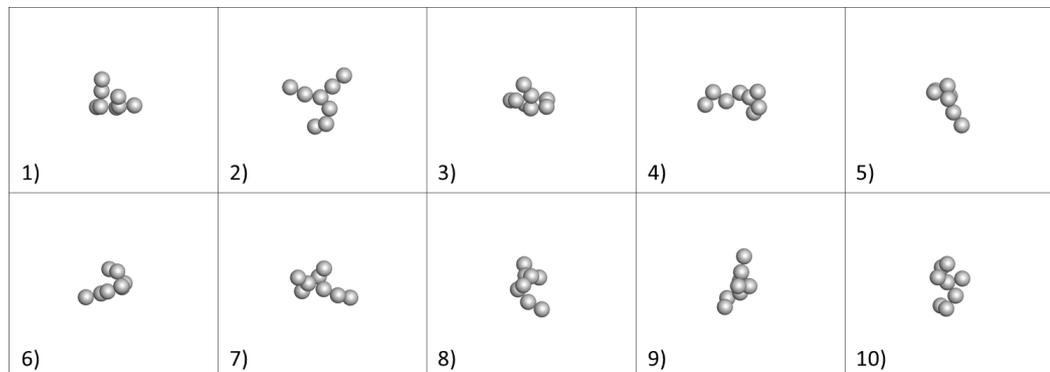
$$\hat{y} = \sqrt{(1 + f_1)^2 + (f_2)^2}$$
(A.14)

$$\varphi = \arctan \left( \frac{f_2}{1 + f_1} \right)$$
(A.15)

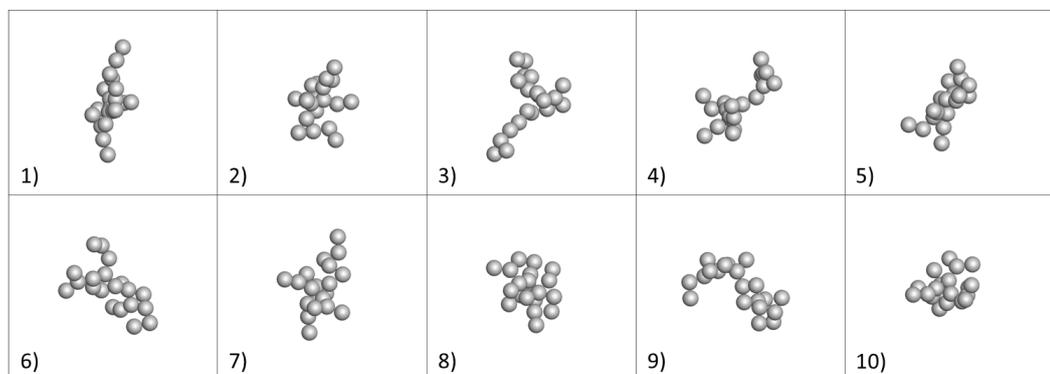
Durch Berechnung eines Amplituden- und Phasenspektrums der Kreisfrequenz in Abhängigkeit der approximierten Koeffizienten des Typs I-IV ist es möglich, den Einfluss einzelner Kräfte auf das Bewegungsverhalten von Partikeln in viskosen Fluiden zu bewerten.

### A.3 Analytierte Agglomeratstrukturen

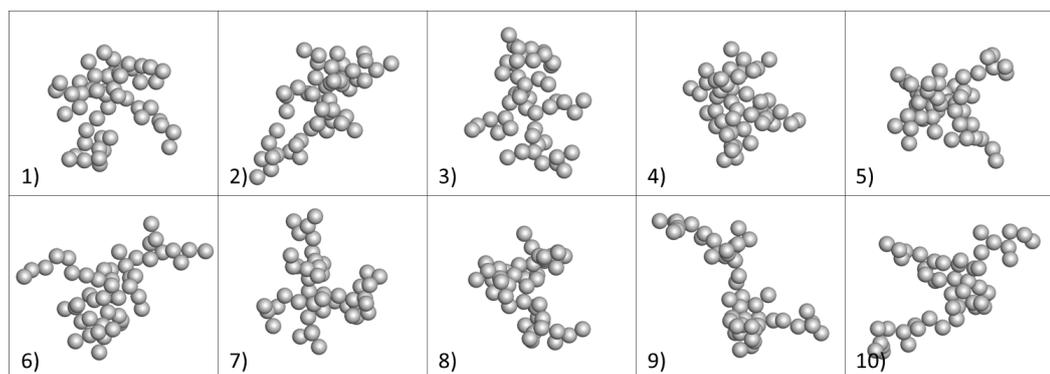
Für die Berechnung des in Abbildung 6.6 dargestellten Gesamtdrehmoments wurden jeweils zehn Agglomerate gleichen Strukturtyps und Größe generiert und anschließend die scherinduzierten Fluid-Partikel-Wechselwirkungen analysiert. Abbildung A.2 zeigt offen strukturierte Agglomerate, die unter Anwendung einer diffusionslimitierten Agglomeration von Primärpartikeln mit Clustern entstanden sind (Witten & Sander 1983). Demgegenüber gehen die in Abbildung A.3 dargestellten kompakten Agglomeratstrukturen aus einem von Becker *et al.* (2009) und Seto *et al.* (2011) angepassten Diffusionsprozess hervor. Die in den Abbildungen A.2 und A.3 gezeigten Agglomerate setzen sich jeweils aus 8, 20 und 50 gleich großen Primärpartikeln zusammen.



(a)

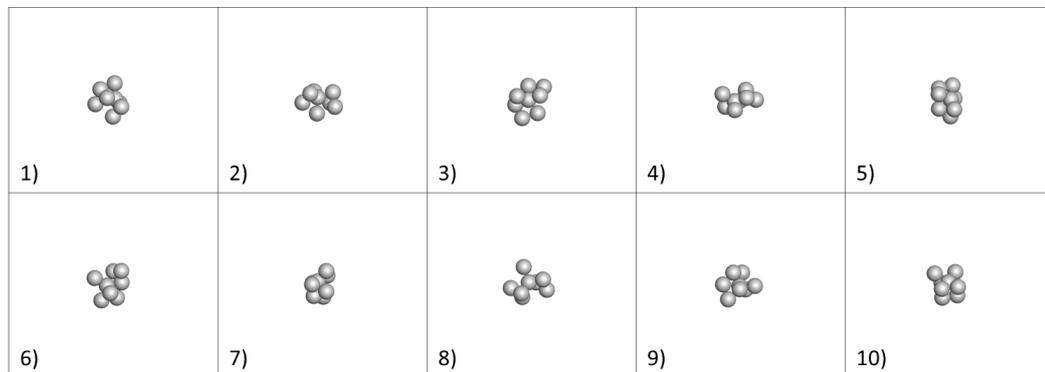


(b)

