

4 Beschreibung der dispersen Phase

Die in diesem Abschnitt zusammengestellten Beschreibungen für die disperse Phase können den Anspruch einer umfassenden Behandlung natürlich nicht erfüllen, da bei der Zusammenstellung nur die für die nachfolgenden Berechnungen benötigten Beziehungen berücksichtigt wurden. Für eine allgemeine Beschreibung von dispersen Phasen sei auf die Arbeiten von Crowe et al. [55], Sommerfeld [294][297] aber auch z.B. Loth [182] verwiesen.

4.1 Wichtige Kennzahlen und Beziehungen

Für die Beschreibung der Partikelbewegung werden eine Reihe von Kennzahlen benötigt. Von zentraler Bedeutung ist dabei die Partikel-Reynoldszahl. Diese ist je nach Anwendungsfall unterschiedlich definiert.

Die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Translation hat die folgende Form:

$$\text{Re}_P = d |\mathbf{w}| \nu^{-1} \quad (4.1)$$

Die verwendete Differenzgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel (auch Schlupfgeschwindigkeit genannt) lautet dabei:

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} - \mathbf{v} \quad (4.2)$$

Ferner wird der Partikeldurchmesser d sowie die kinematische Viskosität der fluiden Phase ν benutzt.

Bei der Betrachtung der Partikelrotation verwendet man die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation:

$$\text{Re}_R = d^2 |\boldsymbol{\omega}_r| \nu^{-1} \quad (4.3)$$

Analog zu Gl. 4.1 bezeichnet $\boldsymbol{\omega}_r$ die relative Rotation zwischen Fluid und Partikel. Sie ist definiert als

$$\boldsymbol{\omega}_r = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_F - \boldsymbol{\omega}_P = \frac{1}{2} [\nabla \times \mathbf{u}] - \boldsymbol{\omega}_P \quad (4.4)$$

In Scherströmungen definiert man entsprechend eine Partikel-Reynoldszahl bzgl. der Scherung:

$$\text{Re}_S = d^2 |\boldsymbol{\omega}_F| \nu^{-1} \quad (4.5)$$

Dabei wird als Geschwindigkeit die Rotation der Strömung $\boldsymbol{\omega}_F = [\nabla \times \mathbf{u}]$ angesetzt.

Die Partikelrelaxationszeit τ_P ist ein Maß für die Zeit, die ein Teilchen benötigt, um sich der Geschwindigkeit des umgebenden Fluids anzupassen. Für den Stokesschen Bereich, d.h. für $\text{Re}_P < 1$, berechnet sich τ_P zu

$$\tau_P = \frac{1}{18} \rho_P d^2 \mu^{-1} = \frac{1}{18} d^2 \gamma_\rho^{-1} \nu^{-1} \quad (4.6)$$

Dabei steht ρ_P für die Dichte des Partikelmaterials und μ für die dynamische Viskosität des Fluids. Ferner wird das Dichteverhältnis zwischen Fluid und Partikelmaterial mit $\gamma_\rho = \rho/\rho_P$ bezeichnet.

Die zeitlichen Ableitungen der Fluid- und der Partikelgeschwindigkeit sind prinzipiell verschieden, da das Fluid im Eulerschen Koordinatensystem, d.h. ortsfest (die Variablen liegen als Feldgrößen vor), und die disperse Phase im Lagrangeschen Bezugssystem, d.h. entlang der Partikelbahn, betrachtet wird. Um die Geschwindigkeitsänderung des Fluids entlang der Bahn eines Fluidelements zu erfassen, muss das totale Differential verwendet werden:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad (4.7)$$

4.2 Erhaltungsgleichungen für Teilchen in einer Strömung

Die Bewegungsgleichungen für ein bestimmtes Teilchen (wobei jedes Teilchen der dispersen Phase andere Teilcheneigenschaften, wie z.B. Größe d , Dichte ρ_P und damit Teilchenmasse m , aufweisen kann) erfassen den Impulsübergang von der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase und haben die folgende Form:

$$\frac{d\mathbf{x}_P}{dt} = \mathbf{v} \quad (4.8)$$

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_\Omega + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_G + \mathbf{F}_P + \mathbf{F}_{VM} + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_{LS} + \mathbf{F}_{LM} \quad (4.9)$$

$$I_P \frac{d\boldsymbol{\omega}_P}{dt} = \mathbf{T}_\Omega + \mathbf{T} \quad (4.10)$$

Dabei berechnet sich das Massenträgheitsmoment I_P eines kugelförmigen Teilchens bei einer Rotation um die eigene Achse durch Integration über das Volumen des Teilchens zu $I_P = \frac{1}{10} m d^2$.

4.2.1 Teilchenort

Die Ortsänderung eines Teilchens $d\mathbf{x}_P/dt$ ist nichts anderes als die Partikelgeschwindigkeit \mathbf{v} (Gl. 4.8). Durch Integration über den jeweils betrachteten Zeitschritt Δt berechnet sich die entsprechende Ortsänderung.

4.2.2 Teilchentranslationsgeschwindigkeit

Die Partikelbewegungsgleichung für die Translation (Gl. 4.9) basiert im Wesentlichen auf Arbeiten von Basset [18] [17], Boussinesq [28][29] und Oseen [231][232][233] und wird daher üblicherweise Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung (BBO-Gleichung) genannt¹. Sie wurde bereits in einer Vielzahl von wissenschaftlichen Arbeiten (z.B. Tchen [321], Riley [266] oder Maxey & Riley [195]) diskutiert. Ferner sind eine Reihe von Einschränkungen bzgl. der Gültigkeit der Gleichung zu nennen, welche ausführlich z.B. von Sommerfeld [294], Kohnen [157] und Magnaudet [191] diskutiert wurden. Bemerkenswert ist, dass auch in jüngerer Zeit die Partikelbewegungsgleichung noch immer Modifikationen erfährt, wie z.B. die Arbeiten von Mei & Adrian [198] und Kim et al. [149] zeigen.

Die Trägheitskraft $m dv/dt$ steht dabei im Gleichgewicht mit einer Reihe von Kräften, die auf ein Teilchen entlang seiner Flugbahn wirken. Im folgenden sollen diese kurz beschrieben werden.

Coriolis- und Zentrifugalkraft F_{Ω}

Wie beim Fluid wird auch bei der Partikelbewegungsgleichung bei einem rotierenden Koordinatensystem eine Transformation der Erhaltungsgleichung nötig. Durch die Transformation der Trägheitskraft $m dv/dt$ erhält man im rotierenden Koordinatensystem zusätzliche Terme für die Coriolis- und die Zentrifugalkraft.

$$\mathbf{F}_{\Omega} = -m (2[\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times \mathbf{v}] + [\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times [\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} \times \mathbf{x}_{\mathbf{P}}]]) \quad (4.11)$$

Bei einer Rotation um die x_3 -Achse mit einer Winkelgeschwindigkeit von $\Omega_G = |\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}}| = \Omega_{3,G}$ reduziert sich Gl. 4.11 zu:

$$\mathbf{F}_{\Omega} = m \Omega_G \begin{pmatrix} \Omega_G x_{1,P} + 2 v_2 \\ \Omega_G x_{2,P} - 2 v_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Die Zentrifugalkraft ist dabei proportional zu Ω_G^2 und die Corioliskraft proportional zu Ω_G . Bei der Betrachtung auf einem stationären Gitter, d.h. $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}} = \mathbf{0}$, wird auch \mathbf{F}_{Ω} zu Null.

Widerstandskraft $F_{\mathbf{D}}$

Die Widerstandskraft ist in aller Regel die dominierende Kraft auf ein Teilchen in einer Strömung und setzt sich zusammen aus Reibungs- und Formwiderstand eines

¹Die erste Formulierung der Partikelbewegungsgleichung geht aber bereits zurück auf Arbeiten von Stokes [309]. Dieser spezifizierte die Kraft, welche auf ein fixiertes kleines Teilchen bei gleichmäßiger Anströmung wirkt, und lieferte damit die Pionierarbeiten für die Untersuchungen von Partikelbewegungen in viskosen Fluiden.

Teilchens. Sie ergibt sich durch Integration der Reibungs- und Druckkräfte über die Teilchenoberfläche. Für den Stokesschen Bereich (d.h. bei einer schleichenden Strömung mit $\text{Re}_P < 1$) erhält man so unter Vernachlässigung der Trägheitskräfte bei einem kugelförmigen Teilchen die beiden Anteile zur Widerstandskraft. Es wird dabei eine gleichmäßige Strömung um das Teilchen sowie eine konstante Relativgeschwindigkeit angenommen.

$$\mathbf{F}_D = \mathbf{F}_D^F + \mathbf{F}_D^R = 3\pi \mu d \mathbf{w} = 18 m \frac{\mu}{\rho_P d^2} \mathbf{w} \quad (4.13)$$

$$\mathbf{F}_D^F = \frac{1}{3} \mathbf{F}_D \quad (\text{Formwiderstand})$$

$$\mathbf{F}_D^R = \frac{2}{3} \mathbf{F}_D \quad (\text{Reibungswiderstand})$$

Unter Verwendung der Definitionsgleichung für die Partikelrelaxationszeit (Gl. 4.6) resultiert somit vereinfachend:

$$\mathbf{F}_D = m \tau_P^{-1} \mathbf{w} \quad (4.14)$$

Bei höheren Reynoldszahlen nimmt die Bedeutung der Trägheitskräfte zu. Eine analytische Lösung für die Widerstandskraft steht dann nicht mehr zur Verfügung. Daher wird zur Korrektur der Widerstandsbeiwert c_D eingeführt, für welchen im Stokesschen Bereich $c_D = 24 \text{Re}_P^{-1}$ gilt. Die auf höhere Reynoldszahlen angepasste Partikelrelaxationszeit lautet dann:

$$\tau_P = \frac{\rho_P d^2}{18 \mu} \frac{24}{c_D \text{Re}_P} \quad (4.15)$$

Für $\text{Re}_P < 1$ geht Gl. 4.15 also in Gl. 4.6 über. Entsprechend ergibt sich für die Widerstandskraft:

$$\mathbf{F}_D = m \tau_P^{-1} \mathbf{w} = \frac{3}{4} m \gamma_\rho d^{-1} c_D |\mathbf{w}| \mathbf{w} \quad (4.16)$$

Der Widerstandsbeiwert hängt von sehr vielen Faktoren ab, wobei die Reynoldszahl für die vorliegenden Betrachtungen den größten Einfluss hat. Nimmt die Reynoldszahl zu, so steigt c_D im Vergleich zum c_D -Wert im Stokesschen Bereich. Steigt die Reynoldszahl weiter, so bilden sich Wirbel hinter dem kugelförmigen Teilchen. Damit ändert sich die Druckverteilung an der Oberfläche und der Formwiderstand erhöht sich. Im Newtonschen Bereich (ca. $750 < \text{Re}_P < 3.5 \cdot 10^5 = \text{kritische Reynoldszahl}$) spielt der Anteil der Reibung kaum noch eine Rolle und es liegt ein nahezu konstanter Widerstandsbeiwert von $c_D = 0.445 (\pm 13\%)$ vor. Höhere Reynoldszahlen sind in der Regel bei der Berechnung von partikelbeladenen Strömungen nicht relevant.

Für die experimentell zu ermittelnde Beziehung zwischen Widerstandsbeiwert c_D und Reynoldszahl Re_P sind in der Vergangenheit bereits eine Vielzahl von Funktionen veröffentlicht worden. Eine Auswahl an Korrelationen zur Berechnung von c_D ist in Anhang A.1 vergleichend zusammengestellt und diskutiert. Die bereits 1933 von Schiller & Naumann [284] vorgeschlagene Funktion (Gl. 4.17) hat dabei in der Literatur eine Art Standard-Status, so dass sie auch in der vorliegenden Arbeit (im Falle von sehr verdünnten Zweiphasenströmungen) verwendet wird.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left(1 + 0.15 \text{Re}_P^{0.687} \right) \quad \forall \text{Re}_P < 800 \quad (4.17)$$

Mit einer Abweichung von $\pm 5\%$ im betrachteten Bereich hat sie eine ausreichende Genauigkeit. Außerhalb des Bereichs, d.h. für $Re_P > 800$, wird der Widerstandsbeiwert aufgrund der oben beschriebenen Gegebenheiten zu $c_D = 0.445$ gesetzt.

Da bei der Widerstandskraft nur Relativgeschwindigkeiten auftreten, gilt die Kraft in unveränderter Form auch bzgl. eines rotierenden Koordinatensystems. Das gleiche gilt für die Partikel-Reynoldszahl Re_P und den Widerstandsbeiwert c_D .

Schwerkraft F_G

Die Schwerkraft ergibt sich durch die Gravitationsbeschleunigung \mathbf{g} und hat die folgende einfache Form:

$$\mathbf{F}_G = m \mathbf{g} \quad (4.18)$$

Bei der Transformation auf ein mit $\boldsymbol{\Omega}_G$ rotierendes Koordinatensystem erhält man:

$$\mathbf{F}_G = m (2 [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{u}_g] + [\boldsymbol{\Omega}_G \times [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{x}_g]]) \quad (4.19)$$

Im Fall von $\mathbf{g} \parallel \boldsymbol{\Omega}_G$ bleibt die Kraft bei der Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem unverändert, da dann auch die durch die Gravitation resultierende Geschwindigkeit \mathbf{u}_g mit $d\mathbf{u}_g/dt = \mathbf{g}$ als auch der resultierende Weg mit $d\mathbf{x}_g/dt = \mathbf{u}_g$ parallel zu $\boldsymbol{\Omega}_G$ verlaufen und sich somit die Vektorprodukte zu Null berechnen.

Bei den vorliegenden Untersuchungen wurden ausschließlich Systeme betrachtet, bei welchen sich das rotierende Koordinatensystem um die x_3 -Achse des entsprechenden stationären Koordinatensystems dreht und die Gravitation in die negative x_3 -Koordinate gerichtet ist.

Kraft durch den Druckgradienten F_P

Durch einen Druckgradienten in der Strömung resultiert eine weitere Kraft auf das Teilchen. Mit der Annahme eines konstanten Druckgradienten über das Partikel ergibt sich durch Integration über die Teilchenoberfläche:

$$\mathbf{F}_P = -\nabla p m / \rho_P \quad (4.20)$$

Betrachtet man die Navier-Stokes-Gleichung (vgl. Gl. 3.8, wobei als Volumenkraft hier zunächst nur die Schwerkraft berücksichtigt wird)

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (4.21)$$

so lässt sich der Druckgradient wie folgt ausdrücken:

$$-\nabla p = \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \mathbf{g} \quad (4.22)$$

Unter Annahme von konstanter Scherung über das Teilchen wird der Term $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$ zu Null und es ergibt sich für die Kraft durch den Druckgradienten:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - m \gamma_\rho \mathbf{g} \quad (4.23)$$

Die Bedeutung der Kraft ist somit direkt proportional zum Dichteverhältnis γ_ρ und steigt mit zunehmendem Druckgradienten.

Häufig werden die beiden Teilterme getrennt voneinander betrachtet und der erste Term als Druckkraft und der zweite Term als Auftriebskraft bezeichnet. Die Auftriebskraft wird dann in der Regel mit der Gewichtskraft zusammengefasst.

Analog zur Schwerkraft ändert sich auch die Auftriebskraft im Fall von $\mathbf{g} \parallel \boldsymbol{\Omega}_G$ bei der Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem nicht. Bei der Druckkraft entstehen allerdings wie bei der Trägheitskraft durch die Transformation zusätzliche Terme. Allgemein lässt sich die Kraft durch einen Druckgradienten dann wie folgt schreiben:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + 2 [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{u}] + [\boldsymbol{\Omega}_G \times [\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{x}_P]] - \mathbf{g} \right) \quad (4.24)$$

Bei einer Rotation um die x_3 -Achse mit einer Winkelgeschwindigkeit von Ω_G und einer Gravitationsbeschleunigung von $\mathbf{g} = g_3 \mathbf{e}_3$ ergibt sich somit:

$$\mathbf{F}_P = m \gamma_\rho \left[\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \begin{pmatrix} -\Omega_G^2 x_{1,P} - 2 \Omega_G u_2 \\ -\Omega_G^2 x_{2,P} + 2 \Omega_G u_1 \\ -g_3 \end{pmatrix} \right] \quad (4.25)$$

Kraft durch die virtuelle Masse \mathbf{F}_{VM}

Bei der Beschleunigung eines Teilchens muss auch das Fluid in der direkten Umgebung des Teilchens mitbeschleunigt werden, so dass sich ein zusätzlicher Formwiderstand ergibt. Dieser ist proportional zum Dichteverhältnis γ_ρ , d.h. die Bedeutung der massenbezogenen Kraft nimmt mit γ_ρ zu. Die effektive Masse eines Teilchens erscheint also durch diesen Term größer als die reale.

Über die Betrachtung der kinetischen Energie des umgebenden Fluids und entsprechende Integration (s. z.B. Crowe, Sommerfeld und Tsuji [55]) erhält man für die Kraft durch die virtuelle Masse die folgende Beziehung:

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \quad (4.26)$$

Der Koeffizient c_{VM} wurde eingeführt, um die Gültigkeit der Beziehung auch für höhere Reynoldszahlen zu erweitern. Nach Odar & Hamilton [224] lässt sich c_{VM} in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl Re_P und der Beschleunigungszahl

Ac bestimmen. Neuere Untersuchungen (Rivero et al. [267], Mei et al. [199] und Chang & Maxey [40][41]) zeigen aber, dass für einen großen Bereich von Re_P und Ac der Koeffizient $c_{VM} = 0.5$, welcher sich bei kriechender Umströmung berechnet, nach wie vor Gültigkeit besitzt. Bei den durchgeführten Berechnungen wurde daher $c_{VM} = 0.5$ verwendet.

