3 Das Euler/Lagrange-Verfahren für die Berechnung von Zweiphasenströmungen

Das sogenannte Euler/Lagrange-Verfahren eignet sich besonders für die numerische Berechnung disperser Zweiphasenströmungen. Bei diesem Verfahren wird die kontinuierliche

Phase durch Lösung der Reynoldsgemittelten Erhaltungsgleichungen in Verbindung mit einem geeigneten Turbulenzmodell berechnet. Die disperse Phase wird simuliert, indem eine Vielzahl von Partikeln unter Beachtung der auf sie wirkenden Kräfte durch das zuvor berechnete Strömungsfeld verfolgt werden. Die Eigenschaften der dispersen Phase werden dabei durch Anzahlmittelung erhalten. Dem Einfluss der dispersen Phase auf Fluidströmung wird durch geeignete Quellterme in den Erhaltungsgleichungen kontinuierlichen Phase Rechnung getragen. Zu den Vorteilen des Euler/Lagrangeschen Verfahrens zählen im Wesentlichen:

- ✓ einfache Berücksichtigung der Partikelgrößenverteilung,
- ✓ Berücksichtigung der für die Partikelbewegung relevanten Kräfte entsprechend dem Newton'schen Axiom,
- ✓ anschauliche Modellierung der physikalischen Effekte, wie z.B. Partikel-Wand-Kollisionen, Partikel-Partikel-Kollisionen und Partikelagglomeration.

3.1 Berechnung der Fluidströmung

Die Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls über einem infinitesimalen Kontrollvolumen (siehe Bild 9) wird durch die Bilanzierung des Flussvektors der interessierenden Variable (wie z.B. des Massenflusses, der Geschwindigkeitskomponenten, der turbulenten kinetischen Energie) über das betrachtete Kontrollvolumen erhalten. Man kann eine allgemeine, differentielle Transportgleichung für eine beliebige Variable φ formulieren:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + div(\rho U\phi) = div(\Gamma_{\phi} \ grad\phi) + S_{\phi}$$
(24)

Nach dem Erhaltungsprinzip setzt man die zeitliche Änderung des Flussvektors der Variable φ und den konvektiven Transport (Transport durch die gemittelte Strömungsgröße) gleich dem

diffusiven Transport (Transport durch den Konzentrationsgradienten) und einem Quellterm (Generation oder Verlust sowie Wirkung von äußeren Kräften). Γ_{ϕ} und S_{ϕ} sind dabei der spezifische Diffusionskoeffizient und der Quellterm für die interessierende Variable ϕ .

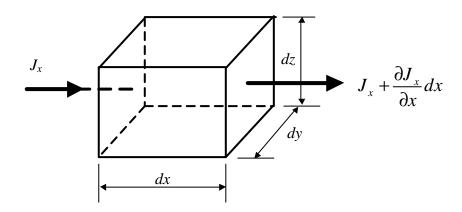


Bild 9 Flussbilanz in x-Richtung an einem Volumenelement (Patankar, 1980)

In technischen Strömungen treten oft Turbulenzerscheinungen auf, so dass die Lösung des momentanen Fluidgeschwindigkeitsfeldes nicht mehr das allgemeine Erscheinungsbild des Strömungsfelds wiedergibt. Zusätzliche Informationen über die turbulenten Eigenschaften des Strömungsfelds werden benötigt. Deshalb wird die Turbulenz mit einem statistischen Ansatz beschrieben. stellt sich die turbulente Strömung als eine Überlagerung Grundströmung durch eine ungeordnete, stochastische Bewegung vor und spaltet turbulenten Strömungsgrößen in Mittelwert und Schwankungsgröße auf. Diese Reynolds'sche Zerlegung wird in die Transportgleichung eingesetzt. Dies ergibt die Grundgleichungen für die Euler'sche Berechnung auf der Basis zeitgemittelten Erhaltungsgleichungen für turbulente Strömungen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad \text{und}$$
 (25)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u_i u_j} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_j} + S_u$$
 (26)