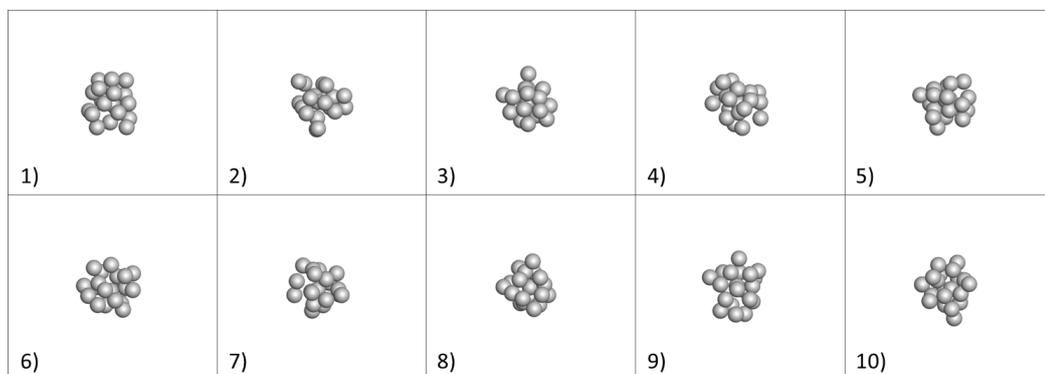


(c)

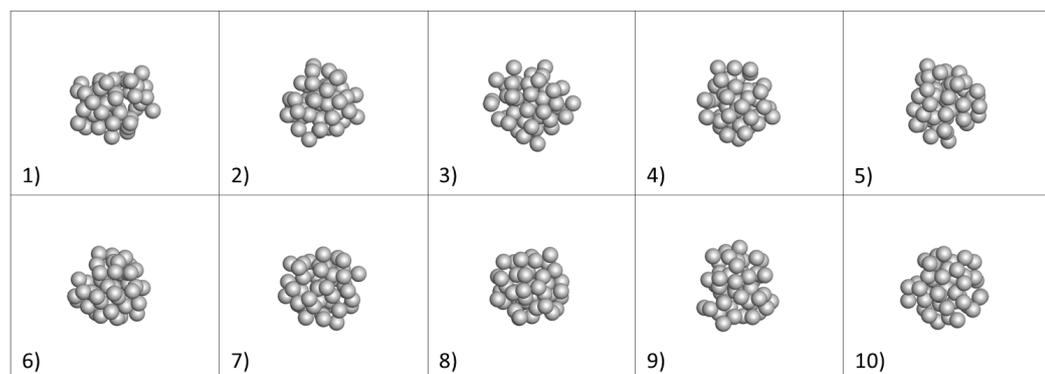
**Abb. A.2.** Übersicht zu den zur Berechnung des scherinduzierten Gesamtdrehmomentes analysierten offenen Agglomeraten mit 8, 20 und 50 Primärpartikeln (*von oben nach unten*).



(a)



(b)



(c)

**Abb. A.3.** Zusammenfassung der zur Berechnung des scherinduzierten Gesamtdrehmomentes untersuchten kompakten Agglomerate mit 8, 20 und 50 Primärpartikeln (*von oben nach unten*).

## Literaturverzeichnis

- Abrahamson, J. (1975): „Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid“. *Chemical Engineering Science*, **30**, S. 1371–1379.
- Alexander, P. (2004): „High order computation of the history term in the equation of motion for a spherical particle in a fluid“. *Journal of Scientific Computing*, **21**, S. 129–143.
- Alipchenkov, V. M. und Zaichik, L. I. (2001): „Particle collision rate in turbulent flow“. *Fluid Dynamics*, **36**, S. 608–618.
- Allen, M. P. und Tildesley, D. J. (1987): *Computer simulation of liquids*. Oxford University Press, New York.
- Alvelius, K. (1999): „Random forcing of three-dimensional homogeneous turbulence“. *Physics of Fluids*, **11**, S. 1880–1889.
- Armaly, B. F., Durst, F., Pereira, J. C. F. und Schönung, B. (1983): „Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **127**, S. 473–496.
- Auton, T., Hunt, J. C. R. und Prud'homme, M. (1988): „The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **197**, S. 241–257.
- Ayala, O., Rosa, B., Wang, L.-P. und Grabowski, W. W. (2008): „Effects of turbulence on the geometric collision rate of sedimenting droplets: part 1. Results from direct numerical simulation“. *New Journal of Physics*, **10**, S. 075015.
- Bäbler, M. U., Moussa, A. S., Soos, M. und Morbidelli, M. (2010): „Structure and kinetics of shear aggregation in turbulent flows. I. Early stage of aggregation“. *Langmuir*, **26**, S. 13142–13152.
- Babovsky, H. (1989): „A convergence proof for Nanbu's Boltzmann simulation scheme“. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, **1**, S. 41–45.
- Barkley, D., Gomes, M. G. M. und Henderson, R. D. (2002): „Three-dimensional instability in flow over a backward-facing step“. *Journal of Fluid Mechanics*, **473**, S. 167–190.

- Barton, I. E. (1995): „Computation of particle tracks over a backward-facing step“. *Journal of Aerosol Science*, **26**, S. 887–901.
- Basset, A. B. (1888): *Treatise on hydrodynamics*. Deighton, Bell & Co., London.
- Bec, J. (2005): „Multifractal concentrations of inertial particles in smooth random flows“. *Journal of Fluid Mechanics*, **528**, S. 255–277.
- Bec, J., Celani, A., Cencini, M. und Musacchio, S. (2005): „Clustering and collisions of heavy particle in random smooth flows“. *Physics of Fluids*, **17**, S. 073301.
- Bec, J., Cencini, M. und Hillerbrand, R. (2007): „Heavy particles in incompressible flows: The large Stokes number asymptotics“. *Physica D*, **226**, S. 11–22.
- Bec, J., Cencini, M., Hillerbrand, R. und Turitsyn, K. (2008): „Stochastic suspensions of heavy particles“. *Physica D*, **237**, S. 2037–2050.
- Becker, V., Schlauch, E., Behr, M. und Briesen, H. (2009): „Restructuring of colloidal aggregates in shear flows and limitations of the free-draining approximation“. *Journal of Colloid and Interface Science*, **339**, S. 362–372.
- Behr, M. und Tezduyar, T. (1994): „Finite element solution strategies for large-scale flow simulations“. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **112**, S. 3–24.
- Bhatnagar, P. L., Gross, E. P. und Krook, M. (1954): „A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems“. *Physical Review*, **94**, S. 511–525.
- Binder, C., Feichtinger, C., Schmid, H.-J., Thürey, N., Peukert, W. und Råde, U. (2006): „Simulation of the hydrodynamic drag of aggregated particles“. *Journal of Colloid and Interface Science*, **301**, S. 155–167.
- Binder, C., Hartig, M. A. J. und Peukert, W. (2009): „Structural dependent drag force and orientation prediction for small fractal aggregates“. *Journal of Colloid and Interface Science*, **331**, S. 243–250.
- Biswas, G., Breuer, M. und Durst, F. (2004): „Backward-facing step flows for various expansion ratios at low and moderate Reynolds numbers“. *Journal of Fluids Engineering*, **126**, S. 362–374.
- Boussinesq, J. (1903): *Théorie analytique de la chaleur*. Gauthier-Vellars, Paris.
- Bouzidi, M., Firdaouss, M. und Lallemand, P. (2001): „Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries“. *Physics of Fluids*, **13**, S. 3452–3459.