Im rotierenden Koordinatensystem ergeben sich durch die Transformation der Geschwindigkeitsableitungen analog zur Trägheitskraft und zur Druckkraft zusätzliche Terme:

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} + 2[\boldsymbol{\Omega}_G \times \mathbf{w}] \right) \quad (4.27)$$

Unter Verwendung von $\boldsymbol{\Omega}_G = \Omega_G \mathbf{e}_3$ vereinfacht sich Gl. 4.27 zu

$$\mathbf{F}_{VM} = m c_{VM} \gamma_\rho \left[\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \begin{pmatrix} -2\Omega_G(u_2 - v_2) \\ 2\Omega_G(u_1 - v_1) \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (4.28)$$

Basset-Kraft \mathbf{F}_B :

Diese Kraft beschreibt den Einfluss der Vorgeschichte auf die Teilchenbewegung und ergibt sich durch die Berücksichtigung von viskosen Effekten durch die instationäre, relative Beschleunigung des Teilchens zum Fluid. Die von Basset [18] beschriebene Widerstandskraft, erweitert durch einen von Odar & Hamilton [224][223] vorgeschlagenen Korrekturfaktor c_B für höhere Reynoldszahlen (welcher von ihnen in Abhängigkeit von der Beschleunigungszahl Ac angegeben wurde) sowie die Modifikation durch Reeks & McKee [261] zur Berücksichtigung der Anfangsgeschwindigkeiten $(\mathbf{u} - \mathbf{v})_0$, hat die folgende Form:

$$\mathbf{F}_B = \frac{3}{2} d^2 c_B \sqrt{\pi \rho \mu} \left[\int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt'} - \frac{d\mathbf{v}}{dt'} \right) dt' + \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v})_0}{\sqrt{t}} \right] \quad (4.29)$$

Die massenbezogene Kraft ist also proportional zu $\sqrt{\rho}/\rho_P$ und wurde daher bei den vorliegenden Untersuchungen vernachlässigt². Eine weiterführende Diskussion der Basset-Kraft findet sich z.B. bei Crowe et al. [55].

²Hjelmfelt & Mockros [126] haben zur Untersuchung der Partikeldispersion in einer turbulenten Strömung die Partikelbewegungsgleichung in den Frequenzbereich transformiert. Dadurch konnte anschaulich die Relevanz der einzelnen Terme der Bewegungsgleichung dargestellt werden. Als Kräfte wurden neben der Widerstandskraft \mathbf{F}_D die Kraft durch den Druckgradienten \mathbf{F}_P , die Kraft durch die virtuelle Masse \mathbf{F}_{VM} und die Basset-Kraft \mathbf{F}_B berücksichtigt. Bei den betrachteten Fällen wurde nacheinander \mathbf{F}_B , dann \mathbf{F}_{VM} und schließlich \mathbf{F}_P vernachlässigt. Durch entsprechende Vergleiche konnte gezeigt werden, dass die vernachlässigten Kräfte im Falle von sehr kleinen Dichteverhältnissen γ_ρ und kleinen Teilchen unbedeutend werden. Liang & Michaelides [176] zeigten z.B., dass die Basset-Kraft bei Gas-Feststoff Strömungen für $\gamma_\rho < 0.002$ vernachlässigbar ist. Besonders bei Blasenströmungen ist eine Vernachlässigung somit nicht sinnvoll. Es ist zu bemerken, dass aufgrund der Ergebnisse von Hjelmfelt & Mockros die Vernachlässigung der Basset-Kraft bei der Berechnung von festen Teilchen in Fluiden im

Saffman-Kraft \mathbf{F}_{LS}

Befindet sich ein Teilchen in einer Scherströmung, so stellt sich eine ungleichmäßige Druckverteilung über die Teilchenoberfläche ein und es resultiert eine Querkraft senkrecht zur Strömung, welche hin zur größeren Relativgeschwindigkeit \mathbf{w} ausgerichtet ist. In Abb. 4.1 ist dies schematisch verdeutlicht.

Nach Arbeiten von Saffman [275][276] (er konnte eine analytische Beziehung für die nach ihm benannte Querkraft herleiten) und Mei [197] ergibt sich die folgende verallgemeinerte Form der Querkraft:

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d^2 (\rho\mu)^{1/2} c_{LS} |\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}|^{-1/2} [\mathbf{w} \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}] \quad (4.30)$$

bzw. unter Einbeziehung der Reynoldszahl bzgl. Scherung Re_S :

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d \mu Re_S^{1/2} c_{LS} [\mathbf{w} \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}}] \quad (4.31)$$

Die Rotation des Fluids wird dabei durch $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} = [\nabla \times \mathbf{u}]$ beschrieben und der von Mei [197] vorgeschlagene Korrekturterm c_{LS} für höhere Reynoldszahlen ermittelt sich aus dessen empirischer Korrelation in Abhängigkeit von den Partikel-Reynoldszahlen bzgl. Translation Re_P und Scherung Re_S .

$$c_{LS} = \begin{cases} (1 - 0.3314 \Upsilon_S^{1/2}) \exp(-0.1 Re_P) + 0.3314 \Upsilon_S^{1/2} & \forall Re_P \leq 40 \\ 0.0371 Re_S^{1/2} & \forall Re_P > 40 \end{cases} \quad (4.32)$$

$$\text{mit } \Upsilon_S = \frac{1}{2} Re_S Re_P^{-1} \text{ im Bereich } 0.005 < \Upsilon_S < 0.4$$

Die Basis für die Beziehung bildeten die numerischen Ergebnisse von Dandy & Dwyer [59]. Später konnte gezeigt werden, dass die Ergebnisse von McLaughlin [196] mit der Korrelation ebenfalls richtig wiedergegeben werden.

Durch die Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem ergeben sich zusätzliche Terme. Ferner ist zu beachten, dass Re_S im Gegensatz zu Re_P nicht invariant bzgl. einer Rotation des Koordinatensystems ist. Allgemein lässt sich für die Saffman-Kraft also schreiben:

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d^2 (\rho\mu)^{1/2} c_{LS} |\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} + 2\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}}|^{-1/2} [\mathbf{w} \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{F}} + 2\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{G}})] \quad (4.33)$$

Gegensatz zu den Berechnungen von festen Teilchen in Luft nicht eindeutig möglich ist. Wegen des überproportional hohen Berechnungsaufwands für die Erfassung dieser Kraft wird diese Unschärfe aber in Kauf genommen.

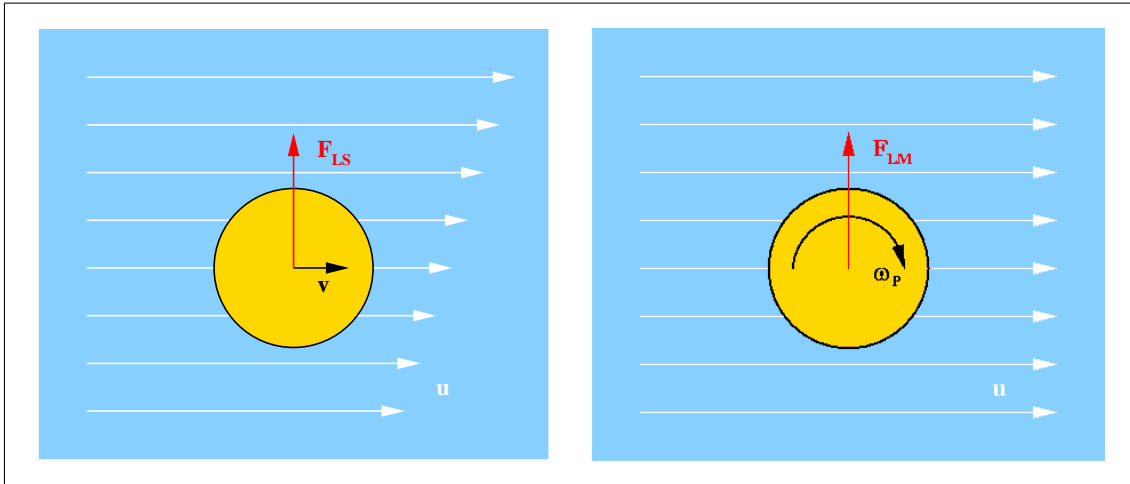


Abbildung 4.1: Querkraft auf ein Partikel in einer Scherströmung (Saffman-Kraft \mathbf{F}_{LS} , links) bzw. aufgrund der Eigenrotation des Teilchens (Magnus-Kraft \mathbf{F}_{LM} , rechts)

Magnus-Kraft \mathbf{F}_{LM}

Die auf Arbeiten von Magnus zurückgehende Kraft resultiert aus der Eigenrotation eines Teilchens in einer parallelen Fluidströmung. Aufgrund der durch die Rotation und die Haftbedingung bestimmten Relativgeschwindigkeiten an der Teilchenoberfläche stellt sich eine ungleichmäßige Druckverteilung über die Oberfläche ein. (Bewegt sich die Teilchenoberfläche entgegen der Strömungsrichtung, so wird das Fluid in der direkten Umgebung des Teilchens verzögert und es resultiert eine lokale Druckerhöhung. Entsprechend entsteht eine lokale Druckreduzierung bei einer Bewegung in Strömungsrichtung.) Dadurch erhält man eine Querkraft/Auftriebskraft (s. Abb. 4.1), die in allgemeinen als Magnus-Effekt bezeichnet wird. Bei hohen Rotationsgeschwindigkeiten der Teilchen kann die Magnus-Kraft deren Bewegung signifikant beeinflussen. Besonders bei Strömungen mit vielen Wandkollisionen, welche große Rotationsgeschwindigkeiten induzieren können, ist mit einer großen Bedeutung zu rechnen (s. z.B. Untersuchungen von Matsumoto & Saito [194] zum pneumatischen Transport in einem rechteckigen Kanal).

Nach Arbeiten von Rubinow & Keller [272] und entsprechender Verallgemeinerung (s. Crowe et al. [55]) kann die Magnus-Kraft wie folgt beschrieben werden:

$$\mathbf{F}_{LM} = \frac{1}{8} \pi \rho d^2 c_{LM} |\mathbf{w}| |\boldsymbol{\omega}_r|^{-1} [\boldsymbol{\omega}_r \times \mathbf{w}] \quad (4.34)$$

bzw. unter Verwendung der Partikel-Reynoldszahlen bzgl. Translation Re_P und Rotation Re_R :

$$\mathbf{F}_{LM} = \frac{1}{8} \pi \rho d^3 Re_P Re_R^{-1} c_{LM} [\boldsymbol{\omega}_r \times \mathbf{w}] \quad (4.35)$$

Für kleine Partikel-Reynoldszahlen ($Re_P < 1$) gilt für den Auftriebsbeiwert nach

theoretischen Ableitungen von Rubinow & Keller [272]:

$$c_{LM} = d |\boldsymbol{\omega}_r| |\mathbf{w}|^{-1} = \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} \quad (4.36)$$

Bei höheren Partikel-Reynoldszahlen (d.h. für $\text{Re}_P < 140$) lässt sich der Beiwert nach Oesterlé & Bui Dinh [225] wie folgt approximieren:

$$c_{LM} = 0.45 + (\text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} - 0.45) \exp(-0.05684 \text{Re}_R^{0.4} \text{Re}_P^{0.3}) \quad (4.37)$$

Alternativ lässt sich der Beiwert mit der Beziehung von Lun & Liu [185]³ für Partikel-Reynoldszahlen bis $\text{Re}_P = 1000$ beschreiben:

$$c_{LM} = \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} (0.178 + 0.822 \text{Re}_P^{-0.552}) \quad (4.38)$$

Andere Autoren (z.B. Frank [95] und Wassen [342]) verwenden bei ihren Simulationen eine einfachere Beziehung für c_{LM} , welche auf den experimentellen Untersuchungen von Tsuji et al. [326] basiert.

$$c_{LM} = \begin{cases} (0.4 \pm 0.1) \Upsilon_R & \forall \Upsilon_R < 1 \\ (0.4 \pm 0.1) & \forall \Upsilon_R \geq 1 \end{cases} \quad \text{mit } \Upsilon_R = \frac{1}{2} \text{Re}_R \text{Re}_P^{-1} \quad (4.39)$$

Hier wird eine abschnittsweise lineare Abhängigkeit des Beiwerts vom Reynoldszahlenverhältnis (dieses entspricht einer dimensionslosen Rotationsgeschwindigkeit) angenommen, welche z.B. auch bei der Umströmung eines rotierenden Zylinders gefunden wurde. Eine ausführlichere Diskussion zu den Abhängigkeiten des Auftriebsbeiwertes findet sich z.B. bei Sommerfeld [294] oder Crowe et al. [55].

Da bei der Magnus-Kraft nur Relativgeschwindigkeiten auftreten, behält die Kraft in unveränderter Form auch bzgl. eines rotierenden Koordinatensystems ihre Gültigkeit. Gleiches gilt für die verwendeten Reynoldszahlen sowie dem Auftriebsbeiwert.

4.2.3 Teilchenrotationsgeschwindigkeit

Analog zur Partikelbewegungsgleichung gilt für die Drehimpulsänderung eines Teilchens, dass die Änderung im Gleichgewicht mit den angreifenden Drehmomenten stehen muss, welche entlang der Flugbahn eines Teilchens wirken. Durch Integration von Gl. 4.10 über einen betrachteten Zeitschritt Δt berechnet sich die entsprechende Änderung der Partikelrotationsgeschwindigkeit.

Drehmoment durch Transformation auf ein rotierendes Bezugssystem \mathbf{T}_Ω

Die Transformation der zeitlichen Ableitung der Partikelrotation (linke Seite von Gl. 4.10) führt ähnlich wie bei der Transformation der Partikelbewegungsgleichung

³Die Korrelation baut auf den Arbeiten von Rubinow & Keller [272], Oesterlé et al. [226] sowie Tsuji et al. [326] auf.

zu Zentrifugal- und die Corioliskraft in der Erhaltungsgleichung für den Drehimpuls zu einem zusätzlichen Term:

$$\mathbf{T}_\Omega = I_P [\boldsymbol{\Omega}_G \times \boldsymbol{\omega}_P] \quad (4.40)$$

Bei einer Rotation des Koordinatensystems um die x_3 -Achse (d.h. mit $\boldsymbol{\Omega}_G = \Omega_G \mathbf{e}_3$) ergibt sich somit:

$$\mathbf{T}_\Omega = I_P \begin{pmatrix} -\Omega_G \omega_{2,P} \\ \Omega_G \omega_{1,P} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

Wirkendes Drehmoment durch die Strömung \mathbf{T}

Die Erhaltungsgleichung für das Drehmoment eines Teilchens (Gl. 4.10) geht auf Arbeiten von Rubinow & Keller [272] sowie Happel & Brenner [112] zurück. Das auf ein rotierendes kugelförmiges Teilchen wirkende Drehmoment \mathbf{T} (dieses beschreibt die Dissipation an Rotationsenergie des Teilchens aufgrund der viskosen Reibung des Fluids) ergibt sich durch Lösung der Navier-Stokes-Gleichung und Integration über die Teilchenoberfläche.

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{1}{2}d\right)^5 c_R |\boldsymbol{\omega}_r| \boldsymbol{\omega}_r = \frac{1}{8} \mu \left(\frac{1}{2}d\right)^3 \text{Re}_R c_R \boldsymbol{\omega}_r \quad (4.42)$$

Zur Erweiterung auf höhere Reynoldszahlen wurde in Gl. 4.42 bereits der Rotationsbeiwert c_R eingeführt, welcher sich für kleine Reynoldszahlen ($\text{Re}_R < 40$) auf den theoretischen Wert von $c_R = 64\pi \text{Re}_R^{-1}$ (s. z.B. Lamb [165]) reduziert. Er kann über eine empirische Korrelation basierend auf numerischen Untersuchungen von Dennis et al. [68] und experimentellen Ergebnissen von Sawatzki [277][278] als Funktion von der Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation Re_R bestimmt werden:

$$c_R = 12.9 \text{Re}_R^{-1/2} + 128.4 \text{Re}_R^{-1} \quad \forall \quad 40 < \text{Re}_R < 4000 \quad (4.43)$$

Die Korrelation liefert eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von Sawatzki bis $\text{Re}_R \approx 4000$, aber auch bis $\text{Re}_R \approx 1.6 \cdot 10^5$ ist die Genauigkeit noch mit gut zu bezeichnen (s. Dennis et al. [68]). Bei höheren Reynoldszahlen nähert sich Gl. 4.43 den theoretischen Ableitungen von Banks [13] und Howarth [129] an, welche den Grenzfall sehr hoher Reynoldszahlen mit Hilfe der Grenzschichttheorie betrachteten.

Frank [95] unterteilte den Reynoldszahlenbereich bis $4 \cdot 10^7$ in mehrere Intervalle, um die Messdaten von Sawatzki möglichst genau zu treffen. Eine derartige Unterteilung wird für die vorliegende Arbeit allerdings nicht benötigt, da bereits im mit Gl. 4.43 sehr gut abgebildeten Bereich von $\text{Re}_R < 4000$ relative Winkelgeschwindigkeiten von $|\boldsymbol{\omega}_r| = 1.5 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ (Luft, $d = 200 \mu\text{m}$), 10^5 s^{-1} (Wasser, $d = 200 \mu\text{m}$) bzw. $1.6 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$ (Wasser, $d = 500 \mu\text{m}$) möglich sind, welche als hinreichend hoch erachtet werden.

Da beim angreifenden Drehmoment nur relative Rotationsgeschwindigkeiten auftreten, verhält es sich, wie auch die Partikel-Reynoldszahl bzgl. Rotation und der Rotationsbeiwert, inert bzgl. einer Transformation auf ein rotierendes Koordinatensystem.

