

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Mechanische Verfahrenstechnik

**Thermochemisch resistentes Cordierit für Dieselpartikelfilter  
(CorTRePa)  
Abschlussbericht**

Förderkennzeichen: 03X3502A

Bewilligungszeitraum: 01.04.2006 - 31.03.2009

Berichtszeitraum: 01.04.2006 - 31.03.2009

Projektleiter: Christine Engel, Robert Bosch GmbH, Abt. CR/ARM2  
Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld, MLU, MVT

Hauptsächlich beteiligte

wissenschaftliche Bearbeiter: Mathias Dietzel

## Inhaltsverzeichnis

1	Kurze Darstellung .....	1
1.1	Aufgabenstellung.....	1
1.2	Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde.....	2
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens .....	3
1.3.1	Beiwertbestimmung der Rußagglomerate .....	4
1.3.2	Untersuchung von Rußschichten .....	6
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand .....	7
1.5	Verwendete Fachliteratur .....	8
1.6	Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	9
2	Darstellung des Projektverlaufs .....	10
2.1	Erzielte Ergebnisse.....	10
2.1.1	Agglomeratgenerierung und -charakterisierung .....	10
2.1.2	Erweiterungen des LBM-Strömungslösers .....	12
2.1.3	Bestimmung der Strömungsbeiwerte von Agglomeraten .....	14
2.1.4	Untersuchung von Agglomerattransport und -deposition .....	24
2.1.5	Zusammenfassung.....	28
2.2	Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse .....	29
2.3	Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen .....	30
2.4	Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse .....	30
2.4.1	Erfolgte Veröffentlichungen .....	30
2.4.2	Geplante Veröffentlichungen .....	30
3	Erfolgskontrollbericht siehe Anlage.....	31

# 1 Kurze Darstellung

## 1.1 Aufgabenstellung

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Entwicklung eines thermochemisch resistenten Cordierit-Sintermaterials zur Anwendung in Dieselpartikelfiltern von Pkw. Entsprechende Substrate sollen zukünftige, über Euro V hinausgehende Abgasnormen erfüllen und insbesondere kostenintensivere Alternativen basierend auf Siliziumcarbid oder Sintermetallen ersetzen. Die Problematik der Anwendung von Cordierit als Abgasfilter ergibt sich aus seinem niedrigen Schmelzpunkt sowie der Neigung zu schädigenden Reaktionen mit Ölaschen bei hohen Temperaturen. Dies kann vor allem bei der Filterregeneration mittels Rußabbrand zu einer erheblichen Beeinträchtigung der Funktionsfähigkeit bis hin zur Zerstörung des Filtersubstrats führen.

Aufgabe der am Arbeitspaket *Modellierung und Simulation* beteiligten Arbeitsgruppen ist zusammenfassend die Untersuchung des Einflusses des Materialdesigns auf die Filtereffizienz, wobei sowohl die Simulation der partikelbeladenen Strömung als auch der Rußpartikelabscheidung im hochporösen Sintermaterial erbracht werden soll. Am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik liegt hierbei der Schwerpunkt der Tätigkeiten in der Bereitstellung von Daten zum Transport- und Depositionsverhalten von Einzelagglomeraten. Mittels der Lattice Boltzmann Methode werden dreidimensionale Simulationen zur laminaren Agglomeratströmung sowie zum Rußschichtenwachstum durchgeführt, bei denen die Agglomeratstruktur vollständig aufgelöst wird. Ergebnis der Umströmungsberechnungen sind Widerstands-, Auftriebs- und Momentenbeiwert der Rußpartikel in Abhängigkeit der Partikelmorphologie und der Strömungsbedingungen. Dazu erfolgen Parameterstudien, bei denen unterschiedliche Agglomerat-Struktur-Typen generiert, morphologisch charakterisiert und ortsfest angeströmt werden. Die erhaltenen Korrelationen sollen im Weiteren als Basis der Lagrangeschen Modellierung des Agglomerattransports dienen. Diese kommt bei der Untersuchung von Partikeltransport und Partikelabscheidung in weniger hoch auflösenden Simulationen von Filtersegmenten zur Anwendung. Dabei können die Agglomerate bedingt durch die begrenzten Rechenkapazitäten nunmehr nur als volumenäquivalente sphärische Partikel betrachtet werden, deren Verhalten in der Strömung jedoch über die angepassten Widerstandsbeiwerte modelliert wird.

Neben der Beiwertbestimmung sollen mittels der hoch auflösenden Simulationen die Porosität und Permeabilität aufwachsender, dünner Rußschichten ermittelt werden. Die Ergebnisse dienen wiederum als Modellierungsansatz für die Lagrangeschen Simulationen auf Substratebene, bei denen eine Zellbeladung bzw. Zellpermeabilität infolge von Partikelanlagerung ermittelt werden muss. Angestrebt ist eine indirekte Validierung der Modellbildung sowie der Simulationsergebnisse mittels experimenteller Daten von Berußungsversuchen.

## **1.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde**

Das Institut Mechanische Verfahrenstechnik beschäftigt sich in Lehre und Forschung sowohl mit klassischen verfahrenstechnischen Grundlagen als auch mit Spezialgebieten der Mehrphasenströmung und Partikeltechnologie. Ziel ist zumeist eine Auslegung bzw. Optimierung von technischen Verfahren oder Apparaten, die mit Hilfe der Analyse der relevanten physikalischen Teilprozesse, einer darauf fußenden Modellentwicklung und letztlich computergestützten Berechnung erbracht werden soll. Einen Schwerpunkt bildet hierbei die numerische Simulation von Mehrphasenströmungen, bei denen die Untersuchung der Mikroprozesse auf Partikelebene im Fokus steht. Etablierte numerische Methoden stellen hierbei das Euler/Lagrange-Verfahren und die Lattice Boltzmann Methode dar, die in Form entsprechender Software am Institut verfügbar und modifizierbar sind.

Die theoretisch-numerischen Methoden werden durch experimentelle Arbeiten ergänzt, welche am Institut selbst beispielsweise mittels eigener Versuchsanlagen und LDA/PDA-gestützter oder bildgebender Verfahren durchgeführt werden. Hinzu kommen projektgebundene Kooperationen mit Industriepartnern, deren experimentelle Daten eine Grundlage für das Prozessverständnis sowie zur Validierung der numerischen Modelle und Berechnungen bilden.

Im Bereich Mehrphasenströmung sind hinsichtlich ihrer Projektrelevanz vor allem die feststoffpartikelbeladenen Gasströmungen zu nennen, bei denen die Modellierung der Wechselwirkung von Partikeln mit turbulenten Strömungen, von Partikelstößen und der Agglomeration vorangetrieben wird. Praktische Erfahrungen sind insbesondere auf dem Gebiet der industriellen Gasreinigung vorhanden, bei der die Untersuchung und Auslegung von Elektroabscheidern und Gaszyklonen unterstützt wird.

### 1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Die Arbeiten des Instituts für Mechanische Verfahrenstechnik (MVT) im gemeinsamen Verbundvorhaben konzentrieren sich auf das Arbeitspaket 5 (AP5) *Modellierung und Simulation*, an dem das Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) und die Robert Bosch GmbH, Abteilung CR/ARH ebenfalls beteiligt sind. Im AP5 soll das gesinterte Filtermaterial virtuell nachgebildet und anschließend durchströmt werden. Aufbauend auf den Strömungssimulationen sollen der Partikeltransport und die Abscheidendynamik innerhalb des virtuellen Materials untersucht werden, um daraus Schlussfolgerungen für das reale Materialdesign ziehen zu können.

Die Simulation der partikelbeladenen Strömung in der gesamten Filtereinheit ist aufgrund der begrenzten Rechenkapazitäten zum jetzigen Zeitpunkt nicht möglich. Daher ist es notwendig, mit Hilfe eines Mehrskalensatzes das Gesamtproblem zu lösen. Die obere, größte Skala bildet dabei ein Filtersegment, dessen Poren mit einer Abmessung im Mikrometerbereich aufgelöst werden. Bei dieser Auflösung können die in der Strömung transportierten Rußagglomerate, welche in der Realität komplexe, nicht-sphärische Geometrien aufweisen, in der Simulation nur durch sphärische Partikel eines geeigneten Äquivalentdurchmessers approximiert werden. Das Partikelverhalten wird dabei mittels Lagrangeschem Ansatz modelliert, bei dem die Bewegungsgleichungen numerisch integriert werden. Neben den aus der Strömung resultierenden Kräften soll auch die Brownsche Bewegung der Partikel berücksichtigt werden. Zudem soll die Rußabscheidung an der Filteroberfläche sowie in den Poren räumlich und zeitlich aufgelöst werden. Dazu wird über ein entsprechendes Depositionsmodell eine veränderliche Substratgeometrie bezüglich der Phasengrenzfläche realisiert. Wandnahe Gitterzellen sollen infolge Partikelanlagerung mit einer entsprechend reduzierten Permeabilität beaufschlagt werden, um die anlagerungsbedingte Versperrung und damit die Rückwirkung der aufwachsenden Rußschichten auf die Gasphase zu modellieren. Die Berechnung der Gasphasenströmung erfolgt mit der Lattice Boltzmann Methode, die sich insbesondere bei den vorliegenden komplexen Strömungsberandungen eignet. Ziel der grobskaligen Lagrangeschen Simulationen sind Empfehlungen hinsichtlich des Gefügedesigns der Sintergeometrie, welche sowohl hinsichtlich eines möglichst geringen Anfangsdruckverlusts als auch bezüglich hoher Filtereffizienz optimiert werden soll.

Die Modellierung des Partikeltransports sowie des Anlagerungsmodells auf der groben Skala soll durch feinskalige Lattice Boltzmann Simulationen unterstützt werden, die im Wesentlichen am Institut MVT erfolgen. Diese direkten numerischen Simulationen auf der Sub-Mikronen-Ebene sollen die Agglomeratstruktur vollständig bis auf die Primärpartikelskala auflösen. In einem ersten Schritt erfolgen numerische Simulationen der Agglomeratströmung, deren Ziel die Ermittlung von Widerstandsbeiwerten ist. Diese sollen für verschiedene Agglomeratgeometrien und bezogen auf Strukturparameter zu Korrelationen zusammengefasst werden, um damit die grobskaligen Lagrangeschen Simulationen zu parametrisieren und den dort betrachteten sphärischen Partikeln ein realistisches Transportverhalten zu verleihen. Des Weiteren sollen direkte Simulationen zum Aufwachsen von Rußschichten in geeigneten Modellgeometrien erfolgen, um Modellparameter für die Rußporosität und -permeabilität im Lagrangeschen Ansatz ermitteln zu können. Die Vorgehensweise bei der Erarbeitung der hoch aufgelösten direkten Simulationen wird im Folgenden näher beschrieben.

### 1.3.1 Beiwertbestimmung der Rußagglomerate

Zu Projektbeginn war am Institut MVT ein nicht-kommerzieller Strömungslöser auf Basis der Lattice Boltzmann Methode vorhanden, welcher im Projektverlauf hinsichtlich der geänderten Anforderungen erweitert werden musste. Eine zentrale Erweiterung stellt das eigens entwickelte Agglomerat-Modul dar, das zur Generierung, Charakterisierung und Umströmung der virtuellen Rußpartikel genutzt wird. Die Strukturgenerierung erfolgt mittels stochastischer Funktionen, die unter Vorgabe von Primärpartikelzahl und Partikelgrößenverteilung Agglomeratgeometrien unterschiedlicher Strukturtypen erzeugen. Zur Begrenzung der Vielzahl an möglichen Agglomeratstrukturen wurden diese im Weiteren auf einen kettigen und einen kompakten Strukturgrundtyp beschränkt. Deren Varianten unterscheiden sich bezüglich der genannten Primärpartikeleigenschaften und der konkreten, zufallsbedingten Morphologie. Da die Bewertung der Transporteigenschaften der virtuellen Rußpartikel eine Charakterisierung ihrer Struktur erforderlich macht, wurden von allen untersuchten Agglomeratvarianten geometrische Strukturparameter bestimmt. Neben unterschiedlichen Äquivalentdurchmessern werden beispielsweise die fraktale Dimension und die Porosität basierend auf der konvexen Hülle der Agglomerate ermittelt. Die Strukturanalyse ist überdies Voraussetzung für die Einstellung der Strömungsbedingungen anhand der Reynolds-Zahl, für deren Berechnung ein Äquivalentdurchmesser als feste Referenzgröße herangezogen werden muss. Eine

weitere Voraussetzung für die numerische Simulation der Agglomeratströmung ist die Überführung der analytisch generierten Partikelmorphologie in ein gitterbasiertes, ruhendes Hindernisobjekt, welches hinreichend fein diskretisiert ist. Die unmittelbare Agglomeratumgebung wird mit feinen Gitterzellen aufgelöst. Der partikelferne Strömungsbereich hingegen wird mit einer groben Gitterweite versehen. Mit Hilfe dieses Mehrgitterverfahrens können sowohl die Rechenzeit als auch der Speicherbedarf im Vergleich zu einer äquidistanten Methode drastisch gesenkt werden. Für die Bestimmung der aerodynamischen Beiwerte muss das virtuelle Agglomerat nicht in der Strömung bewegt werden. Eine ortsfeste Anströmung mit einem definierten Strömungsprofil ist dafür ausreichend. Die Berechnung der Beiwerte erfolgt bei auskonvergierter Strömungslösung aus den am Partikel angreifenden Fluidkräften. Die Ermittlung einer resultierenden Gesamtkraft und eines Gesamtdrehmoments aus den Knoteneinzelkräften entlang der Partikeloberfläche wurde in den Strömungslöser integriert. Zudem wurde eine spezielle Randbedingung zur Behandlung gekrümmter Oberflächen implementiert, um die Genauigkeit der Hindernisdefinition zu erhöhen und den Einfluss der Agglomeratlage im numerischen Gitter zu minimieren.