- Brady, J. F. und Bossis, G. (1988): „Stokesian Dynamics“. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **20**, S. 111–157.
- Brasil, A. M., Farias, T. L., Carvalho, M. G. und Koylu, U. O. (2001): „Numerical characterization of the morphology of aggregated particles“. *Journal of Aerosol Science*, **32**, S. 489–508.
- Buick, J. M. und Greated, C. A. (2000): „Gravity in a lattice Boltzmann model“. *Physical Review E*, **61**, S. 5307–5320.
- Caiazzo, A. (2008): „Analysis of lattice Boltzmann nodes initialisation in moving boundary problems“. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, **8**, S. 3–10.
- Calzavarini, E., Kerscher, M., Lohse, D. und Toschi, F. (2008): „Dimensionality and morphology of particle and bubble clusters in turbulent flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **607**, S. 13–24.
- Chang, E. J. und Maxey, M. R. (1995): „Accelerated motion of rigid spheres in unsteady flow at low to moderate Reynolds numbers. Part II: Accelerated motion“. *Journal of Fluid Mechanics*, **303**, S. 133–153.
- Chapman, B., Jost, G. und van der Pas, R. (2007): *Using OpenMP: Portable shared memory parallel programming*. The MIT Press, Cambridge.
- Chen, J. C. und Kim, A. S. (2004): „Brownian dynamics, molecular dynamics and Monte Carlo modelling of colloidal systems“. *Advances in Colloid and Interface Science*, **112**, S. 159–173.
- Chiang, T. P. und Sheu, T. W. H. (1999): „A numerical revisit of backward-facing step flow problem“. *Physics of Fluids*, **11**, S. 862–874.
- Coleman, S. W. und Vassilicos, J. C. (2009): „A unified sweep-stick mechanism to explain particle clustering in two- and three-dimensional homogeneous isotropic turbulence“. *Physics of Fluids*, **21**, 113301:1–10.
- Comte-Bellot, G. und Corrsin, S. (1971): „Simple Eulerian time correlation of full- and narrow-band velocity signals in grid-generated, 'isotropic' turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **48**, S. 273–337.
- Cooley, J. W. und Tukey, J. W. (1965): „An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series“. *Mathematics of Computation*, **19**, S. 297–301.
- Corrsin, S. und Lumley, J. (1957): „On the equation of motion of a particle in a turbulent fluid“. *Applied Scientific Research, Section A*, **6**, S. 114–116.
- Crouse, B. (2003): „Lattice-Boltzmann Strömungssimulationen auf Baumdatenstrukturen“. *Dissertation*, Technische Universität München.

- Crowe, C. T. (1981): „On the relative importance of particle-particle collisions in gas-particle flows“. In: *Proceedings of Conference on Gas Borne Particles*, C78/81, S. 135–137.
- Dandy, D. S. und Dwyer, H. A. (1990): „A sphere in shear flow at finite Reynolds number: Effect of shear on particle lift, drag, and heat transfer“. *Journal of Fluid Mechanics*, **216**, S. 381–410.
- Davidson, P. A. (2004): *Turbulence: An introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, New York.
- De Jong, J., Salazar, J. P. L. C., Woodward, S. H., Collins, L. R. und Meng, H. (2010): „Measurement of inertial particle clustering and relative velocity statistics in isotropic turbulence using holographic imaging“. *International Journal of Multiphase Flow*, **36**, S. 324–332.
- Decker, S. (2005): „Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Derksen, J. J. (2012): „Direct numerical simulations of aggregation of monosized spherical particles in homogeneous isotropic turbulence“. *AIChE Journal*, **58**, S. 2589–2600.
- Derksen, J. J. (2013): „Direct simulations of aggregates in homogeneous isotropic turbulence“. *Acta Mechanica*, **224**, S. 2415–2424.
- Derksen, J. J. und Eskin, D. (2011): „Flow-induced forces in agglomerates“. *Fluid Dynamics & Materials Processing*, **7**, S. 341–355.
- Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2010): „LBM simulations on agglomerate transport and deposition“. *AIP Conference Proceedings*, **1207**, S. 796–801.
- Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2013): „Numerical calculation of flow resistance for agglomerates with different morphology by the lattice-Boltzmann method“. *Powder Technology*, **250**, S. 122–137.
- Donev, A., Torquato, S. und Stillinger, F. H. (2005): „Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. I. Algorithmic details“. *Journal of Computational Physics*, **202**, S. 737–764.
- Dzwinel, W., Yuen, D. A. und Boryczko, K. (2002): „Mesoscopic dynamics of colloids simulated with dissipative particle dynamics and fluid particle model“. *Journal of Molecular Modeling*, **8**, S. 33–43.
- Eaton, J. K. und Fessler, J. R. (1994): „Preferential concentration of particles by turbulence“. *International Journal of Multiphase Flow*, **20**, S. 169–209.

- Eckmann, J.-P., Kamphorst, S. O., Ruelle, D. und Ciliberto, S. (1986): „Lyapunov exponents from time series“. *Physical Review A*, **34**, S. 4971–4979.
- Elghobashi, S. (1994): „On predicting particle-laden turbulent flows“. *Applied Scientific Research*, **52**, S. 309–329.
- Eswaran, V. und Pope, S. B. (1988): „An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence“. *Computers & Fluids*, **16**, S. 257–278.
- Falkovich, G., Fouxon, A. und Stepanov, M. G. (2002): „Acceleration of rain initiation by cloud turbulence“. *Nature*, **419**, S. 151–154.
- Fede, P. und Simonin, O. (2006): „Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles“. *Physics of Fluids*, **18**, 045103:1–17.
- Fede, P. und Simonin, O. (2010): „Effect of particle-particle collisions on the spatial distribution of inertial particles suspended in homogeneous isotropic turbulent flows“. In: *Turbulence and interactions*, hrsg. von Deville, M., Le, T.-H. und Sagaut, P. Bd. 110. Notes on numerical fluid mechanics and multidisciplinary design. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, S. 119–125.
- Feng, J., Hu, H. H. und Joseph, D. D. (1994): „Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a newtonian fluid - Part 1. Sedimentation“. *Journal of Fluid Mechanics*, **261**, S. 95–134.
- Feng, Z.-G. und Michaelides, E. E. (2005): „Proteus: A direct forcing method in the simulations of particulate flows“. *Journal of Computational Physics*, **202**, S. 20–51.
- Feng, Z.-G. und Michaelides, E. E. (2009): „Robust treatment of no-slip boundary condition and velocity updating for the lattice-Boltzmann simulation of particulate flows“. *Computers & Fluids*, **38**, S. 370–381.
- Fessler, J. R., Kulick, J. D. und Eaton, J. K. (1994): „Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow“. *Physics of Fluids*, **6**, S. 3742–3749.
- Février, P., Simonin, O. und Legendre, D. (2001): „Particle dispersion and preferential concentration dependence on turbulent Reynolds number from direct and large-eddy simulations of isotropic homogeneous turbulence“. In: *Proceedings of 4th International Conference on Multiphase Flow*, ICMF2001-798, S. 1–12.
- Février, P., Simonin, O. und Squires, K. D. (2005): „Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study“. *Journal of Fluid Mechanics*, **533**, S. 1–46.