4.3 Partikeldispersionsmodell

Bei der Berechnung des Fluidgeschwindigkeitsfeldes mit einem Turbulenzmodell liegt die momentane Fluidgeschwindigkeit, welche an einem bestimmten Ort auf ein Teilchen wirkt, nicht direkt vor. Für die korrekte Berechnung der Teilchenbahnen und die daraus resultierende Dispersion kann die Fluidturbulenz nicht vernachlässigt werden. Die momentane Geschwindigkeit muss daher mit Hilfe der gegebenen Daten (z.B. k und ε bei Verwendung des k - ε -Turbulenzmodells) sowie eines geeigneten Teilchendispersionsmodells⁴ bestimmt werden. In der Literatur finden sich diverse Modelle unterschiedlichster Komplexität zur Berechnung der Partikeldispersion. Eine Übersicht wurde z.B. von Crowe et al. [55] zusammengestellt. Bei den vorliegenden Untersuchungen wurde zur Bestimmung der aktuellen Fluktuationsgeschwindigkeiten des Fluids am Partikelort ein Langevin-Gleichungsmodell eingesetzt. Ein relativ einfacher aber sehr verbreiteter Modellansatz ist die Betrachtung von diskreten Wirbeln (s. z.B. Durst et al. [79]). Dieses Modell soll zunächst kurz beschrieben werden, da es bereits die wesentlichen Modellierungsgedanken enthält.

4.3.1 Modell der diskreten Wirbel

Die aktuelle Schwankungsgeschwindigkeit des Fluids am Partikelort wird bei diesem Modell als Zufallsgröße betrachtet und direkt aus der turbulenten kinetischen Energie k bestimmt. Mit der Annahme von isotroper Turbulenz und einer Gauß-Verteilung der Komponenten der Fluidschwankungsgeschwindigkeit berechnen sich diese Komponenten als Gauß-verteilte Zufallszahlen mit einem Mittelwert von Null und einer Varianz von $\sigma_u^2 = \frac{2}{3}k$.

Die so bestimmte Fluktuationsgeschwindigkeit gilt dann für den aktuellen Wirbel, d.h. es muss eine neue Schwankungsgeschwindigkeit generiert werden, sobald der vorliegende Wirbel dissipiert ist oder das Teilchen den Wirbel durchquert hat. Sowohl für das Dissipationszeitmaß T_E (bzw. die Wirbellebendauer) als auch für die charakteristische Wirbelgröße L_E sind in der Literatur unterschiedliche Ansätze zu

⁴Die Grundlage für die Entwicklung von Partikeldispersionsmodellen (siehe z.B. Yudine [354], Csánady [56] usw.) bildete die Theorie der turbulenten Diffusion von Taylor [320], welche ebenfalls auf Lagrangeschen Korrelationen basiert. Diese wird oft auch als die wichtigste und fundamentalste Theorie in der Geschichte der Turbulenz bezeichnet. In der Folgejahre der Pionierarbeiten von Taylor war die turbulente Diffusion Gegenstand einer Vielzahl von wissenschaftlichen Untersuchungen, welche z.B. von Sommerfeld [294] in einer Übersicht zusammengetragen wurden.

finden. Üblicherweise wird aber die allgemeine Formulierung nach Milojević [203] verwendet und die Wirbellebendauer proportional zu $k \varepsilon^{-1}$ (wobei die Proportionalitätskonstante nach einer Zusammenstellung von Sommerfeld [294] je nach Autor und Verifikationsexperimenten im Bereich von 0.12 bis 0.46 liegt ⁵⁾ angenommen und die charakteristische Wirbelgröße mit $L_E = T_E \sigma_u$ berechnet. Die zur Durchquerung des Wirbels benötigte Zeit T_D kann nun mit $T_D = L_E |\mathbf{w}|^{-1}$ abgeschätzt werden. Der maximale Wechselwirkungszeitraum zwischen Wirbel und Teilchen ergibt sich also aus dem Minimum von T_E und T_D . Es bleibt zu erwähnen, dass in der Literatur eine Vielzahl von Varianten dieses Modells zu finden sind.

4.3.2 Langevin-Gleichungsmodell

Die Langevin-Gleichung wurde ursprünglich bei der Untersuchung der Brownschen Molekularbewegung (z.B. Wang & Uhlenbeck [341]) und später auch für die Beschreibung der Teilchendisersion aufgrund turbulenter Geschwindigkeitsschwankungen (z.B. Durbin [77]) eingesetzt. Es handelt sich beim Langevin-Gleichungsmodell um ein stochastisches Modell aus der Gruppe der *Random Walk* Modelle und die aktuelle Form geht im Wesentlichen auf Untersuchungen der Teilchendisersion in der Atmosphäre zurück (z.B. Csanady [56], Hall [110], Legg & Raupach [175][174] und Sawford [279]).

Der beschreibende Markov-Prozess (Gl. 4.46) enthält sowohl einen zufälligen Anteil zur Erfassung der turbulenten Bewegung des Fluids als auch einen korrelierten Term zur Berücksichtigung von Turbulenzballen (d.h. größeren Wirbelstrukturen). Die Fluidgeschwindigkeiten, welche auf ein Teilchen entlang dessen Flugbahn wirken, sind also in Abhängigkeit von den Wirbelstrukturen mehr oder weniger stark korreliert (s. auch Sommerfeld [294] und Decker [61]).

Im Allgemeinen haben disperse Teilchen und Fluidelemente auch bei gleichem Startpunkt unterschiedliche Trajektorien (s. Abb. 4.2). Dies erklärt sich durch die Teilchenträgheit sowie die auf das Teilchen wirkenden äußeren Kräfte. Die Ermittlung der vom Teilchen gesehenen momentanen Fluidgeschwindigkeit erfolgt basierend auf Arbeiten von Ormancey & Martinon [229] im wesentlichen in zwei Schritten. Im ersten Schritt wird die Fluktuationsgeschwindigkeit des Fluids entlang der Trajektorie eines Fluidelements unter Verwendung einer Lagrangeschen Korrelationsfunktion ermittelt. Benötigt wird aber die Fluktuationsgeschwindigkeit entlang der Partikelbahn, so dass im zweiten Schritt mit einer Eulerschen Korrelationsfunktion eine Beziehung zwischen der Geschwindigkeit am Partikelort mit der am Ort des Fluidelements hergestellt wird. Die Erfassung der Geschwindigkeitsänderung entlang der Partikelbahn erfolgt dann durch eine Kombination der beiden Schritte.

Für die Lagrangesche Korrelation der Fluidfluktuationsgeschwindigkeiten (man spricht hier auch oft von einer Auto- oder Zeitkorrelation, da nur eine Änderung

⁵⁾Sowohl Sommerfeld et al. [304] als auch Milojević [203] empfehlen die Verwendung einer Proportionalitätskonstante von 0.3.

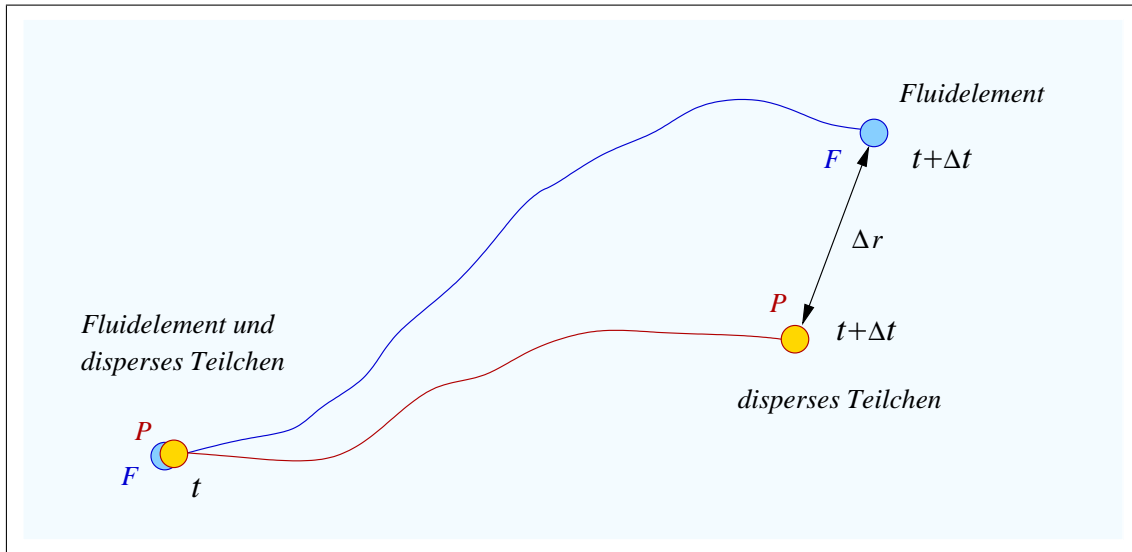


Abbildung 4.2: Unterschiedliche Ortsänderung bzw. Bewegungsbahn eines festen dispersen Teilchens P und eines Fluidelements F innerhalb eines Zeitschritts

der Zeit betrachtet wird) die folgende Beziehung:

$$\mathcal{R}_{\mathcal{L}} = (\mathcal{R}_{\mathcal{L}})_{ij} \{e_i e_j\} = R_{L,ij} \{e_i e_j\} = \frac{u'_i(t + \Delta t) u'_j(t)}{\sqrt{u'^2_i(t) u'^2_j(t)}} \{e_i e_j\} \quad (4.44)$$

Der Korrelationstensor hängt also sowohl von der Zeit t als auch vom Zeitschritt Δt ab, wobei die Abhängigkeit von t normalerweise nicht berücksichtigt werden muss. Vernachlässigt man die Kreuzkorrelationen⁶, so lässt sich der Tensor $\mathcal{R}_{\mathcal{L}}$ auf einen Vektor $\mathbf{R}_{\mathbf{L}}$ mit den folgenden Elementen reduzieren:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{L}} = (\mathbf{R}_{\mathbf{L}})_i e_i = R_{L,i} e_i = (\mathcal{R}_{\mathcal{L}})_{ii} e_i = R_{L,ii} e_i \quad (4.45)$$

Entlang der Trajektorie eines Fluidelements ergibt sich somit die folgende Beziehung für die Fluktuationsgeschwindigkeiten mit einem zeitlichen Abstand von Δt :

$$u'_{i,F}(t + \Delta t) = R_{L,i} u'_{i,F}(t) + \sqrt{1 - (R_{L,i})^2} \sigma_{u_i} \xi_{u_i} \quad (4.46)$$

Dabei steht $u'_{i,F}$ für die Fluidfluktuationsgeschwindigkeit am Ort des Fluidelements, σ_{u_i} für die Standardabweichung der Fluidgeschwindigkeitskomponente u_i und ξ_{u_i} für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von 1 (ebenfalls für Fluidgeschwindigkeitskomponente u_i). Die Komponenten des Lagrangeschen Geschwindigkeitskorrelationsvektors $\mathbf{R}_{\mathbf{L}}$ können mit der

⁶Andere Autoren (z.B. Berlemont et al. [21][23] und Zhou & Leschziner [356][357]) berücksichtigen bei ihren Modellen die gesamte Matrix. Während Berlemont et al. bis zu 50 zurückliegende Zeitschritte berücksichtigen, beschränken sich Zhou & Leschziner auf die Berücksichtigung des letzten Zeitschritts.

Annahme von homogener und isotroper Turbulenz (s. Hinze [124]) als Exponentialfunktionen der Form

$$R_{L,i} = e^{-\Delta t/T_{L,i}} \quad (4.47)$$

angesetzt werden, wobei $T_{L,i}$ das Lagrangesche integrale Zeitmaß der Turbulenz für die i -te Koordinatenrichtung darstellt. Berechnungen mit dem k - ε -Turbulenzmodell implizieren allerdings die Verwendung von nur einem Zeitmaß, so dass sich das Lagrangesche integrale Zeitmaß mit

$$T_L = C_T \frac{2}{3} k/\varepsilon \quad (4.48)$$

bestimmen lässt. Nach Untersuchungen von Sommerfeld [294] ist für C_T der Wert 0.24 zu setzen. Der Korrelationsvektor \mathbf{R}_L geht somit in den skalaren Wert R_L über.

Berlemont et al. [23] verwenden anstelle von Gl. 4.47 einen gemischten, d.h. nicht rein exponentiellen, Ansatz zur Beschreibung der Korrelationsfunktion. Es ist aber zu bemerken, dass streng genommen nur die rein exponentielle Form mit den Herleitungen konsistent ist.

Bei inhomogener Turbulenz kann es zu einer künstlichen Akkumulation von leichten Teilchen in Regionen mit geringer Turbulenzintensität führen (s. z.B. MacInnes & Bracco [189]). Legg & Raupach [175] haben daher Driftkorrekturen vorgeschlagen, um die Variationen der Geschwindigkeitsvarianz in inhomogener Turbulenz in Verbindung mit Druckgradienten zu berücksichtigen.

Wie bereits angedeutet, ist die Fluktuationengeschwindigkeit, welche ein Fluidteilchen während eines Zeitschritts erfährt, anders als die, die ein Feststoffteilchen erfährt. Die Lagrangesche Korrelationsfunktion kann nur die Korrelation zwischen zwei Zeitpunkten entlang der Bahn eines Fluidelements berücksichtigen, so dass eine zweite (Eulersche) Korrelationsfunktion verwendet wird, um die Ortsverschiebung $\Delta \mathbf{r}$ zwischen Fluid- und Feststoffteilchen während eines Zeitschritts Δt zu erfassen (s. Abb. 4.2).

Für die eingesetzte Eulersche Korrelation (oft auch Raum- oder Ortskorrelation genannt, da nur eine Ortsänderung betrachtet wird) gilt folgende Beziehung:

$$\mathcal{R}_{\mathcal{E}} = (\mathcal{R}_{\mathcal{E}})_{ij} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} = R_{E,ij} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} = \frac{\overline{u'_i(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) u'_j(\mathbf{r})}}{\sqrt{\overline{u'^2(\mathbf{r})} \overline{u'^2(\mathbf{r})}}} \{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j\} \quad (4.49)$$

Der Korrelationstensor $\mathcal{R}_{\mathcal{E}}$ hängt also sowohl vom Ort \mathbf{r} als auch von der Ortsverschiebung $\Delta \mathbf{r}$ ab, wobei analog zur Lagrangeschen Korrelation die Abhängigkeit von \mathbf{r} normalerweise nicht berücksichtigt werden muss. Vernachlässigt man auch hier die Kreuzkorrelationen, so reduziert sich der Tensor $\mathcal{R}_{\mathcal{E}}$ auf den Vektor \mathbf{R}_E :

$$\mathbf{R}_E = (\mathbf{R}_E)_i \mathbf{e}_i = R_{E,i} \mathbf{e}_i = (\mathcal{R}_{\mathcal{E}})_{ii} \mathbf{e}_i = R_{E,ii} \mathbf{e}_i \quad (4.50)$$

Die Ortskorrelation setzt also die Geschwindigkeitsfluktuationen des Fluids am neuen Partikelort in Beziehung zu den Geschwindigkeiten am neuen Ort des Fluidelements. Im Fall von lokal homogener und isotroper Turbulenz kann eine Koordinatentransformation vorgenommen werden. Damit lässt sich der Ortskorrelationsvektor

zwischen zwei beliebigen Punkten mit Hilfe von zwei skalaren Funktionen darstellen. Dies sind eine longitudinale und eine transversale Korrelationsfunktion $f(\Delta r)$ und $g(\Delta r)$ (s. Dryden [76] und von Kármán & Howarth [337]). Damit erhält man für den Korrelationstensor

$$\mathbf{R}_E = \frac{f(\Delta r) - g(\Delta r)}{(\Delta r)^2} \{\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r}\} + g(\Delta r) \mathbf{I} \quad (4.51)$$

bzw. für die Komponenten des Korrelationsvektors

$$R_{E,i} = \frac{f(\Delta r) - g(\Delta r)}{(\Delta r)^2} (\Delta r_i)^2 + g(\Delta r) \quad (4.52)$$

Hierbei steht Δr für den Betrag von $\Delta \mathbf{r}$, \mathbf{I} für den Einheitstensor und $\{\Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r}\}$ für das dyadische Produkt zweier Vektoren.

Die folgenden Relationen wurden ermittelt aus Vergleichen mit experimentellen Ergebnissen (s. Frenkiel [98] und Rotta [271]) und sind gute Approximationen für die longitudinale und die transversale Korrelation im Fall lokal homogener und isotroper Turbulenz.

$$f(\Delta r) = e^{-\Delta r/L_E} \quad (4.53)$$

$$g(\Delta r) = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_E}\right) e^{-\Delta r/L_E} \quad (4.54)$$

Das Eulersche integrale Längenmaß am neuen Fluidteilchenort wird näherungsweise mit

$$L_E = C_L T_L \sqrt{\frac{2}{3} k} \quad (4.55)$$

bestimmt. Durch den Vergleich mit Experimenten wurde von Sommerfeld et al. [304] für C_L ein Wert von 3.0 ermittelt.

Durch eine Kombination der Zeit- und Ortskorrelation erhält man schließlich einen effektiven Korrelationsvektor (Sommerfeld [294] und Walklate [340]):

$$\mathbf{R}_P = R_L \mathbf{R}_E \quad (4.56)$$

bzw. $R_{P,i} = R_L R_{E,i}$ für dessen Komponenten.

Für die Berechnung der Fluidfluktationsgeschwindigkeit am neuen Partikelort in Abhängigkeit von den Daten am alten Partikelort ergibt sich somit die folgende Beziehung:

$$u'_{i,P}(t + \Delta t) = R_{P,i} u'_{i,P}(t) + \sqrt{1 - (R_{P,i})^2} \sigma_{u_i} \xi_{u_i} + (1 - R_{P,i}) T_L \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} \quad (4.57)$$

Der erste Term steht dabei für den korrelierten Anteil, der zweite für den zufälligen Anteil und der dritte für die Driftkorrektur. Die Korrektur lässt sich aus der Impulsgleichung ableiten und wurde eingeführt, um eine mittlere Driftbewegung der

Teilchen aus turbulenten Gebieten in Richtung weniger turbulenten Zonen zu vermeiden.

Validierungsberechnungen für das beschriebene Modell wurden bereits von Sommerfeld [294] unter Verwendung experimenteller Ergebnisse von Snyder & Lumley [290] und Wells & Stock [345] bei isotroper Gitterturbulenz sowie von Calabrese & Middleman [39] bei nichtisotroper Turbulenz durchgeführt und ausführlich diskutiert. Ferner wurde die Dispersion eines Fluidelements betrachtet und mit den theoretischen Ableitungen von Taylor [320] verglichen.

