

# 5 Numerische Berechnung von Zweiphasenströmungen

Im Wesentlichen stehen für die Diskretisierung und Lösung der in den Abschnitten 3 und 4 beschriebenen Erhaltungsgleichungen für Zweiphasenströmungen zwei prinzipielle Verfahren<sup>1</sup> zur Auswahl, das Euler-Euler-Verfahren und das Euler-Lagrange-Verfahren. Beim Euler-Euler-Verfahren wird angenommen, dass die disperse Phase in Analogie zum Fluid als Kontinuum beschrieben werden kann, welches mit dem Fluid-Kontinuum in Wechselwirkung steht und dieses auch durchdringt (s. z.B. Reeks [260], Elghobashi & Abou-Arab [85], Elghobashi et al. [86] oder Durst et al. [79]). Durch die räumliche Mittelung in den einzelnen Kontrollvolumina erhält man Erhaltungsgleichungen für die beiden Phasen die sich nur aufgrund der Austauschterme von einer einphasigen Formulierung unterscheiden. Dies ermöglicht eine sehr einfache numerische Behandlung, da die Lösung beider Phasen mit den gleichen Algorithmen erfolgen kann. Neben dem allgemeinen Problem der Definition einer punktförmigen Konzentration bei einer relativ kleinen Anzahl an diskreten Teilchen in einem bestimmten Volumen (s. z.B. Wassen [342])<sup>2</sup> ist es in der Regel schwierig, allgemeingültige Ansätze für die Formulierung der Schubspannung der dispersen Phase, für die Partikeldispersion oder auch für die Diffusion der kinetischen Energie zu finden (s. Crowe [53]). Meist werden hierzu Gradienten-Diffusions-Ansätze mit einer Reihe von empirische Konstanten eingesetzt (Elghobashi [85]), welche mit einer Vielzahl von Experimenten und Simulationen optimiert werden müssen. Ein weiteres Problem ist die Modellierung der Wechselwirkungen mit geometrischen Berandungen. Der größte Vorteil des Verfahrens ist die implizite Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen den Phasen, allerdings muss bei polydispersen Systemen pro Teilchengrößenklasse eine eigene Phase betrachtet werden. Dies resultiert in einer erhöhten Anzahl an zu lösenden Gleichungen mit entsprechend erhöhtem Bedarf an Speicher und Berechnungszeit.

Beim Euler-Lagrange-Verfahren wird nur das Fluid als Kontinuum betrachtet und die disperse Phase durch eine endliche Menge diskreter Einzelteilchen repräsentiert.

---

<sup>1</sup>Ein Überblick über die verschiedenen Modellierungsmethoden findet sich z.B. bei Crowe et al. [55][52].

<sup>2</sup>Das Verfahren ist somit auf Anwendungsfälle begrenzt, bei denen die Anzahldichte der Teilchen in allen Bereichen des Berechnungsgebietes hinreichend groß ist, so dass mittlere lokale Größen sinnvoll ermittelt werden können.

Für diese werden die Erhaltungsgleichungen (s. Abschnitt 4) gelöst und somit ihre Trajektorien berechnet. Numerische Diffusion ist damit prinzipiell vernachlässigbar. Zur Begrenzung der Berechnungszeit ist die betrachtete Anzahl an Teilchen in der Regel eine Teilmenge der realen Teilchen. Makroskopische Strömungsgrößen können durch geeignete Mittelung bestimmt werden. Diese lässt sich zum Vergleich mit Messungen an das jeweilige Messverfahren anpassen. Die Partikelbahnen lassen sich sowohl simultan als auch sequentiell berechnen, wobei die Berücksichtigung von mehreren Teilchengrößenklassen praktisch keinen zusätzlichen Aufwand bedeutet. Allerdings sind die Wechselwirkungen zwischen den Phasen nicht wie beim Euler-Euler-Verfahren implizit enthalten, so dass hier eine zusätzliche Kopplung nötig wird, deren Zeitbedarf nicht zu unterschätzen ist. Beim Euler-Lagrange-Verfahren sind dafür die Modellierungsmöglichkeiten viel direkter, d.h. viel näher an der physikalischen Gegebenheiten, so dass das Verfahren auch oft als direkte Simulation bezeichnet wird. Effekte im Mikrobereich, wie z.B. Oberflächenreaktionen, sind damit erheblich besser und leichter zu erfassen. Für jede der beiden Phasen kommt somit die adäquate Modellierungsmethode zum Einsatz. Dies war die Motivation auch bei den vorliegenden Untersuchungen von Suspensionen in Rührkesseln, bei denen in der Regel relativ hohe Partikelkonzentrationen vorliegen und somit normalerweise das Euler-Euler-Verfahren zum Einsatz kommt, das Euler-Lagrange-Verfahren zu verwenden, um damit die Grundlage zu schaffen in Zukunft auch Detaileffekte zu betrachten, welche nur mit diesem Verfahren korrekt wiedergegeben werden können.

Bei den durchgeführten Berechnungen wurde zur Lösung der Erhaltungsgleichungen das Programmpaket *FASTEST3D*<sup>3</sup>, welches nach der Finite-Volumen-Methode (*FVM*) arbeitet (d.h. die Gleichungen werden in ihrer Integralform betrachtet), in Kombination mit *LAG3D*<sup>4</sup>, bei dem die dispersen Phasen nach dem Lagrangeschen Verfahren berechnet werden, verwendet. In den Abschnitten 5.1 und 5.2 folgt eine kurze Beschreibung der bei den beiden Programmen verwendeten Verfahren. Die Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen den Phasen, d.h. die Kopplung der beiden Programmteile, ist in Abschnitt 5.3 beschrieben. In Abschnitt 5.4 ist der gesamte Programmablauf zusammengefasst.

## 5.1 Numerische Berechnung der fluiden Phase

Die zeitgemittelte Navier-Stokes-Gleichung bildet die Grundlage für die Berechnung der fluiden Phase bei Eulerscher Betrachtungsweise, d.h. die fluide Phase wird als Kontinuum betrachtet. Sowohl bei den untersuchten Gas- als auch bei den Flüssigkeitsströmungen (in beiden Fällen Newtonsche Fluide) ist die Annahme der

<sup>3</sup>*FASTEST3D*: Das Berechnungsprogramm für die Fluidströmung wurde am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg (*FAU-LSTM*) entwickelt.

<sup>4</sup>*LAG3D*: Das Berechnungsprogramm für disperse Phasen wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik der Universität Halle-Wittenberg (*MLU-MVT*) entwickelt. *LAG3D* ist als Add-on für *FASTEST3D* konzipiert, lässt sich aber prinzipiell auch mit anderen Finite-Volumen-Berechnungsprogrammen kombinieren.

Inkompressibilität gut erfüllt, so liegt bei isothermer Betrachtung konstante Dichte als auch konstante Viskosität vor. Ferner spielt die Praxisrelevanz eine zentrale Rolle, d.h. sowohl die benötigten Rechnerressourcen als auch die benötigte Berechnungszeit muss sich in einem angemessenen Rahmen bewegen, so dass sich bei den vorliegenden Untersuchungen auf stationäre Strömungen beschränkt wird.

Die Strömung in Rührbehältern ist allerdings aufgrund rotierender Einbauten prinzipiell immer instationär. Durch die Verwendung des sogenannten *ASS*-Verfahrens<sup>5</sup> lässt sich die Berechnung aber in den stationären Bereich verschieben. Dabei wird das Berechnungsgebiet in zwei Bereiche (ein rotierender und ein ortsfester Bereich) aufgeteilt, welche jeweils stationär behandelt werden. Das Verfahren wird in Abschnitt 5.1.2 näher erläutert und mit anderen Berechnungsverfahren verglichen.

### 5.1.1 Beschreibung des eingesetzten Berechnungsverfahrens

Eine ausführliche Beschreibung der eingesetzten Methoden zur Berechnung der fluiden Phase findet man z.B. bei Ferziger & Perić [92] oder Schäfer & Perić [282], so dass im Folgenden nur ein kurzer Überblick gegeben werden soll.

Da die mathematisch exakte Lösung des in Tab. 3.1 beschriebenen Gleichungssystems in der Regel nicht möglich ist, wird es durch ein prinzipiell lösbares Gleichungssystem approximiert. Dazu erfolgt eine Diskretisierung in ein algebraisches Gleichungssystem, so dass Variablenwerte nur an diskreten Stützstellen vorliegen. Ein Lösungsverfahren stellt die hier verwendete Finite-Volumen-Methode dar (s. z.B. Patankar [235]), bei der das Strömungsgebiet in elementare Volumina (idealerweise Hexaeder), den sogenannten Kontrollvolumen (*KV*), unterteilt wird. Zur besseren Anpassung des Gitters an die jeweiligen Geometrien wird üblicherweise eine Grobunterteilung in Blöcken vorgenommen. Entsprechend lassen sich mit dem Programmpaket *FASTEST3D* [135] nicht-orthogonale, blockstrukturierte Gitter in blockweiser freier Topologie<sup>6</sup> realisieren. Zur Vermeidung von Schachbrettoszillationen und der Möglichkeit von körperangepassten nicht-orthogonalen Gittern wurde die nicht-versetzte Gitteranordnung (s. z.B. Rhie & Chow 1983 [264]) umgesetzt. Ein Vergleich mit den Möglichkeiten der versetzten Anordnung findet sich z.B. bei Ferziger & Perić [92].

Im Gegensatz zur Finite-Elemente-Methode (*FEM*) zeichnet sich die *FVM* durch ihren vollkonservativen Charakter (d.h. die Massenerhaltung ist auf jeden Fall gewährleistet) aus. Die Bilanzierung kann somit für jedes Kontrollvolumen einzeln über konvektive und diffusive Flüsse in bzw. aus dem Kontrollvolumen erfolgen. Dazu ist es nötig die integralen Erhaltungsgleichungen durch die Nutzung des Gaußschen Integralsatzes in Oberflächenintegrale zu überführen. Alle Variablenwerte (d.h.

<sup>5</sup>Häufig wird das *ASS*-Verfahren (*ASS* = *A*pproximate *S*teady-*S*tate) auch als *MFR*-Verfahren (*MFR* = *M*ultiple *F*rames of *R*eference) oder *FR*-Verfahren (*FR* = *F*rozen *R*otor) bezeichnet.

<sup>6</sup>Diese Art der Vernetzung ist ein Kompromiss zwischen der hohen geometrischen Flexibilität eines vollständig unstrukturierten Gitters und der bei global strukturierten Gittern erreichbaren ausgezeichneten numerischen Effizienz.

die jeweiligen Mittelwerte) sind aber in den  $KV$ -Zentren gespeichert, so dass die Flüsse durch die  $KV$ -Flächen interpoliert werden müssen.

Zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse durch die  $KV$ -Flächen kommt die sogenannte Fluss-Korrektur-Methode nach Khosla & Rubin [147] zum Einsatz, welche zur Gruppe der *Deferred-Correction Approaches* gehört und eine Linearkombination aus der  $UDS$ -Methode (*Upwind Difference Scheme*), mit einem Fehler 1. Ordnung, und der  $CDS$ -Methode (*Central Difference Scheme*), mit einem Fehler 2. Ordnung, darstellt. Zu bemerken ist, dass die  $UDS$ -Methode deutlich robuster ist und damit häufig bevorzugt wird. Wie in Abschnitt 7.7 aufgezeigt ist, führt die Diskretisierung nach der  $UDS$ -Methode bei bestimmten Anwendungen, wie z.B. der Berechnung von Rührkesselströmungen, zu erheblichen Verfälschungen der Strömungsstruktur und damit zu nicht tolerierbaren Fehlern. Die Diskretisierung der diffusiven Flüsse erfolgt immer mit einer reinen  $CDS$ -Methode. Eine sehr ausführliche Diskussion weiterer Diskretisierungsmöglichkeiten mit ihren spezifischen Vor- und Nachteilen findet sich bei Ferziger & Perić [92] als auch bei Schäfer & Perić [282].