In der Impulstransportgleichung (26) taucht zusätzlich ein Tensor 2. Ordnung auf, welcher die Korrelation der Schwankungsbewegungen darstellt. Dieser Tensor wird als der Reynoldsspannungstensor bezeichnet. Er beschreibt den Transport des mittleren Impulses durch die turbulenten Fluktuationen. Durch die Anwesenheit des unbekannten Reynolds-

spannungstensors ist das Gleichungssystem nicht geschlossen, d.h. die Zahl der Unbekannten übersteigt die Zahl der verfügbaren Gleichungen. Das Problem ist auch nicht durch das Aufstellen einer neuen Transportgleichung für den Reynoldsspannungstensor zu beheben, da in dieser Gleichung erneut unbekannte Terme auftreten. Auf Grund des sogenannten Schließungsproblems ist man bei diesem Ansatz zur Modellierung des Reynolds-Spannungstensors gezwungen.

3.2 Turbulenzmodellierung der Fluidphase

Zur Modellierung des Reynolds-Spannungstensors wurden folgende Strategien eingesetzt, die zu unterschiedlichen Klassen von Turbulenzmodellen gehören. Zu den Modellen der Schließung erster Ordnung zählen das algebraische Modell, das Eingleichungsmodell und das k-ε-Turbulenzmodell. Zu den Modellen der Schließung zweiter Ordnung gehören das Reynoldspannungs-Transportmodell und das Algebraische Reynoldsspannungsmodell.

3.2.1 Das k-e -Turbulenzmodell

Das k-\varepsilon-Turbulenzmodell ist das meist verwendete statistische Turbulenzmodell zur Schließung der Erhaltungsgleichungen. Es beschreibt die Reynolds-Spannungen durch die Wirbelviskosität. Die turbulente Wirbelviskosität steht im Zusammenhang mit der turbulenten kinetischen Energie und ihrer Dissipationsrate:

$$v_T = C_{\mu} k^2 / \varepsilon \tag{27}$$

Diese Beziehung ergibt sich aus der Energiebilanz, wobei ein Gleichgewicht zwischen der Dissipationsrate und der Produktion der turbulenten kinetischen Energie angenommen wird. Für Strömungen mit hoher Reynoldszahl ist diese Annahme gültig. In der obigen Beziehung hat die Modellkonstante C_{μ} den Wert 0,09 und wurde aus experimentellen Beobachtungen ermittelt. Nun richtet sich das Problem im k- ϵ -Turbulenzmodell auf die Lösung der Transportgleichungen für zwei skalare Größen. Dabei werden die zeitliche und die räumliche Verteilung von k und ϵ im Rechengebiet ermittelt. Die exakten Gleichungen für den Transport der turbulenten kinetischen Energie k sowie von ϵ werden aus der Transportgleichung für die Reynoldsspannung abgeleitet. Zur Schließung der Gleichung müssen jedoch nicht schließende

Terme wie der Transport und der Druck-Diffusions-Term durch das Gradienten-Transportmodell angenähert werden. Die modellierten Gleichungen für k und ϵ können zusammengefasst dargestellt werden:

$$\partial_{t}k + U_{j}\partial_{j}k = P - \varepsilon + \partial_{j}\left((v + v_{T}) \partial_{j}k\right)$$

$$\partial_{t}\varepsilon + U_{j}\partial_{j}\varepsilon = \frac{\varepsilon}{k}\left(C_{\varepsilon 1}P - C_{\varepsilon 2}\varepsilon\right) + \partial_{j}\left(\left(v + \frac{v_{T}}{\sigma_{\varepsilon}}\right)\partial_{j}\varepsilon\right)$$
(28)

In den Gleichungen steht P für die Turbulenzproduktion und beschreibt die Erzeugung turbulenter Fluktuationen durch Schergradienten im mittleren Strömungsprofil. Mit der Definition $P \equiv \overline{u_i u_j} \partial_j U_i$ kann der Produktionsterm für inkompressible Strömungen in Verbindung mit dem Boussinesq-Ansatz formuliert werden $P = 2v_T S_{ij} S_{ji}$, wobei $S_{ii} = 1/2 \left[\partial_i U_i + \partial_j U_i \right]$ die Scherspannungsrate ist.