4.4 Rückwirkung der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase

Wenn sich der Impuls der dispersen Phase aufgrund der Krafteinwirkung des Fluids erhöht bzw. verringert, so muss sich aus Gründen der Impulserhaltung der Impuls des Fluids in der Umgebung der Teilchen ebenfalls ändern, nämlich verringern bzw. erhöhen. Ebenso kann die Anwesenheit von Teilchen die Turbulenz der Strömung je nach Massenbeladung und Größe der Teilchen sowohl anregen als auch dämpfen⁷.

⁷Bei experimentellen Untersuchungen einer horizontalen Rohrströmung mit moderater Teilchenkonzentration fand Zisselmar [358] eine Turbulenzanfächung in Wandnähe, während sich in der Rohrmitte keine Änderungen zeigten. Dies begründete er mit den kleineren Wirbeln in Wandnähe, welche eine maximale Wechselwirkung mit den Teilchen ermöglichen.

Neeße et al. [215] stellen bei ihren Untersuchungen mit gerührten Suspensionen eine starke Turbulenzdämpfung mit zunehmender Beladung und abnehmender Teilchengröße fest. Ähnliche Aussagen resultierten auch aus den Messungen von Svenka [314].

Die Experimente von Geisler [102] (Suspension im Rührbehälter) zeigten ebenfalls eine Turbulenzdämpfung in fast allen betrachteten Zonen bei einem Partikelvolumenanteil von 8% und mehr. Es gab aber auch Positionen mit einer Anfächung (z.B. unterhalb des Rührers im Bereich der Blattspitzen). Die Zonen maximaler Energiedissipation verschoben sich mit zunehmender Partikelbeladung in Richtung Behälterboden. Im Gegensatz zu Neeße et al. [215] fand Geisler auch einen Einfluss der Konzentration auf die turbulenten Längenmaße.

Nouri et al. [222] erklären die zunehmenden Dämpfungseffekte mit steigender Konzentration durch eine Vergrößerung der Längenmaße in Folge von steigender Suspensionsviskosität. Damit wird τ_P kleiner und die Teilchen können den Fluidschwankungen besser folgen, wodurch sich die Turbulenzanfächung aufgrund von Nachlaufeffekten reduziert.

Gore & Crowe [105] werteten eine Vielzahl von Experimenten (primär Gas-Feststoff Rohrströmungen) hinsichtlich Turbulenzbeeinflussung aus. Dabei fanden sie eine Dämpfung für $d/L_E < 0.1$ (ein Teil der Wirbelenergie wird auf die Teilchen übertragen) und eine Anfächung für größere Teilchen (diese erzeugen im Nachlauf kleinere Wirbel). Über die Stärke der Effekte war keine Aussage möglich, da sie sehr stark vom jeweiligen System abhängen.

Analoge Aussagen finden sich bei Hetsroni [123]. Auch er erhält eine Reduzierung der Wirbelenergie im Hochfrequenzbereich bei der Präsenz von kleinen Teilchen und eine Anfächung bei hinreichend großen Partikelreynoldszahlen (Hetsroni nannte in diesem Zusammenhang einen Schwellenwert von $Re_P = 110$).

Untersuchungen von Elghobashi & Truesdell [87] mit *DNS* und sehr kleinen Teilchen ($\tau_P \approx \tau_F$) führten allerdings zu abweichenden Schlussfolgerungen. Es wurden aber nur sehr geringe Konzentrationen betrachtet, so dass Partikel-Partikel-Kollisionen unberücksichtigt blieben. (Die

Nur bei stark verdünnten Zweiphasenströmungen ist der Einfluss der Teilchen auf das Fluid vernachlässigbar.

Die durch die einzelnen Teilchen verursachten Impulsänderungen können für die einzelnen Kontrollvolumina, d.h. für bestimmte finite Bilanzvolumina, aufintegriert bzw. -summiert und in Partikelquelltermen (s. Gl. 3.24) zusammenfasst werden. Dabei wird jeweils entlang des Partikelweges innerhalb des Volumens integriert und für alle Teilchen die das Bilanzgebiet durchqueren aufsummiert. Die Quellterme lassen sich mit einer modifizierten Version des *Particle-Source-in-Cell*-Verfahrens von Crowe et al. [54] berechnen. Es wird angenommen, dass die disperse Phase eine Massen- oder Impulsquelle oder -senke, bzw. eine Quelle für die turbulenten Größen darstellt. Bei den vorliegenden Untersuchungen kommen ausschließlich inerte Teilchen zum Einsatz, so dass keine Massenänderung durch chemische Reaktion oder Phasenwechsel zu berücksichtigen ist. Der Partikelquellterm in der Kontinuitätsgleichung (s. Gl. 3.24) kann somit zu Null gesetzt werden.

Die durch die Partikelbewegung auf das Fluid übertragene Impulsänderung innerhalb eines Zeitschritts errechnet sich mit der entsprechenden Änderung der Teilchengeschwindigkeiten. Durch Summation über alle Zeitschritte, welche in ein bestimmtes Kontrollvolumen fallen, wobei natürlich jedem Zeitschritt ein bestimmtes repräsentatives Teilchen⁸ zugeordnet ist (\implies Index k für die jeweiligen Teilcheneigenschaften), kann die Impulsänderung für ein bestimmtes Kontrollvolumen (mit dem Volumen V_{KV}) ermittelt werden. Durch die Mittelung⁹ über eine große Anzahl von Zeitschritten n_s im betrachteten Kontrollvolumen (dies geht einher mit einer großen Anzahl betrachteter Teilchen) errechnet sich somit ein statistisch signifikanter Partikelquellterm für die Impulsgleichung:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{U,P} &= \sum_{k=1}^{n_s} \mathbf{S}_{U,P,k} \\ &= -V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \dot{m}_{P,k} \left[(\mathbf{v}_k^{t_k + \Delta t_k} - \mathbf{v}_k^{t_k}) - (1 - \gamma_{\rho,k}) \mathbf{g} \Delta t_k \right] \end{aligned} \quad (4.58)$$

Der Massenfluss $\dot{m}_{P,k}$ erfasst dabei die Masse aller Teilchen, welche durch das repräsentative Teilchen symbolisiert werden. Im Falle eines geschlossenen Systems sind keine Massenflüsse gegeben, so dass für eine korrekte Massenbilanz $\dot{m}_{P,k}$ durch $N_{P,k} m_k t_{ref}^{-1}$ ersetzt werden muss. Dabei wird das Produkt aus Partikelmasse m und der Anzahl an realen Teilchen im Parcel N_P durch eine festzulegende Referenzzeit t_{ref} , welche dem Betrachtungszeitraum entspricht, dividiert. Ferner sind Gewichtungsfaktoren (entsprechend der Verweilzeit im jeweiligen Kontrollvolumen) zu

Modifikation der Turbulenz durch die Gegenwart einer dispersen Phase ohne Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen (*two-way coupling* - Crowe [52]) reicht nach Rizk & Elghobashi [268] aus, sofern $\varphi_P < 5 \cdot 10^{-4}$ und $\rho_P \gg \rho$ ist.) Eine Übertragung auf technische Systeme ist damit schwierig.

⁸In der internationalen Literatur werden die repräsentativen Teilchen, welche ja Teilchenkollektive darstellen, oft auch als Parcel oder Cluster bezeichnet (vgl. Abschnitt 5.2). In der vorliegenden Arbeit werden die verschiedenen Begriffe als gleichwertig verwendet.

⁹Details zur verwendeten Ensemble-Mittelung sind in Abschnitt 5.2.4 zusammengestellt.

berücksichtigen, wenn Teilchen innerhalb eines Zeitschritts Kontrollvolumengrenzen überqueren (vgl. Abschnitt 5.2.4).

Äußere Kräfte, wie die Schwer- und Auftriebskraft, sind unabhängig von der Strömung und tragen daher nicht zur Impulsänderung des Fluids bei. Sie müssen somit aus der Betrachtung herausgenommen werden.

Der Quellterm für die Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie lässt sich durch zeitliche Mittelung der Navier-Stokes-Gleichung exakt ableiten (s. z.B. Shuen et al. [287]) und lautet:

$$S_{k,P} = \overline{\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}} - (\mathbf{U} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}) \quad (4.59)$$

wobei der Term der gemittelten Momentanwerte durch eine Summe angenähert werden kann.

$$\overline{\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P}}} = n_s^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{U},\mathbf{P},k}) \quad (4.60)$$

Die Modellierung des Partikelquellterms für die Dissipationsrate basiert auf Arbeiten von Desjonqueres [71] und erfolgt analog zur Vorgehensweise bei der Turbulenzmodellierung (Modellierung von ε in der k -Gleichung). Somit erhält man für den Partikelquellterm:

$$S_{\varepsilon,P} = C_3 \varepsilon k^{-1} S_{k,P} \quad (4.61)$$

Die Modellkonstante wird nach Squires & Eaton [307] mit $C_3 = 1.1$ angenommen. Es muss erwähnt werden, dass für die Modellkonstante in der Literatur je nach Anwendungsfall stark streuende Zahlenwerte zu finden sind. Eine gute Übersicht (auch bzgl. alternativer Modellierungen) bietet hier die Arbeit von Kohnen [157].

4.5 Partikel-Partikel-Kollisionen

Die Bedeutung von Partikel-Partikel-Kollisionen hängt im wesentlichen von der Anzahlkonzentration der Teilchen sowie der Partikelgeschwindigkeitsfluktuationen ab. Bei stark verdünnten Zweiphasenströmungen können Partikel-Partikel-Wechselwirkungen vernachlässigt werden, mit zunehmender Anzahl an Teilchen in einem bestimmten Volumen sowie mit zunehmenden Fluktuationsgeschwindigkeiten steigt die Bedeutung der Partikel-Partikel-Kollisionen und der resultierende Energieverlust im Falle von nicht vollständig elastischen Kollisionen muss berücksichtigt werden. So geben z.B. Oesterlé & Petitjean [227] als Grenzwert bei Gas-Feststoff-Strömungen eine Beladung von 1 an. Aber auch schon bei moderaten Beladungen können Partikel-Partikel-Kollisionen den Charakter einer mehrphasigen Strömung entscheidend prägen. Eine aktuelle Analyse von Kollisionseffekten bei turbulenter Gas-Feststoff Strömung im horizontalen Kanal findet sich z.B. bei Sommerfeld & Kussin [301][305]. Auch bei dieser Untersuchung von Partikel-Wand-Kollisionen (die Wandrauigkeit wurde berücksichtigt variiert) sowie Partikel-Partikel-Kollisionen (bei Variation der Teilchengröße und der Beladung) wurde die

große Bedeutung der Kollisionseffekte für das Partikelverhalten (wie auch bereits von Oesterlé & Petitjean [227] sowie Sommerfeld [306]) demonstriert.

Durch Partikel-Partikel-Kollisionen wird die Teilchenverteilung in der Regel gleichmäßig (s. z.B. Tanaka & Tsuji [318] oder Oesterlé & Petitjean [227]), d.h. es liegt eine erhöhte Dispersion vor. Vor Wänden kann es zu der Ausbildung einer Art Pufferzone kommen, wenn bei hoher Teilchenkonzentration aufgrund sehr vieler Partikel-Wand-Kollisionen eine sehr breite Streuung der Partikelgeschwindigkeiten vorliegt und damit verstärkt Partikel-Partikel-Kollisionen eintreten (s. Oesterlé & Petitjean [227]). Auch die Erosion an Wänden kann durch Partikel-Partikel-Kollisionen verändert werden. Durch die statistische Umverteilung der Auftreffwinkel und -geschwindigkeiten an der Wand kann die Erosion verstärkt werden. Bei hohen Beladungen können Abschirmeffekte durch rückprallende Teilchen die Aufprallgeschwindigkeiten auf der Wand und damit den Abtrag reduzieren (s. Kitron et al. [153]).

Für die direkte Berechnung von Partikel-Partikel-Kollisionen mit dem Lagrange-schen Verfahren (s. z.B. die deterministische Simulation von Tanaka & Tsuji [318]¹⁰ oder von Lun & Liu [185]¹¹) ist die gleichzeitige Verfolgung aller vorliegenden Teilchen im Strömungsgebiet nötig. Eine Zusammenfassung mehrerer realer Teilchen mit gleichen Eigenschaften zu repräsentativen Teilchen sowie eine stationäre Fluidberechnung ist nicht möglich, da die physikalischen Verhältnisse exakt behandelt werden. Dies bedeutet, je höher die Beladung der Strömung und je größer die betrachtete Geometrie, desto mehr Teilchen befinden sich im Berechnungsgebiet und desto mehr Trajektorien müssen gleichzeitig bestimmt werden. Zur Detektion von Kollisionen müssen zu jedem Zeitschritt für alle Kontrollvolumina jeweils alle möglichen Kollisionspaare überprüft werden, ob es zu einer Kollision kommt (d.h. ob sich ihre Flugbahnen kreuzen) oder nicht. Die zur Paarungsprüfung in einem Kontrollvolumen mit N Teilchen benötigte Rechenzeit ist somit proportional zu $\frac{1}{2}N(N-1)$. Damit wird klar, dass bereits bei sehr moderaten Beladungen die Grenzen der zur Zeit vorliegenden Computerkapazitäten überschritten werden und das Verfahren nur im akademischen Bereich von Bedeutung ist.

Zur Vermeidung des Hauptnachteils der deterministischen Simulation, nämlich die hohe Anzahl an simultan zu berechnenden Teilchenbahnen, lässt sich eine Monte-Carlo-Simulation einsetzen (s. z.B. Kitron et al. [153][154], Tanaka et al. [317], Wasen [342] oder Yonemura et al. [352]) Dabei wird mit repräsentativen Teilchen gearbeitet und die Partikel-Partikel-Kollisionen mit einem stochastischen Algorithmus in

¹⁰Bei den Berechnungen wurde eine von Tanaka experimentell untersuchte vertikale Rohrströmung simuliert. Aufgrund des geringen Rohrdurchmessers ($D_R = 40$ mm), der relativ großen Teilchen ($d = 0.4$ mm bzw. $d = 1.5$ mm) und der Betrachtung eines periodischen Rohrabschnitts konnte die Anzahl an simultan zu betrachtenden Teilchen auf 800 bzw. 200 reduziert werden. Die bei den Experimenten gefundene verstärkte Dispersion durch die Partikel-Partikel-Kollisionen konnte durch die Simulation reproduziert werden.

¹¹Auch bei der Arbeit von Lun & Liu wurden periodische Randbedingungen benutzt um das Strömungsgebiet klein zu halten und damit die Anzahl an simultan zu betrachtenden Teilchen zu minimieren. Die Autoren berichten von Berechnungen mit 500 Partikeln.

Analogie zur Berechnung verdünnter Gasströmungen ermittelt. Für eine zuverlässige Statistik sind aber immer noch viele Teilchen simultan zu verfolgen, so dass die Nutzung von Parallelrechnern ratsam ist (s. Wassen [342]). Ein großer Vorteil ist, dass die Anwendbarkeit auf instationäre Strömungen erhalten bleibt. Auch die Bildung von temporären Teilchenanhäufungen an bestimmten Orten des Strömungsgebietes lässt sich aufgrund der simultanen Berechnung erfassen.

Für praktische Anwendungen im stationären Bereich überwiegen allerdings in der Regel nach wie vor die Nachteile, so dass in den meisten Fällen ein anderer Weg, nämlich der der Modellierung, eingeschlagen wird. Im Folgenden soll daher die stochastische Modellierung näher beschrieben werden, welche auch bei den vorliegenden Berechnungen eingesetzt wurde.

4.5.1 Stochastische Modellierung - Überblick

Ein übliches Vorgehen zur Modellierung von Kollisionen in moderat dichten Zweiphasenströmungen besteht darin, während der Berechnung der Trajektorien der repräsentativen Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit (welche von den lokal vorliegenden Konzentrationen und Geschwindigkeiten abhängt) künstliche Partikel-Partikel-Kollisionen (wobei die Dynamik der Kollision mit dem generierten fiktiven Teilchen exakt berechnet wird) einzuführen. Diese Art der Berechnung von dispersen Zweiphasenströmungen wurde bereits von einer Vielzahl von Wissenschaftlern beschrieben und mit Erfolg eingesetzt (z.B. Crowe et al. [55], Huber [130][131][132], Oesterlé & Petitjean [227] und Sommerfeld [306][293][294][295][296][299]. Der große Vorteil der Modellierung besteht in der Unabhängigkeit der zu berechneten Trajektorien von der tatsächlich vorliegenden Konzentration.

Im folgenden soll nun das stochastische Modell von Sommerfeld [296], welches auch bei den vorliegenden Untersuchungen verwendet wurde, näher beschrieben werden. Im wesentlichen sind damit für die Berechnung von Partikel-Partikel-Wechselwirkungen die folgenden Schritte nötig:

1. Generierung eines fiktiven möglichen Stoßpartners mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die Teilchengröße und -geschwindigkeit.
(s. Abschnitt 4.5.2)
2. Ermittlung der Wahrscheinlichkeit für eine Kollision des betrachteten Teilchens mit dem generierten möglichen Stoßpartner innerhalb des betrachteten Zeitschritts.
(s. Abschnitt 4.5.3)
3. Entscheidung ob eine Kollision vorliegt oder nicht. Die beiden folgenden Punkte sind nur im Falle einer Kollision auszuführen.
(s. Abschnitt 4.5.4)

4. Generierung eines zufälligen Kontaktpunktes der beiden Teilchen bei der Kollision.
(s. Abschnitt 4.5.5)
5. Berechnung des Stoßvorgangs mit Hilfe eines geeigneten Kollisionsoperators.
(s. Abschnitt 4.5.6)

Dabei wird in mehreren Schritten auf statistische Werte zurückgegriffen, welche nur durch eine bereits vorliegende (vorläufige) Berechnung ermittelt werden können. Dies verdeutlicht den iterativen Charakter der Modellierung.