Die Lösung der durch die Diskretisierung entstandenen algebraischen Matrix erfolgt mit dem halb-impliziten Verfahren von Stone [310] ( $SIP$ , *Strongly Implicit Procedure*), welches für penta- und hepta-Diagonalmatrizen (d.h. für dünnbesetzte Matrizen) optimiert ist. Das iterative Lösungsverfahren beruht auf einer unvollständigen Dreieckszerlegung ( $ILU$ , *Incomplete Lower-Upper Decomposition*, s. z.B. Press et al. [246]) und hat gegenüber direkten Verfahren einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil.

Da mit dem  $SIP$ -Verfahren jede Gleichung einzeln gelöst wird, ist eine anschließende Kopplung zwischen den einzelnen Variablen nötig. Bei den vorliegenden Untersuchungen wird dazu der  $SIMPLE$ -Algorithmus (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations*) von Patankar & Spalding [236] verwendet, um sich iterativ der Lösung mit gegebener Genauigkeit, d.h. die Residuen müssen einen bestimmten Grenzwert unterschreiten, anzunähern. Von zentraler Bedeutung beim  $SIMPLE$ -Verfahren ist die Kopplung zwischen Kontinuitäts- und Impulsgleichung durch die Druckkorrekturgleichung (welche auf Arbeiten von Rhie & Chow [264] zurückgeht und im Laufe der Zeit, z.B. von Perić [237], verbessert wurde), da keine explizite Gleichung für den Druck zur Verfügung steht.

Zur Strömungsberechnung in komplexen Geometrien mit beliebigen Randformen ist eine lokale Transformation in ein allgemeines nicht-orthogonales Koordinatensystem nötig. Perić [237] hat diese Problematik ausführlich diskutiert und die Vorteile eines kartesischen Koordinatensystems als Basissystem dargelegt.

Das Konvergenzverhalten kann durch den Einsatz der Mehrgittermethode ( $FMG$ , *Full MultiGrid Method*, s. z.B. Hackbusch [109] oder Ferziger & Perić [92]) beschleunigt werden. Dabei wird berücksichtigt, dass die Fehlerglättung am effizientesten erfolgt, wenn die Gittermaschenweite in der Größenordnung der Wellenlänge der Fehler liegt. Durch Nutzung mehrerer Gitter, und damit Abdeckung mehrerer Wellenlängenbereiche, lässt sich eine erhebliche Beschleunigung erreichen.

Die Nutzung leistungstarker Rechner, wie z.B. Vektor- und/oder Parallelrechner bietet eine weitere Möglichkeit die Berechnungen zu beschleunigen. Dabei haben sich in den letzten Jahren die Forschungstätigkeiten immer mehr Richtung Parallelisierung verschoben, da dieses Verfahren nicht zwangsläufig auf High-End Rechner angewiesen ist, sondern auch Kombinationen von Kleinrechnern als virtuelle Parallelrechner nutzen kann.

Bei *FASTEST3D* werden *MPI*-Routinen (*Message Passing Interface*) zur Realisierung der Kommunikation zwischen den Prozessoren eingesetzt. Jedem Prozessor wird ein bestimmter Teil des Strömungsgebietes zugeordnet und der Prozessor hat die Möglichkeit innerhalb seines eigenen Speicherbereiches autark zu agieren, d.h. ein Ausbremsen durch gemeinsamen Speicherzugriff ist nicht möglich. Allerdings müssen die einzelnen Gebiete miteinander gekoppelt werden, so dass eine Kommunikation zwischen den Prozessoren nötig wird. Reduziert man die Kommunikation (d.h. ein Datenaustausch findet z.B. nur nach jeweils  $n$  Iterationen statt), so führt das zu einer Verstärkung der Entkopplung und damit zu einer Erhöhung der Iterationszahl um zum gleichen Ergebnis zu gelangen. Da dieser Effekt stärker wiegt als der Kommunikationsaufwand, erfolgt ein Datenaustausch nach jeder Iteration.

Ein ähnliches Phänomen erhält man bei der Erhöhung der Anzahl an Prozessoren, da hier die den einzelnen Prozessoren zugeordneten Strömungsteilgebiete immer kleiner werden und es dadurch zu einer verstärkten Entkopplung kommt. Ebenso nimmt naturgemäß der Kommunikationsaufwand mit der Anzahl an Prozessoren zu. Eine gute Skalierbarkeit ist also nur bis zu einer bestimmten Anzahl an Prozessoren möglich.

### 5.1.2 Strömungsberechnung im Rührkessel

Aufgrund der hohen Komplexität von Rührkesselströmungen (Koexistenz von bewegten und ortsfesten Elementen) wurden im Laufe der Zeit eine Vielzahl von Varianten zur Erfassung des Impulseintrags durch den Rührer entwickelt, wobei in aller Regel die jeweils aktuellen Limitierungen der Computertechnik sowie das Ziel der Berechnung den Grad der Vereinfachung bestimmten. Eine Übersicht verschiedener Ansätze findet sich z.B. bei Brucato et al. [36] oder Sommerfeld & Decker [302]

Das älteste und prinzipiell einfachste Verfahren ist das *IBC*-Verfahren (*Impeller Boundary Condition*). Dabei wird die Geometrie des Rührers nicht aufgelöst<sup>7</sup> und der Impulseintrag durch das Rührorgan erfolgt über zu spezifizierende Randbedingungen am fiktiven Rührerzylinder (siehe z.B. Issa & Gosman [139]), d.h. dem Gebiet, welches von den physikalischen Rührerblättern erfasst wird, oder über entsprechende Volumenquellterme für den Impuls (siehe z.B. Pericleous & Patel [238][239]), welche dann für den gesamten Rührerzylinder zu spezifizieren sind. Die Betrachtung des Rührers erfolgt damit umfangsgemittelt, so dass die Berechnung stati-

<sup>7</sup>Die Rührerwelle und ggf. die Rührerscheibe lassen sich aber ebenso wie die Stromstörer geometrisch auflösen.

onär durchgeführt werden kann. Unter Ausnutzung der Symmetrie reicht es bei vier Stromstörern ein Viertel des Strömungsgebiets aufzulösen. An der Berandung des Rührerzylinders werden dann Geschwindigkeitsprofile (und ggf. Daten für die turbulenten Größen) als Randbedingung vorgegeben, welche häufig direkt aus experimentellen Daten extrahiert werden.

In der Literatur wurde bereits eine Vielzahl von Varianten vorgeschlagen. So wurde die Rührerzone zum Teil komplett ausgeklammert (Betrachtung als poröser Zylinder, siehe z.B. Issa & Gosman [139]), als Bereich mit Festkörperrotation angenommen (siehe z.B. Harvey & Greaves [118][119]) oder mit entsprechenden Volumenquelltermen mitgerechnet (siehe z.B. Pericleous & Patel [238][239]). Die Randbedingungen wurden meist nur am Abstromrand des Zylinders gesetzt (siehe z.B. Bakker [6]), manchmal aber vollständig an allen Berandungsflächen (siehe z.B. Ranade & Joshi [255]). Oft lagen nur Meßwerte für einzelne Geschwindigkeitskomponenten vor, während die anderen Komponenten (meist auch die turbulenten Größen) abgeschätzt wurden (siehe z.B. Bakker [6]). Bei manchen Rechnungen blieben die turbulenten Randbedingungen auch vollständig unberücksichtigt (siehe z.B. Harvey & Greaves [118][119]).

In Abhängigkeit von der Güte der für den betrachteten Berechnungsfall benötigten Messungen, lassen sich die Strömungszustände im Rührkessel gut abbilden. Je nach Anwendungsfall muss die Datenbasis aber gegebenenfalls um sehr aufwendige detaillierte Messungen erweitert werden<sup>8</sup>, so dass eine schnelle Berechnung nicht mehr gegeben ist. Diese Abhängigkeit von sehr speziellen experimentellen Ergebnissen und deren Genauigkeit ist daher als großer Nachteil des Verfahrens zu bewerten.

Eine gewisse Verbesserung lässt sich durch allgemeinere Modellierungsansätze erreichen. Das phänomenologische *Swirling Radial Jet Model* (Kolar et al. [159], Kresta & Wood [163], Kresta [162]) ermöglicht eine alternative Beschreibung von Radialrührern. Die verschiedenen Modellparameter sind dann aber wieder mit Hilfe von Messungen zu ermitteln. Kresta & Wood [163] schlugen aber unter Berücksichtigung einer Vielzahl von experimentellen Ergebnissen (meist *LDA*-Messungen) optimale Werte für eine Reihe von Anwendungen vor, so dass für diese keine weiteren Messungen benötigt werden.

Ein theoretischer Ansatz wurde bei einem in der eigenen Arbeitsgruppe entwickelten Rührermodell verfolgt, bei dem ähnliche Ansätze zu Grunde liegen wie bei der Modellierung von Pericleous & Patel [238][239]. Die Impulsquellen werden über die Betrachtung der Widerstandskraft eines bewegten Körpers berechnet. Die Kräfte, welche die Rührerblätter auf das Fluid ausüben, lassen sich so lokal (d.h. in radialer und vertikaler Richtung aufgelöst und in Umfangsrichtung gemittelt) herleiten und

---

<sup>8</sup>Bei Untersuchungen von Fokema et al. [93] hat sich gezeigt, dass die für eine bestimmte Konfiguration gemessenen Randbedingungen nicht universell, sondern nur für sehr ähnliche geometrische Anordnungen einsetzbar sind., wobei diese in allen Kontrollvolumen angesetzt werden, welche durch den Rührer erfasst würden. So ist z.B. eine Variation der Einbauhöhe des Rührers nicht uneingeschränkt möglich, sofern nicht entsprechende Messungen für modifizierte Randbedingungen verfügbar sind.

berechnen. Aus den Kräften resultieren dann die entsprechenden Quellterme in den von den gedachten Rührerblättern durchstreiften Kontrollvolumen (siehe Decker & Sommerfeld [62]).

Analog zu den Rührerquelltermen lassen sich auch die Stromstörer als Volumenquellterme (wobei hier der Terminus Senke sicher zutreffender ist) modellieren. Damit ermöglichen sich dann zweidimensionale Betrachtungen (siehe z.B. Morud & Hjertager [209]) oder die geometrische Auflösung des Rührers (siehe z.B. Hutchings et al. [133]). Im zweiten Fall erfolgt die Berechnung dann im rotierenden Koordinatensystem und die Quellterme sind im gesamten Umfang anzusetzen<sup>9</sup>. In erster Näherung kann durch Transformation in ein stationäres Koordinatensystem auch mit bewegten Behälterwänden (d.h. entsprechend transformierten Quelltermen für die Stromstörer) gerechnet werden.

Generell sollten natürlich immer jene Bereiche modelliert werden, welche bei der aktuellen Betrachtung von geringerer Bedeutung sind. Eine Modellierung der Stromstörer macht also Sinn, wenn primär die Strömung am Rührer interessiert, während die Modellierung des Rührers angezeigt ist, wenn in erster Linie die Globalströmung im Rührbehälter richtig wiedergegeben werden muss. Zwangsläufig resultieren aber durch zeitliche Mittelung Ungenauigkeiten im Bereich der Modellierung (Rührer bzw. Stromstörer und Behälterwand). Eine ganzheitliche Betrachtung der Strömung im bewehrten Rührwerk, d.h. die Erfassung der lokalen Effekte an den Rührerblättern als auch an den Stromstörern, ist mit umfangsmittelnden Verfahren nicht möglich, so dass diese rasch an ihre Grenzen gelangen. Im Zuge der immer größeren Leistungsfähigkeit der verfügbaren Computer, werden diese Ansätze daher in jüngster Zeit kaum noch eingesetzt.