Aufgrund der Abhängigkeit der aerodynamischen Beiwerte von der Agglomeratstruktur und den Strömungsbedingungen wurden entsprechende Parameterstudien durchgeführt. Dabei wurde jeweils der Vergleich zwischen den zwei Strukturgrundtypen, kettig und kompakt, angestrebt. Die Primärpartikelzahl wurde im Bereich von 20 bis 50 variiert, zugleich jedoch die geometrische Referenzgröße, beispielsweise der volumen- oder ein flächenäquivalenter Durchmesser, innerhalb einer Parameterstudie konstant gehalten. Somit wurden die Vergleichbarkeit der Beiwerte und überdies die Einstellung ähnlicher Strömungsbedingungen bei identischer Anströmgeschwindigkeit sichergestellt. Da bei den im Dieselfilter vorherrschenden Gasgeschwindigkeiten von einem laminaren Strömungsregime ausgegangen werden kann, wurden die Agglomerate ortsfest bei einer Reynolds-Zahl von 0,3 angeströmt. Zur Evaluierung der Eignung der gewählten Strukturbezugsgröße wurden verschiedene Teilstudien durchgeführt. Dabei musste die Anströmgeschwindigkeit zur Einstellung der Ziel-Reynolds-Zahl angepasst werden. Im Rahmen der Parameterstudien wurden neben Widerstands-, Auftriebs- und Momentenbeiwert auch die geometrischen Strukturparameter ermittelt, um eine Datenbasis für die gewünschten Korrelationen zwischen Agglomeratmorphologie und Transportverhalten ableiten zu können. Die erhaltenen Korrelationen sollten dann zur

Parametrisierung der grobskaligen Lagrangeschen Simulationen an die Projektpartner weitergegeben werden.

### 1.3.2 Untersuchung von Rußschichten

Die numerischen Untersuchungen zur Rußdeposition machen es erforderlich, im Strömungsgebiet frei bewegliche Agglomerate zu modellieren. Dazu müssen die Bewegungsgleichungen der Translation und Rotation für jedes Agglomerat zeitabhängig gelöst werden. Der translatorische Anteil wird mittels des zweiten Newtonschen Gesetzes behandelt, indem aus den angreifenden Fluidkräften eine resultierende Partikelgeschwindigkeit und per Integration ein neuer Partikelort ermittelt wird. Die Berechnung der Winkelgeschwindigkeit bzw. des Lagewinkels erfolgt iterativ mit Hilfe der Eulerschen Bewegungsgleichungen für die Rotation, wobei die resultierende Agglomeratdrehung über eine Drehmatrix gelöst wird. Da es sich bei den Rußagglomeraten im Allgemeinen um komplexe, nicht-axialsymmetrische Partikel handelt, ist eine aufwendige numerische Ermittlung des Trägheitstensors sowie der Hauptträgheitsmomente notwendig. Neben der physikalischen Beschreibung der Partikelbewegung muss diese ebenfalls auf dem numerischen Gitter realisiert werden, indem eine Umschaltung der Gitterknoten von Status „fluid“ zu „fest“ und umgekehrt infolge von Partikelanwesenheit bzw. –abwesenheit implementiert wurde. Darüber hinaus musste eine Randbedingung für bewegte Hindernisobjekte umgesetzt werden, die sowohl einen Impulsübertrag auf das Fluid bewirkt als auch eine Hindernisverschiebung unterhalb der Gitterweite berücksichtigt.

Zusätzlich zur Umsetzung der Partikelbewegung sollte ein Depositionsmodell erarbeitet werden, welches die Simulation von aufwachsenden Rußschichten ermöglicht. Das Detektieren von Agglomeratkollisionen mit festen Wänden als auch mit bereits abgeschiedenen Agglomeraten wurde implementiert. Die Modellierung einer Agglomeratumlagerung während des Depositionsvorgangs konnte jedoch aufgrund der Vielzahl der möglichen simultanen Kontaktstellen zwischen den Primärpartikeln der beteiligten Agglomerate nicht fertig gestellt werden. Daher liegt zum Projektende ein vereinfachtes Depositionsmodell vor, welches die Partikelanlagerung bereits nach dem Etablieren der ersten Kontaktstelle als vollzogen betrachtet. Aufgrund des doch erheblichen und zu Projektbeginn unterschätzten Implementierungs- und Rechenaufwands konnten keine Parameterstudien zum Rußschichtenwachstum erarbeitet werden.

## 1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Die Lattice Boltzmann Methode stellt ein alternatives Verfahren zur Beschreibung Newtonscher Fluide dar. Während herkömmliche Modelle die auf der makroskopischen Ebene formulierten Erhaltungssätze lösen, beschreibt die Boltzmann-Gleichung das Verhalten von Fluiden auf mesoskopischer Ebene. Die Lattice-Boltzmann-Gleichung ist eine spezielle finite Differenzenform der Boltzmann-Gleichung, wobei neben Ort und Zeit auch der Geschwindigkeitsraum diskretisiert wird (He & Luo 1997). Zur Berechnung werden keine globalen linearen oder nicht-linearen Gleichungssysteme benötigt. Aus dem lokalen Charakter der Modellgleichungen ergeben sich Vorteile wie Einfachheit des Algorithmus sowie leichte und effiziente Umsetzbarkeit auf Hochleistungsrechnern (Zeiser 2008).

Die Anwendbarkeit des Lattice Boltzmann Verfahrens für die Simulation von Suspensionen wurde unter anderem von Ladd (1994), Aidun et al. (1998) und Qi (1999) anhand der Durchströmung von Kugelpackungen, der Sedimentation von Partikeln und der Rotation von Partikeln in Scherströmungen demonstriert. Sie erhielten eine sehr gute Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer numerischer Methoden, mit analytischen Ergebnissen und mit experimentellen Werten.

Weiterhin eignet sich die Lattice Boltzmann Methode sehr gut um komplexe Strukturen aufzulösen. Die Wechselwirkung von suspendierten Primärpartikeln und Agglomeraten mit der Strömung ergibt sich aus dem Impulstransfer bei der Kollision von Fluidelementen mit der Partikeloberfläche (Götz et al. 2008, Feng & Michaelides 2009). Um die Gesamtkraft und das Gesamtdrehmoment ermitteln zu können, müssen die über die gesamte Partikeloberfläche wirkenden Kräfte und Drehmomente aufsummiert werden. Wie Binder et al. 2006 und Dietzel et al. 2007 zeigten, ist es mit Hilfe dieser Methode möglich, Strömungsbeiwerte von hoch aufgelösten Agglomeratstrukturen numerisch zu ermitteln. Des Weiteren wurde der Einfluss von Scherkräften auf die Restrukturierung und den Zerfall von aggregierten Primärpartikeln untersucht (Inamuro & Ii 2006). Becker et al. (2007) und Takeuchi et al. (2008) präsentierten kürzlich verschiedene Ansätze für die hoch aufgelöste Simulation von bewegten Primärpartikeln. In den dargelegten Methoden wurden sowohl interpartikuläre als auch hydrodynamische Partikelwechselwirkungen berücksichtigt.

## 1.5 Verwendete Fachliteratur

- [1] Crouse, B: *Lattice-Boltzmann Strömungssimulationen auf Baumdatenstrukturen*, Dissertation, Technische Universität München (2003)
- [2] Nelson, J. A., Crookes, R. J. and Simons, S.: *On obtaining the fractal dimension of a 3D cluster from its projection on a plane-application to smoke agglomerates*, Appl. Phys., 23, 465-468 (1990)
- [3] Hölzer, A.: *Bestimmung des Widerstands, Auftriebs und Drehmoments und Simulation der Bewegung nichtsphärischer Partikel in laminaren und turbulenten Strömungen mit dem Lattice-Boltzmann-Verfahren*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2007)
- [4] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., Krook, M.: *A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*, Physical Review, 94, 511-525 (1954)
- [5] Fidleris, V. and Whitmore, R. L.: *Experimental determination of the wall effect for spheres falling axially in cylindrical vessels*, British Journal of Applied Physics, Vol. 12, 490-494 (1961)
- [6] Guo, Z., Zheng, C. and Shi, B.: *An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method*, Physics of Fluids, Vol. 14, Number 6 (2002)
- [7] Hölzer, A. and Sommerfeld, M.: *Lattice Boltzmann simulations to determine drag, lift and torque acting on non-spherical particles*, Computers and Fluids 38, 572-589 (2008)
- [8] He, X. and Luo, L.-S.: *A priori derivation of the lattice Boltzmann equation*, Physical Review E, Vol. 55, 6333-6336 (1997)
- [9] Zeiser, T.: *Simulation und Analyse von durchströmten Kugelschüttungen in engen Rohren unter Verwendung von Hochleistungsrechnern*, Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen (2008)
- [10] Ladd, A. J. C.: *Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation, Part 2, Numerical results*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 271, 311-339 (1994)
- [11] Aidun, C. K., Lu, Y., Ding, E.-J.: *Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete Boltzmann equation*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 373, 287-311 (1998)
- [12] Qi, D.: *Lattice-Boltzmann simulations of particles in non-zero-Reynolds-number flows*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 385, 41-62 (1999)

- [13] Götz, J., Feichtinger, C., Iglberger, K., Donath, S. and Rüde, U.: *Large scale simulation of fluid structure interaction using Lattice Boltzmann methods and 'the physics engine'*, ANZIAM Journal, Vol. 50, C166-C188 (2008)
- [14] Feng, Z.-G. and Michaelides, E. E.: *Robust treatment of no-slip boundary condition and velocity updating for the lattice-Boltzmann simulation of particulate flows*, Computers & Fluids, Vol. 38, 370-381 (2009)
- [15] Binder, C., Feichtinger, C., Schmid, H.-J., Thürey, N., Peukert, W. and Rüde, U.: *Simulation of the hydrodynamic drag of aggregated particles*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 301, 155-167 (2006)
- [16] Becker, J., Junk, M., Kehrwald, D. and Thömmes, G.: *A Lattice Boltzmann Method for multiphase flows*, 6th International Conference on Multiphase Flow, paper no. S3\_Mon\_B\_1 (2007)
- [17] Inamuro, T. and Ii, T.: *Lattice Boltzmann simulation of the dispersion of aggregated particles under shear flows*, Mathematics and Computers in Simulation, Vol. 72, 141-146 (2006)
- [18] Takeuchi, S., Morita, I. and Kajishima, T.: *Motion of particle agglomerate involving interparticle force in dilute suspension*. Powder Technology, Vol. 184, 232-240 (2008)

## 1.6 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

An dem Verbundvorhaben waren die Robert Bosch GmbH (Bosch) als Koordinator, das Hermsdorfer Institut für technische Keramik e.V. (HITK), das Institut für Keramik im Maschinenbau der TU Karlsruhe (IKM) sowie das Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) beteiligt. Die Bearbeitung der materialwissenschaftlichen Arbeitspakete unterlag dabei den Projektpartnern Bosch, HITK und IKM, die gemeinschaftlich an der Entwicklung des Cordierit-Basismaterials sowie der Schutzmaßnahmen in Form von Dotierungen, Alkaligettern und Schutzschichten arbeiteten. Darüber hinaus wurden zahlreiche Arbeiten zur Werkstoffcharakterisierung und -prüfung geleistet. Die Arbeiten zur Komplexmodellierung und Simulation wurden von Bosch, ITWM und MVT durchgeführt, wobei die wesentlichen Schwerpunkte in der Generierung eines virtuellen Materialdesigns sowie der Simulationen zur Durchströmung und Partikelabscheidung bestanden.

Die arbeitsgruppenübergreifende Zusammenarbeit im Projekt wurde durch quartalsweise Gesamt- und Teilprojekttreffen sowie durch außerplanmäßige Kontakte sicher gestellt.

Dabei agierte Bosch als Gesamtkoordinator des Projekts und stellte darüber hinaus für jeden Themenschwerpunkt jeweils eine koordinierende Abteilung.

Der Informationsaustausch zwischen Material- und Simulationsseite sollte aufbauend auf der numerischen Optimierung des virtuellen Gefügedesigns bezüglich Druckverlust und Filtereffizienz erfolgen. Aus den Simulationsergebnissen sollten Zielgrößen für das reale Sintermaterial abgeleitet werden, die dann über die stoffliche Zusammensetzung, den Einsatz von Hilfsstoffen oder die Modifizierung des Extrusionsvorgangs angenähert werden sollten. Andererseits ergaben sich durch die Untersuchungen am Basismaterial materialtechnische Grenzen, innerhalb derer eine an den Simulationen ausgerichtete Gefügebeeinflussung überhaupt möglich war.