4.5.2 Generierung eines möglichen Stoßpartners

Für jeden Zeitschritt bei der Berechnung der Trajektorie eines Teilchens A wird ein fiktives Teilchen B anhand vorher bestimmter Statistiken generiert. Dazu ist sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Teilchengröße als auch für die Teilchengeschwindigkeit am aktuellen Ort nötig. Im Gegensatz zu anderen Verfahren wird beim Modell von Sommerfeld [296] die Geschwindigkeitskorrelation zwischen den Teilchen A und B berücksichtigt. Sie hängt im Wesentlichen vom Strömungsfolgevermögen der Teilchen, charakterisiert durch die Partikelrelaxationszeit τ_P (s. Abschnitt 4.1 und 4.2.2), und den turbulenten Eigenschaften der Strömung, beschreibbar z.B. durch das integrale turbulente Zeitmaß T_L (s. Abschnitt 4.3), ab. Es liegt daher nahe, eine Beschreibung anhand der Partikel-Stokeszahl $St = \tau_P/T_L$ vorzunehmen. Für die beiden Grenzfälle $St \rightarrow 0$, d.h. die Teilchen sind klein im Vergleich zu den Skalen der Turbulenz und folgen somit allen turbulenten Schwankungen (vollständige Korrelation), und $St \rightarrow \infty$, d.h. die Teilchenbewegung wird nicht durch turbulente Schwankungen beeinflusst womit weder eine Korrelation zwischen Fluid und Teilchen noch zwischen verschiedenen Teilchen vorliegt, lassen sich theoretische Kollisionsfrequenzen bestimmen (s. Sommerfeld [296]). Bei praktischen Anwendungen liegt aber normalerweise nur eine partielle Korrelation vor, d.h. keiner der beiden Grenzfälle ist erfüllt.

Bei der betrachteten Modellierung wird die Partikelgeschwindigkeit des fiktiven Teilchens B analog zum Langevin-Gleichungsmodell für die Teilchendisersion (s. Abschnitt 4.3) über folgende Gleichung für die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten mit der Geschwindigkeit von Teilchen A korreliert:

$$v'_{i,B} = R_{AB} v'_{i,A} + (1 - R_{AB}^2)^{1/2} \sigma_{v_{i,B}} \xi_i \quad (4.62)$$

Dabei ergibt sich $v'_{i,A}$ durch Subtraktion des statistischen Mittelwertes dieser Teilchenart von der aktuellen Geschwindigkeit. Die Standardabweichung der Geschwindigkeit der Partikelart B am aktuellen Ort ($\sigma_{v_{i,B}}$) wurde in der vorausgegangenen Iteration bestimmt. Ferner steht ξ_i für eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von 1.

Somit besteht die Bestimmungsgleichung 4.62 aus einem korrelierten Anteil und einem zufälligen Anteil. Die Gewichtung erfolgt über die Korrelationsfunktion R_{AB} , welche von Sommerfeld [296] mit Hilfe von *LES*-Simulationen zu

$$R_{AB} = \exp(-0.55 \text{St}_B^{0.4}) \quad (4.63)$$

bestimmt wurde. Die Stokeszahl ist dabei auf die Eigenschaften von Teilchen B zu beziehen.

Mit dem Durchmesser und der Geschwindigkeit des fiktiven Teilchens ist dieses zunächst ausreichend spezifiziert um mit dem nächsten Schritt fortzufahren.

4.5.3 Wahrscheinlichkeit für eine Kollision

Die Wahrscheinlichkeit für eine Kollision zwischen zwei Teilchen A und B lässt sich mit Hilfe der kinetischen Gastheorie bestimmen. Grundsätzliche Überlegungen zur Ableitung der Kollisionswahrscheinlichkeit P_{PPK} findet man z.B. bei Wedler [344] oder Frohn [100]. Entsprechend berechnet sich die Kollisionswahrscheinlichkeit P_{PPK} nach Gl. 4.64 in Abhängigkeit von den Teilchendurchmessern d_A und d_B , der relativen Teilchengeschwindigkeit $\mathbf{v}_{AB} = \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B$, dem betrachteten Zeitintervall Δt sowie der Partikelanzahldichte n_P .

$$P_{PPK} = \underbrace{\frac{1}{4}\pi (d_A + d_B)^2}_{\text{Kollisionszylinder- fläche}} \underbrace{|\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B| \Delta t}_{\text{Kollisionszylinder- länge}} n_P \quad (4.64)$$

In der Literatur finden sich auch Formulierungen mit der Maxwellschen freien Weglänge, so dass bei der Kollisionswahrscheinlichkeit ein zusätzlicher Faktor von $\sqrt{2}$ auftritt. Dieser resultiert aus der Berücksichtigung der Bewegungsrichtungsverteilung der einzelnen Moleküle eines Gases. Bei Partikel-Partikel-Kollisionen werden aber die Geschwindigkeiten sowie die Teilchentrajektorien bis zur Kollision als bekannt vorausgesetzt, so dass keine Verteilung zu berücksichtigen ist und der Faktor $\sqrt{2}$ nicht eingeführt werden darf.

Häufig wird in diesem Zusammenhang von einem Kollisionszylinder gesprochen, dessen Durchmesser durch die Teilchengrößen und dessen Länge mit dem Produkt aus relativer Geschwindigkeit und Zeitintervall bestimmt werden. In Abb. 4.3 ist dieser schematisch dargestellt.

Dabei ist zu erwähnen, dass der Zeitschritt Δt zum einen hinreichend groß sein muss, um eine statistische Betrachtung zu ermöglichen, und zum anderen klein genug, um die Dominanz von binären Kollisionen zu gewährleisten. Ferner ist zu beachten, dass innerhalb eines Zeitschritts mit ausreichender Sicherheit maximal eine Kollision des betrachteten Teilchens A stattfindet.

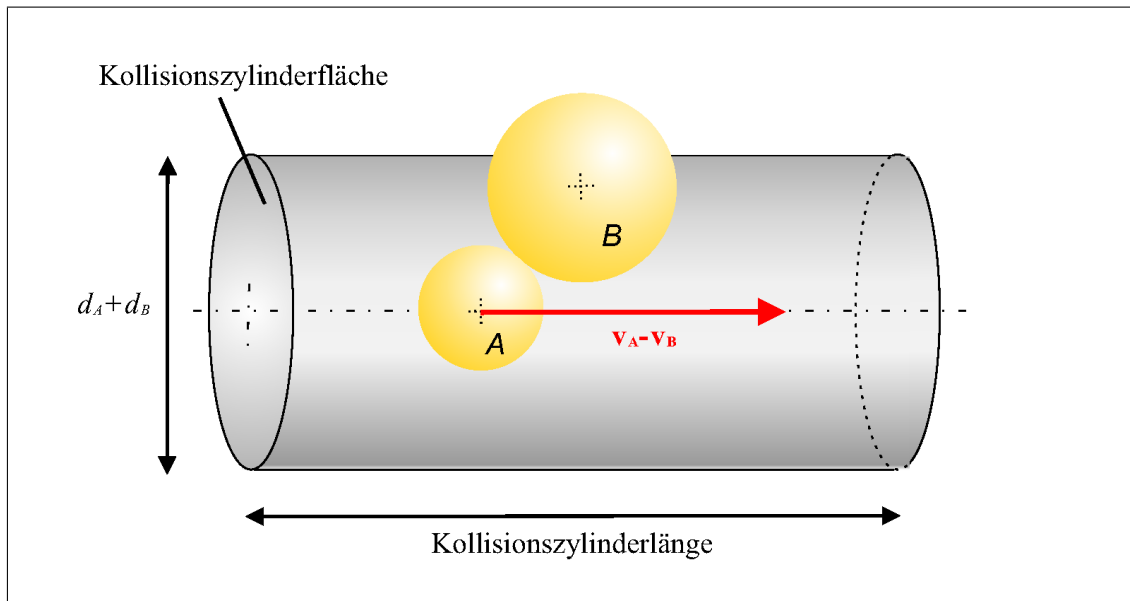


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung eines binären Kollisionsvorgangs

4.5.4 Entscheidung ob Kollision vorliegt oder nicht

Zur Entscheidung, ob eine Kollision zwischen Teilchen A und dem fiktiven Teilchen B vorliegt oder nicht, genügt ein sehr einfaches Verfahren. Mit Hilfe einer Zufallszahl ζ , welche im Intervall $[0; 1]$ gleichverteilt vorliegt, wird entschieden ob es zu einer Kollision kommt oder nicht. Ist $\zeta < P_{PPK}$, so wird eine Kollision berechnet, d.h. die weiteren Schritte werden ausgeführt. Findet keine Kollision statt, so werden sie übersprungen.

4.5.5 Generierung des Kollisionskontaktpunktes

Damit es im betrachteten Zeitschritt zu einer Kollision zwischen Teilchen A und B kommen kann, muss sich das fiktive Teilchen (bzw. um genau zu sein der Schwerpunkt des Teilchens), dessen genaue Position bisher noch nicht spezifiziert wurde, innerhalb des unter Abschnitt 4.5.3 beschriebenen geraden Kollisionszylinder befinden. Zur Bestimmung der im nächsten Schritt benötigten Koordinaten des Kontaktpunktes genügt es allerdings, die Position des fiktiven Teilchens in einem beliebigen senkrechten Schnitt des Zylinders zu kennen. Die Generierung der Position von Teilchen B reduziert sich also auf die Ermittlung einer zufälligen Position in einer Kreisfläche mit Durchmesser $d_A + d_B$, welche senkrecht auf \mathbf{v}_{AB} steht und ihren Mittelpunkt bei $\mathbf{x}_{P,A}$ hat.

Die Beschreibung der Kreisfläche kann dabei über zwei Basisvektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2

erfolgen, welche folgenden Beziehungen gehorchen:

$$(\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2) = (\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{v}_{AB}) = (\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{v}_{AB}) = 0 \quad (4.65)$$

$$[\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2] = \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \quad (4.66)$$

$$|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = 1 \quad (4.67)$$

wobei die Richtung von \mathbf{b}_1 auf der Kreisfläche beliebig ist. Zur Spezifikation lässt sich z.B. ein beliebiger Punkt \mathbf{x}_{bel} im Raum wählen, mit der einzigen Bedingung $([\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \cdot \mathbf{v}_{AB}) \neq 0$, um dann \mathbf{b}_1 zu bestimmen.

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[[\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \times \mathbf{v}_{AB}]}{|[[\mathbf{x}_{\text{bel}} - \mathbf{x}_{P,A}] \times \mathbf{v}_{AB}]|} \quad (4.68)$$

Damit reduziert sich die Generierung eines Punktes in der Kreisfläche auf

$$\mathbf{x}_{\text{Kreis}} = \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2}(d_A + d_B)[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2] \quad (4.69)$$

mit zwei gleichverteilten Zufallszahlen ζ_1 und ζ_2 im Intervall $[-1; 1]$. Zu beachten ist, dass die Zufallszahlen die Bedingung $\zeta_1^2 + \zeta_2^2 < 1$ erfüllen, da der Punkt sonst nicht in der Kreisfläche liegt. Im Mittel wird also eine Wiederholung der Zufallszahlengenerierung in 21% aller Fälle nötig sein.

Da der Kontaktpunkt im Moment des Stoßes auf der halben Oberfläche von Teilchen A bzw. der Schwerpunkt von Teilchen B auf der halben Oberfläche der Kugel mit Radius $\frac{1}{2}(d_A + d_B)$ und Mittelpunktskoordinate $\mathbf{x}_{P,A}$ liegt (wobei jeweils die Hälfte im Lee-Bereich bei der Kollision nicht erreicht werden kann), berechnen sich die Koordinaten des Schwerpunkts von Teilchen B durch Projektion der Koordinaten im Kreis $\mathbf{x}_{\text{Kreis}}$ auf die Kugeloberfläche:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{P,B} &= \mathbf{x}_{\text{Kreis}} + \frac{1}{2}(d_A + d_B)(1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \\ &= \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2}(d_A + d_B) \left[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2 + (1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \right] \end{aligned} \quad (4.70)$$

bzw. für den Kollisionskontaktpunkt:

$$\mathbf{x}_K = \mathbf{x}_{P,A} + \frac{1}{2} d_A \left[\zeta_1 \mathbf{b}_1 + \zeta_2 \mathbf{b}_2 + (1 - \zeta_1^2 - \zeta_2^2)^{1/2} \mathbf{v}_{AB} |\mathbf{v}_{AB}|^{-1} \right] \quad (4.71)$$

Die noch zu definierenden Rotationsgeschwindigkeiten von Teilchen B werden analog zu den Translationsgeschwindigkeiten bestimmt (s. Gl. 4.62). Allerdings wird bei der Rotation eine vollständige Unkorreliertheit angenommen, d.h. $R_{AB} = 0$.

4.5.6 Kollisionsoperator

Zur Bestimmung der Teilcheneigenschaften nach einer binären Kollision in Abhängigkeit von den Eigenschaften vor der Kollision sowie der vorliegenden Geometrie und den Materialkonstanten wird ein Kollisionsoperator benötigt. Eine sehr

ausführliche Übersicht möglicher Kollisionsoperatoren aufgrund unterschiedlicher Ansätze wurde z.B. von Schäfer [280] zusammengestellt.

Allgemein lassen sich Partikel-Partikel-Kollisionen (schiefe Stöße) in Abhängigkeit vom Schiefeparameter, welcher ein Maß für die Abweichung von einer frontalen Kollision darstellt und im folgenden (s. Gl. 4.99) noch genau spezifiziert wird, in drei Kategorien einteilen:

1. Die Teilchen gleiten im Kontaktpunkt während des gesamten Kollisionsprozesses (große Schiefeparameter).
2. Während der Kollision kommt es zum Übergang von Gleiten zu Rollen bzw. Haften (mittlere Schiefeparameter).
3. Es liegt direkt ab Beginn der Kollision Haftreibung, d.h. Rollen, vor (kleine Schiefeparameter).

Ein physikalischer Kollisionsoperator ergibt sich auf Basis des Waltonschen Kollisionsmodells (s. Crowe et al. [55], Schäfer [280] oder Sommerfeld [294]), bei dem vereinfachend die zweite Kategorie von Stößen vernachlässigt wird. Somit lassen sich die Impulserhaltungsgleichungen für den Stoßvorgang wie folgt formulieren:

$$m_A [\mathbf{v}_A^* - \mathbf{v}_A] = \mathbf{J} \quad (4.72)$$

$$m_B [\mathbf{v}_B^* - \mathbf{v}_B] = -\mathbf{J} \quad (4.73)$$

$$I_{P,A} [\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* - \boldsymbol{\omega}_{P,A}] = \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \mathbf{J}] \quad (4.74)$$

$$I_{P,B} [\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* - \boldsymbol{\omega}_{P,B}] = \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \mathbf{J}] \quad (4.75)$$

Der Impuls, welcher auf Teilchen A wirkt bzw. von Teilchen B auf Teilchen A übergeht wird, dabei mit \mathbf{J} bezeichnet. Die Teilcheneigenschaften nach der Kollision sind mit * markiert.

Für die Lösung des Systems werden folgende Randbedingungen angenommen:

1. Die kollidierenden Teilchen sind kugelförmig.
2. Es liegt maximal eine moderate Inelastizität der Teilchen vor, d.h. die Geometrie der Teilchen kann während des gesamten Kollisionsvorgangs als konstant angenommen werden und eine instationäre Deformation erscheint nicht explizit in den beschreibenden Gleichungen.
3. Die Kontaktfläche während der Kollision ist sehr klein.
4. Das Gleiten an den Teilchenoberflächen kann durch das Coulombsche Reibungsgesetz beschrieben werden.
5. Kommt das Gleiten zwischen den Teilchen während des Kollisionsvorgangs zum Stillstand, so liegt auch im folgenden kein Gleiten vor.

Die Beschreibung der Kollision vereinfacht sich durch die Definition einer normalen Koordinate, welche im Zeitpunkt des Kontaktes vom Schwerpunkt des Teilchens A zum Schwerpunkt von Teilchens B zeigt. Der normale Einheitsvektor \mathbf{e}_n hat somit die folgende Definition:

$$\mathbf{e}_n = \frac{\mathbf{x}_{P,B} - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_{P,B} - \mathbf{x}_{P,A}|} = \frac{\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}|} \quad (4.76)$$

Bei kugelförmig angenommenen Teilchen berechnet sich das Massenträgheitsmoment jeweils mit:

$$I_P = \frac{1}{10} m d^2 \quad (4.77)$$

Die relativen Geschwindigkeiten zwischen den beiden Teilchen vor und nach der Kollision werden mit \mathbf{v}_{AB} und \mathbf{v}_{AB}^* bezeichnet.

$$\mathbf{v}_{AB} = \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B \quad (4.78)$$

$$\mathbf{v}_{AB}^* = \mathbf{v}_A^* - \mathbf{v}_B^* \quad (4.79)$$

Unter Berücksichtigung der Teilchenrotation erhält man für die relative Geschwindigkeit der beiden Teilchen am Kontaktpunkt (zu Beginn des Stoßvorgangs):

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB} - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,B}] \quad (4.80)$$

Diese lässt sich nun in eine normale und eine tangentielle Komponente aufspalten.