Der Ansatz von Boussinesq ist allgemein bekannt:

$$-\overline{u_i u_j} = 2v_T S_{ij} - 2/3 k \delta_{ij}$$

$$\tag{29}$$

Bei ihm wird angenommen, dass analog zum laminaren Strömungsverhalten die turbulente Reynoldsspannung $\overline{u_iu_j}$ proportional zum mittleren Geschwindigkeitsgradienten mit der turbulenten Wirbelviskosität \mathbf{n}_T als einem Faktor ist. Die Konstanten des k- ε -Turbulenzmodells sind in Tabelle 2 aufgelistet.

Tabelle 2 Konstanten des k-ε-Turbulenzmodells

C_{μ}	$C_{f el}$	C_{e2}	$oldsymbol{S}_k$	$oldsymbol{S_e}$
0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

Die Anwendung des k-ε-Turbulenzmodells in der unmittelbaren Nähe der Wand ist stark fehlerbehaftet, da die Viskositätseinflüsse in Wandnähe im Modell nicht korrekt beschrieben wurden. Als Ausweg bieten sich inzwischen mehrere Methoden an. Eine Methode ist die Benutzung einer Dämpfungsfunktion (Launder & Sharma 1974) zur Dämpfung der Wirbelviskosität in Wandnähe. Diese führte zur Entwicklung des "Low-Reynolds-number"-Modells (einer Modifikation des k-ε-Turbulenzmodells). Eine andere Methode ist die Verwendung einer Wandfunktion. Dabei wird der verlauf der Turbulenz und der mittleren Geschwindigkeit in Wandnähe durch ein vorgeschriebenes Profil, das universale Wandgesetz, festgelegt. Die Turbulenz im Strömungsfeld, welches sich genügend weit von der

Wandoberfläche entfernt befindet, wird weiterhin mit dem k-\varepsilon-Turbulenzmodell berechnet. Beide Vorhersageregionen überlappen sich in der logarithmischen Grenzschichtregion. Eine weitere Methode ist das Zwei-Schichten-Modell (Chen & Patel 1988). Bei dieser Methode wird das Strömungsfeld im Wandbereich mit einem Eingleichungsmodell wiedergegeben, und weit entfernt von der Wand, wo der Viskositätseinfluss vernachlässigbar ist, wird das k-\varepsilon-Turbulenzmodell verwendet.

Beim Eingleichungsmodell wird die modellierte k-Gleichung benutzt und die ϵ -Gleichung durch eine algebraische Formel $\epsilon = k^{1.5}/l_{\epsilon}$ ersetzt. Das Dissipationslängenmaß l_e in der Wandgrenzschicht ist eine Funktion des Wandabstands y (Kohnen 1997):

$$l_{e} = \frac{kC_{m}^{-3/4}y}{1+5,3/\text{Re}_{y}}$$
 (30)

Außerdem wird die Wirbelviskosität mit einem Abstandslängenmaß l_{m} welches die Dämpfung der Wirbelviskosität zur Wand annähernd modelliert, berechnet:

$$\mathbf{n}_T = C_{\mathbf{m}} k^{0.5} \cdot l_{\mathbf{m}} \tag{31}$$

Kohnen (1997) liefert die Beziehung für das Abstandslängenmaß l_{m}

$$l_{\mu} = \kappa C_{\mu}^{-3/4} y \left(1 - \exp\left(-\frac{\operatorname{Re}_{y}}{A_{\mu}}\right) \right)$$
 (32)

Dabei nimmt die Konstante A_{μ} den Wert 50,5 an, und die Reynoldszahl Re $_y$ ist durch $Re_y = \frac{k^{0.5}y}{n}$ definiert. Der Wechsel vom Eingleichungs-Turbulenzmodell zum Standard-k- ϵ -

Turbulenzmodell erfolgt bei der Bedingung $l_m > 0.95$.