Innerhalb des Arbeitspakets Modellierung und Simulation wurden Synergien genutzt, da insbesondere die Erweiterung des von Bosch und MVT genutzten Strömungslösers in enger Kooperation erfolgte. Überdies gelangen das Koordinieren der Modellierung und Berechnungen auf den verschiedenen Skalenbereichen sowie ein gemeinsames Analysieren und Interpretieren von erbrachten Simulationsergebnissen.

## **2 Darstellung des Projektverlaufs**

### **2.1 Erzielte Ergebnisse**

Ziel der Arbeiten der MVT im Arbeitspaket 5 war wie bereits in Punkt 1.3 beschrieben die Untersuchung des Transport- und Abscheideverhaltens von Rußpartikeln mit Hilfe von numerischer Modellierung und Simulation. Ausgehend von der Generierung virtueller Rußagglomerate wurden Charakterisierungsmöglichkeiten untersucht und bewertet. Die zur Agglomeratmodellierung erforderlichen Erweiterungen des vorhandenen Strömungslösers auf Basis der Lattice Boltzmann Methode wurden durchgeführt und validiert. Daneben wurden in Parameterstudien aerodynamische Beiwerte bestimmt sowie numerische Simulationen zur Agglomeratbewegung durchgeführt.

#### **2.1.1 Agglomeratgenerierung und -charakterisierung**

Aus experimentellen Untersuchungen ist bekannt, dass die komplexen Strukturen von Rußagglomeraten beispielsweise in Abhängigkeit von der Motorlast oder dem nachgeschalteten Abgassystem stark variieren können. Dabei sind sowohl äußerst kettige

als auch vergleichsweise kompakte Partikelmorphologien bekannt. Dementsprechend sollte die Methodik zur Generierung der virtuellen Agglomerate diese Formvielfalt abbilden können. Der Aufbau der Agglomerate erfolgt aus einer definierten Anzahl von Primärpartikeln, die in Übereinstimmung mit REM-Aufnahmen von realen Rußpartikeln als sphärisch angenommen werden können. Die Primärpartikel können dabei eine Größenverteilung aufweisen und entweder über einen Punktkontakt oder eine Kontaktfläche miteinander verbunden sein. Mit Hilfe stochastischer Methoden erfolgt die eigentliche Strukturgenerierung, die über Designparameter hinsichtlich der erzeugten Agglomeratformen beeinflusst werden kann. Um die morphologische Vielfalt einzuschränken, wurden für die Untersuchungen Variationen eines dendritischen und eines kompakten Strukturgrundtypen betrachtet (Abb. 1). Programmintern werden die virtuellen Agglomerate über eine Baumdatenstruktur hinterlegt, die die Eigenschaften und Lagebeziehungen der Primärpartikel verwaltet.

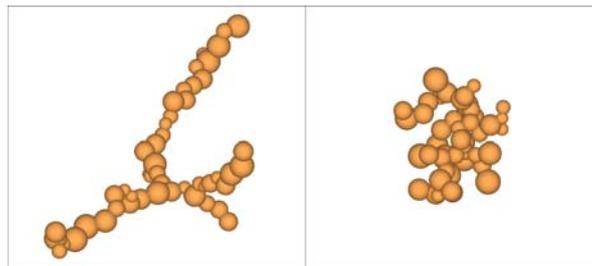


Abb. 1: Darstellung einer kettigen (links) und einer kompakten Strukturvariation (rechts), bestehend aus jeweils 50 Primärpartikeln

Die Agglomeratcharakterisierung dient der Bestimmung von Strukturparametern und ermöglicht den Vergleich von verschiedenen Agglomeratvarianten. Überdies bietet sie eine Grundlage für die Formulierung von Korrelationen zum strukturabhängigen Transportverhalten. Da die geometrische Struktur der virtuellen Agglomerate nach ihrer Generierung bekannt ist, können die morphologischen Kenngrößen direkt bestimmt werden. Dazu zählt beispielsweise der volumenäquivalente Durchmesser, d.h. der Durchmesser einer Kugel, die dasselbe Gesamtvolumen wie das Agglomerat aufweist. In Analogie können Äquivalenzdurchmesser basierend auf der Oberfläche oder der Anströmfläche des Agglomerats gebildet werden. Die Bestimmung der Basisgrößen muss im Allgemeinen über Diskretisierungsmethoden erfolgen, da eine analytische Berechnung aufgrund der komplexen Struktur mit Mehrfachüberlappungen von Primärpartikeln zu aufwendig wäre. Weiterhin werden der Interzeptionsdurchmesser, der auf den Massenschwerpunkt bezogene Trägheitsradius, die Sphärizität und die fraktale Dimension ermittelt. Letztere kann über einen Box Counting Algorithmus angenähert werden, wobei

sich dieser Ansatz bei den betrachteten, relativ geringen Primärpartikelzahlen als begrenzt anwendbar erwiesen hat. Ursache hierfür ist die große Sensitivität des Verfahrens bezüglich der angewandten stufenweisen Diskretisierung zum Erhalt der fraktalen Dimension. Eine Porositätskennzahl wird anhand des Volumens der konvexen Hülle bestimmt. Diese entspricht der kleinstmöglichen und zugleich alle Primärpartikel umschließenden konvexen Fläche (Abb. 2) und wird mittels eines rekursiven numerischen Algorithmus ermittelt. Die zum Teil sehr aufwändigen Berechnungen zur Charakterisierung fallen jedoch in der eigentliche Strömungsberechnung nicht ins Gewicht, da sie jeweils nur einmal je Agglomerat ausgeführt werden müssen. Ein Vergleich bezüglich der Eignung der unterschiedlichen Kenngrößen wird anhand der unter Punkt 2.1.3 aufgeführten Parameterstudien angestellt.

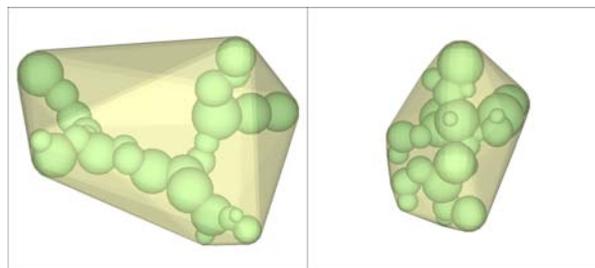


Abb. 2: Konvexe Hülle eines kettigen (links) und eines kompakten Agglomerats (rechts), bestehend aus jeweils 30 Primärpartikeln

### 2.1.2 Erweiterungen des LBM-Strömungslösers

Die Simulation von Agglomeratströmung bzw. Agglomerattransport erfordert die Überführung der erzeugten Agglomeratgeometrien in Hindernisobjekte für die betrachtete Strömung. Bei der Platzierung eines Agglomerats im Strömungsgebiet werden die von dem Agglomeratvolumen überdeckten Gitterknoten als feste Hindernisknoten markiert, mit einer entsprechenden Randbedingung beaufschlagt und somit vom Fluid abgegrenzt. Da die Auflösung der Agglomerate wie in Abb. 3 (links) dargestellt primär von der Gitterweite abhängig ist, muss für eine direkte numerische Simulation eine genügend feine Diskretisierung aller Primärpartikel sichergestellt werden. Eine hohe Auflösung des gesamten Berechnungsgebiets führt jedoch bei äquidistantem Gitter zu einem erheblichen numerischen Aufwand, vor allem im Falle dreidimensionaler Simulationen. Mit Hilfe eines Multi-Skalen-Ansatzes können Lattice Boltzmann Simulationen auch auf nicht-äquidistanten Gittern durchgeführt werden. Diese ermöglichen eine hohe Auflösung des numerischen Gitters und damit eine genaue Strömungsberechnung in unmittelbarer

Agglomeratumgebung, während die äußeren, weniger relevanten Strömungsgebiete grob diskretisiert werden können (Abb. 3, rechts). Im Vergleich zu Simulationen auf äquidistanten Gittern können dadurch sowohl der Speicherbedarf als auch die erforderliche Rechenzeit wesentlich reduziert werden.

Trotz des angewandten Multi-Skalen-Verfahrens ist die gitterbasierte Auflösung der Agglomeratstruktur aufgrund endlicher Ressourcen limitiert. Überdies werden die Hinderniskonturen unter Anwendung einer Standard-Randbedingung lediglich in Form einer Treppenfunktion approximiert, so dass Objekte mit gekrümmter Oberfläche gerastert und in gewissem Maße verkleinert abgebildet werden. Diese Nachteile können durch die Einführung einer Randbedingung für gekrümmte Oberflächen beseitigt werden. Dazu werden nicht mehr die äußeren Hindernisknoten als direkte Objektoberfläche interpretiert, sondern es wird für jeden oberflächennahen Fluidknoten der genaue Wandabstand ermittelt (Abb. 4). Der variable Wandabstandsparameter  $q$  kann also im Gegensatz zur Treppenstufen-Randbedingung auch Werte kleiner Eins annehmen. Dadurch wird sichergestellt, dass das Partikelvolumen vollständig abgebildet wird und die Realisierung der Agglomeratgeometrie unabhängig von der relativen Lage zum numerischen Gitter ist. Die gekrümmte Randbedingung ist somit unmittelbare Voraussetzung für die Simulation der Agglomeratbewegung, bei der das Partikel relativ zum Gitter bewegt wird.

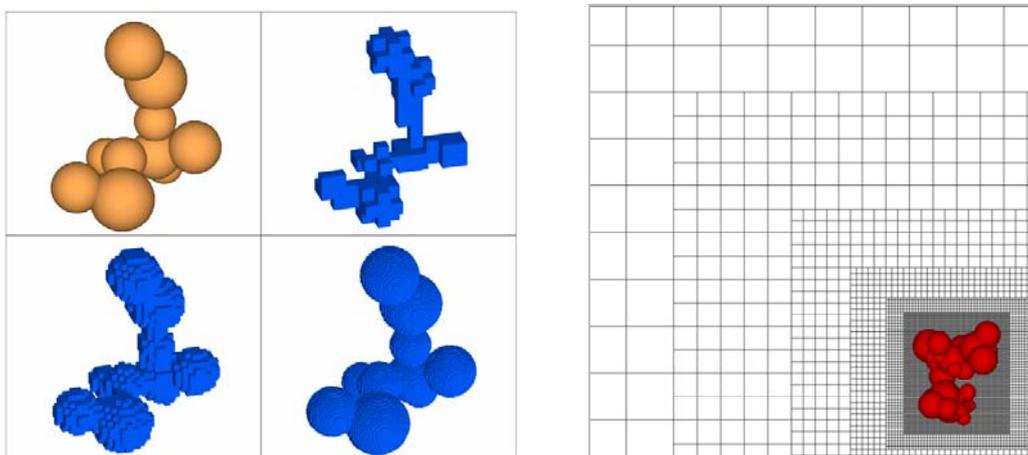


Abb. 3: Gitterabhängige Auflösung eines Agglomerats: 5, 10 und 30 Zellen pro mittlerem Primärpartikeldurchmesser (links) und Ausschnitt eines nicht-äquidistanten Multi-Skalen-Gitter im Bereich eines Agglomerats (rechts)

Sowohl für die Beiwertbestimmung mittels Agglomeratumströmung als auch die Simulation der Agglomeratbewegung müssen die vom Fluid auf das Partikel wirkenden Strömungskräfte ermittelt werden. Dazu werden die Strömungsinformationen derjenigen Fluidknoten berücksichtigt, die sich in direkter Nachbarschaft zur Partikeloberfläche befinden. Die Summation der an der Oberfläche angreifenden Punktkräfte ergibt eine

Gesamtkraft, die in eine Widerstands- und eine Auftriebskomponente aufgeteilt werden kann. Unter Berücksichtigung des Abstands der lokalen Kräfte zum Partikelschwerpunkt kann analog das Gesamtdrehmoment bestimmt werden. Gesamtkraft und Drehmoment bilden die Grundlage zur Ermittlung der aerodynamischen Beiwerte bzw. zur Berechnung von Partikeltranslation und –rotation.