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB,K,n} + \mathbf{v}_{AB,K,t} \quad (4.81)$$

Da die beiden letzten Terme von Gl. 4.80 keinen Beitrag in normaler Richtung liefern, gilt für die entsprechende Geschwindigkeit im Kontaktpunkt:

$$\mathbf{v}_{AB,K,n} = v_{AB,K,n} \mathbf{e}_n = (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n \quad (4.82)$$

Für die tangentielle Komponente ergibt sich somit aufgrund von Gl. 4.80, - 4.82:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{AB,K,t} &= \mathbf{v}_{AB,K} - \mathbf{v}_{AB,K,n} = v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \\ &= \mathbf{v}_{AB} - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,B}] \\ &\quad - (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n \end{aligned} \quad (4.83)$$

Dabei definiert sich der tangentielle Einheitsvektor im Kontaktpunkt durch:

$$\mathbf{e}_t = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|} = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.84)$$

Analog zur relativen Geschwindigkeit lässt sich auch der auf Teilchen A wirkende Impuls unterteilen:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_t = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t \quad (4.85)$$

Durch Einführung des normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PPK}$ (oft auch als Stoßzahl bezeichnet) wird eine Beziehung zwischen der normalen relativen Geschwindigkeit der Teilchen vor und nach dem Stoß hergestellt.

$$s_{n,PPK} = - \frac{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}^*)}{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})} \quad (4.86)$$

Eine derartige Betrachtung ist nötig, da in der Realität normalerweise die Hertzsche Theorie nicht gilt, d.h. keine elastischen Stöße vorliegen. Die Energiedissipation bei der Kollision spiegelt sich somit in Restitutionskoeffizienten kleiner eins wider. Gründe für die Energieverluste finden sich bei der plastischen Verformung der Teilchen, Viskoelastizität sowie elastischen Wellen im Material.

Unter Berücksichtigung von Gl. 4.78 und 4.79 liefert die Kombination von Gl. 4.72 und 4.73 die folgende Beziehung für die relative Geschwindigkeit nach der Kollision:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}} + (m_A + m_B) m_A^{-1} m_B^{-1} \mathbf{J} = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}} + m_{eff}^{-1} \mathbf{J} \quad (4.87)$$

wobei $m_{eff} = m_A m_B (m_A + m_B)^{-1}$ für die effektive Partikelmasse steht.

Betrachtet man nur die normale Komponente, dies entspricht einer Multiplikation von Gl. 4.87 mit \mathbf{e}_n , und berücksichtigt die Definition des normalen Restitutionskoeffizienten (Gl. 4.86), so erhält man für J_n :

$$J_n = (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{J}) = -(1 + s_{n,PPK}) m_{eff} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) \quad (4.88)$$

Gleiten die beiden Teilchen im Kontaktpunkt während der gesamten Kollisionsphase, so spricht man von einem Gleitstoß und für die tangential Impulskomponente gilt aufgrund des Coulombschen Reibungsgesetzes

$$|J_t| = \mu_{d,PPK} |J_n| \quad (4.89)$$

mit dem dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{d,PPK}$. Da die Reibung stets der Bewegungsrichtung entgegengesetzt ist ergibt sich für den Gesamtimpuls:

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t = -(1 + s_{n,PPK}) m_{eff} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t] \quad (4.90)$$

Die folgenden Überlegungen dienen nun der Ermittlung eines Entscheidungskriteriums, um zu erfassen, ob tatsächlich ein Gleitstoß oder etwa ein Haftstoß vorliegt.

Analog zu Gl. 4.80 gilt für die relative Geschwindigkeit im Kontaktpunkt nach dem Stoß:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB,K}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^* - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,A}}^*] - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,B}}^*] \quad (4.91)$$

Ersetzt man nun in Gl. 4.91 $\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}^*$ durch Gl. 4.87 und $\mathbf{v}_{\mathbf{AB}}$ mit Hilfe von Gl. 4.80 so erhält man unter Berücksichtigung von Gl. 4.85 die folgende Beziehung:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\mathbf{AB,K}}^* &= \mathbf{v}_{\mathbf{AB,K}} + m_{eff}^{-1} (J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t) \\ &\quad - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,A}}^* - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,A}})] \\ &\quad - \frac{1}{2} d_B [\mathbf{e}_n \times (\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,B}}^* - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{P,B}})] \end{aligned} \quad (4.92)$$

Unter Verwendung von Gl. 4.74, 4.75 und 4.77 sowie des Entwicklungssatzes lassen sich die letzten beiden Terme umformen und es ergibt sich:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{AB,K}}^* = \mathbf{v}_{\mathbf{AB,K}} + m_{eff}^{-1} (J_n \mathbf{e}_n + \frac{7}{2} J_t \mathbf{e}_t) \quad (4.93)$$

Die relativen Geschwindigkeiten werden entsprechend Gl. 4.81 durch

$$\mathbf{v}_{AB,K} = \mathbf{v}_{AB,K,n} + \mathbf{v}_{AB,K,t} = v_{AB,K,n} \mathbf{e}_n + v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \quad (4.94)$$

$$\mathbf{v}_{AB,K}^* = \mathbf{v}_{AB,K,n}^* + \mathbf{v}_{AB,K,t}^* = v_{AB,K,n}^* \mathbf{e}_n + v_{AB,K,t}^* \mathbf{e}_t \quad (4.95)$$

ersetzt. Ferner wird \mathbf{e}_t ausgeklammert und durch Gl. 4.84 ersetzt. Mit entsprechender Umformung und Beachtung von Gl. 4.87 ergibt sich somit:

$$\mathbf{v}_{AB,K,t}^* = \left(v_{AB,K,t} + \frac{7}{2} m_{eff}^{-1} J_t \right) \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.96)$$

Für ein kontinuierliches Gleiten während des gesamten Kollisionsvorgangs muss somit der Term in Klammern positiv sein.

Mit dem tangentialen Restitutionskoeffizienten $s_{t,PPK}$

$$s_{t,PPK} = - \frac{(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB,K,t}^*)}{(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB,K,t})} \quad (4.97)$$

(welcher bei ideal glatten, d.h. reibungsfreien, Teilchen zu Eins wird) und einer Multiplikation von Gl. 4.96 mit \mathbf{e}_t sowie entsprechenden Umformungen unter Nutzung von Gl. 4.89 und 4.88 resultiert dann:

$$\frac{v_{AB,K,t}}{v_{AB,K,n}} = \frac{v_{AB,K,t}}{(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})} = \frac{7}{2} \mu_{d,PPK} \frac{1 + s_{n,PPK}}{1 - s_{t,PPK}} \quad (4.98)$$

Der linke Teil der Gleichung wird üblicherweise als Schiefe des Stoßes bezeichnet. Bei den hier betrachteten Koordinaten ist diese identisch mit dem symmetrischen Schiefeparameter, welcher durch

$$\psi = \frac{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|}{|\mathbf{v}_{AB,K,n}|} \quad (4.99)$$

definiert ist. Damit lässt sich ein wirksamer (positiv definit) Stoßwinkel definieren, welcher gleich dem Winkel zwischen dem Vektor der relativen Geschwindigkeit im Kontaktpunkt und der Normalen \mathbf{e}_n ist:

$$\vartheta = \arctan \psi \quad (4.100)$$

Dieser ist in der Regel nicht identisch mit dem geometrischen Stoßwinkel, welcher sich (ebenfalls positiv definit) mit

$$\vartheta_g = \arctan \frac{|(\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{v}_{AB})|}{|(\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB})|} \quad (4.101)$$

berechnen lässt. Die beiden Winkel stimmen nur im Grenzfall verschwindender Rotationsanteile (d.h. die Summe der beiden letzten Terme von Gl. 4.80 wird zu Null) überein.

Im Falle von $\psi = 0$ bzw. $\vartheta = 0$ liegt somit eine frontale Kollision vor, während man bei $\psi > 0$ bzw. $\vartheta > 0$ von einer schiefen Kollision spricht. Bei der frontalen Kollision

ist die tangentielle Geschwindigkeit im Kontaktpunkt gleich Null, so dass immer ein Haftstoß gegeben ist.

Geht man nun über zum Grenzfall eines Haftstoßes, so wird der tangentielle Restitutionskoeffizient wegen verschwindender Endtangentialgeschwindigkeit (d.h. der Gleitvorgang ist in einen Rollvorgang übergegangen) zu Null und der dynamische Reibungsbeiwert muss durch den statischen Beiwert ersetzt werden. Somit ergibt sich für den Grenzschiefeparameter ψ_0 :

$$\psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK}) \quad (4.102)$$

bzw. als anschaulicheres Maß der Grenzstoßwinkel ϑ_0 :

$$\vartheta_0 = \arctan \psi_0 \quad (4.103)$$

Ist der wirksame Stoßwinkel kleiner als der Grenzstoßwinkel, d.h. $\vartheta > \vartheta_0$ bzw. $\psi > \psi_0$, so ist der tangentielle Geschwindigkeitsanteil im Kontaktpunkt hinreichend groß um ein Gleiten während des gesamten Kollisionsvorgangs zu gewährleisten (Gleitstoß). Andernfalls kommt es zum Rollen und es liegt ein Haftstoß vor.

Da beim Haftstoß die relative tangentielle Geschwindigkeit nach der Kollision im Kontaktpunkt $\mathbf{v}_{\mathbf{AB},\mathbf{K},t}^*$ gleich Null ist, erhält man aus Gl. 4.96:

$$J_t = -\frac{2}{7} m_{eff} v_{AB,K,t} \quad (4.104)$$

bzw. für den Gesamtimpuls:

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{e}_n + J_t \mathbf{e}_t = -m_{eff} [(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{AB}}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t] \quad (4.105)$$

In Tab. 4.1 ist der Kollisionsoperator, d.h. die resultierenden Gleichungen zur Beschreibung der Änderung von Translations- und Rotationsgeschwindigkeit durch Partikel-Partikel-Kollisionen, zusammengefasst. Es ist zu bemerken, dass die Eigenschaften des fiktiven Teilchens B nach der Kollision für die Berechnung der Trajektorie des betrachteten Teilchens A nicht weiter benötigt werden. Die entsprechenden Gleichungen in Tab. 4.1 sind somit nur zur Vollständigkeit aufgeführt.

Die benötigten Stoffkonstanten sind anhand von Experimenten zu bestimmen. Oesterlé & Petitjean [227] geben im Fall von Kügelchen aus Glas für den normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PPK} = 0.95$ sowie für den statischen und dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{s,PPK} = 0.94$ und $\mu_{d,PPK} = 0.4$ an, wobei sie sich bei den Reibungsbeiwerten auf Daten von Fuller [101] berufen. Diese Materialkonstanten wurden auch bei den Simulationen in dieser Arbeit verwendet. So berechnet sich für den Grenzschiefeparameter $\psi_0 = 6.42$ bzw. für den Grenzstoßwinkel $\vartheta_0 = 81.1^\circ$. In der Literatur findet man häufig Berechnungen mit der vereinfachenden Annahme, dass nur ein Reibungsbeiwert vorliegt, nämlich der dynamische. Damit erhält man allerdings einen deutlich abweichenden Grenzschiefeparameter (d.h. mit den oben angegebenen Zahlenwerten errechnet sich $\psi_0 = 2.73$ bzw. $\vartheta_0 = 69.9^\circ$).

Gleitstoß	falls $\psi > \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK})$
$\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - (1 + s_{n,PPK}) m_{eff} m_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t]$	
$\mathbf{v}_B^* = \mathbf{v}_B + (1 + s_{n,PPK}) m_{eff} m_B^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PPK} \mathbf{e}_t]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} + 5 (1 + s_{n,PPK}) \mu_{d,PPK} d_A^{-1} m_{eff} m_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,B} + 5 (1 + s_{n,PPK}) \mu_{d,PPK} d_B^{-1} m_{eff} m_B^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	
Haftstoß	falls $\psi \leq \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PPK} (1 + s_{n,PPK})$
$\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - m_{eff} m_A^{-1} \left[(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$	
$\mathbf{v}_B^* = \mathbf{v}_B + m_{eff} m_B^{-1} \left[(1 + s_{n,PPK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_{AB}) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_A^{-1} m_{eff} m_A^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,B}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,B} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_B^{-1} m_{eff} m_B^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	

Tabelle 4.1: Zusammenfassung des Kollisionsoperators für Teilchen-Teilchen-Stöße

4.6 Partikel-Wand-Kollisionen

Neben den Partikel-Partikel-Kollisionen sind in begrenzten Strömungsgebieten auch Partikel-Wand-Kollisionen¹² von großer Bedeutung. Dabei wird der Einfluss der Wandstöße auf das Strömungsverhalten umso größer sein, desto kleiner im Strömungsgebiet das Verhältnis von Volumen zu Wandfläche ist. Als Beispiel sei der pneumatische Transport in Rohren mit kleinem Durchmesser genannt. Ähnlich verhält es sich in Rührkesseln, bei welchen die wandnahe Strömung die globale Struktur der Strömung entscheidend prägt. Besonders ist dies bei Suspendierprozessen zu beobachten. Dort kommt es an der Behälterwand zu einer starken Erhöhung der Teilchenkonzentration und damit zu sehr vielen Partikel-Wand-Kollisionen. Es ist somit durchaus möglich, dass auch bei verdünnten Zweiphasenströmungen die Wechselwirkungen mit der Wand entscheidenden Einfluss auf die gesamte Strömung haben.

¹²Neben Kollisionen können begrenzende Wände auch zu Änderungen des Widerstandbeiwertes c_D führen. Bezüglich dieses Effekts soll an dieser Stelle nur auf die Zusammenfassung von Sommerfeld [300] verwiesen werden.

4.6.1 Allgemeines

Im wesentlichen lassen sich zwei unterschiedliche Wirkungen der Wand auf die Teilchenbewegung festhalten. Dies ist zum einen die direkte Kollision (rein mechanische Interaktion) und zum anderen die indirekte Wirkung durch die von der Wand beeinflusste Fluidströmung (s. z.B. Saffman-Kraft in Abschnitt 4.2.2). Diese hydrodynamische Wechselwirkung kann unter Umständen eine Kollision mit der Wand unterbinden oder den Verlauf der Kollision beeinflussen. Auf der anderen Seite kann sie vernachlässigt werden, wenn die Partikelträgheit hinreichend groß ist, so dass die Kollision in einem viel kleineren Zeitrahmen erfolgt als die Relaxation der Teilchen. Das Dichteverhältnis aber auch der Turbulenzgrad spielen also eine wichtige Rolle.

Bei der Kollision von massiven Teilchen mit der Wand kommt es in der Regel zu einer Reflektion, wobei kinetische Energie durch Reibung und inelastische Effekte verloren geht. Dieser Impulsverlust und die daraus resultierende Wirkung auf die zweiphasige Strömung hängt stark von der Trägheit der Teilchen ab. Je größer und schwerer die Teilchen sind, desto mehr Impuls besitzen sie und desto länger dauert es, bis sie ihre Geschwindigkeit wieder der des Fluids angepasst haben. Kleinere Teilchen mit einer kleineren Partikelrelaxationszeit τ_P passen sich schneller wieder der Strömung an, so dass die Teilchenbewegung weniger durch die Kollisionen als vielmehr durch die Strömung bestimmt wird. Zudem kann es sein, dass bei sehr kleinen Teilchen weitere Kräfte, wie z.B. Van-der-Waals Kräfte, wichtig werden. Unter Umständen bleiben die Teilchen dann anstatt zu reflektieren an der Wand haften.

Bei reflektierenden Partikel-Wand-Kollisionen kommt es neben der Änderung der Translationsgeschwindigkeit der Teilchen \mathbf{v} auch zu einer Änderung der Teilchenrotation $\boldsymbol{\omega}_P$. Diese wiederum beeinflusst über die Magnuskraft \mathbf{F}_{LM} (s. Abschnitt 4.2.2) die weitere Bewegung der Teilchen. Die wesentlichen Parameter des Kollisionsvorgangs sind also die Translations- und Rotationsgeschwindigkeit der Teilchen, der Auftreffwinkel, das Material der Wand und der Teilchen, die Partikelform sowie die Oberflächenbeschaffenheit der Wand.

4.6.2 Kollisionsoperator

Der Kollisionsvorgang eines Teilchens mit einer Wand unterteilt sich in eine Kompressions- und eine Rückprallphase. Bei harten Wandmaterialien kann angenommen werden, dass ein Teilchen bei einer Wandberührung zunächst zu gleiten beginnt. Für den gesamten Kollisionsvorgang lassen sich analog zu den Partikel-Partikel-Kollisionen drei Fälle unterscheiden:

1. Das Teilchen beginnt in der Kompressionsphase zu rollen.
2. Das Teilchen beendet die Gleitphase in der Rückprallphase.
3. Das Teilchen gleitet während des gesamten Kollisionsvorgangs

In Abb. 4.4 ist der Stoßvorgang eines Teilchens mit einer festen Wand (lokal glatt

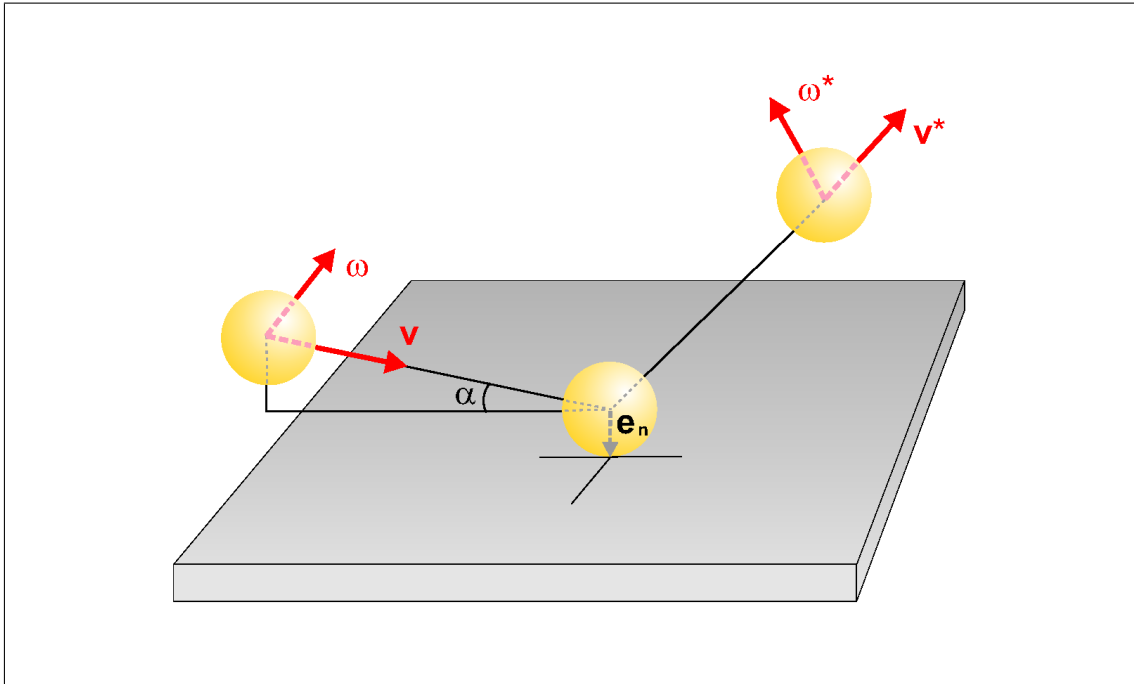


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung des Kollisionsvorgangs eines Teilchens mit einer Wand

und eben) schematisch dargestellt. Er lässt sich mit Hilfe von Impulserhaltungsgleichungen für die Translation und Rotation eines Teilchens in Verbindung mit dem Coulombschen Reibungsgesetz für die einzelnen Phasen der Kollision beschreiben. Man erhält so ein Gleichungssystem von 27 Erhaltungsgleichungen, welches durch Integration über die Kollisionszeit und unter Berücksichtigung entsprechender Randbedingungen zu lösen ist (s. z.B. Crowe et al. [55], Tsuji et al. [330]).