- Flesch, J. C., Spicer, P. T. und Pratsinis, S. E. (1999): „Laminar and turbulent shear-induced flocculation of fractal aggregates“. *AIChE Journal*, **45**, S. 1114–1124.
- Frigo, M. und Johnson, S. G. (2005): „The design and implementation of FFTW3“. *Proceedings of the IEEE*, **93**, S. 216–231.
- Glowinski, R., Pan, T. W., Hesla, T. I., Joseph, D. D. und Periaux, J. (2001): „A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: Application to particulate flow“. *Journal of Computational Physics*, **169**, S. 363–426.
- Gosman, A. D. und Ioannides, E. (1983): „Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors“. *Journal of Energy*, **7**, S. 482–490.
- Goto, S. und Vassilicos, J. C. (2006): „Self-similar clustering of inertial particles and zero-acceleration points in fully developed two-dimensional turbulence“. *Physics of Fluids*, **18**, S. 115103.
- Grassberger, P. (1983): „On the fractal dimension of the Henon attractor“. *Physics Letters A*, **97**, S. 224–226.
- Grassberger, P. und Procaccia, I. (1983): „Characterization of strange attractors“. *Physical Review Letters*, **50**, S. 346–349.
- Grassberger, P. und Procaccia, I. (1984): „Dimensions and entropies of strange attractors from a fluctuating dynamics approach“. *Physica D*, **13**, S. 34–54.
- Gropp, W. (2007): *MPI - Eine Einführung*. De Oldenbourg Gruyter.
- Guo, B., Fletcher, D. F. und Langrish, T. A. G. (2004): „Simulation of the agglomeration in a spray using Lagrangian particle tracking“. *Applied Mathematical Modelling*, **28**, S. 273–290.
- Guo, Z. und Shu, C. (2013): *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. World Scientific Press, Singapur.
- Guo, Z. und Zheng, C. (2008): „Analysis of lattice Boltzmann equation for microscale gas flows: Relaxation times, boundary conditions and the Knudsen layer“. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **22**, S. 465–473.
- Guo, Z., Zheng, C. und Shi, B. (2002a): „An extrapolation method for boundary conditions in the lattice Boltzmann method“. *Physics of Fluids*, **14**, S. 2007–2010.
- Guo, Z., Zheng, C. und Shi, B. (2002b): „Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method“. *Physical Review E*, **65**, 046308:1–6.

- Hadwiger, H. (1957): *Vorlesungen über Inhalt, Oberfläche und Isoperimetrie*. Springer Verlag, Berlin.
- Hänel, D. (2004): *Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- Harada, S., Tanaka, T. und Tsuji, Y. (2000): „Fluid force acting on a falling particle toward a plane wall“. In: *Proceedings of 2000 ASME Fluid Engineering Division Summer Meeting*, FEDSM2000-11267.
- Harshe, Y. M., Ehrl, L. und Lattuada, M. (2010): „Hydrodynamic properties of rigid fractal aggregates of arbitrary morphology“. *Journal of Colloid and Interface Science*, **352**, S. 87–98.
- He, X., Shan, X. und Doolen, G. D. (1998): „Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases“. *Physical Review E*, **57**, R13–R16.
- Hentschel, H. G. E. und Procaccia, I. (1983): „The infinite number of generalized dimensions of fractals and strange attractors“. *Physica D*, **8**, S. 435–444.
- Hinze, J. O. (1975): *Turbulence*. McGraw-Hill, New York.
- Hjelmfelt, A. T. und Mockros, L. F. (1966): „Motion of discrete particles in a turbulent fluid“. *Applied Scientific Research*, **16**, S. 149–161.
- Ho, C. A. und Sommerfeld, M. (2002): „Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows“. *Chemical Engineering Science*, **57**, S. 3073–3084.
- Hölzer, A. (2007): „Bestimmung des Widerstandes, Auftriebs und Drehmoments und Simulation der Bewegung nichtsphärischer Partikel in laminaren und turbulenten Strömungen mit dem Lattice-Boltzmann-Verfahren“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Hölzer, A. und Sommerfeld, M. (2009): „Lattice Boltzmann simulations to determine drag, lift and torque acting on non-spherical particles“. *Computers & Fluids*, **38**, S. 572–589.
- Hölzer, A. und Sommerfeld, M. (2010): „Analysis of the behaviour of cylinders in homogeneous isotropic turbulence by lattice-Boltzmann method“. *ERCOFTAC Bulletin*, **82**, S. 11–16.
- Huang, H., Krafczyk, M. und Lu, X. (2011): „Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models“. *Physical Review E*, **87**, 046710:1–15.

- Hunt, J. C. R., Buell, J. C. und Wray, A. A. (1987): „Big whorls carry little whorls“. In: *Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases. Proceedings of the 1987 Summer Program*, S. 77–94.
- Johnson, S. M., Williams, J. R. und Cook, B. K. (2008): „Quaternion-based rigid body rotation integration algorithms for use in particle methods“. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **74**, S. 1303–1313.
- Jovic, S. und Driver, D. M. (1994): *Backward-facing step measurement at low Reynolds number,  $Re_h = 5000$ . Technischer Bericht*, NASA, Memorandum 108807.
- Jung, J., Yeo, K. und Lee, C. (2008): „Behavior of heavy particles in isotropic turbulence“. *Physical Review E*, **77**, 016307:1–8.
- Karnik, A. (2012): „Direct numerical investigations of dilute dispersed flows in homogeneous turbulence“. *Dissertation*, University of Southampton.
- Kerscher, M., Schmalzing, J., Retzlaff, J., Borgani, S., Buchert, T., Gottlober, S., Müller, V., Plionis, M. und Wagner, H. (1997): „Minkowski functionals of Abell/ACO clusters“. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **284**, S. 73–84.
- Kim, J.-W. und Kramer, T. A. (2005): „Improved models for fractal colloidal agglomeration: Computationally efficient algorithms“. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **253**, S. 33–49.
- Kim, S., Lee, K.-S., Zachariah, M. R. und Lee, D. (2010): „Three-dimensional off-lattice Monte Carlo simulations on a direct relation between experimental process parameters and fractal dimension of colloidal aggregates“. *Journal of Colloid and Interface Science*, **344**, S. 353–361.
- Kolmogorov, A. N. (1959): „Entropy per unit time as a metric invariant of automorphisms“. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, **124**, S. 754–755.
- Kolmogorov, A. N. (1991): „The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers“. *Proceedings of the Royal Society A*, **434**, S. 9–13.
- Kruis, F. E. und Kusters, K. A. (1997): „The collision rate of particles in turbulent flow“. *Chemical Engineering Communications*, **158**, S. 201–230.
- Kuipers, J. B. (2002): *Quaternions and rotation sequences*. Princeton University Press, Princeton.
- Kupershtokh, A. L., Medvedev, D. A. und Karpov, D. I. (2009): „On equations of state in a lattice Boltzmann method“. *Computers and Mathematics with Applications*, **58**, S. 965–974.

- Ladd, A. J. C. (1994a): „Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation“. *Journal of Fluid Mechanics*, **271**, S. 285–309.
- Ladd, A. J. C. (1994b): „Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results“. *Journal of Fluid Mechanics*, **271**, S. 311–339.
- Ladd, A. J. C. und Verberg, R. (2001): „Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions“. *Journal of Statistical Physics*, **104**, S. 1191–1251.
- Laín, S. (2010): *On modeling and numerical computation of industrial disperse two-phase flow with the Euler-Lagrange approach*. Shaker Verlag, Aachen.
- Laín, S. und Sommerfeld, M. (2013): „Characterization of pneumatic conveying systems using the Euler/Lagrange approach“. *Powder Technology*, **235**, S. 764–782.
- Lallemand, P. und Luo, L.-S. (2003): „Lattice Boltzmann method for moving boundaries“. *Journal of Computational Physics*, **184**, S. 406–421.
- Larsen, M. L., Kostinski, A. B. und Jameson, A. R. (2014): „Further evidence for superterminal raindrops“. *Geophysical Research Letters*, **41**, S. 6914–6918.
- Laviéville, J. (1997): „Numerical simulations and modelling of interactions between turbulence dragging and interparticle collisions applied to gas-solid two-phase flows“. *Dissertation*, Département Laboratoire National d’Hydraulique.
- Laviéville, J., Deutsch, E. und Simonin, O. (1995): „Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field“. In: *Proceedings of 6th International Symposium on Gas-Particle Flows, ASME FED*, Bd. 228, S. 347–357.
- Le, H., Moin, P. und Kim, J. (1997): „Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step“. *Journal of Fluid Mechanics*, **330**, S. 349–374.
- Li, S., Marshall, J. S., Liu, G. und Yao, Q. (2011): „Adhesive particulate flow: The discrete-element method and its application in energy and environmental engineering“. *Progress in Energy and Combustion Science*, **37**, S. 633–668.
- Liebovitch, L. S. und Toth, T. (1989): „A fast algorithm to determine fractal dimensions by box counting“. *Physics Letters A*, **141**, S. 386–390.
- Lipowsky, J. (2013): „Zur instationären Euler/Lagrange Simulation partikelbeladener Drallströmungen“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.