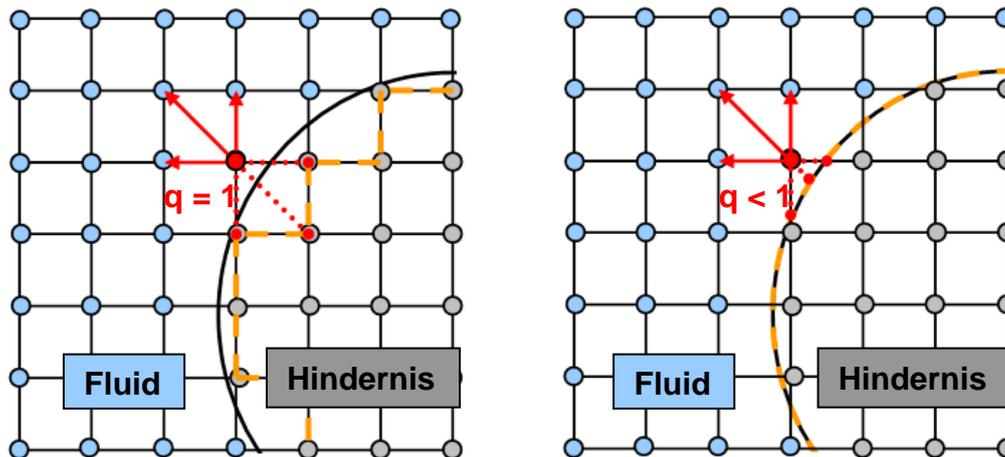


Abb. 4: Schematische Darstellung der gestuften Randbedingung mit Abstandsparameter  $q \equiv 1$  (links) und der gekrümmten Randbedingung mit  $0 < q \leq 1$  (rechts)

### 2.1.3 Bestimmung der Strömungsbeiwerte von Agglomeraten

Die Ermittlung der aerodynamischen Beiwerte erfolgt anhand der Simulation von dreidimensionalen Agglomeratströmungen. Die Agglomerate werden analog zu Abb. 5 (links) ortsfest und zentriert im numerischen Strömungsgebiet platziert, welches durch Ein- und Auslass sowie Symmetrierandbedingungen begrenzt wird. Am Einlass wird ein pfeifenförmiges Strömungsprofil aufgegeben, dessen konstante Einlassgeschwindigkeit im Weiteren zur Definition der Partikel-Reynolds-Zahl und damit zur Charakterisierung der Strömungsbedingungen genutzt wird. Nach Erreichen der Konvergenz der Simulation liegen neben den Geschwindigkeits- und Druckinformationen auch die resultierenden Kräfte entlang der Agglomeratoberfläche vor. Aus den lokalen Kräften werden die Widerstandskraft  $F_D$ , die Auftriebskraft  $F_L$  und das Drehmoment  $T$  abgeleitet (Abb. 5, rechts). Der Widerstandsbeiwert  $c_D$ , der Auftriebsbeiwert  $c_L$  sowie der Momentenbeiwert  $c_T$  ergeben sich aus den folgenden Berechnungsgleichungen:

$$c_D = \frac{|\mathbf{F}_D|}{\frac{1}{2} \rho u^2 d_{equi}^2} \quad c_L = \frac{|\mathbf{F}_L|}{\frac{1}{2} \rho u^2 d_{equi}^2} \quad c_T = \frac{|\mathbf{T}|}{\frac{1}{2} \rho u^2 d_{equi}^3}$$

Darin werden die Fluidichte mit  $\rho$  und die mittlere Strömungsgeschwindigkeit mit  $u$  bezeichnet. Der Durchmesser  $d_{\text{equi}}$  stellt eine charakteristische Äquivalenzabmessung des Agglomerats dar, über die die Vergleichbarkeit der Ergebnisse von verschiedenen Agglomeratformen erreicht wird.

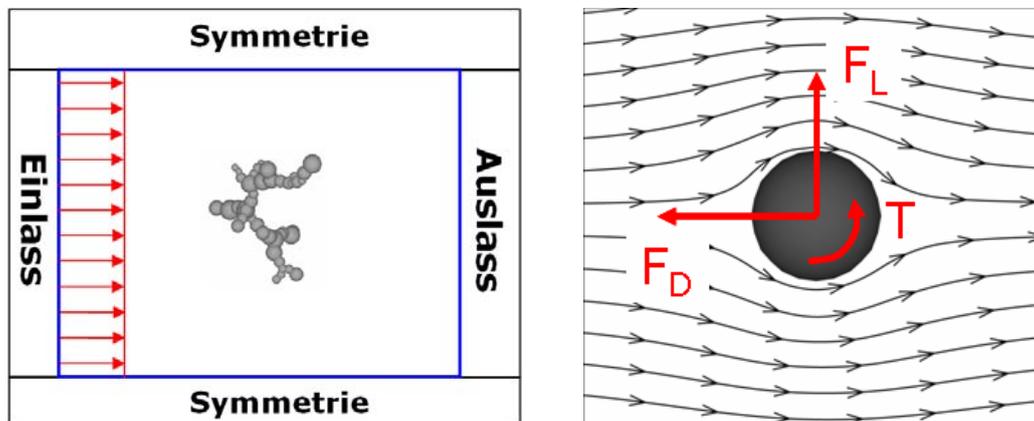


Abb. 5: Konfiguration des numerischen Strömungsgebiets zur Beiwertbestimmung von Agglomeraten (links) und Veranschaulichung der am Partikel angreifenden Kräfte sowie des resultierenden Drehmoments in Abhängigkeit von der Strömungsrichtung (rechts)

Die Implementierung der Methoden zur Beiwertbestimmung wurde anhand von Kugel und Würfel validiert. In Voruntersuchungen wurde sichergestellt, dass das Einbringen von lokalen Gitterverfeinerungen im Vergleich zur äquidistanten Simulation zu keinerlei Artefakten führt. Des Weiteren wurden minimale Abmessungen des Strömungsgebiets ermittelt, die eine weitgehende Unabhängigkeit der Lösung von der Strömungsberandung gewährleisten. Kugel und Würfel wurden mit einer Auflösung von minimal 16 und maximal 128 Zellen bezogen auf den volumenäquivalenten Durchmesser umströmt. Dazu wurden vier bis fünf lokale Gitterverfeinerungen um die Partikel platziert. Die Anströmung des Würfels erfolgte senkrecht zu einer der sechs Stirnflächen. Die Reynolds-Zahl wurde im Bereich von 0,3 bis 90 variiert. Die Ergebnisse zum Widerstandsbeiwert sowie exemplarische Ausschnitte aus den Strömungsprofilen sind in Abb. 6 zusammenfassend dargestellt. Der Vergleich mit Korrelationsdaten (Schiller und Naumann, 1933) zeigt eine gute Übereinstimmung der ermittelten Widerstandskoeffizienten der Kugel im betrachteten Reynolds-Zahl-Bereich. Den Erwartungen entsprechend ist der Partikelwiderstand eines volumenäquivalenten Würfels etwas höher als der der vergleichbaren Kugel. Darüber hinaus korrespondieren die Würfelwiderstände gut zu Literaturangaben (Hölzer und Sommerfeld, 2008).

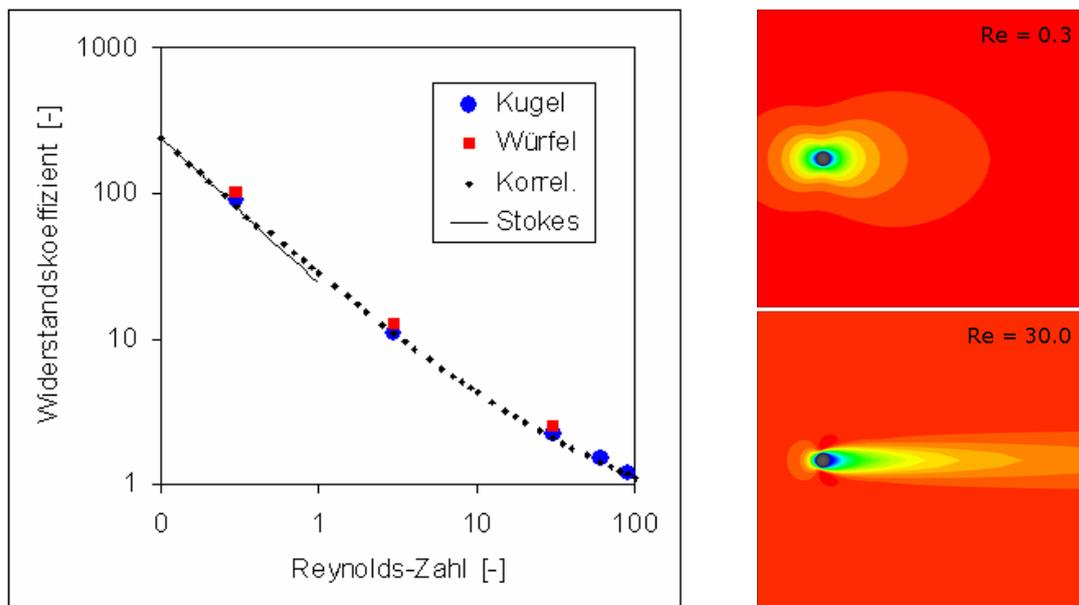


Abb. 6: Widerstandsbeiwert von Kugel und Würfel im Vergleich zur Stokes-Theorie und zur Schiller/Naumann-Korrelation in Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl (links) und Ausschnitte aus dem Geschwindigkeitsprofil bei einer Kugelumströmung mit steigender Reynolds-Zahl (rechts)

Im Rahmen von Parameterstudien wurden die Strömungsbeiwerte von virtuellen Rußagglomeraten bestimmt. Zur Einschränkung der Formvielfalt wurden ein dendritischer und ein kompakter Strukturgrundtyp berücksichtigt, von denen Varianten bestehend aus jeweils 20, 30, 40 und 50 Primärpartikeln generiert wurden. Neben der Partikelzahl wurde eine willkürliche Partikelgrößenverteilung im Bereich von  $\pm 50\%$  des mittleren Partikeldurchmessers vorgegeben. Alle Primärpartikel wurden an ihren Kontaktstellen mit 35 % ihres Durchmessers überlagert, um eine den REM-Aufnahmen von realen Rußpartikeln ähnelnde Agglomeratstruktur zu gewährleisten. Die Agglomeraterzeugung basiert wie in Punkt 2.1.1 beschrieben auf stochastischen Methoden, so dass die resultierende Morphologie und damit die Strukturparameter nicht vorhergesagt werden können. Dennoch ist es für die Vergleichbarkeit der Ergebnisse aus den Parameterstudien erforderlich, dass alle Varianten einer Versuchsreihe bezüglich einer Referenzgröße übereinstimmen. Aus diesem Grund wurde eine Verwerfungsmethode eingesetzt, die unter der Vorgabe der Designparameter so lange zufällige Agglomerate erzeugt, bis eines der vorgegebenen Bezugsabmessung mit einer genügenden Genauigkeit entspricht. Dazu mussten für jedes Zufallsagglomerat die betreffenden Strukturparameter ermittelt und anhand dieser die Auswahl getroffen werden. Auf diese Weise konnten trotz willkürlicher Morphologie die gewählten Referenzgrößen eingestellt werden.

Die Strömungsbeiwerte hängen neben der Agglomeratstruktur auch von den vorliegenden Strömungsbedingungen ab. Die Charakterisierung der Strömung wird mit Hilfe der

Partikel-Reynolds-Zahl  $Re_p$  vorgenommen, die sich aus der Relativgeschwindigkeit von Partikel und Strömung  $u$ , der Fluidichte  $\rho_F$ , der dynamischen Fluidviskosität  $\eta_F$  und einer charakteristischen Abmessung des Agglomerats  $d_{equi}$  ergibt:

$$Re_p = \frac{u \rho_F d_{equi}}{\eta_F}$$

Da bei den realen Strömungen im Filtermaterial von einer laminaren Strömung ausgegangen werden kann, wurde für alle Parametervariationen eine Reynolds-Zahl von 0,3 angenommen. Dieser Wert kann über die Anströmgeschwindigkeit eingestellt werden, da die Partikelgeschwindigkeit aufgrund der ortsfesten Umströmung stets Null ist.

Eine Auswahl an generierten und untersuchten Agglomeratvarianten ist in Abb. 7 aufgezeigt. Im dargestellten Fall ist die feste Referenzgröße zur Ermittlung der Reynolds-Zahl und der Beiwerte die konstante Anströmfläche der Partikel. Basierend auf dieser Variation sollen die wichtigsten Strukturparameter betrachtet werden, die in Abb. 8 und Abb. 9 aufgeführt sind. Dargestellt sind der volumen- und anströmflächenäquivalente Durchmesser, der Trägheitsradius, die Sphärizität und die Porosität bezogen auf die konvexe Hülle in Abhängigkeit von der Primärpartikelanzahl. Dabei wird der Vergleich der dendritischen Agglomerate mit den kompakten Vertretern sowie mit der anströmflächenäquivalenten Kugel angestrebt.