3.2.2 Das Reynoldsspannungs-Transportmodell

Das k-ɛ-Turbulenzmodell ist wegen der einfachen Handhabung weit verbreitet. Für viele Strömungsprobleme ergeben sich durch seine Anwendung gute Übereinstimmungen mit experimentellen Untersuchungen. Die Anwendung bei komplexeren Strömungsproblemen zeigt jedoch eine Reihe von Schwachstellen. Ursache dafür ist die Verwendung von vereinfachten Annahmen bei der Turbulenzmodellierung:

- ✓ Eingeschränkte Verwendbarkeit durch die linear vorgegebene Spannungs-Deformationsrate-Beziehung. Dadurch ergeben sich Unzulänglichkeiten bei der Beschreibung von Strömungen, die nicht durch einen spektralen Gleichgewichtszustand gekennzeichnet sind.
- ✓ Unempfindlichkeit bezüglich der Orientierung der turbulenten Strukturen und der Anisotropie der Normalspannung.

genannten Defizite können durch die Anwendung eines Reynoldsspannungs-Transportmodells (RSTM) ausgeglichen werden. Im Unterschied zum Standard-k-ε-Turbulenzmodell wird die Reynoldsspannung beim Reynoldsspannungs-Transportmodell aus den modellierten Transportgleichungen bestimmt. Beim Reynoldsspannungs-Transportmodell Transportgleichungen für die sechs Reynolds'schen Spannungskomponenten aufgestellt. Diese lauten in kartesischen Koordinaten wie folgt:

$$\frac{\partial \left(\rho \overline{u_i u_j}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho U_k \overline{u_i u_j}\right)}{\partial x_k} = P_{ij} + \Phi_{ij} + D_{ij} - \rho \varepsilon_{ij}$$
(33)

Die Terme auf der rechten Seite der Gleichung (33) können wie folgt interpretiert werden. Der turbulente Diffusionsterm D_{ij} , welcher den Vorgang des Turbulenztransports durch die turbulenten Fluktuationen, die Druckschwankungen und die viskosen Kräfte darstellt, wird durch die Anwendung des Gradientendiffusionsansatzes modelliert:

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} (C_{s} \mathbf{r}_{f} \, \overline{u_{k}} \, \overline{u_{l}} \, \frac{k}{\mathbf{e}} \frac{\partial \overline{u_{i}} \overline{u_{j}}}{\partial x_{l}}) \tag{34}$$

Der Produktionsterm ist eine exakte Größe und kann durch:

$$P_{ij} = -\rho_f \left(\overline{u_i u_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right)$$
 (35)

ausgedrückt werden. Der Umverteilungsterm (oder Druck-Scher-Korrelationsterm) F_{ij} in der Reynoldsspannungsgleichung beschreibt den Umverteilungsprozess, bei dem durch die Druck-Spannungs-Wechselwirkung das Turbulenzfeld beeinflusst wird. Dadurch nähert sich das Strömungsverhalten isotroper Turbulenz an. Die Modellierung der Druck-Scher-Korrelation ist entscheidend für die Bestimmung der Reynoldsspannung aus ihrer Transportgleichung. Der Umverteilungsterm wird oft als eine Linearkombination aus drei Komponenten modelliert. Das sind ein Turbulenz-Turbulenz-Wechselwirkungsterm oder "slow-Term" $F_{ij,1}$, ein Turbulenz-mittlere Strömung-Wechselwirkungsterm oder "Rapid-

Term" $F_{ij,2}$ und ein Wand-Reflektionsterm F_{ijw} . Die Definition des Umverteilungsterms lautet:

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ijw} \tag{36}$$

Für die einzelnen Komponenten erhält man schließlich:

$$\Phi_{ij,1} = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} (\overline{u_i u_j} - \frac{\delta_{ij}}{3} \overline{u_k u_k})$$
(37)

$$\Phi_{ij,2} = -C_2(P_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}P_{kk}) \quad \text{mit} \quad P_{kk} = \frac{1}{2}P_{ij}$$
(38)

$$\Phi_{ijw} = -C_1 \frac{\mathbf{e}}{k} (\overline{u_k u_m} n_k n_m \mathbf{d}_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u_k u_i} n_k n_i - \frac{3}{2} \overline{u_k u_j} n_k n_j) \cdot f$$

$$- C_2 (\Phi_{km,2} n_k n_m \mathbf{d}_{ij} - \frac{3}{2} \Phi_{ik,2} n_k n_i - \frac{3}{2} \Phi_{jk} n_k n_j) \cdot f$$
(39)

Bei der letzten Komponente stellt n_i den wandnormalen Einheitsvektor in i-Richtung dar, f ist eine skalare Funktion des Orts und der Wandgeometrie und ergibt sich mit $\mathbf{D}n$ als dem wandnormalen Abstand zu:

$$f = C_{m}^{0.75} \frac{k^{1.5}}{e \ k \ \Delta n} \tag{40}$$

Für die Dissipationsrate e_{ij} wird lokale Isotropie der dissipativen Bewegung vorausgesetzt:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \rho_f \delta_{ij} \varepsilon \tag{41}$$

Die Dissipationsrate der Energie wird aus der selben Transportgleichung wie beim k-ε-Turbulenzmodell bestimmt. Der Satz der Konstanten im Fall des RSTM ist in Tabelle 3 aufgeführt.

Tabelle 3 Konstanten des Reynoldsspannungs-Transportmodells

						Сε		
0,09	1,8	0,6	0,5	0,3	0,22	0,18	1,45	1,9

Um bei der Benutzung des RSTM das Problem der hohen Anzahl der Gitterpunkte zur Auflösung der turbulenten Grenzschicht an der Wand zu umgehen, wurde die Methode der Wandfunktion benutzt. Das Geschwindigkeitsprofil im logarithmischen Bereich der turbulenten Grenzschicht (oder der Trägheitsunterschicht) wurde mit dem universalen Wandgesetz beschrieben:

$$u^{+} = \frac{\overline{v_{m}}}{u_{\tau}} = \frac{1}{\kappa} \ln y^{+} + B ,$$
 (42)

wobei $\overline{v_m}$ die mittlere Geschwindigkeit parallel zur Wand ist, $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$ die Schergeschwindigkeit, t_w die Scherspannung an der Wand, B eine empirische Konstante und y^+ der dimensionlose Abstand von der Wand ($y^+ = yu_\tau/\nu$). Die Trägheitsunterschicht fängt bei $y^+ > 30$ an. In der viskosen Unterschicht ändert sich die Geschwindigkeit linear zum Abstand von der Wand, so ist $u^+ = y^+$ für $y^+ < 5$.

3.3 Numerische Lösungsmethode zur Berechnung des Fluidströmungsfeldes

Das angegebene Transportgleichungssystem ist bei der Anwesenheit von turbulenten Größen im Allgemeinen nicht analytisch lösbar. Die Lösung dieses Gleichungssystems kann nur über Approximation und iterativ auf numerischem Weg durch Einsatz von Computern erfolgen. Diese Methode ist für komplexe Strömungsgeometrien geeignet. Das in der Arbeit verwendete Lösungsverfahren ist die Finite-Volumen-Methode (FVM) (Patankar 1980, Peric 2000). Der vorliegende Abschnitt dient der Erläutung des Prinzips der FVM. Es beschränkt sich deshalb auf die Lösung von stationären und zweidimensionalen Strömungsproblemen.