- Lun, C. K. K. und Liu, H. S. (1997): „Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows in horizontal channels“. *International Journal of Multiphase Flow*, **23**, S. 575–605.
- Luo, L.-S. (1997): „Analytic solutions of linearized lattice Boltzmann equation for simple flows“. *Journal of Statistical Physics*, **88**, S. 913–926.
- Luo, L.-S. (1998): „Unified theory of lattice Boltzmann models for nonideal gases“. *Physical Review Letters*, **81**, S. 1618–1621.
- Magnaudet, J., Rivero, M. und Fabre, J. (1995): „Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part 1. Steady straining flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **284**, S. 97–135.
- Maiss, M. (2010): „Simulation und Analyse des Transports nano-skaliger Partikel in elementaren Strömungsstrukturen“. *Studienarbeit*, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld), Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Martys, N. S., Shan, X. und Chen, H. (1998): „Evaluation of the external force term in the discrete Boltzmann equation“. *Physical Review E*, **58**, S. 6855–6857.
- Maxey, M. R. (1987): „The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields“. *Journal of Fluid Mechanics*, **174**, S. 441–465.
- Maxey, M. R. und Riley, J. J. (1983): „Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow“. *Physics of Fluids*, **26**, S. 883–889.
- Mecke, K. R., Buchert, T. und Wagner, H. (1994): „Robust morphological measures for large-scale structure in the Universe“. *Astronomy and Astrophysics*, **288**, S. 697–704.
- Mecke, K. R. und Wagner, H. (1991): „Euler characteristic and related measures for random geometric sets“. *Journal of Statistical Physics*, **64**, S. 843–850.
- Mei, R. (1992): „An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number“. *International Journal of Multiphase Flow*, **18**, S. 145–147.
- Mei, R. und Hu, K. C. (1999): „On the collision rate of small particles in turbulent flows“. *Journal of Fluid Mechanics*, **391**, S. 67–89.
- Mei, R., Yu, D., Shyy, W. und Luo, L.-S. (2002): „Force evaluation in the lattice Boltzmann method involving curved geometry“. *Physical Review E*, **65**, 041203:1–14.

- Melis, S., Verduyn, M., Storti, G. und Morbidelli, M. (1999): „Effect of fluid motion on the aggregation of small particles subject to interaction forces“. *AIChE Journal*, **45**, S. 1383–1393.
- Michaelides, E. E. und Feng, Z.-G. (1995): „The equation of motion of a small viscous sphere in an unsteady flow with interface slip“. *International Journal of Multiphase Flow*, **21**, S. 315–321.
- Michaelides, E. E. und Roig, A. (2011): „A reinterpretation of the Odar and Hamilton data on the unsteady equation of motion of particles“. *AIChE Journal*, **57**, S. 2997–3002.
- Monchaux, R., Bourgoïn, M. und Cartellier, A. (2012): „Analyzing preferential concentration and clustering of inertial particles in turbulence“. *International Journal of Multiphase Flow*, **40**, S. 1–18.
- Nguyen, N. Q. und Ladd, A. J. C. (2002): „Lubrication corrections for lattice Boltzmann simulations of particle suspensions“. *Physical Review E*, **66**, 046708:1–12.
- Ning, W., Reitz, R. D., Diwakar, R. und Lippert, A. M. (2009): „An Eulerian-Lagrangian spray and atomization model with improved turbulence modeling“. *Atomization and Sprays*, **19**, S. 727–739.
- Odar, F. und Hamilton, W. S. (1964): „Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid“. *Journal of Fluid Mechanics*, **18**, S. 302–314.
- Oesterlé, B. und Petitjean, A. (1993): „Simulation of particle-to-particle interactions in gas solid flows“. *International Journal of Multiphase Flow*, **19**, S. 199–211.
- O’Rourke, P. J. (1981): „Collective drop effects on vaporizing“. *Dissertation*, Princeton University.
- Orszag, S. A. und Patterson, G. S. (1972): „Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence“. *Physical Review Letters*, **28**, S. 76–79.
- Oseen, C. W. (1927): *Neue Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik*. Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig.
- Overholt, M. R. und Pope, S. B. (1998): „A deterministic forcing scheme for direct numerical simulations of turbulence“. *Computers & Fluids*, **27**, S. 11–28.
- Peng, Z., Doroodchi, E. und Evans, G. (2010): „DEM simulation of aggregation of suspended nanoparticles“. *Powder Technology*, **204**, S. 91–102.

- Picciotto, M., Marchioli, C. und Soldati, A. (2005): „Characterization of near-wall accumulation regions for inertial particles in turbulent boundary layers“. *Physics of Fluids*, **17**, 098101:1–4.
- Pope, S. B. (2000): *Turbulent flows*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Pozorski, J. und Apte, S. V. (2009): „Filtered particle tracking in isotropic turbulence and stochastic modeling of subgrid-scale dispersion“. *International Journal of Multiphase Flow*, **35**, S. 118–128.
- Pumir, A. (1994): „A numerical study of the mixing of a passive scalar in three dimensions in the presence of a mean gradient“. *Physics of Fluids*, **6**, S. 2118–2132.
- Reade, W. C. und Collins, L. R. (2000): „Effect of preferential concentration on turbulent collision rates“. *Physics of Fluids*, **12**, S. 2530–2540.
- Reeks, M. W. (1983): „The transport of discrete particles in inhomogeneous turbulence“. *Journal of Aerosol Science*, **14**, S. 729–739.
- Reeks, M. W. und McKee, S. (1984): „The dispersive effects of Basset history forces on the particle motion in a turbulent flow“. *Physics of Fluids*, **27**, S. 1573–1582.
- Renshaw, E. (1987): „The discrete Uhlenbek-Ornstein process“. *Journal of Applied Probability*, **24**, S. 908–917.
- Rogallo, R. S. (1981): *Numerical experiments in homogeneous turbulence*. *Technischer Bericht*, NASA, Ames Research Center, Memorandum 81315.
- Saffman, P. G. (1965): „The lift on a small sphere in a slow shear flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **22**, S. 385–400.
- Saffman, P. G. (1968): „Corrigendum: The lift on a small sphere in a slow shear flow“. *Journal of Fluid Mechanics*, **31**, S. 624.
- Saffman, P. G. und Turner, J. S. (1956): „On the collision of drops in turbulent clouds“. *Journal of Fluid Mechanics*, **1**, S. 16–30.
- Salazar, J. P. L. C., de Jong, J., Cao, L. J., Woodward, S. H., Meng, H. und Collins, L. R. (2008): „Experimental and numerical investigation of inertial particle clustering in isotropic turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **600**, S. 245–256.
- Sandkühler, P., Sefcik, J., Lattuada, M., Wu, H. und Morbidelli, M. (2003): „Modelling structure effects on aggregation kinetics in colloidal dispersions“. *AIChE Journal*, **49**, S. 1542–1554.
- Sarraille, J. und DiFalco, P. (1992): *A program for estimating fractal dimension*. URL: <http://life.bio.sunysb.edu/morph/morphmet/fd3dosz.exe> (besucht am 29.01.2014).