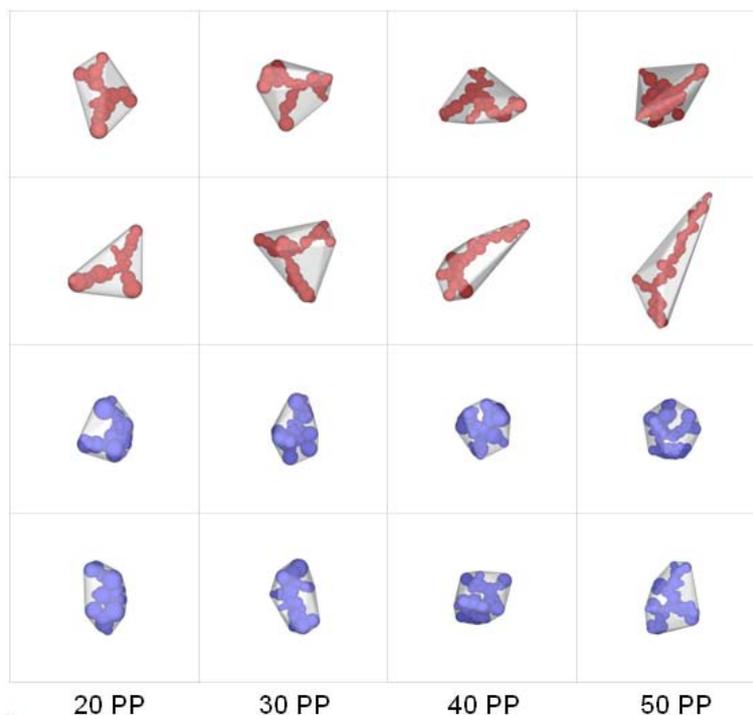


Abb. 7: Agglomeratvarianten mit identischem anströmflächenäquivalenten Durchmesser bestehend aus 20, 30, 40 und 50 Primärpartikeln (von links nach rechts): rot: dendritischer Strukturtyp; blau: kompakter Strukturtyp

Gemäß der Vorgabe für die Untersuchungsreihe besitzen alle Vertreter der Agglomerate und die zugehörige flächenäquivalente Kugel nahezu denselben, auf die Anströmfläche bezogenen Äquivalentdurchmesser (Abb. 8). Der volumenäquivalente Durchmesser hingegen ist nur für die kompakten Agglomerate nahezu konstant. Bei den dendritischen Varianten fällt er mit zunehmender Primärpartikelzahl leicht ab (Abb. 8). Der Abfall resultiert aus den geringeren Primärpartikeldurchmessern, die sich durch die Forderung der konstanten Anströmfläche bei gleichzeitig steigenden geometrischen Abmessungen der kettigen Agglomerate ergeben. Der Anstieg der Agglomeratabmessungen zeigt sich deutlich im Verlauf des Trägheitsradius, der ein Maß für die auf den Schwerpunkt bezogene Masseverteilung im Agglomerat ist. Erwartungsgemäß zeigen dendritische Agglomerate einen progressiveren Anstieg mit wachsender Primärpartikelzahl (Abb. 8). Im Gegensatz dazu scheint die Sphärizität kein geeigneter Parameter zu sein, um morphologische Unterschiede zu erfassen, da das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen für kompakte und kettige Agglomerate annähernd gleich ist (Abb. 9). Ein deutlicher Unterschied wäre erst dann zu erwarten, wenn die kompakten Vertreter eine ausgeprägte Versinterung der Primärpartikel aufwiesen. Die Porosität bezogen auf das Volumen der konvexen Hülle hingegen bietet bei den untersuchten Agglomeratvarianten eine signifikante Unterscheidungsmöglichkeit hinsichtlich der Partikelmorphologie, auch wenn der physikalische Gehalt dieses Parameters vor allem bei den kettigen Vertretern begrenzt ist (Abb. 9).

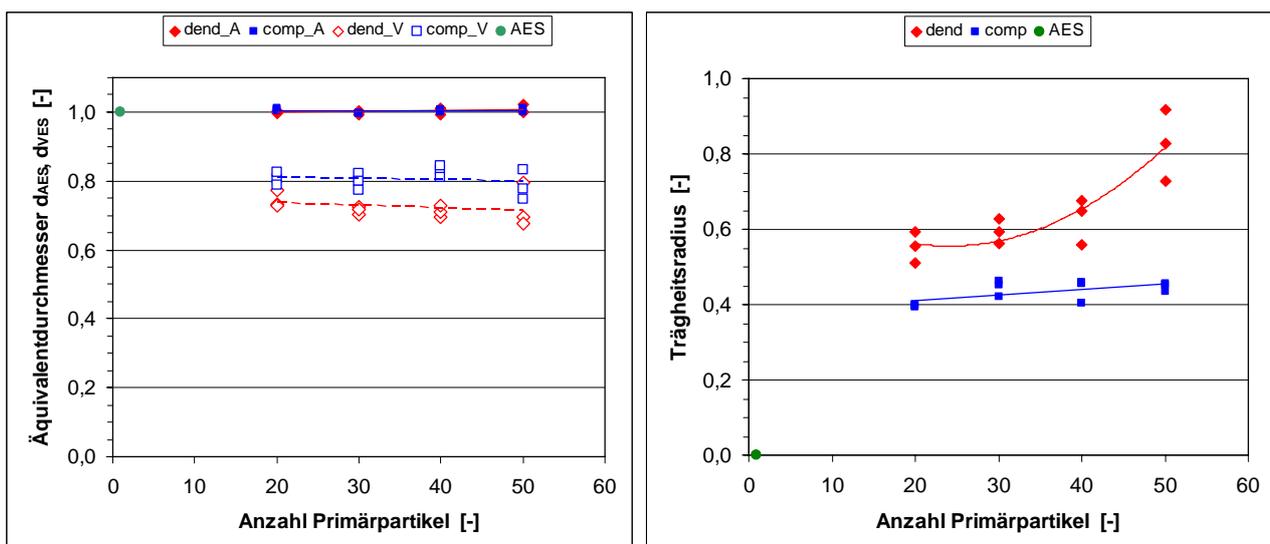


Abb. 8: Anströmflächen- und volumenäquivalenter Durchmesser (links) und Trägheitsradius (rechts) von dendritischen Agglomeraten (rot), kompakten Agglomeraten (blau) und der anströmflächenäquivalenten Kugel (grün) bei konstanter Anströmfläche aller Vertreter

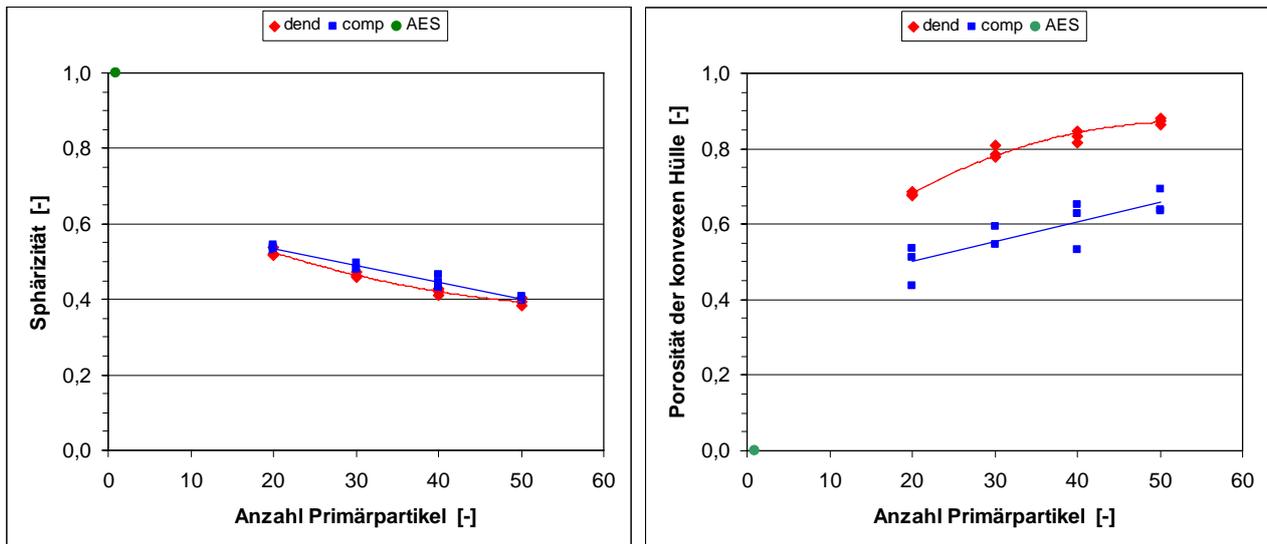


Abb. 9: Sphärizität (links) und Porosität bezogen auf die konvexe Hülle (rechts) von dendritischen Agglomeraten (rot), kompakten Agglomeraten (blau) und der anströmflächenäquivalenten Kugel (grün) bei konstanter Anströmfläche aller Vertreter

Insgesamt wurden vier Parameterstudien mit folgenden, jeweils konstanten Referenzgrößen durchgeführt:

- Anströmfläche bezogen auf die Agglomeratgeometrie
- Anströmfläche bezogen auf die konvexen Hülle
- virtuelle Fläche bestehend aus 1/3 Anströmfläche und 2/3 Oberfläche bezogen auf die Agglomeratgeometrie
- Oberfläche bezogen auf die konvexen Hülle

Da sowohl die Partikel-Reynolds-Zahl als auch die Agglomeratbeiwerte auf die jeweilige Referenzgröße bezogen werden müssen, können die Ergebnisse aus einer Variation nicht hinsichtlich einer anderen Referenzgröße interpretiert werden. Zwar kann man die Beiwertberechnung im Nachhinein an die andere Bezugsgröße anpassen, die zugehörige Reynolds-Zahl würde sich jedoch ebenso ändern, dies jedoch in unterschiedlicher Weise für jedes betrachtete Agglomerat. Damit wäre dann die Konstanz der Partikel-Reynolds-Zahl nicht mehr gegeben, so dass ein Vergleich der Agglomeratbeiwerte untereinander entfallen würde.

Abb. 10 bis Abb. 13 veranschaulichen die Ergebnisse der Parameterstudien, wobei sowohl eine Auftragung über die Reynolds-Zahl als auch bezüglich der Primärpartikelzahl der Agglomerate abgebildet sind. Die geschlossenen Symbole stellen die auf die entsprechende Referenzfläche bezogenen Ergebnisse dar, die offenen Symbole stehen für die Auftragung bezogen auf den volumenäquivalenten Durchmesser. Letzteres dient

lediglich zur Veranschaulichung der zu erwartenden Streuung der Beiwerte bei volumenbezogener Berechnung. Begründet durch die Unstetigkeit der volumenbasierten Reynolds-Zahl sind die Werte jedoch wie bereits erläutert nicht direkt vergleichbar. In vorangegangenen Simulationsläufen wurde dennoch festgestellt, dass auch bei vollständig volumenbezogenen Berechnungen vergleichbare Streuungen der Agglomeratbeiwerte auftraten. Diese Voruntersuchungen gaben dann den Anlass für eine Evaluierung der aufgeführten flächenbezogenen Referenzgrößen.

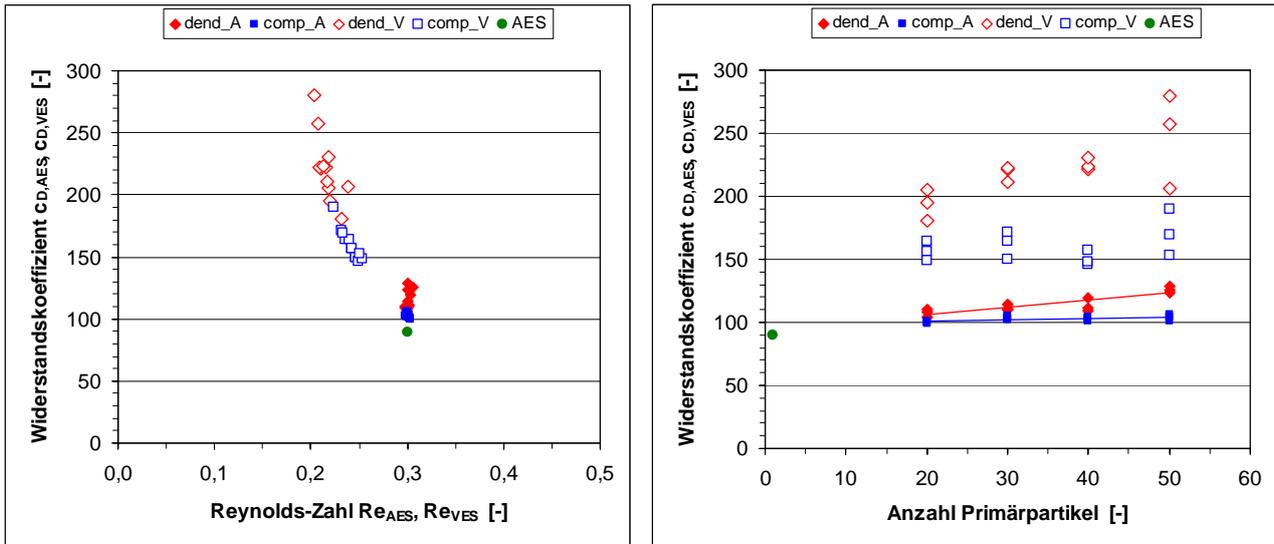


Abb. 10: Widerstandsbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei *konstanter Anströmfläche des Agglomerats* [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