Zur parallelen geometrischen Auflösung des Rührers und der Stromstörer muss das Berechnungsgebiet in eine rotierende innere Zone (zur Auflösung der Rührergeometrie) und eine ortsfeste äußere Zone (für die Erfassung der Stromstörer und Behälterwände) unterteilt werden. Eine relativ einfache Umsetzung dieses Prinzips findet sich beim *IO*-Verfahren (*Inner-Outer*), welches von Brucato et al. [35] vorgeschlagen wurde. Dabei werden die Zonen (welche sich stark überlappen) getrennt von einander vernetzt und stationär nacheinander alternierend berechnet. Die fehlenden inneren Randbedingungen werden dann durch Interpolation und Transformation aus Daten der jeweils anderen Zone bestimmt. Nach mehreren Kopplungssimulationen erhält man so eine konvergente Gesamtlösung. Durch eine Mittelung der inneren Randbedingungen in Umfangsrichtung ist es auch möglich, dass die beiden Zonen, welche praktisch entkoppelt berechnet werden, verschieden große Winkelbereiche abdecken (z.B. innen  $60^\circ$  bei Sechsstabtrührern und außen  $90^\circ$  bei vier Stromstörern). Dabei wird angenommen, dass in der inneren Zone nur die Periodizität der Rührerblätter und in der äußeren Zone nur die der Stromstörer wirkt. Dies entspricht je nach Wahl der Zonengrenzen mehr oder weniger gut den realen

---

<sup>9</sup>Im eher seltenen Fall von unbewehrten Rührkesseln kann bei der Berechnung im rotierenden Koordinatensystem sogar ganz ohne Modellierung ausgekommen werden (siehe z.B. Dong et al. [74][75]).

Bedingungen.

Ohne eine Aufspaltung in zwei Zonen kommt das *CS*-Verfahren (*C*omputational *S*napshot) aus (siehe z.B. Ranade & Dommeti [252]). Die Auflösung des Rührers erfolgt hier allerdings indirekt, indem an den Oberflächen der Rührerblätter Quellterme entsprechend der Bewegung gesetzt werden<sup>10</sup>, um den resultierenden Drehimpuls zu berücksichtigen. Da es sich um eine stationäre Berechnung handelt (die transienten Terme in den Erhaltungsgleichungen werden vernachlässigt), wird faktisch die Strömung zu einem bestimmten Zeitpunkt betrachtet. Durch die Variation der Rührerstellung (d.h. des Zeitpunkts) kann so die gesamte Strömung untersucht werden. Bei einer instationären Berechnung sind die Quellterme in den Erhaltungsgleichungen dann zeitabhängig, d.h. sie werden jeweils an der aktuellen Position der Rührerblätter eingebracht und entsprechend der Rotation des Rührers für jeden Zeitschritt modifiziert (siehe z.B. Revstedt et al. [262]). Da die Beträge der Quellterme über die Betrachtung der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Rührerblätter und Fluid bestimmt werden, sind für die Umsetzung keinerlei experimentelle Daten nötig. Derksen & Van den Akker [70] haben für diesen Ansatz mit stationärem Gitter den Begriff *AFFT* (*A*daptive *F*orce-*F*ield *T*echnique) eingeführt.

Zur Vermeidung von Fehlern, welche durch Ungenauigkeiten der Quellterme entstehen würden, lässt sich das *SM*-Verfahren (*S*liding *M*esh)<sup>11</sup> verwenden (siehe z.B. Luo et al. [188]). Bei diesem instationären Verfahren wird das Berechnungsgebiet wie beim *IO*-Verfahren in einen inneren rotierenden und einen äußeren stationären Bereich unterteilt, um eine vollständige geometrische Auflösung zu ermöglichen. Die beiden Teilbereiche überlappen sich nicht (implizite Kopplung an der Grenzfläche) und können durch geeignete Interpolation aneinander vorbeigleiten. Eine Sonderform stellt das *CM*-Verfahren (*C*licking *M*esh) dar (siehe z.B. Wechsler et al. [343]), bei dem die Austauschfläche nach dem Berechnungszeitschritt  $\Delta t$ , d.h. nach der Verdrehung während dieses Zeitschritts, genau mit der entsprechenden Austauschfläche des Nachbarkontrollvolumens zusammenfällt. Die Unterteilung sowie (exemplarisch) der Austausch zwischen den beiden Bereichen zu einem Zeitpunkt  $t_i$  ist in Abb. 5.1-B für das *CM*-Verfahren skizziert. (Beim *IBC*-Verfahren würde entsprechend der in Abb. 5.1-A dargestellte Fall vorliegen, wobei entweder die Auflösung des Rotors oder des Stators vernachlässigt würde.) Durch die Drehung des Rotors erhält man dann zum Zeitpunkt  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$  die in Abb. 5.1-C dargestellte geänderte Austauschsituation, bzw. in Abb. 5.1-D die entsprechende programmtechnische Umsetzung. Beim *CM*-Verfahren ist die Wahl des Berechnungszeitschritts also sehr stark an die Drehzahl des Rotors und die Gitterauflösung in Umfangsrichtung (welche im Übrigen äquidistant sein muss) gekoppelt und kann somit nicht frei

<sup>10</sup>Im Falle es Scheibenrührers kann vereinfachend auch an den Rührerblättern sowie der Scheibe die tangentiale Geschwindigkeit (in Abhängigkeit vom Radius und der Rührerdrehzahl) als Randbedingung gesetzt.

<sup>11</sup>Beim *SM*-Verfahren sind keinerlei Vereinfachungen nötig und der einzige empirische Parameter ist die Rührerdrehzahl. Die Auflösung der räumlichen wie auch der zeitlichen Strukturen resultiert aber in hohen Rechenzeiten, so dass die Nutzung von Periodizitäten große Bedeutung hat.



gewählt werden. Dafür entfällt die beim *SM*-Verfahren benötigte Interpolation<sup>12</sup> an den Übergangsfächen. Die Austauschterme müssen natürlich entsprechend der Austauschrichtung von einem rotierenden auf ein stationäres Koordinatensystem bzw. umgekehrt transformiert werden. Beim *MDM*-Verfahren (*Moving Deforming Mesh*) gleiten die beiden Bereichen nicht aneinander vorbei, sondern das Gitter wird im Übergangsbereich durch die Bewegung verzerrt (siehe z.B. Perng & Murthy [240]). Damit entfällt ebenfalls die Interpolation, allerdings können nun Fehler durch eine zu starke Verzerrung entstehen. Daher muss in kurzen regelmäßigen Abständen eine Umstrukturierung des Gitters erfolgen. Auch der hohe Verwaltungsaufwand während der Berechnung ist zu erwähnen.

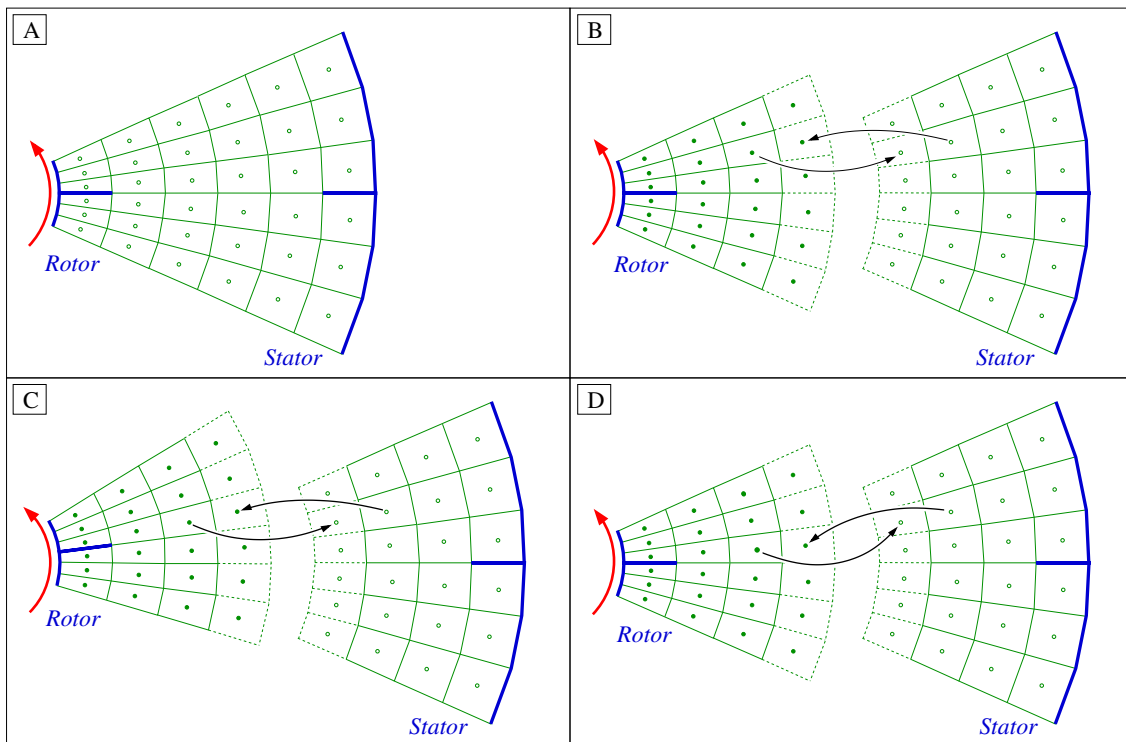


Abbildung 5.1: Einteilung des Berechnungsgitters bei verschiedenen Verfahren zur Berechnung einer Rotor-Stator Kombination

Für die meisten Anwendungen sind die sehr detaillierten Ergebnisse einer instationären Berechnung (z.B. für die Anfahr- und Übergangsphase zur periodisch stationären Strömung) nicht von Interesse, da die entsprechenden Prozesse (periodisch) stationär betrieben werden. Der sehr hohe Rechenaufwand, wobei der Löwenanteil auf die Anfahr- und Übergangsphase entfällt<sup>13</sup>, ist daher eigentlich nicht gerechtfertigt.

<sup>12</sup>Eine saubere Interpolationstechnik an den Grenzflächen zwischen rotierenden und stationären Bereichen ist nötig, um die Massen- und Impulserhaltung zu gewährleisten.

<sup>13</sup>Bakker et al. [9] ermittelten einen Bedarf von ca. 35 Umdrehungen, um einen voll entwickelten periodischen Strömungszustand zu erreichen.

tigt. Oft liegen auch zeitkritische Aufgabenstellungen vor, bei denen eine instationäre Betrachtung von vornherein auszuschließen ist.

Das *ASS*-Verfahren (*A*pproximate *S*teady-*S*tate) (oft auch als *MFR*-Verfahren (*M*ultiple *F*rames of *R*eference) oder *FR*-Verfahren (*F*rozen *R*otor) bezeichnet) verwendet wie das *IO*- und das *SM-/CM-/MDM*-Verfahren zwei Referenzkoordinatensysteme und die Rechnung erfolgt stationär (siehe z.B. Luo et al. [187] oder Issa [137]). Die Gitteranordnung entspricht aber dem *SM-/CM-/MDM*-Verfahren (s. Abb. 5.1-B), so dass im Gegensatz zum *IO*-Verfahren ein implizit gekoppeltes Gitter vorliegt (keine externen Iterationen nötig). Alle Teile des Rührsystems werden geometrisch exakt erfasst. Die Grenze zwischen der rotierenden und ortsfesten Zone ist so zu wählen, dass in Umfangsrichtung möglichst konstante Werte vorliegen (d.h. weder die instationäre Wirkung der Rührerblätter noch die Effekte der Stromstörer dürfen dominieren), um den Fehler durch die Betrachtung von nur einer Winkelstellung des Rührers klein zu halten (s. auch Issa [138]). Die geschickte Wahl der Grenzfläche spielt also eine Schlüsselrolle bei diesem Verfahren. Ferner ist zu bemerken, dass das Verfahren bei zu großen Rührern aus oben genannten Gründen nicht sinnvoll eingesetzt werden kann.