- Sawford, B. L. (1991): „Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion“. *Physics of Fluids A*, **3**, S. 1577–1586.
- Schiller, L. und Naumann, A. Z. (1933): „Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung“. *Verein Deutscher Ingenieure*, **77**, S. 318–320.
- Schlauch, E., Ernst, M., Seto, R., Briesen, H., Sommerfeld, M. und Behr, M. (2013): „Comparison of three simulation methods for colloidal aggregates in Stokes flow: Finite elements, lattice Boltzmann and Stokesian dynamics“. *Computers & Fluids*, **86**, S. 199–209.
- Schlichting, H., Gersten, K., Krause, E. und Oertel, H. Jr. (2006): *Grenzschicht-Theorie*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York.
- Schmalzing, J. und Kerscher, M. (2007): *A program for calculating Minkowski functionals of a Boolean grain model with boundary correction*. URL: <http://www.mathematik.uni-muenchen.de/~kerscher/software/minkowski2.1.tar> (besucht am 29.01.2014).
- Schmalzing, J., Kerscher, M. und Buchert, T. (1996): „Minkowski functionals in cosmology“. In: *Proceedings of the International School of Physics Course CXXXII*, hrsg. von Bonometto, S., Primack, J. R. und Provenzale, A. IOS Press, Oxford, S. 281–290.
- Schmid, H.-J., Tejwani, S., Artelt, Ch. und Peukert, W. (2004): „Monte Carlo simulation of aggregate morphology for simultaneous coagulation and sintering“. *Journal of Nanoparticle Research*, **6**, S. 613–626.
- Schmidt, O. (2011): „Numerische und experimentelle Untersuchung der Rußabscheidung an Partikelsensoren im Diesellabgasstrang“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Schomburg, H. (2010): „Numerische und experimentelle Analyse der Filtration von Rußpartikeln“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Schutte, K. C. J., Portela, L. M. und Henkes, R. A. W. M. (2013): „A numerical study on the formation and break-up of particle agglomerates“. In: *Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow*, ICMF2013-731, S. 1–12.
- Sen, S. K. und Venkaiah, V. C. (1988): „On symmetrizing a matrix“. *Indian Journal of Pure and Applied Mathematics*, **19**, S. 554–561.
- Seo, J. H. und Mittal, R. (2011): „A sharp-interface immersed boundary method with improved mass conservation and reduced spurious pressure oscillations“. *Journal of Computational Physics*, **230**, S. 7347–7363.

- Seto, R., Botet, R. und Briesen, H. (2011): „Hydrodynamic stress on small colloidal aggregates in shear flow using Stokesian dynamics“. *Physical Review E*, **84**, S. 041405.
- Shan, X. und Chen, H. (1993): „Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components“. *Physical Review E*, **47**, S. 1815–1819.
- Shan, X. und Doolen, G. D. (1995): „Multi-component lattice-Boltzmann model with interparticle interaction“. *Journal of Statistical Physics*, **81**, S. 379–393.
- Shan, X., Yuan, X.-F. und Chen, H. (2006): „Kinetic theory representation of hydrodynamics: A way beyond the Navier-Stokes equation“. *Journal of Fluid Mechanics*, **550**, S. 413–441.
- Sharma, N. und Patankar, N. A. (2005): „A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows“. *Journal of Computational Physics*, **205**, S. 439–457.
- Shaw, R. A., Reade, W. C., Collins, L. R. und Verlinde, J. (1998): „Preferential concentration of cloud droplets by turbulence: Effects on the early evolution of Cumulus cloud droplet spectra“. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **55**, S. 1965–1976.
- Shrimpton, J. S. und Danby, M. (2012): „Effect of poly-dispersity on the stability of agglomerates subjected to simple fluid strain fields“. *Powder Technology*, **228**, S. 241–249.
- Siggia, E. D. (1981): „Numerical study of small-scale intermittency in three-dimensional turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **107**, S. 375–406.
- Sommerfeld, M. (1996): *Modellierung und numerische Berechnung von partikelbeladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler/ Lagrange-Verfahrens*. Shaker Verlag, Aachen.
- Sommerfeld, M. (2001): „Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence“. *International Journal of Multiphase Flow*, **27**, S. 1829–1858.
- Sommerfeld, M., van Wachem, B. und Oliemans, R. (2008): *Best practice guidelines - Computational fluid dynamics of dispersed multi-phase flows*. Technischer Bericht, European Research Community on Flow, Turbulence & Combustion (ERCOFTAC), Lausanne, Schweiz.
- Soos, M., Sefcik, J. und Morbidelli, M. (2006): „Investigation of aggregation, breakage and restructuring kinetics of colloidal dispersions in turbulent flows by population

- balance modeling and static light scattering“. *Chemical Engineering Science*, **61**, S. 2349–2363.
- Squires, K. D. und Eaton, J. K. (1991): „Preferential concentration of particles by turbulence“. *Physics of Fluids A*, **3**, S. 1169–1178.
- Sreenivasan, K. R. (1995): „On the universality of the Kolmogorov constant“. *Physics of Fluids*, **7**, S. 2778–2784.
- Stokes, G. G. (1850): „On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums“. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, **9**, S. 8–23.
- Stübing, S. und Sommerfeld, M. (2012): „Lagrangian modelling of agglomeration for applications to spray drying“. In: *Proceedings of 9th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements*, ETMM9, S. 1–6.
- Sundaram, S. und Collins, L. R. (1996): „Numerical considerations in simulating a turbulent suspension of finite-volume particles“. *Journal of Computational Physics*, **124**, S. 337–350.
- Sundaram, S. und Collins, L. R. (1997): „Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. Part 1. Direct numerical simulations“. *Journal of Fluid Mechanics*, **335**, S. 75–109.
- Takahashi, D. (2003): „Efficient implementation of parallel three-dimensional FFT on clusters of PCs“. *Computer Physics Communications*, **152**, S. 144–150.
- Tanaka, T. und Tsuji, Y. (1991): „Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe: On the effect of inter-particle collisions“. *Gas-Solid-Flow, FED, ASME*, **121**, S. 123–128.
- Tang, L., Wen, F., Yang, Y., Crowe, C. T., Chung, J. N. und Troutt, T. R. (1992): „Self-organizing particle dispersion mechanism in a plane wake“. *Physics of Fluids A*, **4**, S. 2244–2251.
- Tchen, C. M. (1947): „Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid“. *Dissertation*, Technische Universteit Delft, Martinus Nijhoff, The Hague.
- Teike, G. (2010): „Untersuchung der Rußanlagerung auf einem resistiven Partikelsensor“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Teike, G., Dietzel, M., Michaelis, B., Schomburg, H. und Sommerfeld, M. (2012): „Multiscale lattice-Boltzmann approach for electrophoretic particle deposition“. *Aerosol Science and Technology*, **46**, S. 451–464.