Bei der FVM wird das Berechnungsgebiet in eine Vielzahl von Kontrollvolumina unterteilt. Das numerische Gitter stellt die Grenzflächen zwischen den Kontrollvolumina dar. Die Variablen sind im Mittelpunkt des Kontrollvolumens definiert und ergeben sich als lokale Mittelwerte über das Kontrollvolumen. Für die FVM wird die allgemeine Transportgleichung über ein Kontrollvolumen integriert, wobei das Gauß'sche Theorem benutzt wird, um das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral umzuwandeln:

$$\int_{A} \mathbf{r} \mathbf{f} U_{i} \cdot \overrightarrow{n_{i}} dA = \int_{A} \Gamma_{\mathbf{f}} \operatorname{grad} \mathbf{f} \cdot \overrightarrow{n_{i}} dA + \int_{\Omega} S_{\mathbf{f}} d\Omega$$
(43)

Bild 10 zeigt ein Kontrollvolumen in einem zweidimensionalen, nicht orthogonalen Gitter. Bei der FVM werden zunächst die Integrale in der Gleichung (43) ausgewertet, und die Gleichung wird linearisiert. Es werden konstante Massenflüsse entlang der Kontrollvolumengrenzflächen und konstante Quellterme im Kontrollvolumen angenommen. Die Kontinuitätsgleichung kann wie folgt diskretisiert werden:

$$(\rho UA)_{e} - (\rho UA)_{w} + (\rho VA)_{n} - (\rho VA)_{s} = J_{e} - J_{w} + J_{n} - J_{s} = 0$$
(44)

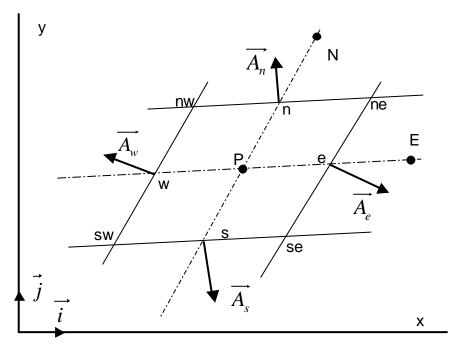


Bild 10 Kontrollvolumen in einem zweidimensionalen Gitter mit verwendeter Normenklatur (FASTEST-Bedienungsanleitung)

In der allgemeinen Transportgleichung für eine beliebige Variable oder skalare Größe werden die konvektiven Flüsse durch die Grenzflächen Ost (e) und Nord (n) wie folgt approximiert:

$$J_e^C \approx \left(\rho \vec{U} \cdot \vec{A}\right)_e \phi_e = \rho_e \left[U(y_n - y_s) - V(x_n - x_s)\right]_e \cdot \phi_e \tag{45}$$

$$J_n^C \approx \left(r \overrightarrow{U} \cdot \overrightarrow{A} \right)_n \mathbf{f}_n = \mathbf{r}_n [V(x_e - x_w) - U(y_e - y_w)]_n \cdot \mathbf{f}_n \tag{46}$$

Die diffusiven Flüsse durch die Grenzflächen Ost und Nord ergeben sich zu:

$$J_{e}^{D} \approx -\Gamma_{f,e} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} \dot{i} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial y} \dot{j} \right)_{e} \cdot \overrightarrow{A_{e}} = -\frac{\Gamma_{f,e}}{\mathbf{d}V_{e}} \left\{ (\mathbf{f}_{E} - \mathbf{f}_{P}) \left[(y_{n} - y_{s})_{e}^{2} + (x_{n} - x_{s})_{e}^{2} \right] - \left[(\mathbf{f}_{E} - \mathbf{f}_{P}) \left[(y_{n} - y_{s})_{e} + (x_{n} - x_{s})_{e}^{2} \right] - \left[(\mathbf{f}_{E} - \mathbf{f}_{P}) \left[(y_{n} - y_{s})_{e} + (x_{n} - x_{s})_{e}^{2} \right] \right] \right\}$$
(47)

$$J_{n}^{D} \approx -\Gamma_{\phi,n} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \dot{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \dot{j} \right)_{n} \cdot \overrightarrow{A_{n}} = -\frac{\Gamma_{\phi,n}}{\delta V_{n}} \left\{ (\phi_{N} - \phi_{P}) \left[(y_{e} - y_{w})_{n}^{2} + (x_{e} - x_{w})_{n}^{2} \right] - (\phi_{e} - \phi_{w})_{n} \left[(y_{N} - y_{P}) (y_{e} - y_{w})_{n} + (x_{N} - x_{P}) (x_{e} - x_{w})_{n} \right] \right\}$$
(48)