Die verschiedenen Modellierungsansätze<sup>14</sup> wurden inzwischen in einer Vielzahl von Arbeiten für verschiedenste Anwendungsfälle verglichen (siehe z.B. Harvey et al. [115], Tabor et al. [315], Brucato et al. [36], Wechsler et al. [343], Montante et al. [204] usw. — eine umfangreichere Übersicht verschiedener Anwendungen, weitere Details zu den Realisierungen und Vergleiche der Ansätze befindet sich in Abschnitt 7.3). Dabei zeigte sich, dass stationäre Verfahren mit mehreren Referenzkoordinatensystemen im Vergleich zur instationären Berechnung bzw. zu Experimenten sehr gute Resultate liefern. Die Unterschiede zu instationären Verfahren sind meist sehr klein und tendenziell umso geringer, je kleiner der Abstand zwischen Rührerblättern und Stromstörern ist. Das *IBC*-Verfahren schneidet bei Vergleichen in der Regel deutlich schlechter ab.

Aufgrund der erheblichen Vorteile des *ASS*-Verfahrens bei den Berechnungszeiten, gerade mit Hinblick auf die benötigten Kopplungsiterationen mit dem Lagrange-schen Berechnungsteil für die disperse Phase (s. Abschnitt 5.4), ohne Einbußen bei der geometrischen Auflösung, wurde dieses Verfahren gegenüber den instationären Verfahren als ökonomische Alternative bevorzugt und bei den vorliegenden Untersuchungen eingesetzt.

<sup>14</sup>Eine schlüssige strukturierte Unterteilung der Verfahren ist nur bedingt möglich, da eine Vielzahl an Unterscheidungskriterien vorliegen (stationär oder instationär, ein oder mehrere Referenzkoordinatensysteme, Auflösung oder Ausklammerung der Rührergeometrie, experimentelle oder theoretische Randbedingungen, gemittelte oder Momentanbetrachtung usw.), so dass an dieser Stelle darauf verzichtet wurde.

## 5.2 Numerische Berechnung der dispersen Phase

Bei der Lagrangeschen Betrachtungsweise werden diskrete Teilchen betrachtet. Die Modellierung der dispersen Phase besteht also im Wesentlichen darin, die Analyse auf eine ausreichende Anzahl an repräsentativen Teilchen, welche als Kollektiv realer Teilchen mit gleichen Eigenschaften betrachtet werden, zu beschränken um diese dann im Strömungsfeld zu verfolgen. Die Berechnung der Partikelbahnen erfolgt anhand der angreifenden Kräfte und Momente durch schrittweise zeitliche Integration der Partikelbewegungsgleichungen (s. Abschnitt 4.2) entlang der Trajektorien. Die entsprechenden Fluideigenschaften am aktuellen Partikelort sind durch geeignete Interpolation zu bestimmen und werden für die Dauer eines Zeitschritts als konstant angenommen.

### 5.2.1 Zeitschrittbestimmung für die Partikelbewegung

Beim Verfolgen der repräsentativen Teilchen muss gewährleistet sein, dass der verwendete Zeitschritt  $\Delta t$  hinreichend klein ist, um den Teilchen die Möglichkeit zu geben auf Änderungen der Fluideigenschaften entlang der Trajektorien zu reagieren. Andererseits führen unnötig kleine Zeitschritte unter Umständen zu einer massiven Rechenzeiterhöhung. Daher ist es sinnvoll eine adaptive Zeitschrittbestimmung zu verwenden, bei der anhand von verschiedenen Kriterien der jeweils optimale lokale Zeitschritt bestimmt wird.

Zum einen muss sichergestellt sein, dass der Zeitschritt  $\Delta t$  kleiner als die Partikelrelaxationszeit  $\tau_P$  ist, um dem Fluidfolgevermögen der Teilchen Rechnung zu tragen. Ferner müssen bei turbulenten Strömungen deren Strukturen berücksichtigt werden, um den Teilchen hinreichend Zeit für eventuelle Wechselwirkungen zu geben, d.h. das integrale turbulente Zeit- und Längenmaß muss berücksichtigt werden ( $\Delta t < T_L$  und  $\Delta t < L_E |\mathbf{v}|^{-1}$ ). Aus statistischen Gründen muss sich jedes Teilchen eine bestimmte Mindestanzahl an Zeitschritten in jedem Kontrollvolumen aufhalten. Bei einer charakteristischen Abmessung eines Kontrollvolumens von  $\ell_{KV}$  muss somit  $\Delta t < \ell_{KV} |\mathbf{v}|^{-1}$  gelten<sup>15</sup>. Um auf der sicheren Seite zu sein und z.B. den Annahmen bei der Ableitung des Dispersionsmodells (s. Abschnitt 4.3) zu genügen ( $\Delta t \ll T_L$ ), werden entsprechende Sicherheitsfaktoren in der Größenordnung von 0.1 verwendet.

Bei der Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen kommt ein zusätzliches Kriterium hinzu, da bei den Ableitungen des Kollisionsmodells angenommen wurde, dass während eines Zeitschritts maximal eine Partikel-Partikel-Kollision stattfindet (s. Abschnitt 4.5.3). Der maximale Zeitschritt  $\Delta t_{max,PPK}$  lässt sich mit Hilfe von Gl. 4.64 — unter Vorgabe einer Kollisionswahrscheinlichkeit für die nur eine binäre

<sup>15</sup>Bei der instationären Berechnung einer Fluidströmung existiert eine analoge Bedingung in Form der Courantzahl ( $Co = \Delta t_E |\mathbf{u}| \ell_{KV}^{-1}$ ), welche das Verhältnis von Zeitschritt und charakteristischer Konvektionszeit beschreibt. Insbesondere für die Bewertung der Genauigkeit einer Berechnung ist die Courantzahl ein Schlüsselparameter (s. auch z.B. Ferziger & Perić [92]).

Kollision zu erwarten ist (hier  $P_{PPK} = 5\%$ ) — berechnen und ist somit abhängig von den Teilchengrößen und -geschwindigkeiten sowie der lokalen Partikelanzahldichte.

### 5.2.2 Wechsel des Bezugssystems während der Bewegung entlang einer Partikeltrajektorie

Bei Verfahren mit mehreren Referenzkoordinatensystemen (wie beim hier verwendeten *ASS*-Verfahren) ist es nötig, die Teilchengeschwindigkeiten entsprechend dem jeweils relevanten Koordinatensystem zu betrachten, d.h. bei einem Wechsel des Bezugssystems muss eine entsprechende Transformation der Teilcheneigenschaften erfolgen. Zusätzlich ist die momentan vorliegende Fluidgeschwindigkeit in der Umgebung des Teilchens zu transformieren. Je nach Richtung des Übergangs muss zu der Tangentialkomponente der Geschwindigkeit der Term  $\Omega_G(x_{1,P}^2 + x_{2,P}^2)^{1/2}$  addiert oder von ihr subtrahiert werden<sup>16</sup>. Ferner muss der Übergang bei der Partikelrotationsgeschwindigkeit berücksichtigt werden. Dies bedeutet, es muss von der  $\omega_{3,P}$ -Komponente die Rotation des Gitters  $\Omega_G$  subtrahiert oder zu ihr addiert werden. Bei beiden Transformationen wird bei einem Übergang vom stationären Gitter auf das rotierende Gitter subtrahiert und im umgekehrten Fall addiert.

Um dem instationären Verhalten des Rührers bei zeitabhängiger Betrachtung (wie sie beim Lagrange-Verfahren vorliegt) Rechnung zu tragen, muss der Übergangsort entsprechend der Flugzeit des Teilchens (und damit entsprechend der Rührerstellung) für das neue Bezugssystem bestimmt werden. Es erfolgt also in der Regel ein Versatz der Teilchenposition auf der Übergangsfläche in Umfangsrichtung.

### 5.2.3 Weitere Unterteilung des Berechnungsgitters für die disperse Phase

Bei der Erzeugung von komplexen hexaedralen Berechnungsgittern mit entsprechenden kommerziellen Gittergenerierungstools bestehen die Seitenflächen der einzelnen Kontrollvolumina in der Regel nicht aus exakt planen Flächen, d.h. die vier Eckpunkte liegen nicht zwingend in einer Ebene. Die Abweichungen spielen bei der Berechnung der fluiden Phase aufgrund des Finite-Volumen-Ansatzes keine Rolle, solange sie nicht zu groß werden. Dies ist praktisch immer sichergestellt, so dass dieses Phänomen bei einphasigen Berechnungen irrelevant und somit bei den meisten Bearbeitern nahezu unbekannt ist. Bei der Berechnung einer dispersen Phase mit dem Lagrangeschen Verfahren können diese kleinen Abweichungen aber fatale Folgen haben, da der aktuelle Partikelort unter Umständen nicht mehr eindeutig bestimmbar ist und das Teilchen somit in eine Endlosschleife geraten kann, welche dann wiederum explizit abgefangen werden muss. Um diese Problematik zu vermeiden werden die Kontrollvolumina in die kleinstmöglichen Einheiten unterteilt.

<sup>16</sup>Dabei wird angenommen, dass  $\Omega_G \parallel \mathbf{e}_3$  erfüllt ist.

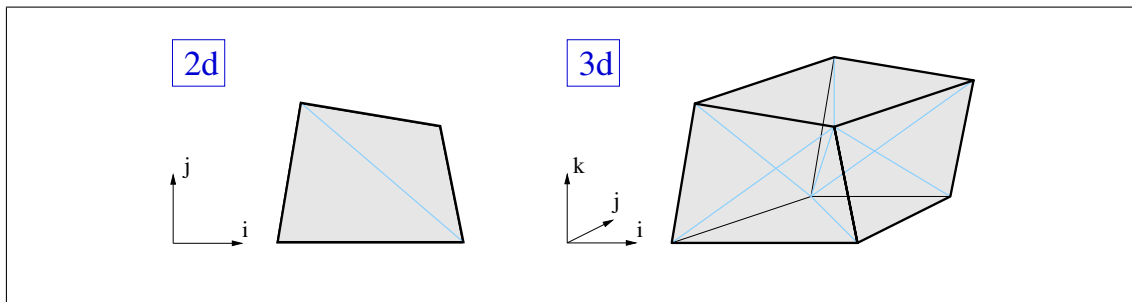


Abbildung 5.2: Unterteilung der Kontrollvolumina bei zwei- bzw. dreidimensionaler Betrachtung

Wie in Abb. 5.2 dargestellt resultieren dabei im Zweidimensionalen aus einem Viereck zwei Dreiecke und im Dreidimensionalen aus einem Hexaeder sechs Tetraeder. In Abb. 5.3 ist die gewählte Unterteilung in Tetraeder noch einmal deutlicher dargestellt. Entsprechend müssen auch die Seitenflächen der Kontrollvolumen für die korrekte Behandlung der Randbedingungen (z.B. Kollisionen der Teilchen mit der Wand) jeweils in zwei Dreiecksflächen unterteilt werden. Diese Unterteilungen sind in Abb. 5.4 mit der entsprechenden Indizierung zusammengefasst.