Alternativ lässt sich der Kollisionsoperator für eine reflektierende Wandkollision mit Hilfe der bereits gewonnenen Erkenntnisse bei der Partikel-Partikel-Kollision definieren. Dies führt bei den gleichen Randbedingungen bzw. Annahmen zum gleichen Resultat und soll im Folgenden näher erläutert werden.

Für die Wand als Stoßpartner lässt sich ein unendlich schweres und ausgedehntes Teilchen annehmen, so dass der in Tab. 4.1 zusammengefasste Kollisionsoperator für Teilchen-Teilchen-Stöße direkt für die Betrachtung von Teilchen-Wand-Stößen eingesetzt werden kann. Für die Masse und den Durchmesser des Teilchens B gilt dann:

$$m_B \longrightarrow \infty \quad \text{bzw.} \quad d_B \longrightarrow \infty \quad (4.106)$$

Für die effektive Masse m_{eff} bzw. deren Verhältnis zu m_A und m_B ergibt sich somit:

$$m_{eff} \longrightarrow m_A \quad \text{bzw.} \quad m_{eff} m_A^{-1} \longrightarrow 1 \quad \wedge \quad m_{eff} m_B^{-1} \longrightarrow 0 \quad (4.107)$$

Ferner sind die Translations- und Rotationsgeschwindigkeiten von Teilchen B zu Null zu setzen und bei den Materialkonstanten die entsprechenden Werte für eine

Partikel-Wand-Kollision zu verwenden. Damit reduziert sich der Kollisionsoperator für ein Teilchen A auf die in Tab. 4.2 zusammengefassten Gleichungen.

<div style="border: 1px solid black; display: inline-block; padding: 2px 5px; margin-bottom: 5px;">Gleitstoß</div>	falls $\psi > \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PWK} (1 + s_{n,PWK})$
$\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - (1 + s_{n,PWK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) [\mathbf{e}_n - \mu_{d,PWK} \mathbf{e}_t]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} + 5 (1 + s_{n,PWK}) \mu_{d,PWK} d_A^{-1} (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	
<div style="border: 1px solid black; display: inline-block; padding: 2px 5px; margin-bottom: 5px;">Haftstoß</div>	
falls $\psi \leq \psi_0 = \frac{7}{2} \mu_{s,PWK} (1 + s_{n,PWK})$	
$\mathbf{v}_A^* = \mathbf{v}_A - \left[(1 + s_{n,PWK}) (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) \mathbf{e}_n + \frac{2}{7} v_{AB,K,t} \mathbf{e}_t \right]$	
$\boldsymbol{\omega}_{P,A}^* = \boldsymbol{\omega}_{P,A} - \frac{10}{7} v_{AB,K,t} d_A^{-1} [\mathbf{e}_n \times \mathbf{e}_t]$	

Tabelle 4.2: Zusammenfassung des Kollisionsoperators für Teilchen-Wand-Stöße

Zu beachten ist, dass der normale Einheitsvektor entgegen den üblichen Definitionen zur Wand gerichtet ist. Er definiert sich entsprechend Gl. 4.76 mit Hilfe des Kontaktpunktes \mathbf{x}_K :

$$\mathbf{e}_n = \frac{\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}}{|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P,A}|} \quad (4.108)$$

Die relative tangentielle Geschwindigkeit im Kontaktpunkt $\mathbf{v}_{AB,K,t}$ berechnet sich analog zu Gl. 4.83 mit

$$\mathbf{v}_{AB,K,t} = \mathbf{v}_A - \frac{1}{2} d_A [\mathbf{e}_n \times \boldsymbol{\omega}_{P,A}] - (\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{v}_A) \mathbf{e}_n \quad (4.109)$$

Die Definition des tangentialen Einheitsvektors ergibt sich somit entsprechend Gl. 4.84 zu:

$$\mathbf{e}_t = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{|\mathbf{v}_{AB,K,t}|} = \frac{\mathbf{v}_{AB,K,t}}{v_{AB,K,t}} \quad (4.110)$$

Der symmetrische Schiefeparameter ψ und der Grenzschiefeparameter ψ_0 berechnen sich mit Gl. 4.99 und 4.102.

Ferner werden für die Lösung, wie auch bei den Partikel-Partikel-Kollisionen, Informationen zum statischen und dynamischen Reibungsbeiwert $\mu_{s,PWK}$ und $\mu_{d,PWK}$ sowie zum normalen Restitutionskoeffizienten $s_{n,PWK}$ benötigt. Diese Werte hängen wesentlich von der Materialkombination und dem Auftreffwinkel α ab und müssen experimentell bestimmt werden. Mit Teilchen-Wand-Kollisionsversuchen für eine

Vielzahl von Materialkombinationen konnten Huber [130] sowie Sommerfeld & Huber [303] die Abhängigkeit des dynamischen Reibungsbeiwertes und des normalen Restitutionskoeffizienten vom Aufprallwinkel bestimmen. Für Glasteilchen in Kombination mit einer polierten Stahlplatte ergeben sich somit die in Abb. 4.5 dargestellten vereinfachten Abhängigkeiten vom Auftreffwinkel α .

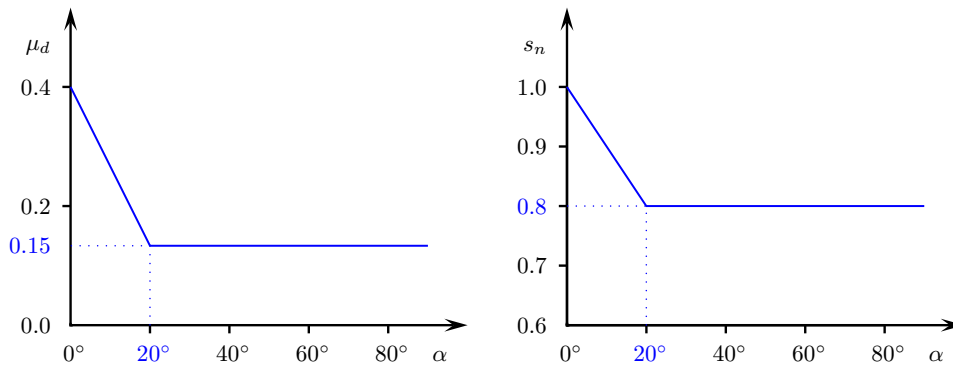


Abbildung 4.5: Abhängigkeit des dynamischen Reibungsbeiwertes und des normalen Restitutionskoeffizienten vom Auftreffwinkel

Bei frontaler Kollision ist der dynamische Reibungsbeiwert gleich dem statischen Reibungsbeiwert von 0.4. Er nimmt mit zunehmendem Auftreffwinkel α linear ab und hat später einen konstanten Wert von 0.15. Ähnlich verhält es sich mit dem normalen Restitutionskoeffizienten, welcher ebenfalls zunächst mit steigendem Winkel abfällt und dann einen konstanten Wert von 0.8 annimmt.

Im Falle von Rührwerksströmungen kommen an der Behälterwand aufgrund der Strömungsstruktur primär große Auftreffwinkel α vor, so dass eine Dominanz von Gleitstößen anzunehmen ist. Aufgrund fehlender Daten für Kollisionen von Glasteilchen auf Glaswänden, wurden die oben genannten experimentellen Ergebnisse als gute Näherung auch bei den vorliegenden Berechnungen verwendet.

4.6.3 Irreguläre Partikel-Wand-Kollisionen

Bei den vorangegangenen Ableitungen wurde von ideal glatten Wänden und kugelförmigen Teilchen ausgegangen. Derartig ideale Zustände liegen aber bei praktischen Anwendungen in der Regel nicht vor, so dass es zu irregulären Partikel-Wand-Kollisionen kommt. Generell lässt sich festhalten, dass die Berücksichtigung irregulärer Stöße mit zunehmender Teilchengröße an Bedeutung gewinnt, da größere Teilchen weniger durch fluiddynamische Kräfte (wie z.B. Saffman- und Magnus-Kraft oder Fluidturbulenz) beeinflusst werden und somit Kollisionen eine erhebliche Auswirkung auf die Teilchenbahnen haben.

Entsprechend den zwei Hauptursachen für irreguläre Partikel-Wand-Kollisionen lässt

sich eine Klassifizierung in zwei Typen von Modellen zu ihrer Berücksichtigung vornehmen. Bei der einen Gruppe von Modellen werden nicht-sphärische Partikel berücksichtigt (entsprechende Untersuchungen bzw. Modelle wurden z.B. von Matsumoto & Saito [194], Tsuji et al. [331][332] und Sommerfeld [298] vorgestellt) während beim zweiten Typ Wandrauigkeiten als Ursache für irreguläre Kollisionen angenommen werden. Auch für die Berücksichtigung von Wandrauigkeiten wurden bereits verschiedene Modelle vorgestellt (s. z.B. Matsumoto & Saito [193], Tsuji et al. [328], Sommerfeld & Zivkovic [306], Frank et al. [97]). Die analytische Beschreibung von irregulären Partikel-Wand-Kollisionen stößt dabei sehr schnell an ihre Grenzen (wobei sich die Erfassung von kantigen Teilchen als besonders schwierig erweist, s. z.B. Crowe et al. [55]), so dass praktisch alle praxisrelevanten Modelle stochastischer Natur sind. Im Gegensatz zu den auf Impulserhaltung basierenden Modellen finden zum Teil auch noch rein empirische Modelle Verwendung (s. z.B. Grant & Tabakoff [107], deren Modell auf Experimenten von Tabakoff basieren).

Da bei den vorliegenden Arbeiten ausschließlich sphärische bzw. nahezu sphärische Teilchen verwendet werden, sollen die entsprechenden Modelle, welche im Übrigen bereits von Frank [95] neben einer Vielzahl von Wandkollisionsmodellen vergleichend zusammengestellt wurden, hier nicht weiter behandelt werden. Ferner werden Kollisionen an rauen Wänden mit dem weiterentwickelten Wandkollisionsmodell von Sommerfeld [291][292] berücksichtigt, wobei die Änderung des Abprallwinkels durch die Wandrauigkeit über eine statistische Betrachtung erfasst wird.

Die Bedeutung der Wandrauigkeit für die Teilchen-Wand-Wechselwirkung hängt wesentlich vom Verhältnis der Teilchengröße zu den charakteristischen Abmessungen der Wandrauigkeit ab. In Abb. 4.6 wird dieser Zusammenhang veranschaulicht.

Die Struktur der Wandrauigkeit ergibt sich hauptsächlich durch das Herstellungsverfahren aber auch durch betriebsbedingte Verschleißerscheinungen (z.B. Erosion durch harte Teilchen). Durch eine mittlere Rauhtiefe Δz_R und den Profilfraganteil Δx_R kann die Wandrauigkeit charakterisiert werden. Bei zyklischer Rauigkeit lässt sich so der maximale Winkel $\gamma_{R,max}$ in Abhängigkeit von der Teilchengröße bestimmen. Dieser Winkel definiert ein Maß für die maximal von einem bestimmten Teilchen sichtbare Rauigkeit, d.h. die Winkelabweichung der realen (lokal aufgelösten) Wandoberfläche von der idealisierten (gemittelten) Wand. Allgemein gilt bei hinreichend kleinen Teilchen (Durchmesser von gleicher Größenordnung wie die charakteristischen Rauigkeitsabmessungen), dass $\gamma_{R,max}$ mit zunehmender Rauhtiefe steigt und mit zunehmender Periodenlänge abnimmt. Je größer die Teilchen sind, desto kleiner wird $\gamma_{R,max}$, sofern die betrachtete Periodenlänge hinreichend klein ist. Bei der Modellierung werden diese Effekte durch stetige Überprüfung der Teilchengröße, des Auftreffwinkels usw. berücksichtigt.

Im Modell wird angenommen, dass sich der tatsächliche Kollisionswinkel eines Teilchens mit einer Wand aus dem Flugbahnwinkel und einem stochastischen Anteil durch die Wandrauigkeit, dem sogenannten Rauigkeitswinkel γ_R , zusammensetzt. Da bei der Modellierung ursprünglich der zweidimensionale Fall betrachtet wurde, hier aber Dreidimensionalität, muss der Rauigkeitswinkel auf ein Rauigkeitswin-

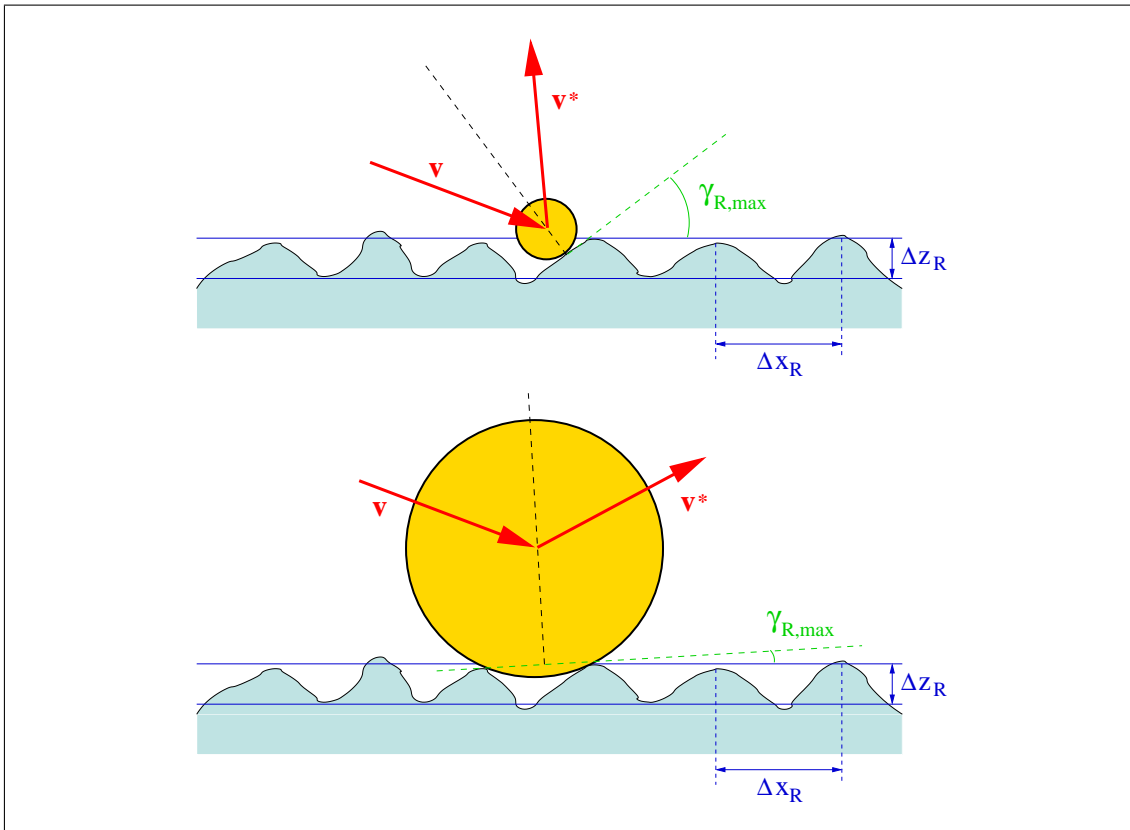


Abbildung 4.6: Einfluss der Teilchengröße auf das Kollisionsverhalten an rauhen Wänden

kelpaar erweitert werden, um die dreidimensionale Oberflächenstruktur zu erfassen. Die beiden Einzelrauhigkeitswinkel werden jeweils durch Gauß-verteilte Zufallszahlen mit einem Mittelwert von Null und einer Standardabweichung von $\gamma_{R,eff}$ simuliert. Dabei wird angenommen, dass keine Vorzugsrichtung der Rauheitsstruktur vorliegt und die Oberflächenrauigkeit mit Hilfe der genannten Winkel und Zufallszahlen hinreichend beschreibbar ist. Der Winkel $\gamma_{R,eff}$ muss dann anhand von Oberflächenanalysen des Wandmaterials unter Berücksichtigung der Teilchengröße bestimmt werden (s. Huber [130]). Als Größenordnung sei hier ein Bereich von $1-10^\circ$ genannt.

Der eigentliche Stoßprozess erfolgt also an einer virtuellen Wand, welche abhängig von den Rauheitswinkeln stochastisch verteilt von der Wandebene abweicht (normalverteilte lokale Inklination). Der in Abschnitt 4.6.2 abgeleitete Kollisionsoperator ist somit unverändert auch bei Verwendung des Wandrauheitsmodells nutzbar. Allerdings ist noch zu berücksichtigen, dass bestimmte Winkelbereiche aufgrund von Abschattungseffekten von den Teilchen nicht erreicht werden können. Werden Rauheitswinkel in diesen Bereichen generiert, so müssen diese verworfen und alternative Winkel bestimmt werden. Die Verteilung der möglichen Rauheitswinkel verschiebt sich somit in Richtung positive Winkel (Sommerfeld & Huber [303]) und

der Abprallwinkel wird im Mittel größer.