Das Integral des Quellterms ist definiert als:

$$S = \int_{\Omega} S_f d\Omega \approx \left(S_f\right)_P d\Omega \tag{49}$$

Beim Einsetzen aller diskretisierten Terme in die Transportgleichung erhält man eine lineare Gleichung der Form:

$$a_P \phi_P = \sum_{NB} a_{NB} \phi_{NB} + S_{\phi} \tag{50}$$

Hierin wird der Wert der Variable f im Mittelpunkt P aus den Werten der benachbarten Zellen (mit dem Index NB) berechnet. Dabei sind a_P und a_{NB} die Transportkoeffizienten und zugleich kurzgefasste Ausdrücke für die diffusiven und konvektiven Massenströme.

Auf der Grundlage der bereits beschriebenen räumlichen Diskretisierung berechnet das numerische Verfahren Werte der Transportgröße φ an den Gitterknoten, d.h. im Mittelpunkt der Bilanzzelle. Die diffusiven und konvektiven Flüsse enthalten jedoch die Werte auf den Begrenzungslinien des Kontrollvolumens. Um diese Werte zu bestimmen, müssen Interpolationsverfahren eingesetzt werden. Diese Interpolationswerte werden mit Hilfe des sogenannten Diskretisierungsschemas ermittelt. Für die Funktionswerte wird oft das Upwind-Schema (UDS) verwendet:

$$\mathbf{f}_{e} = \begin{cases} \mathbf{f}_{P} & f \ddot{u} r \quad J_{e} \ge 0 \\ \mathbf{f}_{E} & f \ddot{u} r \quad J_{e} < 0 \end{cases}$$
 (51)

Beim Zentrale-Differenzen-Schema (CDS) gilt:

$$\phi_e = \frac{1}{2} (\phi_E + \phi_P) \tag{52}$$

Das Flux-Blending-Approximationsschema kombiniert das CDS mit dem UDS. Beide Verfahren werden mit dem Parameter γ gewichtet.

$$\phi_e = \gamma \phi_{e,CDS} - (1 - \gamma) \phi_{e,Upwind} \tag{53}$$

Das Lösungsverfahren mit dem Upwind-Schema ist immer stabil, da die resultierenden Koeffizienten stets positiv sind. Bei Verwendung des Upwind-Schemas tritt verstärkt numerische Diffusion auf, da die Upwind-Interpolation nur erster Ordnung genau ist. Das CDS-Schema hat eine Genauigkeit zweiter Ordnung, die Stabilität der Lösung jedoch wird reduziert. Negative konvektive Transportterme J_i^C , die bei der CDS-Interpolation zwangsläufig auftreten, stören nachhaltig die Stabilität des numerischen Verfahrens, sobald ihr Betrag den des diffusiven Austauschterms J_i^D übersteigt (Peric 2000).

Die Koeffizienten der linearen Gleichung haben die folgende, endgültige Form:

$$a_{E} = D_{E} + \max(-F_{e}, 0)$$

$$a_{W} = D_{W} + \max(F_{w}, 0)$$

$$a_{N} = D_{N} + \max(-F_{n}, 0)$$

$$a_{S} = D_{S} + \max(F_{s}, 0)$$
(54)

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + S_P \tag{55}$$

Die Koeffizienten D_i und F_i sind die aus den impliziten Gleichungen abgeleiteten Faktoren für die diffusiven und konvektiven Flüsse.