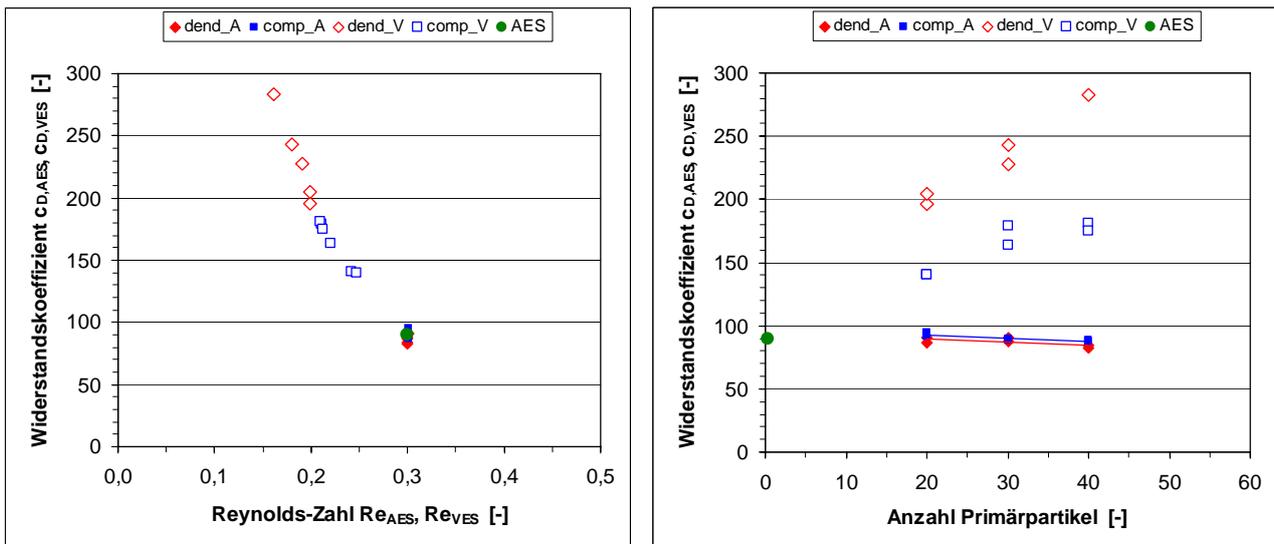


Abb. 11: Widerstandsbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei *konstanter Anströmfläche der konvexen Hülle* [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

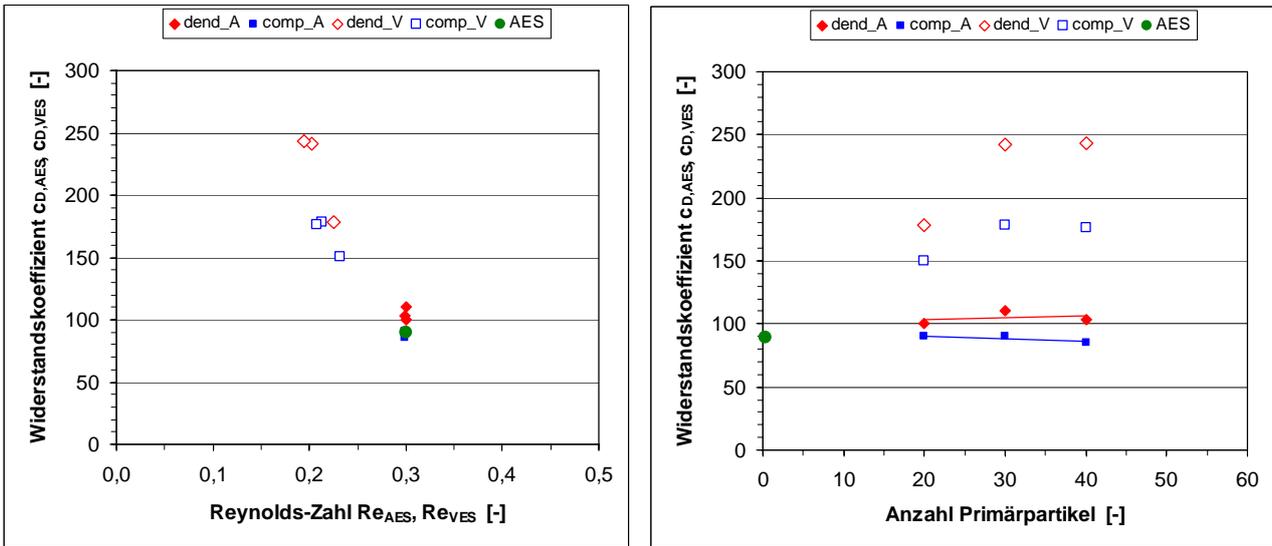


Abb. 12: Widerstandsbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei konstanter Fläche bestehend aus 1/3 Anströmfläche und 2/3 Oberfläche des Agglomerats [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

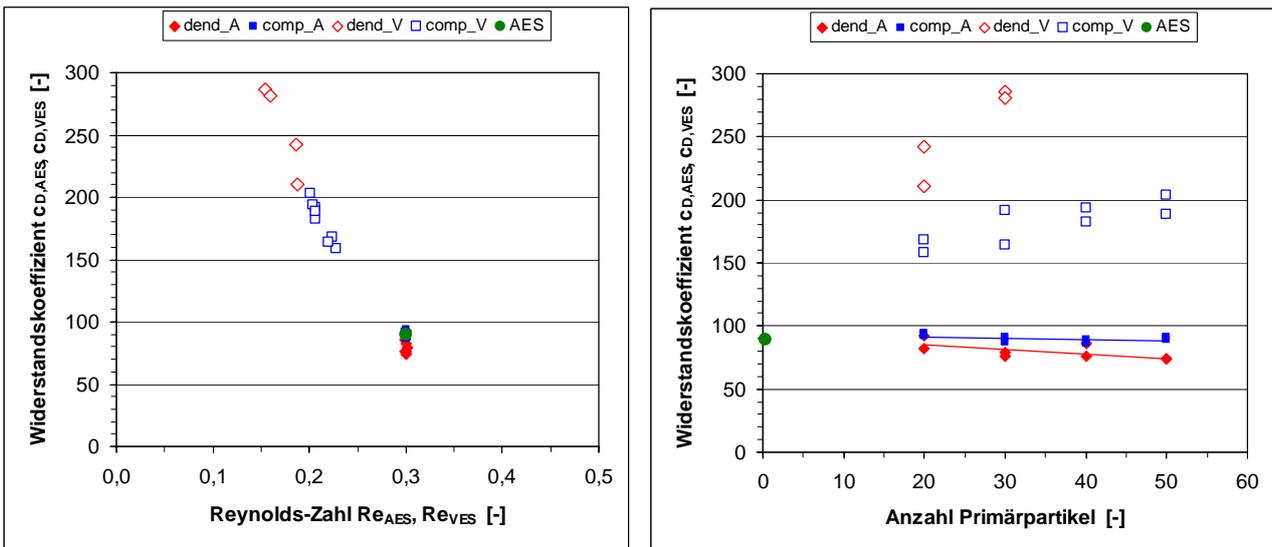


Abb. 13: Widerstandsbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei konstanter Oberfläche der konvexen Hülle [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

Die in Abb. 10 dargestellten Ergebnisse mit Bezug auf die Anströmfläche des Agglomerats zeigen einen gegenüber der flächenäquivalenten Kugel erhöhten Widerstandsbeiwert sowohl für kettige als auch kompakte Agglomerate. Dieser Effekt verstärkt sich mit zunehmender Primärpartikelzahl vor allem bei kettigen Typen und lässt auf eine Unterschätzung der Sperrwirkung des angeströmten Profils schließen. Wenn hingegen als Bezugsgröße zur Anströmfläche des Agglomerats ein Anteil aus dessen Oberfläche hinzugezogen wird (Abb. 12), dann kann der Unterschätzung der wirksamen Anströmfläche entgegengewirkt werden. Infolge dessen liegen die Partikelwiderstände

näher an dem der Referenzkugel und streuen weniger stark. Die mit Abstand beste Beschreibung des Agglomeratwiderstands gelingt mit Hilfe der Anströmfläche der konvexen Hülle anstelle der des Agglomerates an sich (Abb. 11). Alle ausgewerteten Widerstandsbeiwerte liegen sehr dicht an dem Referenzwert der flächengleichen Kugel. Zudem liegen die Beiwerte für dendritische und kompakte Agglomerate nahezu auf einer Kurve, so dass eine strukturunabhängige Beschreibung zumindest innerhalb des untersuchten Bereichs möglich scheint. In diesem Falle könnte der resultierende Agglomeratwiderstand für alle Strukturvarianten mittels Primärpartikelanzahl nahezu linear korreliert werden. Im Vergleich dazu zeigt die volumenbasierte Berechnung bereits für eine definierte Primärpartikelzahl deutliche Schwankungen der Widerstandsbeiwerte. Ursache ist die im Allgemeinen vorliegende Unkorreliertheit des flächen- und des volumenäquivalenten Durchmessers. Zwei Agglomerate mit gleicher aktiver Anströmfläche können deutlich verschiedene Gesamtvolumina besitzen. In umgekehrter Weise haben Agglomerate unterschiedlichen Aufbaus bei gleichem Volumen in der Regel eine unterschiedliche Sperrwirkung gegenüber der Strömung. Die anströmflächenbezogene Beiwertbestimmung besitzt jedoch den Nachteil, dass sich bei nicht-sphärischen Partikeln die wirksame Anströmfläche in Abhängigkeit der Relativgeschwindigkeit von Partikel und Fluid ändert. Insbesondere bei technischen Strömungen und infolge von Partikelrotation kann nicht von einer gleichbleibenden Anströmrichtung ausgegangen werden, so dass die Bezugsgröße der Widerstandskorrelation nicht als konstant betrachtet und damit stets angepasst werden muss. Dies bedeutet einen zusätzlichen Aufwand für entsprechende numerische Simulationen beispielsweise mit Lagrangeschem Ansatz.

Alternativ zu den anströmflächenbezogenen Berechnungen wurden Simulationen mit konstanter Oberfläche durchgeführt. Hierbei ergibt sich eine intrinsische Unabhängigkeit von der aktuellen Anströmrichtung des Agglomerats und infolge dessen eine geeignete Korrelationsbasis für die Modellierung des Widerstands in Lagrangeschen Simulationen. Ergebnisse des Partikelwiderstands bei einer konstanten Oberfläche der konvexen Hülle aller Agglomeratvertreter finden sich in Abb. 13. Die Streuung der Beiwerte ist hier etwas größer als bei der anströmflächenbezogenen Auswertung, wobei strukturbedingte Unterschiede der Agglomeratwiderstände zwischen dendritischen und kompakten Agglomeraten auftreten. Zudem wird vor allem im Fall der kettigen Agglomerate die wirksame Referenzfläche überschätzt und der Partikelwiderstand damit unterbewertet. Dies könnte innerhalb der Korrelation eventuell durch einen der eingangs beschriebenen Struktur Faktoren angepasst werden.

Neben den Widerstandskoeffizienten wurden auch der Auftriebs- und der Momentenbeiwert betrachtet. Nahezu unabhängig von der gewählten Referenzgröße liegen deutliche Schwankungen der ermittelten Werte vor. Exemplarisch sind die zu der Versuchsreihe mit konstanter Anströmfläche der konvexen Hülle bestimmten Auftriebs- und Momentenkoeffizienten in Abb. 14 und Abb. 15 dargestellt.

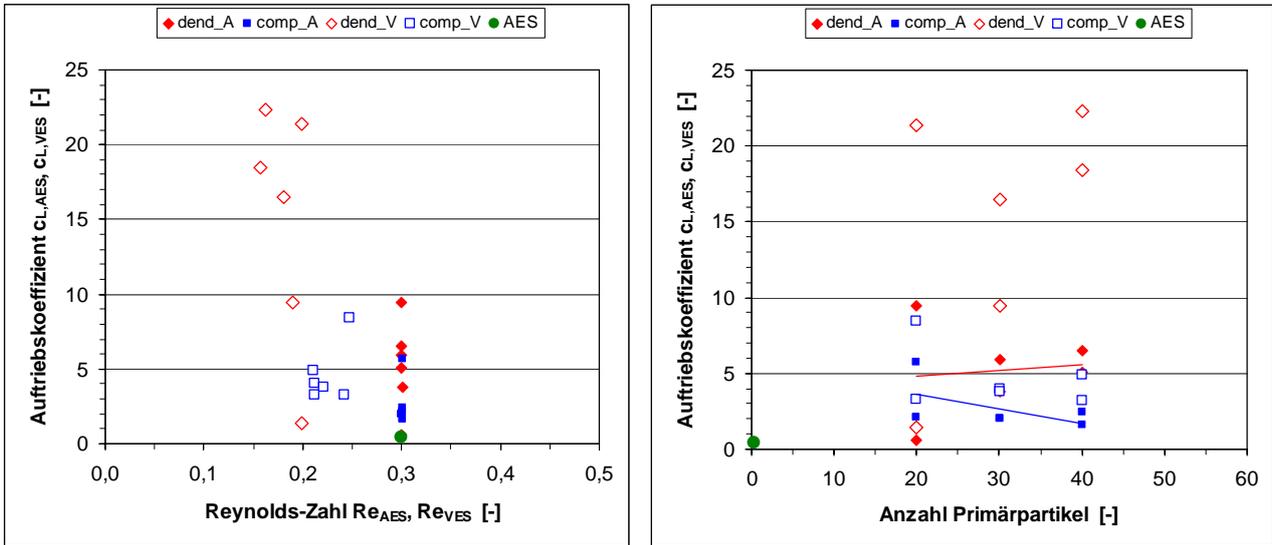


Abb. 14: Auftriebsbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei konstanter Anströmfläche der konvexen Hülle [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