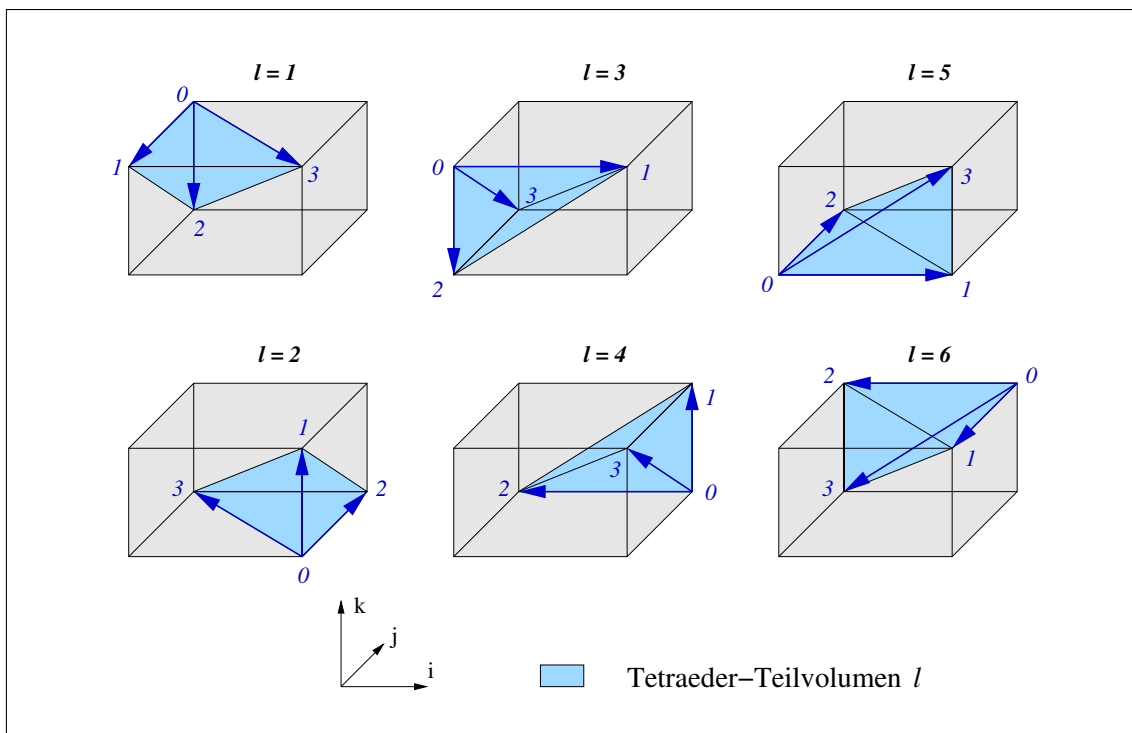


Abbildung 5.3: Unterteilung der einzelnen Kontrollvolumina (Hexaeder) in jeweils sechs Tetraeder-Teilvolumen

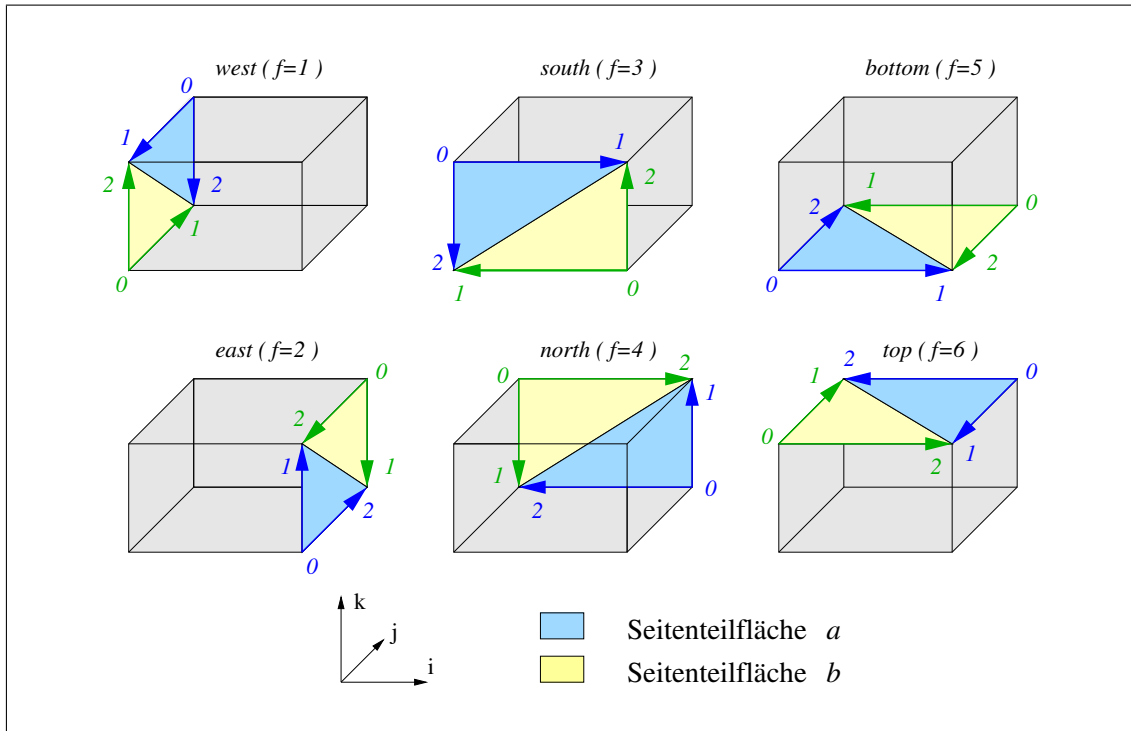


Abbildung 5.4: Unterteilung der Seitenflächen der einzelnen Kontrollvolumina

Durch die Unterteilung in Tetraeder lässt sich eine effiziente und einfache Interpolation der Fluideigenschaften am Partikelort realisieren. Die Nachbar-Tetraeder sind aufgrund der geordneten Struktur der Einteilung direkt bekannt, so dass sich durch die Berechnung von lokalen Koordinaten des neuen Partikelorts im bisherigen Tetraeder die Bewegungsrichtung bezüglich des Gitters und somit auch die Zuordnung der Partikelbahn zu den entsprechenden Kontrollvolumen bzw. Tetraedern effizient gestalten lässt.

### 5.2.4 Berechnung der Mittelwerte der dispersen Phase in den einzelnen Kontrollvolumina

Da die zeitlichen Mittelwerte der Partikelphase in den einzelnen Kontrollvolumina aufgrund der Lagrangeschen Betrachtungsweise nicht direkt vorliegen, müssen sie mit Hilfe der Ensemble-Mittelung gesondert bestimmt werden. Dieses Vorgehen entspricht sowohl einer zeitlichen als auch einer räumlichen Mittelung im Kontrollvolumen. Die Berechnung der einzelnen Größen erfolgt dabei gewichtet sowohl mit den jeweiligen Zeitschritten als auch mit der Anzahl an realen Partikeln pro Parcel.

Für die mittlere Partikelgeschwindigkeit ( $\phi = \mathbf{V}$ ), den mittleren Partikeldurchmesser ( $\phi = \bar{d}$ ) und die mittlere Dichte der Teilchen ( $\phi = \bar{\rho}_P$ ) im betrachteten

Kontrollvolumen erhält man somit:

$$\phi = N_t^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \varphi_k N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad \forall \quad \varphi = \mathbf{v}, d, \rho_P \quad (5.1)$$

$$\text{mit} \quad N_t = \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.2)$$

Dabei ist  $f_s$  der Faktor für den anteiligen Aufenthalt eines Parcels im betrachteten Kontrollvolumen während eines Zeitschrittes  $\Delta t$ . Hält sich ein Parcel während des gesamten Zeitschrittes  $\Delta t$  im betrachteten Kontrollvolumen auf, so gilt  $f_s = 1$ . Entsprechend ist  $f_s < 1$ , wenn ein Parcel während des Zeitschrittes  $\Delta t$  das Kontrollvolumen betritt oder verlässt.

Die Komponenten der mittleren Partikelschwankungsgeschwindigkeit  $v'_i$  im betrachteten Kontrollvolumen berechnen sich entsprechend Gl. 5.3.

$$v'_i = \left( N_t^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} v_i^2 N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} - V_i^2 \right)^{1/2} \quad (5.3)$$

Der mittlere Zeitschritt eines Partikels in einem bestimmten Kontrollvolumen errechnet sich analog mit:

$$\overline{\Delta t} = N_N^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.4)$$

$$\text{und} \quad N_N = \sum_{k=1}^{n_s} N_{P,k} f_{s,k} \quad (5.5)$$

Für die mittlere Verweilzeit eines Teilchens in einem bestimmten Kontrollvolumen (bezogen auf dessen Volumen  $V_{KV}$ ) erhält man:

$$t_{KV} = V_{KV}^{-1} \overline{\Delta t} n_{ps} n_{pe}^{-1} \quad (5.6)$$

Dabei steht  $n_{ps}$  für die Anzahl an Partikelereignissen im betrachteten Kontrollvolumen und  $n_{pe}$  entsprechend für die Anzahl an Partikeleintritten. Diese beiden Werte sind nicht zu verwechseln mit  $n_s$  und  $n_e$ , welche die Anzahl an Parcelereignissen bzw. -eintritten repräsentieren.

Der mittlere Partikelvolumenanteil im betrachteten Kontrollvolumen berechnet sich mit:

$$\varphi_P = V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \dot{m}_{P,k} \rho_{P,k}^{-1} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.7)$$

Diese Beziehung gilt aber nur für offene Systeme, da bei geschlossenen Systemen in der Regel keine Massenströme verfügbar sind. Analog zu Abschnitt 4.4 lässt sich der mittlere Partikelvolumenanteil im Falle von geschlossenen Systemen wie folgt berechnen:

$$\varphi_P = V_{KV}^{-1} \sum_{k=1}^{n_s} \frac{1}{6} \pi d_k^3 N_{P,k} t_{ref}^{-1} \Delta t_k f_{s,k} \quad (5.8)$$

### 5.2.5 Abschätzung des statistischen Fehlers

Für die Beurteilung der Güte der mit den Gleichungen 5.1–5.8 errechneten Mittelwerte kommt die mathematische Statistik zum Einsatz. Dabei wird basierend auf Kenntnissen über gewisse Eigenschaften einer Teilmenge (diese ergibt sich im vorliegenden Fall durch die Berechnung von repräsentativen Teilchen) auf die entsprechenden Eigenschaften der Gesamtmenge bzw. Grundgesamtheit (welche alle Teilchen umfasst) geschlossen. Das interessierende Merkmal der Grundgesamtheit kann mathematisch durch eine Zufallsgröße  $X$  mit einer bestimmten Verteilung  $F(X)$  modelliert werden. Dabei ist im quantitativen Fall die Zufallsgröße das Merkmal selbst.

Eine durchgeführte Lagrangesche Berechnung der dispersen Phase kann somit als eine Realisierung einer mathematischen Stichprobe eines bestimmten Umfangs betrachtet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Entnahme bzw. Wahl der einzelnen Elemente der Stichprobe zufällig und mathematisch unabhängig voneinander<sup>17</sup> aus der Grundgesamtheit erfolgt. Aus dieser Realisierung lässt sich nun das empirische Mittel  $\bar{x}$  und die empirische Varianz  $s_x^2$  der Stichprobe  $(x_1, \dots, x_n)$  berechnen. Bei einem Stichprobenumfang von  $n$  gilt somit:

$$\bar{x} = n^{-1} \sum_{k=1}^n x_k \quad \text{und} \quad s_x^2 = (n-1)^{-1} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2 \quad (5.9)$$

Die empirischen Werte sind also Schätzwerte für den Erwartungswert  $\mu_x$  und die Varianz  $\sigma_x^2$  der Grundgesamtheit und gleichen sich mit zunehmendem Stichprobenumfang  $n$  diesen asymptotisch an.

Bei wiederholter Realisierung und Berechnung von  $\bar{x}$  und  $s_x^2$  kann man die Streuung der empirischen Mittelwerte mit Gl. 5.10 abschätzen.

$$s_{\bar{x}}^2 = s_x^2 n^{-1} \quad (5.10)$$

Lässt sich für  $X$  eine Normalverteilung nach  $N(\bar{x}, s_x)$  annehmen, dann gilt für die Verteilung von  $\bar{x}$  entsprechend  $N(\bar{x}, s_x n^{-1/2})$  und für die Stichprobenfunktion  $Z_n = (\bar{x} - \mu_x) n^{1/2} \sigma_x^{-1}$  gilt  $N(0, 1)$ . Bei großen Stichproben<sup>18</sup> genügt die Kenntnis der asymptotischen Grenzverteilung von  $Z_n$  für  $n \rightarrow \infty$ , d.h. die Streuung  $\sigma_x$  lässt sich mit guter Näherung durch die empirische Streuung  $s_x$  ersetzen. Damit gilt für die Stichprobenfunktion und deren Verteilung:

$$Z_n = (\bar{x} - \mu_x) s_x^{-1} n^{1/2} \quad (5.11)$$

<sup>17</sup>Entlang einer Parcel-Bahn innerhalb eines Kontrollvolumens kann in der Regel keine statistische Unabhängigkeit angenommen werden. Statistisch unabhängige Ereignisse liegen also primär bei unterschiedlichen repräsentativen Teilchen vor. Dies gilt besonders bei relativ kleinen Kontrollvolumina. Bei sehr großen Kontrollvolumina sind aber durchaus auch entlang einer Parcel-Bahn (aufgrund der relativ langen Weglänge) unkorrelierte Ereignisse möglich. Im vorliegenden Fall entspricht der Stichprobenumfang  $n$  also weniger der Anzahl an Parcelereignissen im betrachteten Kontrollvolumen als vielmehr der Anzahl an Parceleintritten.