- Ten Cate, A. (2002): „Turbulence and particle dynamics in dense crystal slurries“. *Dissertation*, Technical University Delft.
- Ten Cate, A., Nieuwstad, C. H., Derksen, J. J. und van den Akker, H. E. A. (2002): „Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity“. *Physics of Fluids*, **14**, S. 4012–4025.
- Ten Cate, A., van Vliet, E., Derksen, J. J. und van den Akker, H. E. A. (2006): „Application of spectral forcing in lattice-Boltzmann simulations of homogeneous turbulence“. *Computers & Fluids*, **35**, S. 1239–1251.
- Thömmes, G., Becker, J., Junk, M., Vaikuntam, A. K., Kehrwald, D., Klar, A., Steiner, K. und Wiegmann, A. (2009): „A lattice Boltzmann method for immiscible multiphase flow simulations using the level set method“. *Journal of Computational Physics*, **228**, S. 1139–1156.
- Thompson, A. C. (1996): *Minkowski geometry*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Uhlenbeck, G. E. und Ornstein, L. S. (1930): „On the theory of Brownian motion“. *Physical Review*, **36**, S. 823–841.
- Vanni, M. und Gastaldi, A. (2011): „Hydrodynamic forces and critical stresses in low-density aggregates under shear flow“. *Langmuir*, **27**, 12822:1–33.
- Vinningland, J. L., Johnsen, O., Flekkøy, E. G., Toussaint, R. und Måløy, K. J. (2007): „Experiments and simulations of a gravitational granular flow instability“. *Physical Review E*, **76**, 051306:1–13.
- Von Karman, T. und Howarth, L. (1938): „On the statistical theory of isotropic turbulence“. *Proceedings of the Royal Society A*, **164**, S. 192–215.
- Von Smoluchowski, M. (1917): „Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloidaler Lösungen“. *Zeitschrift für physikalische Chemie*, **92**, S. 129–168.
- Wadell, H. (1935): „Volume, shape and roundness of quartz particles“. *Journal of Geology*, **43**, S. 250–280.
- Wang, L. P. und Maxey, M. R. (1993): „Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **256**, S. 27–68.
- Wang, L.-P., Ayala, O., Kasprzak, S. E. und Grabowski, W. W. (2005): „Theoretical formulation of collision rate and collision efficiency of hydrodynamically interacting

- cloud droplets in turbulent atmosphere“. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **62**, S. 2433–2450.
- Wang, L.-P., Rosa, B., Gao, H., He, G. und Jin, G. (2009): „Turbulent collision of inertial particles: Point-particle based, hybrid simulations and beyond“. *International Journal of Multiphase Flow*, **35**, S. 854–867.
- Wang, L.-P., Wexler, A. S. und Zhou, Y. (1998): „On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I. Zero-inertia case“. *Physics of Fluids*, **10**, S. 266–276.
- Weickert, M. (2010): „Partikelerosion in laminaren und schwach turbulenten Strömungen“. *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Westphal, D. L., Toon, O. B. und Carlson, T. N. (1987): „A two-dimensional numerical investigation of the dynamics and microphysics of Saharan dust storms“. *Journal of Geophysical Research*, **92**, S. 3027–3049.
- Wilkinson, M. und Mehlig, B. (2005): „Caustics in turbulent aerosols“. *Europhysics Letters*, **71**, S. 186–192.
- Williams, J. J. E. und Crane, R. I. (1983): „Particle collision rate in turbulent flow“. *International Journal of Multiphase Flow*, **9**, S. 421–435.
- Williams, P. T. und Baker, A. J. (1997): „Numerical simulations of laminar flow over a 3D backward-facing step“. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **24**, S. 1159–1183.
- Witten, T. A. und Sander, L. M. (1983): „Diffusion-limited aggregation“. *Physical Review B*, **27**, S. 5686–5697.
- Wolf-Gladrow, D. A. (2000): *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models*. Springer Verlag, Berlin.
- Wunsch, D. (2009): „Theoretical and numerical study of collision and coalescence - Statistical modeling approaches in gas-droplet turbulent flows“. *Dissertation*, Université de Toulouse.
- Yeung, P. K. und Pope, S. B. (1989): „Lagrangian statistics from direct numerical simulations of isotropic turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **207**, S. 531–586.
- Yong, M. und Brenner, G. (2013): „Hybride Parallelisierung von Lattice-Boltzmann-Verfahren zur Berechnung von Transportvorgängen in porösen Medien“. *Chemie Ingenieur Technik*, **85**, S. 1381.
- Yoshimoto, H. und Goto, S. (2007): „Self-similar clustering of inertial particles in homogeneous turbulence“. *Journal of Fluid Mechanics*, **577**, S. 275–286.

- Yuu, S. (1984): „Collision rate of small particles in a homogeneous and isotropic turbulence“. *AIChE Journal*, **30**, S. 802–807.
- Zaichik, L. I., Alipchenkov, V. M. und Avetissian, A. R. (2006): „Modelling turbulent collision rates of inertial particles“. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, **27**, S. 937–944.
- Zaichik, L. I., Alipchenkov, V. M. und Sinaiski, E. G. (2008): *Particles in turbulent flows*. WILEY-VCH Verlag, Weinheim.
- Zhang, Z. und Prosperetti, A. (2012): „A method for particle simulation“. *Journal of Applied Mechanics*, **70**, S. 64–74.
- Zhao, F. und van Wachem, B. G. M. (2013): „A novel Quaternion integration approach for describing the behaviour of non-spherical particles“. *Acta Mechanica*, **224**, S. 3091–3109.
- Zucca, A., Marchisio, D. L., Barresi, A. A. und Fox, R. O. (2006): „Implementation of the population balance equation in CFD codes for modelling soot formation in turbulent flames“. *Chemical Engineering Science*, **61**, S. 87–95.

# Lebenslauf

## Persönliche Daten

Name Dipl.-Ing. (FH) Martin Ernst  
Geburtsdatum/-ort 26.07.1982 in Halle (Saale)

## Beruflicher Werdegang

Seit 10/2015 Entwicklungsingenieur  
TRINSEO Deutschland GmbH, Schkopau  
Bereich Synthesekautschuk | Technischer Service & Entwicklung

06/2014-09/2015 Projektingenieur  
rubicon Gummitechnik und Maschinenbau GmbH, Halle (Saale)  
Bereich Sondermaschinenbau

11/2007-04/2014 Wissenschaftlicher Mitarbeiter  
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)  
Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik

## Studium

11/2007-04/2014 Promotionsstudium  
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)  
Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik

01.10.2007 Diplomprüfung (Dipl.-Ing. (FH))

04/2007-09/2007 Diplomand  
STIHL AG, Waiblingen  
Bereich Forschung | Motorische Berechnung

10/2003-10/2007 Maschinenbaustudium  
Hochschule Merseburg (FH), Merseburg  
Fachbereich Ingenieur- und Naturwissenschaften

## Schulbildung

08/1993-06/2002 Frieden-Gymnasium, Halle (Saale)  
08/1989-07/1993 Grundschule Bertolt Brecht, Halle (Saale)

Halle (Saale), den 19.07.2016

---

Martin Ernst

# Publikationsliste

## Begutachtete Publikationen in Fachzeitschriften

- Dietzel, M., Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2016): „Application of the lattice-Boltzmann method for particle-laden flows: Point-particles and fully resolved particles“. *Flow, Turbulence and Combustion*, **97**, S. 539–570.
- Ernst, M., Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2013c): „A lattice-Boltzmann method for simulating transport and agglomeration of resolved particles“. *Acta Mechanica*, **224**, S. 2425–2449.
- Schlauch, E., Ernst, M., Seto, R., Briesen, H., Sommerfeld, M. und Behr, M. (2013): „Comparison of three simulation methods for colloidal aggregates in Stokes flow: Finite elements, lattice Boltzmann and Stokesian dynamics“. *Computers & Fluids*, **86**, S. 199–209.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2012a): „On the volume fraction effects of inertial colliding particles in homogeneous isotropic turbulence“. *Journal of Fluids Engineering*, **134**, 031302:1–16.