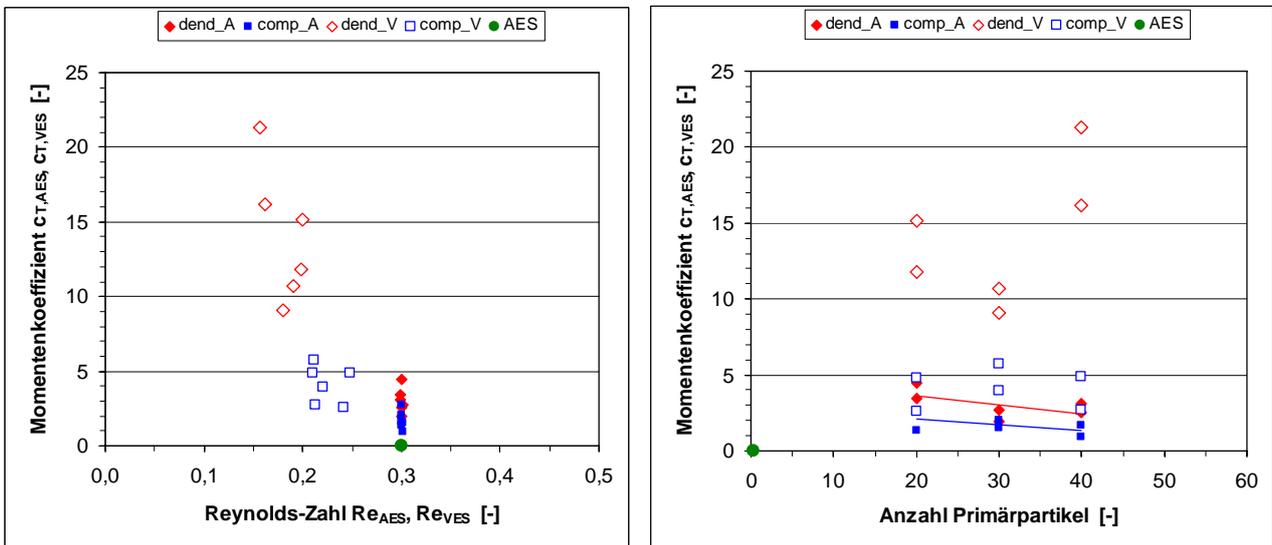


Abb. 15: Momentenbeiwert bezogen auf die Reynolds-Zahl (links) und in Abhängigkeit von der Primärpartikelzahl (rechts) bei konstanter Anströmfläche der konvexen Hülle [rot: dendritisch; blau: kompakt; grün: flächenäquivalente Kugel]

Sowohl im Falle des Auftriebskoeffizienten als auch beim Momentenbeiwert sind die Ergebnisse deutlich höher als bei der flächengleichen Kugel, die im Idealfall bei der vorliegenden gleichmäßigen Anströmung und infolge der Kugelsymmetrie weder

Profilauftrieb noch ein resultierendes Drehmoment aufweist. Aufgrund der unregelmäßigen Struktur der Agglomerate und der zufällig gewählten Anströmrichtung ist demzufolge in der Regel mit einem Auftrieb und einem Drehmoment verschieden von Null zu rechnen. Die Formulierung einer geeigneten Korrelation für Auftriebs- und Momentenbeiwert erscheint mit den betrachteten Bezugsgrößen nur schwer realisierbar. Eine numerische Modellierung könnte daher beispielsweise mittels aufgeprägter stochastischer Schwankung der Beiwerte um einen gegebenen Mittelwert gelöst werden.

#### 2.1.4 Untersuchung von Agglomerattransport und -deposition

Ziel der hoch auflösenden Simulationen von Agglomeratbewegung und –anlagerung war die Modellierung aufwachsender Rußschichten. Die Charakterisierung der aus Agglomeraten bestehenden Ablagerungen sollte sowohl geometrisch mit Hilfe der Porosität als auch strömungstechnisch über die Bestimmung der Permeabilität erfolgen. Beide Parameter sind für die Abschätzung der zeitabhängigen Zellbeladung bzw. ihrer Durchströmbarkeit infolge von Rußdeposition in Lagrangeschen Simulationen erforderlich. Abb. 16 zeigt ein Beispiel strömungsfrei simulierter Agglomeratdeposition sowie die Durchströmung einer repräsentativen Rußscheibe zur Bestimmung der Permeabilität. Anhand dieser vereinfachten Konfiguration konnte ein Depositionsmodell erprobt werden, welches Agglomeratumlagerung durch Verdrehung und Verkippung bis zum Erreichen einer stabilen Dreipunktauflage zulässt.

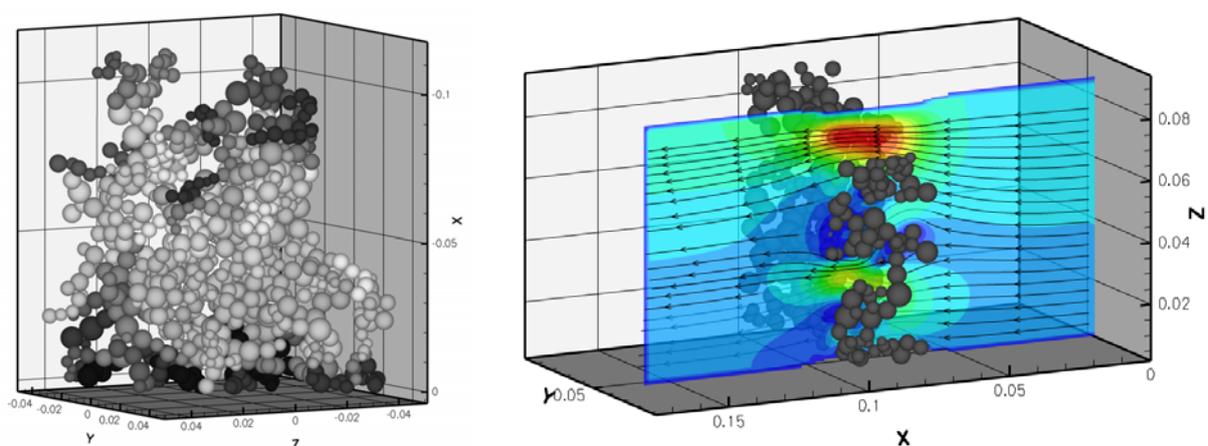


Abb. 16: Strömungsfreie, schwerkraftgetriebene Sedimentation von 200 Agglomeraten mit Reorientierung während der Deposition (links) und Durchströmung einer extrahierten, repräsentativen Ablagerungsschicht (Porosität: 84,3 %; Reynolds-Zahl: 0,53)

Um neben dem Struktureinfluss der Agglomerate auch die Strömungswirkung auf die Depositionseigenschaften abbilden zu können, musste zuvor die vollständige Kopplung zwischen Partikel und Strömung hergestellt werden. Hierbei ist sowohl die Partikeltranslation als auch die Rotation zu berücksichtigen, da zunächst nicht von einem drehungsfreien Agglomerattransport ausgegangen werden kann. Die Partikeltranslation wird über die Lösung des zweiten Newtonschen Gesetzes modelliert. Aus den am Partikel angreifenden Fluidkräften sowie externen Kräften wie beispielsweise der Schwerkraft wird eine Partikelbeschleunigung berechnet, aus der über numerische Integration die Partikelgeschwindigkeit sowie der Partikelort folgen. Im Fall der Rotation werden die Eulerschen Bewegungsgleichungen iterativ gelöst. Aus dem auf das Partikel wirkenden Gesamtdrehmoment wird die Winkelgeschwindigkeit ermittelt, aus der die entsprechende Partikellage hervorgeht. Die Beschreibung der geometrischen Rotation des Agglomerats wird mittels Drehmatrix über inkrementelle Teildrehungen gelöst. Da die Eulerschen Gleichungen nur im Partikelbezugssystem Gültigkeit besitzen, müssen für jedes Agglomerat der Trägheitstensor und darauf aufbauend die Hauptträgheitsmomente über die Lösung des Eigenwertproblems bestimmt werden. Basierend auf den Eigenvektoren kann eine Rotationsvorschrift formuliert werden, um die im globalen Koordinatensystem vorliegenden Drehmomente in Partikelkoordinaten zu überführen.

Neben der physikalisch-numerischen Umsetzung von Translation und Rotation konnten die erforderlichen Anpassungen auf Gitterebene implementiert werden. Je nach Partikellage und -ort müssen Gitterknoten von Status „fluid“ auf „solid“ und umgekehrt umgeschaltet werden, um Lageänderungen des Partikels zu realisieren. In diesem Zusammenhang wurde eine Randbedingung für gekrümmte Oberflächen für die Anwendung mit bewegten Hinderniswänden erweitert. Die gekoppelte, zeitschrittgebundene Berechnung von Fluid und Partikelbewegung erfolgt in einem transienten Verfahren. Darüber hinaus wurde ein Mesh-Movement-Algorithmus implementiert, der das Verschieben von lokalen Gitterverfeinerungen gebunden an die Agglomeratbewegung ermöglicht. Abb. 17 zeigt eine schematische Darstellung eines Strömungsgebiets mit poröser Wand zur Agglomeratabscheidung. Während das feine Gitter entlang der Filterwand stationär modelliert werden kann, müssen die feinen Gitterregionen in Agglomeratumgebung bei Bewegung folgen. Auf diese Weise kann auch bei der Simulation des freien Agglomerattransports eine hohe Auflösung der Agglomeratgeometrie bei gleichzeitig handhabbarem numerischen Aufwand erreicht werden.

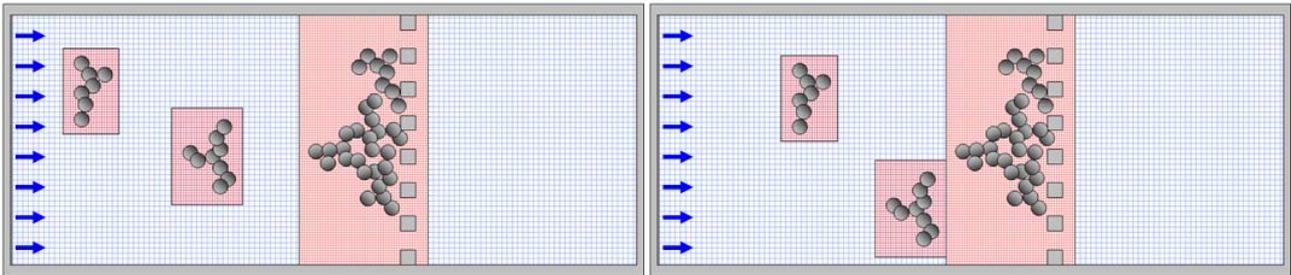


Abb. 17: Schematische Darstellung des Agglomerattransports (links: Zeitpunkt  $t$ ; rechts: Zeitpunkt  $t + \Delta t$ ) mit stationärer feiner Gitterregion entlang der Filterwand und mit bewegten feinen Gitterbereichen in unmittelbarer Agglomeratumgebung

Die Validierung der translatorischen Partikelbewegung und des Mesh-Movement-Algorithmus erfolgte anhand von Simulationen zur schwerkraftbedingten Sedimentation von Kugeln. Die betrachteten Partikel wurden mit einer zusätzlichen Verfeinerungsstufe gegenüber dem umgebenden Gitter aufgelöst. Abb. 18 zeigt eine Sequenz des Beschleunigungsvorgangs zur Veranschaulichung der Ausbildung des Strömungsprofils unter Mitbewegen der feinen Gitterregion. Das vertikale Strömungsgebiet ist oben und unten durch eine periodische Randbedingung begrenzt. Die übrigen Seiten weisen eine Symmetrierandbedingung auf. Partikel und Fluid wurden mit einer Geschwindigkeit von Null initialisiert. Die im Simulationsverlauf erreichte stationäre Sinkgeschwindigkeit liegt etwas unterhalb der mit der Korrelation (Schiller und Naumann, 1933) vorhergesagten Geschwindigkeit, die ein unbegrenztes Strömungsgebiet voraussetzt. Die Abweichung von ca. 3,5 % resultiert vermutlich aus den eingeschränkten Abmessungen des Strömungsgebietes, die eine Beeinflussung des Sinkvorgangs durch die Randbedingungen zu Folge haben. Unter Anwendung einer Wandkorrektur nach Ladenburg (Fidleris and Whitmore, 1961) ist die simulierte Sinkgeschwindigkeit ca. 3 % überschätzt, vermutlich begründet durch die Anwendung von Symmetrierandbedingungen anstelle fester Wände. Dennoch kann anhand dieser Ergebnisse die Berechnung des Geschwindigkeits-Ort-Verlaufs als hinreichend genau angesehen werden.