<sup>18</sup>Ab welchem Wert  $n$  als groß zu bezeichnen ist, kann leider nicht allgemein festgelegt werden, da der asymptotische Verlauf abhängig von der gültigen Verteilungsfunktion ist. Im Falle einer Normalverteilung ist  $n > 30$  bereits hinreichend groß.



$$\Phi(z) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^z \exp(-\frac{1}{2}z^2) dz \quad (5.12)$$

Für die Wahrscheinlichkeit, dass sich  $Z_n$  im Konfidenzintervall (oder Vertrauensintervall bzw. Toleranzbereich) von  $-z_\alpha$  bis  $z_\alpha$  befindet gilt also:

$$P(|Z_n| < z_\alpha) = \Phi(z_\alpha) - \Phi(-z_\alpha) = 2\Phi(z_\alpha) - 1 = P_\varepsilon = 1 - P_\alpha \quad (5.13)$$

$P_\varepsilon$  ist also die statistische Sicherheit und  $P_\alpha$  die Irrtumswahrscheinlichkeit. Durch die Vorgabe der erforderlichen statistischen Sicherheit (diese wird in der Praxis z.B. umso höher gewählt, je folgenreicher ein Irrtum bei der Ermittlung eines Merkmals der Grundgesamtheit ist) bzw. der Irrtumswahrscheinlichkeit lässt sich mit Hilfe von Tabellenwerken (z.B. Bronstein & Semendjajew [34] oder Strom [312])  $z_\alpha$  bestimmen. Die in der Praxis wichtigsten  $P_\varepsilon$ - $P_\alpha$ - $\Phi(z_\alpha)$ - $z_\alpha$ -Beziehungen sind in Tab. 5.1 zusammengefasst.

$P_\varepsilon$	$P_\alpha$	$\Phi(z_\alpha)$	$z_\alpha$
0.800	0.200	0.9000	1.282
0.900	0.100	0.9500	1.645
0.950	0.050	0.9750	1.960
0.990	0.010	0.9950	2.576
0.999	0.001	0.9995	3.291

Tabelle 5.1: Praxisrelevante  $P_\varepsilon$ - $P_\alpha$ - $\Phi(z_\alpha)$ - $z_\alpha$ -Beziehungen

Damit resultiert bei einer bestimmten Irrtumswahrscheinlichkeit der Vertrauensintervall für  $Z_n$  und damit ein Maß für den möglichen Fehler des berechneten Mittelwertes in Abhängigkeit von der empirischen Varianz und dem Stichprobenumfang. Mit einer statistischen Sicherheit von  $P_\varepsilon$  liegt also der tatsächliche Mittelwert der Grundgesamtheit im Bereich von  $\bar{x} - z_\alpha s_x n^{-1/2}$  bis  $\bar{x} + z_\alpha s_x n^{-1/2}$ . Entsprechend lässt sich auch ein relativer Fehler  $\varepsilon_{rel}$  definieren, der dann zusätzlich noch vom empirischen Mittel abhängt. Der relative Fehler sinkt also mit  $n^{-1/2}$ , d.h. für eine Halbierung von  $\varepsilon_{rel}$  muss  $n$  vervierfacht werden.

$$\varepsilon_{rel} = |\bar{x} - \mu_x| |\bar{x}|^{-1} = z_\alpha s_x |\bar{x}|^{-1} n^{-1/2} \quad (5.14)$$

Die bei den Ableitungen getroffene Annahme, dass die Zufallsgröße  $X$  einer Normalverteilung folgt, wird im Allgemeinen als erfüllt betrachtet, da nach dem zentralen Grenzwertsatz der Statistik für die Mittelwerte bei großer Stichprobenzahl auch dann eine Normalverteilung vorliegt, wenn die Zufallsvariable in der Grundgesamtheit nicht einer solchen folgt. Zu bemerken ist ferner, dass für die Verteilung der Stichprobenfunktion nicht a priori eine Normalverteilung angenommen werden kann. Tatsächlich sind die Ableitungen allgemeiner mit der  $t$ -Verteilung vorzunehmen. Bei großen Proben, welche bei den vorliegenden Untersuchungen in aller Regel

vorliegen, lässt sich die  $t$ -Verteilung allerdings durch die standardisierte Normalverteilung approximieren. Ist der Probenumfang aber kleiner als  $n = 30$ , dann ist diese Approximation nicht zulässig und es muss die  $t$ -Verteilung verwendet werden.

Die aufgeführten Zusammenhänge sind z.B. bei Beitz & Grote [19] oder Schubert et al. [285] in komprimierter Form beschrieben. Eine ausführlichere und umfassendere Zusammenstellung findet man z.B. bei Strom [312] und Bronstein & Semendjajew [34]. Es ist zu erwähnen, dass Kohnen [157] analoge Überlegungen auch bei seinen Untersuchungen zum Konvergenzverhalten von gekoppelten Zweiphasenströmungen durchgeführt hat.

### 5.2.6 Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an repräsentativen Teilchen

Die Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an repräsentativen Teilchen gestaltet sich aufgrund der in Abschnitt 5.2.5 zusammengefassten Ableitungen schwierig. Mit Hilfe von Gl. 5.14 lässt sich zwar für gegebene statistische Sicherheit und maximal zulässigem relativen Fehler eine Abschätzung für die mindestens benötigte Anzahl an Parcels ableiten (Gl. 5.15), aber es wird schnell klar, dass diese Beziehung nur für relativ homogene Strömungszustände Sinn macht. Da die Mindestanzahl an Parcels sowohl vom ermittelten Mittelwert als auch von der Varianz in den einzelnen Kontrollvolumen abhängt, ist eine globale Aussage nur bei sehr gleichmäßiger Strömung möglich.

$$n_{min} = \varepsilon_{rel}^2 z_{\alpha}^{-2} s_x^{-2} \bar{x}^2 \quad (5.15)$$

Für komplexere Verhältnisse kann die Beziehung nur als grobe Abschätzung dienen, da die Unterschiede zwischen den einzelnen Kontrollvolumina sehr groß sein können und eine Betrachtung der ungünstigsten Kontrollvolumina zur Bestimmung eines globalen Wertes für die Mindestanzahl an unabhängigen Parcelereignissen je Kontrollvolumen nicht zielführend sein muss. Neben der Problematik der Ermittlung der ungünstigen Kontrollvolumina ist es gut vorstellbar, dass andere Kontrollvolumina von deutlich weniger Parcels durchströmt werden und somit aufgrund der ermittelten Mindestanzahl  $n_{min}$  die Anzahl an Partikeln pro Parcel reduziert werden muss um der Bedingung zu genügen. Dies hat natürlich eine Erhöhung der Berechnungszeit zur Folge, welche unter Umständen aus statistischen Gründen gar nicht nötig sein muss, da z.B. in diesen Kontrollvolumina die geforderte Genauigkeit bereits mit weniger Parcelereignissen realisiert werden könnte.

Ein anderer Weg zur Ermittlung einer ausreichenden Anzahl an Parcels ist die Betrachtung der Änderung von integralen Werten der Zweiphasenströmung bei einer Variation der Anzahl an Partikeln pro Parcel  $N_P$ . Bei einer stetigen Erniedrigung von  $N_P$  nähert sich der betrachtete integrale Wert aus statistischen Gründen einem Grenzwert an, dem realen integralen Wert. Eine Bewertung der Güte der Berechnung ist dann allerdings nur durch die Variation von  $N_P$  möglich. Bei der Berechnung

von vielen Parametervariationen (innerhalb eines nicht zu großen Variationsbereiches) reicht es in der Regel aber eine Bewertung der Berechnungsgüte für einen Referenzfall durchzuführen.

Die Wahl des integralen Bewertungsmaßes hängt stark von der zu untersuchenden Strömung ab. Eine allgemeine Empfehlung ist somit nicht möglich. An dieser Stelle sollen aber zwei allgemeine Maße zur Vermischung der Phasen aufgeführt werden, nämlich die Intensität und das lineare Längenmaß der Segregation.

Die Intensität der Segregation  $I_S$  ist ein Maß für die Gleichverteilung einer Mischung im gesamten betrachteten Bereich und wird nach Danckwerts [58] aus den lokalen Volumenanteilen der dispersen Phase  $\varphi_P$  wie folgt berechnet:

$$I_S = \frac{s_{\varphi_P}^2}{\langle \varphi_P \rangle (1 - \langle \varphi_P \rangle)} = \frac{\langle \varphi_P^2 \rangle - \langle \varphi_P \rangle^2}{\langle \varphi_P \rangle (1 - \langle \varphi_P \rangle)} \quad (5.16)$$

Dabei steht  $\langle \dots \rangle$  für die räumliche Mittelung über das gesamte Strömungsgebiet. Für vollständige Segregation, d.h. vollständige Entmischung, gilt dann  $I_S = 1$  und bei einer homogenen Verteilung ist  $I_S = 0$ . Da im Allgemeinen keine konstante Kontrollvolumengröße vorliegt, müssen die räumlichen Mittelungen volumengewichtet durchgeführt werden.

Das lineare Längenmaß der Segregation  $S_S$  ist ein Maß für die Größe von 'Konzentrationsballen', d.h. von lokalen Konzentrationserhöhungen, und wird nach Danckwerts [58] wie folgt bestimmt:

$$S_S = \int_0^\infty R(r) dr \approx \sum_{i=1}^{n_r} R(r_i) \Delta r_i \quad (5.17)$$

mit der Korrelationsfunktion

$$R(r = |\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|) = \overline{(\varphi_{P,A} - \langle \varphi_P \rangle)(\varphi_{P,B} - \langle \varphi_P \rangle)} s_{\varphi_P}^{-2} \quad (5.18)$$

und beliebigen Punkten  $A$  und  $B$ .

### 5.2.7 Parallelisierung

Für die Parallelisierung<sup>19</sup> sind zwei prinzipielle Ansätze einsetzbar. Dies ist zum einen das Verfahren der Gebietszerlegung (dieses Verfahren wurde von Wassen [342] und Frank [96] intensiv untersucht) und die Verteilung der einzelnen Teilchen auf die zur Verfügung stehenden Prozessoren (dieses Verfahren wird vor allem durch *FAU-LSTM* und *MLU-MVT* vorangetrieben).

<sup>19</sup>Bei der parallelen Bearbeitung werden in der Regel Supercomputer oder Cluster (häufig auf Basis von handelsüblichen PC-Komponenten) verwendet. Eine gute Übersicht zum Einsatz von Supercomputern sowie eine Diskussion der verschiedenen Architekturen findet sich z.B. bei Bartels et al. [16]. Aktuell werden Parallel-Vektorcomputer als optimale Lösung angesehen.