## Begutachtete Buchbeiträge

- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2015): „Resolved numerical simulation of particle agglomeration“. In: *Colloid Process Engineering*, hrsg. von Kind, M., Peukert, W., Rehage, H. und Schuchmann, H. P. Springer International Publishing, S. 45–71.

## Begutachtete Publikationen in Tagungsbänden

- Ernst, M., Dietzel, M., Cui, Y. und Sommerfeld, M. (2013a): „Lattice-Boltzmann simulations for analysing particle-scale phenomena“. In: *Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow*, ICMF2013-441.
- Laín, S., Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2013a): „Colliding particle-pair velocity correlation function and particle segregation in homogeneous isotropic turbulence“. In: *Proceedings of IX Congreso Colombiano de Métodos Numéricos*, CCMN2013-4.

- Dietzel, M., Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2011b): „Application of the lattice-Boltzmann-method in two-phase flow studies: From point-particles to fully resolved particles“. In: *ASME-JSME-KSME 2011 Joint Fluids Engineering Conference: Volume 1, Symposia - Parts A, B, C, and D - 11th International Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flow*, AJK2011-04033.
- Ernst, M., Laín, S. und Sommerfeld, M. (2010a): „Analysis of interparticle collision effects in homogeneous isotropic turbulence using point-particle DNS based on the lattice-Boltzmann-method“. In: *Proceedings of 2010 ASME Joint U.S.-European Fluids Engineering Summer Meeting*, FEDSM-ICNMM2010-31321.
- Laín, S., Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2010): „Colliding particle-pair velocity correlation function in turbulent flows“. In: *Proceedings of 7th International Conference on Multiphase Flow*, ICMF2010-9.5.3.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2009a): „Direct numerical simulations of colliding particles suspended in homogeneous isotropic turbulence“. In: *ASME 2009 Fluids Engineering Division Summer Meeting: Volume 1, Symposia - Parts A, B and C - 12th International Symposium on Gas-Particle Flows*, FEDSM2009-78072.
- Der Beitrag Ernst & Sommerfeld (2009a) wurde mit dem 2010 Robert T. Knapp Award (*Best Paper Award*) ausgezeichnet.

### **Auswahl an Vorträgen und Posterbeiträgen**

- Ernst, M., Dietzel, M., Cui, Y. und Sommerfeld, M. (2013b): „Lattice-Boltzmann simulations for analysing particle-scale phenomena“. Vortrag, *8th International Conference on Multiphase Flow*, Seogwipo, Jeju, Korea.
- Ernst, M., Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2013d): „Direct numerical simulations on sedimentation and agglomeration of polydisperse spherical particles“. Vortrag, *9th Workshop on Direct and Large-Eddy Simulations*, Dresden.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2013): „Multiscale analysis of particle collision and agglomeration“. Vortrag, *IX Congreso Colombiano de Métodos Numéricos*, Cali, Kolumbien.
- Ernst, M., Dietzel, M., Laín, S. und Sommerfeld, M. (2012a): „Lattice Boltzmann method applied to analyze collision and agglomeration behavior of inertial particles“. Vortrag, *German-Colombian Mobility Program for Scientists by DAAD and Colciencias*, Cali, Kolumbien.

- Ernst, M., Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2012b): „Fully-resolved simulations of colliding and agglomerating particles by the lattice-Boltzmann method“. Vortrag, *13th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Halle.
- Ernst, M., Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2012c): „Lattice-Boltzmann simulations of the agglomeration behavior of fully resolved particles in two-phase flows“. Vortrag, *International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows*, State College, Pennsylvania, USA.
- Ernst, M., Dietzel, M. und Sommerfeld, M. (2012d): „Modellierung und Analyse der hydrodynamischen Wechselwirkung im Nahbereich kollidierender Partikel“. Poster, *ProcessNet Jahrestreffen der Fachausschüsse Computational Fluid Dynamics und Fluidverfahrenstechnik*, Weimar.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2012b): „Sedimentation of a solid particle towards a plane wall: A test case introduction“. Vortrag, *13th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Halle.
- Ernst, M., Laín, S. und Sommerfeld, M. (2010c): „Colliding particle-pair velocity correlation function in turbulent flows“. Vortrag, *7th International Conference on Multiphase Flow*, Tampa, Florida, USA.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2010): „Lattice Boltzmann simulations of particle-laden turbulent flow: Preferential concentration and collision statistics“. Vortrag, *The Sixth International Conference on Computational Fluid Dynamics*, St. Petersburg, Russland.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2009b): „Direct numerical simulations of colliding particles suspended in homogeneous isotropic turbulence“. Vortrag, *2009 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting*, Vail, Colorado, USA.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2009c): „Direkte Numerische Simulation des Kollisionsverhaltens von Partikeln in homogener isotroper Turbulenz“. Poster, *ProcessNet Jahrestreffen der Fachausschüsse Computational Fluid Dynamics, Mischvorgänge und Extraktion*, Fulda.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2009d): „Simulation von turbulenten Suspensionen mit dem Lattice-Boltzmann-Verfahren“. Vortrag, *SPP 1273 Workshop Modellierung und Simulation kolloidaler Systeme*, Halle.
- Ernst, M. und Sommerfeld, M. (2008): „Modellierung und Simulation der Transportvorgänge nano-skaliger Partikel in homogener isotroper Turbulenz“. Poster, *SPP 1273 Workshop Streumethoden*, Bayreuth.

## **Betreute studentische Arbeiten**

Krause, P. (2011): „Entwicklung eines Programms für die Darstellung einer kubischen Spline-Interpolation unter Verwendung des Gauß-Algorithmus“. *Studienarbeit*, Lehrstuhl für Mathematik, Stochastik und Datenanalyse (Prof. Dr. rer. nat. habil. E. Liebscher) und Lehrstuhl für Ingenieurmathematik und Numerische Methoden (Prof. Dr. rer. nat. H. Kröner), Hochschule Merseburg (FH).

Maiss, M. (2010): „Simulation und Analyse des Transports nano-skaliger Partikel in elementaren Strömungsstrukturen“. *Studienarbeit*, Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld), Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.

Halle (Saale), den 19.07.2016

Martin Ernst

## Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die den benutzten Werken wörtlich und inhaltlich übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form als Dissertation eingereicht und ist als Ganzes noch nicht veröffentlicht.

Hiermit erkläre ich, dass für mich Promotionsverfahren außerhalb der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg weder beantragt wurden, anhängig sind, noch erfolglos abgeschlossen wurden.

Darüber hinaus versichere ich, dass gegen mich keine Strafverfahren eingeleitet sind und keine Vorstrafen vorliegen.

Halle (Saale), den 19.07.2016

---

Martin Ernst