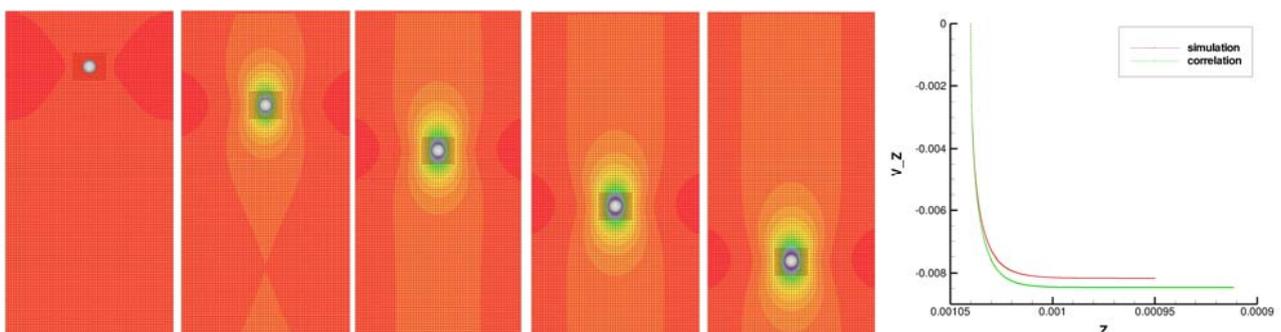


Abb. 18: Sequenz der Sedimentation einer Kugel unter Anwendung einer mitbewegten feinen Gitterregion sowie zugehöriges Geschwindigkeits-Ort-Diagramm

Die Validierung des Rotationsalgorithmus für axialsymmetrische Partikel wurde anhand der Kugelrotation in einer Scherströmung durchgeführt. Dazu wurde ein kugelförmiges Partikel in eine Couette-Strömung eingebracht und umströmt. Die Kugel konnte sich dabei frei um alle Achsen drehen, eine Ortsänderung wurde jedoch zur Verhinderung einer Überlagerung der Rotationsbewegung mit der Translation bewusst ausgeschlossen. Die Validierungsrechnungen erfolgten transient, wobei zu Simulationsbeginn eine ruhende, nicht rotierende Kugel vorgegeben wurde. Diese wurde angetrieben durch die Scherströmung im Verlauf der Berechnung zunehmend beschleunigt, d.h. in Rotation versetzt, bis die stationäre Rotationsgeschwindigkeit erreicht war. Abb. 19 zeigt den Zustand der stationären Kugelrotation um die  $x$ -,  $y$ - bzw.  $z$ -Achse. Einströmseite und Ausrichtung der Scherströmung wurden so gewählt, dass nur einachsige Drehzustände der Kugel zu erwarten waren. Die Rechnungen zeigten Übereinstimmung sowohl bezüglich der resultierenden stationären Rotationsgeschwindigkeit als auch beim zeitlichen Verlauf der Beschleunigung.

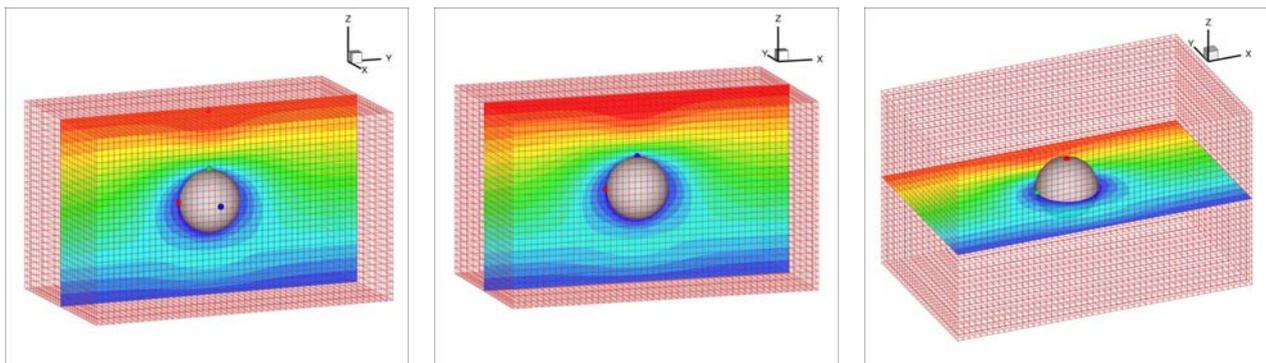


Abb. 19: 3D-Simulationsergebnisse zur Kugelrotation um die  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Achse in einer Couette-Strömung: Kugel und Fluidgeschwindigkeit im Schnitt durch die Kanalmitte [rot: hohe Geschwindigkeit, blau: niedrige Geschwindigkeit]

Die Rotation von nicht-axialsymmetrischen Partikeln wurde bisher an verschiedenen Agglomeratgeometrien getestet und liefert qualitativ plausible Ergebnisse. Die durch eine Scherströmung induzierte, ortsfeste Rotation eines asymmetrischen Agglomerats ist in Abb. 20 dargestellt. Dabei ist eine freie Drehung um alle Partikelachsen zu erkennen. Erwartungsgemäß ist die Auslenkung des Agglomerats um die Achse senkrecht zum Geschwindigkeitsgradienten am größten. Eine quantitative Validierung der Rotation asymmetrischer Partikel konnte aufgrund fehlender Vergleichsdaten bisher noch nicht erbracht werden.

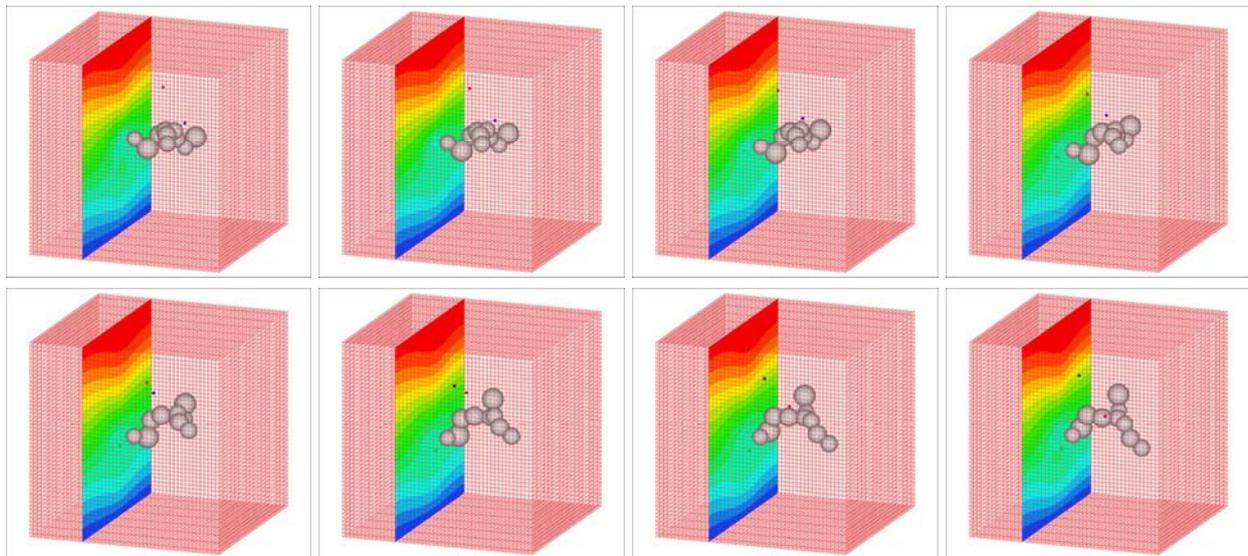


Abb. 20: 3D-Simulationssequenz zur ortsfesten Agglomeratrotation in einer Couette-Strömung:  
 Agglomeratlage und Fluidgeschwindigkeit im Schnitt  
 [rot: hohe Geschwindigkeit, blau: niedrige Geschwindigkeit]

Mit dem Abschluss der Arbeiten an der Modellierung von Translation und Rotation sowie am Depositionsmodell sind alle Grundlagen zur Durchführung von Depositionsrechnungen vorhanden. Aufgrund der umfangreichen Implementierungs- und Validierungsarbeiten und des hohen numerischen Aufwands konnten innerhalb der Projektlaufzeit keine Parameterstudien zur Charakterisierung von Rußschichten erfolgen.

### 2.1.5 Zusammenfassung

Im Rahmen des Forschungsvorhabens konnten Methoden zur Agglomeratgenerierung und –charakterisierung erfolgreich an einen bestehenden Strömungslöser auf Basis der Lattice Boltzmann Methode angebunden werden. Es wurden verschiedene Strukturparameter identifiziert, die sensitiv gegenüber morphologischen Unterschieden von Agglomeraten sind. Unter anderem wurden Methoden zur Ermittlung von geometrischen Äquivalentdurchmessern, der fraktalen Dimension und der Porosität basierend auf der konvexen Hülle entwickelt. Darüber hinaus wurden spezielle Randbedingungen sowie die Kräfteberechnung auf Strömungshindernisse implementiert, die eine Bestimmung von Widerstands-, Auftriebs- und Momentenbeiwert umströmter Partikel ermöglichen. Anhand von Parameterstudien zur Umströmung von dendritischen und kompakten Agglomeraten konnte der Einfluss der Partikelgeometrie bei vergleichbaren Strömungsbedingungen untersucht werden. Die Agglomeratgeometrie wurde dabei mit Hilfe eines nicht-äquidistanten numerischen Gitters in Form von lokalen Gitterverfeinerungen vollständig

aufgelöst. Als aussichtsreiche Referenzgröße für die Formulierung von Korrelationen zum Agglomeratwiderstand wurde die Anströmfläche der konvexen Hülle erkannt, die jedoch in Abhängigkeit der Anströmrichtung bestimmt werden muss. Eine richtungsunabhängige Alternative hingegen bietet der oberflächeäquivalente Durchmesser der konvexen Hülle. Hinsichtlich Auftriebs- und Momentenbeiwert konnten bislang keine befriedigenden Modellierungsansätze gefunden werden.

Die Simulation der freien Agglomeratbewegung konnte durch Erweiterungen des Strömungslösers hinsichtlich zeitlich veränderlicher Strömungsberandungen und bewegter feiner Gitterregionen umgesetzt werden. Neben der Partikeltranslation wurde die Rotation infolge der am Partikel angreifenden Strömungskräfte modelliert, wobei sich die Ermittlung der Hauptträgheitsmomente und des entsprechenden Partikel-Bezugssystems als numerisch sehr aufwendig erwies. Weiterhin wurde ein einfaches Depositionsmodell entwickelt, welches eine Umorientierung von Agglomeraten während ihrer Anlagerung erlaubt. Aufgrund des hohen Entwicklungs- und Simulationsaufwands konnten die erforderlichen Arbeiten erst gegen Ende der Projektlaufzeit beendet und damit keine Parameterstudien zur Rußschichtenbildung infolge der Agglomeratdeposition durchgeführt werden.

## **2.2 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse**

Die Ergebnisse zur Untersuchung des Transportverhaltens von Rußagglomeraten konnten einen Beitrag zur erfolgreichen Bearbeitung des Gesamtprojekts leisten. Die ermittelten Widerstands-, Auftriebs- und Momentenbeiwerte von virtuellen Rußagglomeraten können darüber hinaus als Modellierungsgrundlage für anknüpfende numerische Untersuchungen genutzt werden. Wichtige Erkenntnisse konnten zudem auf dem Gebiet der Agglomeratcharakterisierung gewonnen werden, indem geeignete Strukturparameter identifiziert worden sind. Des Weiteren wurde ein wesentlicher Fortschritt bei der Modellierung der freien strömunggetriebenen Agglomeratbewegung erarbeitet, der in der Erweiterung des Lattice Boltzmann Strömungslösers mündete. Mittels der implementierten Methoden können in zukünftigen Vorhaben die Bemühungen weitergeführt werden, um das Bewegungsverhalten von Agglomeraten und deren Depositionsvorgänge genauer zu studieren.

## 2.3 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Auf dem Gebiet der Beiwertbestimmung von Agglomeraten mittels der Lattice Boltzmann Methode wurden während der Projektlaufzeit Arbeiten am Institut für Partikeltechnologie der Universität Erlangen-Nürnberg bekannt:

Binder, C., et al., *Simulation of hydrodynamic drag of aggregated particles*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 301, Issue 1, S. 155-167 (2006)

## 2.4 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

### 2.4.1 Erfolgte Veröffentlichungen

- WING Jahrbuch 2006 – 2008
- WING Poster 2007
- Dietzel, M., Sommerfeld, M., Teike, G. und Schomburg, H., *Determination of aerodynamic coefficients of agglomerates*, Proceedings of ICMF 2007, Leipzig, Germany (2007)
- Dietzel, M., Sommerfeld, M., *Determination of aerodynamic coefficients of agglomerates using the Lattice-Boltzmann-Method*, Proceedings of CFD 2008, Trondheim, Norway (2008)
- Dietzel, M., Sommerfeld, M., *Bestimmung aerodynamischer Beiwerte und Untersuchungen zur Bewegung von Agglomeraten mit der Lattice-Boltzmann-Methode*, Posterbeitrag ProcessNet Jahrestagung 2008, Karlsruhe, Deutschland (2008)
- Dietzel, M., Sommerfeld, M., *LBM simulations on agglomerate transport and deposition*, Proceedings of ISMF 2009, Xi'an, China (2009)

### 2.4.2 Geplante Veröffentlichungen

- Dietzel, M., Sommerfeld, M., *Lattice Boltzmann simulations on agglomerate transport and deposition*, (voraussichtlich 2010)

### **3 Erfolgskontrollbericht siehe Anlage**