Bei der Gebietszerlegung wird jedem Prozessor ein Teil des Strömungsgebiets zugeteilt. Dabei wird in der Regel die Zerlegung, welche bereits für die Berechnung der fluiden Phase vorgenommen wurde übernommen. Die Unterteilung ist somit für die Berechnung der kontinuierlichen Phase optimiert, d.h. die Teilgebiete sind (bei homogener Prozessorleistung) etwa gleich groß bzgl. der Anzahl an Kontrollvolumen. Die abgebildete geometrische Größe bleibt dabei unberücksichtigt. Diese ist aber im Zusammenhang mit den lokalen Strömungsbedingungen von zentraler Bedeutung für die Verweilzeit der Teilchen der dispersen Phase in den einzelnen Teilgebieten. Da jeder Prozessor nur die Teilchen berechnen kann, welche sich in seinem Berechnungsgebiet befinden, resultiert somit bei unbedachter Gebietszerlegung eine erhebliche Ungleichverteilung der Prozessorlast. Diese wird noch umso extremer, je separierter die Phasen vorliegen. Die Effizienz der Parallelisierung hängt also sehr stark von der Strömung selbst und der Gebietszerlegung ab. Als Vorteile sind zu nennen, dass der Kommunikationsaufwand gering ist und die Implementierung relativ einfach zu realisieren ist.

Um die Nachteile dieser statischen Gebietszerlegung (*Static Domain Decomposition - SDD*) zu reduzieren kann man Verfahren zur dynamischen Gebietszerlegung (*Dynamic Domain Decomposition - DDD*) einsetzen. Dabei erfolgt die Aufteilung auf die Prozessoren wiederholt während der Berechnung in Abhängigkeit von der aktuellen Prozessorauslastung. Die daraus resultierende verbesserte Prozessorauslastung geht aber einher mit einem erhöhten Kommunikationsaufwand zwischen den Prozessoren und zusätzlichen Rechenoperationen für die sich wiederholende Gebietszerlegung. Die optimale Frequenz der Reorganisation der Zerlegung muss somit in Abhängigkeit von der untersuchten Strömung bestimmt werden. Es ist zu bemerken, dass bei der *SDD* bei  $N$  Partitionen neben den  $N$  Prozessen für die eigentliche Berechnung der Trajektorien (diese benötigen primär Rechenzeit) noch einmal  $N + 1$  Prozesse mit der optimalen Auslastung beschäftigt sind (diese sind weniger rechenintensiv, haben aber einen hohen Speicherbedarf). Bei aktuellen Rechnerarchitekturen ist häufig nur ein Prozess pro Prozessor erlaubt, so dass eine sehr ineffiziente Rechnerauslastung resultiert.

Die Konzentrationsverteilung im Strömungsgebiet hat den größten Einfluss auf die Effizienz der verschiedenen Verfahren. Da diese im Allgemeinen nicht a priori bekannt ist, lässt sich das optimale Verfahren vor Beginn der Simulation schwer vorhersagen. Eventuell lohnt eine für die disperse Phase optimierte Partitionierung. Bei stationären gekoppelten Problemen erfolgt die Annäherung an die tatsächliche Partikelverteilung aber iterativ, d.h. die optimale Partitionierung wird sich mit den Kopplungsiterationen ändern, so dass für eine optimale Effizienz das Gitter während der Berechnung angepasst werden müsste. Ähnlich verhält es sich bei der simultanen Berechnung aller Teilchen, welche inhärent instationär ist, so dass sich die Partikelverteilung während der Rechnung ständig ändern kann. In diesem Fall ist eine dynamische Umverteilung der Teilchen bei Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Kollisionen schwierig, da zu jedem Zeitpunkt auch Informationen zu den Nachbarpartikeln benötigt werden und somit die Gefahr eines sehr hohen Kommunikationsaufwands gegeben ist.

Die *SDD* bietet sich z.B. für umfangreiche Parameterstudien an, bei denen keine gravierenden Änderungen der Randbedingungen vorliegen, so dass einmalig eine optimale Partitionierung vorgenommen werden kann um eine maximale Effizienz zu erzielen. Aufgrund der Unabhängigkeit der *DDD* von den physikalischen Eigenschaften der Strömung sowie der iterativen Entwicklung der Partikelverteilung ist die *DDD* genereller einsetzbar, aber mit größerem Kommunikationsaufwand verbunden.

Eine Zusammenstellung der Verfahrensdetails sowie die vergleichende Anwendung auf zwei Testfälle (horizontale und vertikale Rohrströmung) wurde von Wassen [342] durchgeführt. Er berichtet von sehr guter Skalierbarkeit bei bis zu acht Prozessoren, darüber geht die Effizienz zurück. Ab etwa 64 Prozessoren ist keine weitere Beschleunigung der Berechnung zu erzielen.

Beschreitet man den zweiten prinzipiellen Weg und verteilt nicht Gebiete auf die Prozessoren, sondern Teilchen, so lässt sich eine optimale Skalierbarkeit erreichen, da keinerlei Kommunikation zwischen den Prozessoren nötig ist. Dies setzt allerdings voraus, dass für die Berechnung einer Teilchentrajektorie keine Informationen über die anderen Trajektorien benötigt werden. Eine simultane Berechnung mit einer deterministischen Behandlung von Partikel-Partikel-Kollisionen macht hier also keinen Sinn. Ferner muss jedem Prozessor das gesamte Strömungsfeld vorliegen, so dass die Größe des betrachteten Problems durch den Speicherausbau der einzelnen Prozessoren bzw. Knoten begrenzt wird. Durch die Nutzung von Shared-Memory-Systemen kann dieses Problem auch nur bedingt umgangen werden, da hier unter Umständen mit Engpässen beim Speicherzugriff zu rechnen ist.

In Hinblick auf Effizienz ist das Verfahren der Partikelverteilung immer im Vorteil, da die natürliche Unterteilung des Systems genutzt wird. Sofern die Randbedingungen es erlauben, sind mit diesem Verfahren also die schnellsten Berechnungen zu erzielen.

## 5.3 Phasenkopplung

Bei der Berücksichtigung der Rückwirkung der dispersen Phase auf die fluide Phase mit dem in Abschnitt 4.4 vorgestellten *Particle-Source-in-Cell*-Verfahren ist insbesondere bei kopplungsintensiven Strömungsproblemen (dies bedeutet normalerweise bei einem erhöhten Massenanteil der dispersen Phase, welcher eine verstärkte Modifikation der Fluidströmung hervorruft) mit Instabilitäten bei der numerischen Simulation zu rechnen. Zur Erlangung einer konvergenten Lösung bei der iterativen Berechnung von zwei- oder mehrphasigen Strömungen müssen die Partikelquellterme somit in aller Regel unterrelaxiert werden. Dies bedeutet, die bei der aktuellen Iteration  $i$  berechneten Quellterme werden mit Hilfe der Quellterme der vorherigen Iteration  $i - 1$  entsprechend Gl. 5.19 modifiziert.

$$S_{\phi,P}^{i(mod)} = f_{UR} S_{\phi,P}^i + (1 - f_{UR}) S_{\phi,P}^{i-1} \quad (5.19)$$

Damit lassen sich extreme Schwankungen aufgrund der sehr schlechten Kopplung zu Beginn der Iterationen dämpfen, wobei die Dämpfung umso stärker ausfällt,

je kleiner der Unterrelaxationsfaktor  $f_{UR}$  gewählt wird. Als weitere Konsequenz der Unterrelaxation erhöht sich die bis zur Konvergenz benötigte Anzahl an Iterationen, da die aktuellen Werte immer nur zu einem bestimmten Prozentsatz berücksichtigt werden. Die benötigte Stärke der Unterrelaxierung wurde bereits von Kohnen et al. [158][157] ausführlich diskutiert.

Der Volumeneffekt der dispersen Phase auf das Fluid wird bei den vorliegenden Berechnungen als vernachlässigbar angenommen. Bei kleinen bis moderaten Partikelkonzentrationen ist diese Annahme gut erfüllt, bei sehr hohen Konzentrationen ist aber mit einer reduzierten Genauigkeit zu rechnen.

Anmerkung zur Mischung von Eulerscher und Lagrangescher Betrachtungsweise:

Die Berechnung der fluiden Phase erfolgt in Eulerschen Koordinaten, d.h. die verschiedenen Fluideigenschaften (wie z.B. die Geschwindigkeit) liegen in Abhängigkeit vom Ort und der Zeit vor. Bei stationärer Betrachtung erfolgt eine Mittelung über die Zeit, so dass dann nur noch eine Ortsabhängigkeit vorliegt. Im Gegensatz dazu werden die Teilchen der dispersen Phase in Lagrangeschen Koordinaten instationär verfolgt, d.h. die Partikeleigenschaften (und dazu zählt hier auch der aktuelle Teilchenort) liegen als Funktion der Zeit vor. Eine Mittelung an bestimmten Orten kann daher nur als Ensemble-Mittelung erfolgen.

An der Schnittstelle zwischen den beiden Betrachtungsweisen, wie z.B. bei der Ermittlung und Berücksichtigung von Partikelquelltermen, ergibt sich dann das Problem, dass eine Verquickung der durch unterschiedliche Verfahren entstandenen Mittelwerte eigentlich nicht zulässig ist. Ein wichtiges Ergebnis der Ergodentheorie<sup>20</sup> besagt aber, dass bei kontinuierlichen Prozessen und unendlich vielen Realisationen in Lagrangeschen Koordinaten, d.h. bei der Betrachtung einer dispersen Phase die Berechnung von hinreichend vielen Teilchenbahnen, die Ensemble-Mittelwerte aus der Lagrangeschen Betrachtung mit den zeitlichen Mittelwerten aus der Eulerschen Betrachtung vergleichbar werden. Die Aussage der Ergodentheorie ist somit von zentraler Bedeutung für die Berechnung von Zweiphasenströmungen mit unterschiedlichen Betrachtungsweisen für die kontinuierliche und die disperse Phase. Generell wird in der vorliegenden Arbeit darauf geachtet bei der Ensemble-Mittelung hinreichend viele Trajektorien zu betrachten, so dass keine qualitative Unterscheidung zwischen der zeitlichen und der Ensemble-Mittelung vorgenommen werden muss.

## 5.4 Prinzipieller Programmablauf

Die aus verschiedenen Teilberechnungen bestehende Berechnung einer dispersen Zweiphasenströmung ist in Abb. 5.5 als schematischer Ablaufplan zusammengefasst.

Nach der Definition des betrachteten zweiphasigen Strömungsproblems steht als erster Schritt die Erstellung des Berechnungsgitters an. Dabei ist zunächst die Geome-

<sup>20</sup>Eine Widerlegung der Ergodentheorie gibt es bisher nicht (s. Bradshaw[30]).