Durch Partikel-Wand-Kollisionen sind weiterhin Erosionserscheinungen möglich. Die Stärke der Erosion ist dabei proportional zum Quadrat der Teilchengeschwindigkeit und die maximale Abtragung erfolgt im Fall von zähen Wandmaterialien bei Einfallswinkeln von ca. 15° sowie bei spröden Materialien von ca. 90° . Relevant ist die Berücksichtigung der Materialabtragung allerdings nur bei Bauteilen mit starker Erosionsgefahr, wie z.B. schnellrotierende Turbinenschaufeln. Bei den vorliegenden Untersuchungen ist dies nicht der Fall, so dass Erosionseffekte vernachlässigt werden.

Bei sehr kleinen Teilchen kann es ferner sein, dass bereits relativ kleine absolute Kräfte eine Reflektion von der Wand unterbinden, d.h. elektrische Ladungen oder Van-der-Waals-Kräfte können zu einer Adhäsion an der Wand führen. Die Bedeutung von Adhäsion ist dabei in Zweiphasenströmungen mit gasförmigen Fluiden größer als bei Strömungen mit Flüssigkeiten. Da Adhäsion bei den in dieser Arbeit vorliegenden Rahmenbedingungen nicht zu erwarten ist, wird immer von einer Reflektion ausgegangen.

4.7 Schwarmeffekte

Neben den Kollisionen als Partikel-Partikel-Wechselwirkungen spielen auch die hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Teilchen eine wichtige Rolle. Analog zu den Kollisionen ist auch hier die Partikelkonzentration und damit der mittlere Abstand zwischen benachbarten Teilchen von zentraler Bedeutung.

Befindet sich ein Teilchen im Nachlauf eines anderen Teilchens, so reduziert sich dessen Widerstandsbeiwert aufgrund der gestörten Umströmung umso stärker, je geringer der Abstand zwischen den beiden Teilchen ist. Dieser Effekt wird üblicherweise als Schwarmeffekt bezeichnet, da er in der Regel nur bei hohen Teilchenkonzentrationen (auch lokalen Ansammlungen) relevant wird. Bei nebeneinander angeordneten Teilchen kommt es dagegen zu einer Erhöhung des Widerstandsbeiwerts. Die Effekte sind hier aber geringer, da der Teilchenabstand für eine wirksame Beeinflussung deutlich kleiner sein muss.

Bei schleichender Umströmung konnten die Kräfte auf zwei benachbarte Kugeln bereits 1911 von Smoluchowski [289] analytisch beschrieben werden. Erweiterungen für höhere Reynoldszahlen wurden dann von Oseen [234] und später auch von Happel & Pfeffer [113] sowie für noch höhere Reynoldszahlen (bis etwa 1000) von Tsuji et al. [329] vorgeschlagen. Neuere Untersuchungen von Kim et al. [148] und Ramachandran et al. [248] (für nebeneinander bzw. hintereinander angeordnete Teilchen) ergaben, dass der Widerstandsbeiwert bereits bei Teilchenabständen von etwa 10 Teilchendurchmessern merklich vom Widerstandsbeiwert eines isolierten Teilchens abweicht. Mit Annahme einer homogenen Teilchenverteilung sowie kubisch-einfacher

Anordnung¹³ gilt für den kürzesten Abstand ℓ zwischen zwei Teilchenzentren die folgende Beziehung:

$$\varphi_P = \frac{1}{6}\pi d^3 \ell^{-3} \quad \Longrightarrow \quad \ell/d = \left(\frac{1}{6}\pi \varphi_P^{-1}\right)^{1/3} \quad (4.111)$$

Ein Abstand von $\ell = 10d$ liegt somit bereits bei einem Partikelvolumenanteil von $\varphi_P = 5.2 \cdot 10^{-4}$ vor. Crowe et al. [55] betrachten den Einfluss benachbarter Teilchen bei einem Abstand von etwa $\ell = 10d$ als gering, so dass hier noch von isolierten Teilchen ausgegangen werden kann. (Andere Autoren, wie z.B. Schubert et al. [285], gehen von einer völligen Vernachlässigbarkeit der Wechselwirkungen bei mittleren Abständen von $\ell > 6d$ aus.) Bei Abständen von $\ell = 3d$ (dies entspricht einem Partikelvolumenanteil von $\varphi_P = 1.9 \cdot 10^{-2}$) und kleiner schließen sie die Möglichkeit einer isolierten Betrachtung definitiv aus. Für den Bereich dazwischen wird leider keine Aussage getroffen, so dass von Fall zu Fall zu entscheiden ist, ob eine isolierte Betrachtung im Rahmen der vorliegenden Genauigkeitsanforderungen noch möglich ist oder nicht.

Durch den verringerten Widerstandsbeiwert eines nachfolgenden Teilchens kann dieses seinen Vorläufer unter Umständen einholen und sogar mit ihm kollidieren. Diesen Effekt konnten z.B. Happel & Pfeffer [113] mit ihren Ableitungen abbilden. Fortes et al. [94] bestätigten diesen Vorgang auch bei höheren Konzentrationen, d.h. bei Betrachtung von mehr als zwei Teilchen.

Zur genauen Abbildung der hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den Teilchen bei der numerischen Simulation mit dem Lagrangeschen Verfahren müssen alle Teilchen simultan verfolgt werden, so dass zu jedem Zeitpunkt alle Positionen und damit alle möglichen Wechselwirkungen erfasst werden können. Entsprechende Ableitungen für hintereinander bzw. nebeneinander angeordnete Teilchen wurden z.B. von Huber [130] durchgeführt und angewandt. Zentrale Parameter waren dabei neben den Teilchenpositionen (und damit die relativen Lagen und Entfernungen) auch die Bewegungsrichtungen und die Teilchengrößen.

Die parallele Betrachtung sehr vieler Teilchen ist mit einem sehr hohen Berechnungsaufwand verbunden. Daher erfolgt die Erfassung der hydrodynamischen Wechselwirkungen bei praxisrelevanten Anwendungen in der Regel mit Hilfe integraler halbempirischer Korrelationen für den Widerstandsbeiwert.

Druckverlust-Untersuchungen in Kugelpackungen bilden die Basis erster Beziehungen zwischen Partikelvolumenanteil und Widerstandsbeiwert. Aufgrund theoretischer Überlegungen sowie der Dimensionsanalyse erhält man für den Druckverlust in Packungen:

$$\Delta p/\Delta L = k_1 \mu d_{32}^{-2} \bar{U} \varphi_P^2 (1 - \varphi_P)^{-3} + k_2 \rho d_{32}^{-1} \bar{U}^2 \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-3} \quad (4.112)$$

bzw. mit $\text{Re} = \bar{U} d_{32} \nu^{-1}$

$$\Delta p/\Delta L = \left(k_1 \varphi_P \text{Re}^{-1} + k_2\right) \rho d_{32}^{-1} \bar{U}^2 \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-3} \quad (4.113)$$

¹³Bei kubisch-einfacher Anordnung ist ein Raumwürfel jeweils an seinen Ecken mit einem Teilchen bestückt.

Der erste Term in Gl. 4.112 ist der auf Fluidreibung zurückzuführende Anteil ($\propto \mu \bar{U}$) und der zweite Term resultiert aus dem Staudruck ($\propto \rho \bar{U}^2$). Ergun [88] quantifizierte die Koeffizienten für Schüttungen mit relativ enger Korngrößenverteilung zu $k_1 = 150$ und $k_2 = 1.75$.

Bei einer Betrachtung von kugelförmigen, monodispersen Teilchen (d.h. $d_{32} = d$) und der lokalen Geschwindigkeit in den Poren $\bar{U}(1 - \varphi_P)^{-1}$ ergibt sich unter Verwendung der Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} die allgemeinere Beziehung für den Druckverlust. Berücksichtigt man nun noch, dass der Druckverlust des Fluids in einem bestimmten Volumen¹⁴ in guter Näherung gleich der Widerstandskraft aller beteiligten Teilchen ist, so lässt sich die Widerstandskraft eines Teilchens wie folgt formulieren:

$$\mathbf{F}_D = n_P^{-1} \left[k_1 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + k_2 \right] \rho d^{-1} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \varphi_P \quad (4.114)$$

Mit Gl. 4.16 lässt sich nun nach dem Widerstandsbeiwert c_D auflösen, wobei im vorliegenden Fall für die Teilchenanzahldichte $n_P = \varphi_P (\frac{1}{6} \pi d^3)^{-1}$ gilt.

$$c_D = \frac{4}{3} \left[k_1 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + k_2 \right] = 200 \text{Re}_P^{-1} \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-1} + \frac{7}{3} \quad (4.115)$$

Aufgrund der Ableitung ist diese Beziehung für den Widerstandsbeiwert nur bei Strömungen mit sehr hohen Teilchenbelastungen gültig. Nach Gidasopow [103] ist Gl. 4.115 bei Partikelvolumenanteilen von 20% und mehr einsetzbar.

Richardson & Zaki [265] haben den Zusammenhang zwischen Teilchenkonzentration und Widerstandsbeiwert (bzw. stationärer Sinkgeschwindigkeit) mit Hilfe von Sedimentationsexperimenten untersucht. Sie korrelierten das Verhältnis der tatsächlich gemessenen Sinkgeschwindigkeit v_s zu der theoretischen stationären Sinkgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens v_{s1} mit dem Volumenanteil der kontinuierlichen Phase. Bei Berücksichtigung von Partikelwiderstand, Schwerkraft und statischem Auftrieb (diese Kräfte befinden sich bei unbeschleunigter Sinkbewegung im Gleichgewicht) berechnet sich die stationäre Sinkgeschwindigkeit eines isolierten Teilchens zu:

$$v_{s1} = \left[\frac{4}{3} d |\mathbf{g}| (\gamma_\rho^{-1} - 1) c_D^{-1} \right]^{1/2} \quad (4.116)$$

Damit reduziert sich das Verhältnis der Sinkgeschwindigkeiten auf:

$$\frac{v_s(\varphi_P)}{v_{s1}} = \left[\frac{c_D(\varphi_P \rightarrow 0)}{c_D(\varphi_P)} \right]^{1/2} \quad (4.117)$$

Aus den Daten von Richardson & Zaki resultiert die folgende Beziehung für den Widerstandsbeiwert:

$$c_D = 24 \text{Re}^{-1} (1 - \varphi_P)^{-k} \quad \text{mit} \quad k = 4.45 \text{Re}^{-0.1} \quad (4.118)$$

Dabei lag die mit v_{s1} berechnete Reynoldszahl Re bei den Sedimentationsexperimenten im Bereich von 200 bis 500. Durch Gl. 4.118 wird die Abnahme der Schwarm-sinkgeschwindigkeit bei zunehmender Turbulenz verdeutlicht. Dies lässt sich durch eine erhöhte gegenseitige Behinderung der Teilchen erklären.

¹⁴Der Druckverlust bezieht sich dabei nur auf die Fluidphase, so dass der zusätzliche Faktor $(1 - \varphi_P)$ zu berücksichtigen ist.

Generell nimmt die Sinkgeschwindigkeit mit zunehmender Teilchenkonzentration zunächst zu (gegenseitige hydrodynamische Beeinflussung der Teilchen durch Bildung von Teilchenkomplexen) und durchläuft im Bereich von $\varphi_P \approx 0.002 \dots 0.015$ eine maximale Überhöhung. Bei weiterer Konzentrationszunahme steigt der bewegungsbehindernde Einfluss und die Sinkgeschwindigkeit wird wieder kleiner. Ein Modell zur Berücksichtigung der Bewegungsbehinderung wurde von Brauer et al. [31][32][146] entwickelt. Dabei setzt sich der Schwarmbehinderungsfaktor aus dem Gegenstromfaktor k_G und dem Schwarmturbulenzfaktor k_T zusammen und es gilt die folgende Beziehung für die Schwarmsinkgeschwindigkeit:

$$v_s = k_G k_T v_{s1} \quad (4.119)$$

Die beiden Faktoren k_G und k_T können dann in Abhängigkeit vom Teilchenvolumenanteil φ_P beschrieben werden. Im Fall von monodispersen Teilchen lauten die Beziehungen:

$$k_G = \left[1 + \varphi_P (1 - \varphi_P)^{-2} \right]^{-1} \quad (4.120)$$

$$k_T = (1 - \varphi_P) \left(1 + 1.05 \left[\left(1 + \frac{1}{144} \pi^2 \varphi_P^{-2} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right]^{-1} \right)^{-1} \quad (4.121)$$

Brauer et al. haben ihr Modell aber auch für polydisperse Teilchen erweitert und publiziert.

Es ist zu bemerken, dass die Zunahme der Sinkgeschwindigkeit in Suspensionen mit kleinen Teilchenkonzentrationen ausbleibt, wenn z.B. durch Mischprozesse die Bildung von Teilchenkomplexen verhindert wird. In der Verfahrenstechnik ist damit, auch aufgrund der üblicherweise höheren Konzentrationen, in der Regel mit einer Abnahme der Sinkgeschwindigkeit zu rechnen.

Wen & Yu [346] führten eine Reihe von Fluidisationsexperimenten bei hoher Partikelbeladung durch. Ihre Daten kondensierten sie dann unter Beachtung früherer Ergebnisse (wie z.B. Richardson & Zaki [265]) in einem Korrekturfaktor f_c für die c_D -Beziehung für einzelne Teilchen nach Schiller & Naumann [284] (s. Abschnitt 4.2.2).

$$f_c = (1 - \varphi_P)^{-3.7} \quad (4.122)$$

Der Widerstandsbeiwert berechnet sich somit zu

$$c_D = 24 \operatorname{Re}^{-1} \left(1 + 0.15 \operatorname{Re}^{0.687} \right) (1 - \varphi_P)^{-3.7} \quad (4.123)$$

Bei den Untersuchungen von Wen & Yu wurden auch die Einflüsse der Reynoldszahl auf die stationäre Sinkgeschwindigkeit berücksichtigt, so dass sie in der Lage waren eine empirische Korrelation für den gesamten Reynoldszahlbereich zu entwickeln.

Im Jahr 1994 hat Di Felice [72] verschiedene in der Literatur verfügbare Datensätze analysiert und den Korrekturfaktor f_c wie üblich als Funktion von φ_P und Re_P (in Form des Faktors k) angesetzt.

$$f_c = (1 - \varphi_P)^{-k} \quad (4.124)$$

Bei kleinen Reynoldszahlen strebt der Exponent k gegen 3.65 (basierend auf den Ergebnissen von Richardson & Zaki [265]) und bei größeren Reynoldszahlen gegen 3.7 (basierend auf den Ergebnissen von Wen & Yu [346] und anderen). Di Felice empfiehlt folgende empirische Beziehung für den Korrekturfaktor f_c :

$$k = 3.7 - 0.65 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - \log_{10} \text{Re}_P \right)^2 \right] \quad (4.125)$$

Insgesamt wird damit ein Reynoldszahlenbereich von $10^{-2} < \text{Re}_P < 10^4$ abgedeckt und k durchläuft bei dieser symmetrischen Funktion einen minimalen Wert von 3.05 bei $\text{Re}_P \approx 30$.

Eine weitere Korrelation wurde von O'Rourke [230][2] vorgeschlagen (Gl. 4.126). Dabei wird die c_D -Beziehung für einzelne Teilchen nach Putnam [247] (s. Anhang A.1) mit den Ergebnissen von Richardson & Zaki [265] kombiniert, d.h. bei sehr kleinen Partikelbeladungen geht Gl. 4.126 in Gl. A.4 über und bei höheren Beladungen erfolgt entsprechend eine Annäherung an Gl. 4.118.

$$c_D = 24 \text{Re}_P^{-1} \left[(1 - \varphi_P)^{-2.65} + \frac{1}{6} \text{Re}_P^{2/3} (1 - \varphi_P)^{-1.78} \right] \quad (4.126)$$

Mit der Beziehung, welche auch bei den vorliegenden Untersuchungen mit signifikanten Partikelbeladungen verwendet wurde, können Reynoldszahlen bis $\text{Re}_P \approx 10^3$ abgedeckt werden.

Die hier aufgeführten Ansätze stellen natürlich nur einen kleinen Ausschnitt der bereits veröffentlichten Korrelationen dar. Für eine ergänzende Zusammenstellung sei z.B. auf eine entsprechende Diskussion von Politis [245]¹⁵ verwiesen.

Zusammenfassend muss bemerkt werden, dass die aktuellen Erkenntnisse in Hinblick auf Schwarmeffekte nach wie vor unzureichend für eine exakte Modellierung sind. Weitere experimentelle und numerische Untersuchungen von Strömungen mit vielen Teilchen unter Auflösung der Teilchenumströmung versprechen eine erhebliche Verbesserung des Verständnisses.

¹⁵Politis [245] hat neben dem Einfluss auf die Widerstandskraft auch die Wirkung auf andere Kräfte erörtert. Nach einer Abschätzung der Größenordnung der einzelnen Kräfte hat er allerdings bei seinen Berechnungen schließlich nur die Widerstandskraft berücksichtigt (s. auch Abschnitt 7.3). Politis diskutierte auch den Effekt turbulenter Schwankungen auf den Widerstandsbeiwert. Im Allgemeinen wird ein Teilchen auf Fluktuationen mit einem turbulenten Längenmaß größer als dem Teilchendurchmesser reagieren. Dabei lässt sich der Effekt durch ein Dispersionsmodell erfassen (dieser Fall wurde in der vorliegenden Arbeit angenommen). Sind die Teilchen kleiner als das Längenmaß, so besteht der Effekt der Turbulenz darin, dass die Strömung um die Teilchen verändert wird (s. z.B. Clift et al. [47]).