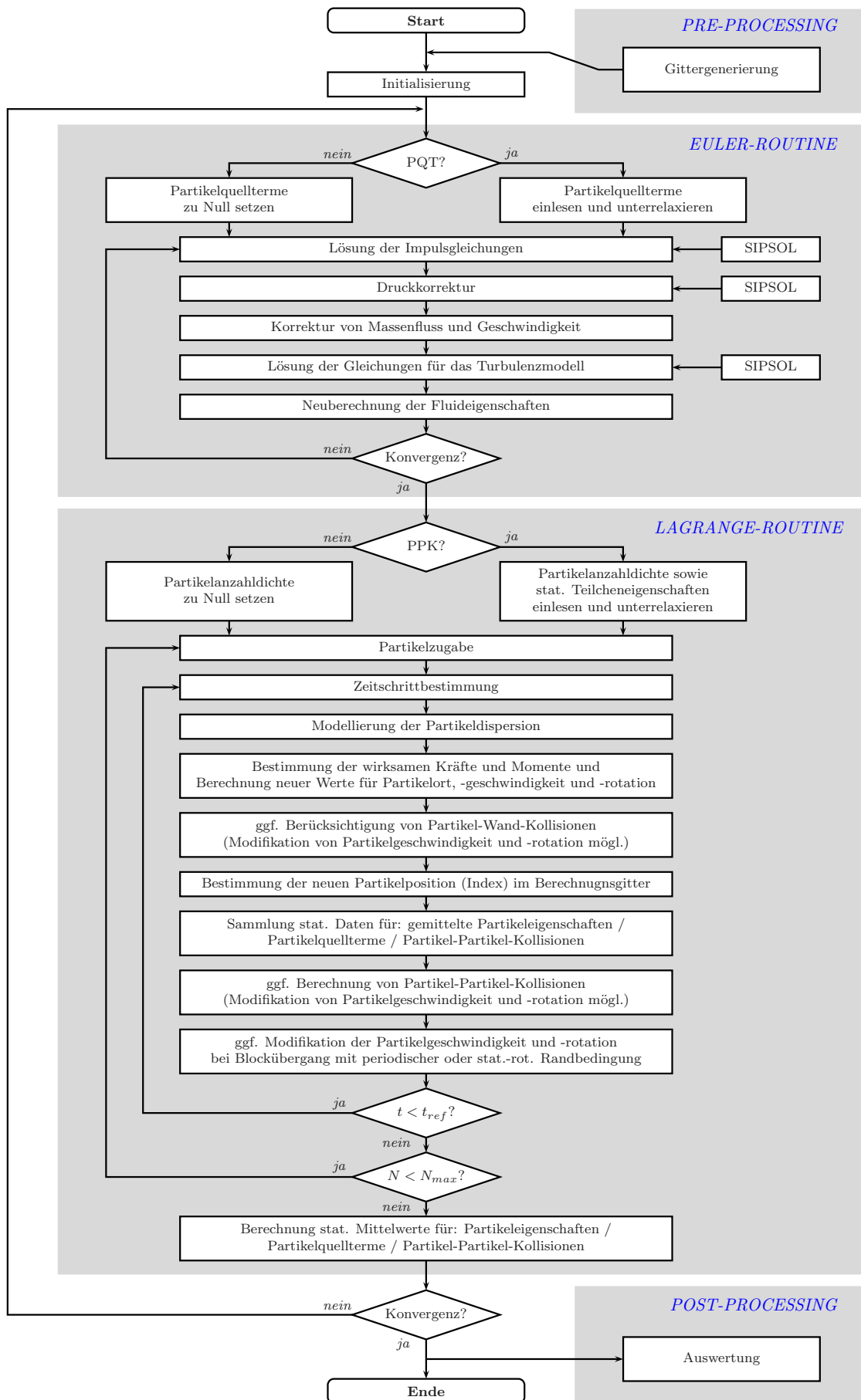


Abbildung 5.5: Programmablaufplan

trie, d.h. die Berandungen des Strömungsgebiets, zu modellieren, was üblicherweise mit Hilfe eines CAD-Programms erfolgt. Das somit definierte Strömungsgebiet wird dann im Anschluss unter Nutzung eines Vernetzungsprogramms in Kontrollvolumina unterteilt. Die sinnvolle Unterteilung des Strömungsgebiets ist dabei von zentraler Bedeutung für die Genauigkeit und Stabilität des gesamten weiteren Ablaufs, so dass ein erheblicher Aufwand bereits beim ersten Schritt unvermeidbar ist.

Es folgt die Initialisierung der Berechnung. Hier sind die Randbedingungen für die Strömungsberechnung, d.h. die Anfangsgeschwindigkeiten von Fluid und Teilchen am Einlass, die physikalischen Eigenschaften von Fluid und Teilchen, die Teilchengrößenverteilung usw., zu setzen.

Als erster Hauptblock der Berechnung schließt sich die Euler-Routine zur Berechnung der Fluidströmung an. Hier ist zunächst festzulegen, ob eine Berücksichtigung der Rückwirkung der dispersen Phase auf die fluide Phase über Partikelquellterme ( $PQT$ ) nötig ist oder nicht. Zu vernachlässigen sind die Quellterme  $S_{\phi,P}$  (s. Abschnitt 4.4) bei sehr geringer Konzentration an Partikeln, ansonsten sind die in der Lagrange-Routine ermittelten Quellterme einzulesen und in der Regel zu unterrelaxieren (s. Abschnitt 5.3). Zu Beginn der gekoppelten Berechnung liegen noch keine Informationen zu den Quelltermen vor, so dass sie zunächst zu Null gesetzt werden müssen. Nun kann das resultierende Gleichungssystem aufgesetzt und wie bereits in Abschnitt 5.1 beschrieben gelöst werden. Die Lösung der einzelnen Gleichungen erfolgt sequentiell mit einem *SIP*-Löser (*SIPSOL*), wobei zunächst die Impulsgleichungen gelöst werden und im Anschluss die Massenerhaltung über die Druckkorrektur berücksichtigt wird. Nach entsprechender Korrektur der Massenflüsse und der Geschwindigkeiten werden die Gleichungen für das Turbulenzmodell gelöst. Am Ende der Iterationsschleife werden die Fluideigenschaften unter Verwendung von Unterrelaxationsfaktoren neu gesetzt. Die iterative Lösung der Erhaltungsgleichungen erfolgt so lange, bis die Kopplung zwischen den Gleichungen hinreichend berücksichtigt und eine konvergierte Lösung des Systems erreicht ist.

Die Lagrange-Routine bildet den zweiten Hauptblock der Berechnung. Zu Beginn dieses Blocks muss festgelegt werden, ob Partikel-Partikel-Kollisionen (*PPK*) berücksichtigt werden sollen oder nicht. Auch hier ist die Teilchenkonzentration der entscheidende Parameter für eine Vernachlässigung oder Berücksichtigung (s. Abschnitt 4.5). Können die Kollisionen vernachlässigt werden, so lässt sich deren Modellierung durch Setzen der Partikelanzahldichte auf Null unterdrücken. Dürfen die Kollisionen nicht vernachlässigt werden, so müssen die bei der vorausgegangenen Iterationsschleife<sup>21</sup> in der Lagrange-Routine statistisch ermittelten Partikelanzahldichten sowie die entsprechenden gemittelten Eigenschaften der dispersen Phase in den einzelnen Kontrollvolumen gesetzt werden. Analog zu der Berücksichtigung der Partikelquellterme in der Euler-Routine wird auch hier zur Stabilisierung eine Unterrelaxierung verwendet. Beim ersten Aufruf der Lagrange-Routine liegen noch keine statistischen Werte der dispersen Phase vor, so dass Partikel-Partikel-Kollisionen

<sup>21</sup>Die mittleren lokalen Werte der dispersen Phase sind a priori nicht bekannt, so dass eine Iteration analog zu der Berücksichtigung der Partikelquellterme nötig ist.



erst ab dem zweiten Aufruf berücksichtigt werden können.

Nach der Partikelzugabe<sup>22</sup> erfolgt für jedes Parcel die Berechnung des maximal möglichen Zeitschritts unter Berücksichtigung der in Abschnitt 5.2.1 zusammengefassten Kriterien. Danach werden die aktuell auf die betrachteten Teilchen wirksamen Fluidkräfte bestimmt. Diese berechnen sich mit Hilfe der in Abschnitt 4.3 beschriebenen Modellierung für die Partikeldispersion. Basierend auf den vorliegenden fluiden Kräften und Momenten werden nun die während des betrachteten Zeitschritts resultierenden Änderungen der Teilcheneigenschaften (Partikelort, -geschwindigkeit und -rotation) berechnet. Durch die Änderung des Partikelortes besteht die Möglichkeit eines Wandkontakts, welcher dann durch Modifikation der Teilcheneigenschaften entsprechend Abschnitt 4.6 zu berücksichtigen ist. Aufgrund der Positionsänderung der Teilchen ist zu prüfen, ob sich die Positionen auch bzgl. des Berechnungsgitters verändert haben. Gegebenenfalls sind die Positionsindizes der Teilchen zu korrigieren (s. Abschnitt 5.2). Da sowohl für die Partikelquellterme als auch bei den Partikel-Partikel-Kollisionen statistische Informationen zu den Partikeleigenschaften in den einzelnen Kontrollvolumen benötigt werden, erfolgt für jeden Zeitschritt eine entsprechende Sammlung (Summation) mit Hinblick auf eine spätere Mittelung (s. Abschnitt 4.4 und 5.2.4). Natürlich sind diese gemittelten Daten auch für eine spätere Auswertung von großem Nutzen.

Neben den bereits erwähnten Partikel-Wand-Kollisionen können die Teilcheneigenschaften auch durch Partikel-Partikel-Wechselwirkungen modifiziert werden. Die dadurch resultierenden Änderungen berechnen sich mit Hilfe der in Abschnitt 4.6 beschriebenen Modellierung. Die Position dieser Modifikationen im Programmablauf erklärt sich dadurch, dass die Partikel-Partikel-Kollisionen zeitlich dem Ende des jeweiligen Zeitschritts zugeordnet sind, und somit erst für den nächsten Zeitschritt wirksam werden.

Schließlich ist zu prüfen, ob Transformationen von Geschwindigkeit und Rotation der Partikel aufgrund von Blockübergängen mit periodischer Randbedingung bzw. von Übergängen zwischen stationären und rotierenden Bereichen nötig sind, um diese gegebenenfalls durchzuführen (s. Abschnitt 5.2.2).

Für jedes Parcel wird nun geprüft, ob die akkumulierte Flugzeit  $t$  die definierte Referenzzeit  $t_{ref}$  bereits überschritten hat. Ist dies der Fall, so gilt die betrachtete Trajektorie an dieser Stelle für beendet<sup>23</sup>. Ansonsten sind für die Trajektorienberechnung weitere Zeitschritte nötig, so dass im Ablaufplan eine entsprechende Schleife zur Zeitschrittbestimmung vorliegt.

<sup>22</sup>Die Anzahl an gleichzeitig injizierten Teilchen ist abhängig von der Anzahl an zugelassenen parallelen Trajektorienberechnungen. In der Praxis hat sich bei den für diese Arbeit verfügbaren Rechnerarchitekturen eine Anzahl von etwa 300 als am effektivsten bzgl. Rechenzeit herauskristallisiert. Es ist allerdings zu bemerken, dass die optimale Anzahl an parallelen Trajektorien je nach verwendeter Rechnerarchitektur stark schwanken kann und somit der angeführte Wert nur als Richtwert zu sehen ist.

<sup>23</sup>Bei offenen Systemen (wie z.B. Rohrströmungen - s. Abschnitt 6) greift dieses Kriterium nicht. Hier ist die Bedingung für das Ende der Trajektorienbetrachtung daher gleichbedeutend mit dem Verlassen des Berechnungsgebietes.

Ist eine Trajektorie abgeschlossen, so ist zu prüfen, ob bereits die geforderte Anzahl an Trajektorien  $N_{max}$  berechnet wurde oder nicht. Bei einer Trajektorienanzahl  $N < N_{max}$  erfolgt eine weitere Partikelzugabe, während für den Fall  $N = N_{max}$  keine weiteren Parcels zugeben werden und die gegebenenfalls noch nicht beendeten weiteren parallelen Trajektorien nur noch vervollständigt werden.

Im Anschluss wird der Lagrange-Block mit der Berechnung der statistischen Mittelwerte und Fluktuationen in den einzelnen Kontrollvolumen (s. Abschnitt 4.4 und 5.2.4) abgeschlossen.

Liegt nun bereits eine konvergente Lösung der Phasenkopplung vor (s. Abschnitt 6.3.2 und 7.14), so ist die Berechnung beendet und es schließt sich die Analyse der Ergebnisse an. Ansonsten ist wenigstens eine weitere Kopplungsiteration nötig, bei der dann die verbesserten Randbedingungen (die Partikelquellterme und die mittleren Teilcheneiwerdengenschaften zur Berechnung der Partikel-Partikel-Kollisionen unter Berücksichtigung geeigneter Unterrelaxierungen) aus der aktuellen Iteration zum Tragen kommen.

Es ist zu bemerken, dass es für einige Anwendungen durchaus Sinn macht, zusätzliche innere Iterationen für den Lagrange-Block durchzuführen, um zunächst die mittleren Teilcheneigenschaften zur Berechnung der Partikel-Partikel-Kollisionen zu verbessern, bevor eine erneute Berechnung des Fluids erfolgt (s. Abschnitt 7.14).