Das Ziel des Lösungsverfahrens ist die simultane Lösung der Kontinuitätsgleichung, der Impulsgleichung und der Gleichung für die skalare Strömungsgrößen. Unbekannt sind zunächst, bei Vernachlässigung skalarer Größen, der Geschwindigkeitsvektor und der Druck. In den Impulstransportgleichungen stehen noch die zusätzlichen Beiträge der Druckgradienten, welche bei der Behandlung der allgemeinen Transportgleichung Quellterm aufgefasst wurden. Für die Berechnung der Geschwindigkeitsvektoren muss der Druckgradient bekannt sein. Hier in der Arbeit wird das Druckkorrekturverfahren verwendet. Dazu wird die Impulsgleichung für die gestaffelte Gitteranordnung diskretisiert. Geschwindigkeitskomponente wird auf der ihr senkrechten Kontrollvolumenwand zu gespeichert. Aus der Kontinuitätsgleichung wird die Diskretisierungsgleichung für Druckkorrektur abgeleitet. Diese Gleichungen bilden die Grundlage für den SIMPLE-Algorithmus (nach Spalding 1972, Patankar 1980), der in der Arbeit als eine iterative Methode zur Lösung des Druck-Geschwindigkeits-Kopplungsproblems angewendet wurde. Die Lösungsschritte lauten wie folgt:

- 1. Die Impulsgleichung kann nur gelöst werden, wenn das Druckfeld gegeben ist oder geraten wird. Es wird ein Druckfeld p^* angenommen.
- 2. Mit diesem Druckfeld wird die Impulsgleichung gelöst. Die dabei bestimmten Geschwindigkeitsvektoren u_p^* sind nicht richtig.
- 3. Die Druckkorrekturgleichung zur Bestimmung der Druckkorrektur wird gelöst. Der Druck und die Geschwindigkeiten werden mit dem Ziel korrigiert, dass die neuen Geschwindigkeiten die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Deshalb bilden die Schätzwerte (u_p^*, p_p^*) und die Korrekturwerte (u_p^*, p_p^*) die momentanen Lösungen (u_p^*, p_p^*) .

$$u_P = u_P^* + u_P^*; \ p_P = p_P^* + p_P^*$$
 (56)

- 4. Die Transportgleichungen für die zusätzlichen Variablen, wie z.B. die Turbulenzgrößen k und ϵ , werden gelöst.
- 5. Gehe zu Schritt 2. und iteriere bis zur Konvergenz.

Das Iterationsverfahren ist divergenzempfindlich gegenüber der schlechten Abschätzung des Druckfelds. Die Unterrelaxationsmethode bietet die Möglichkeit zur Verbesserung des Divergenzverhaltens. Deshalb werden im Schritt 4. nicht die vollständigen Korrekturwerte für den Druck und die Geschwindigkeit eingesetzt, sondern nur ein Bruchteil davon. D.h. bei der Unterrelaxationsmethode gilt: $\phi_P = \phi_P^* + \alpha \phi_P^*$ mit $0 \le \alpha \le 1$.

Die linearen Diskretisierungsgleichungen werden für alle Kontrollvolumina im Berechnungsgebiet formuliert. Dabei entsteht das algebraische Gleichungssystem. Zur Lösung dieses Gleichungsystems wurde in der Arbeit die SIP-Methode nach Stone (1968) verwendet.

3.4 Die Berechnung der dispersen Phase

Die Berechnung der dispersen Phase erfolgt durch das Lagrangesche Verfahren. Ziel dieses Verfahrens ist die Bestimmung der Felder der charakteristischen lokalen Größen für die disperse Phase. Das sind z.B. die lokale Verteilung der Partikelanzahl, der Partikelgröße, der Partikelgeschwindigkeit usw. Im Unterschied zu anderen Methoden wie der Euler-Euler-Methode werden hier einzelne Partikeln betrachtet. Man verfolgt das Bewegungsverhalten jeder Partikel im strömenden Fluid. Bei der Berechnung der Partikelbahn werden die lokalen Eigenschaften der Partikeln abgespeichert. Nach der Verfolgung einer genügend großen Anzahl an Partikelbahnen im Fluidfeld werden für jedes Kontrollvolumen die statistischen Mittelwerte der Eigenschaften zur Charakterisierung der dispersen Phase bestimmt. Dabei sind die Mittelwerte anzahlgemittelte Werte. Um statistisch zuverlässige Werte zu erhalten, ist es in der Regel erforderlich, einige tausend Partikelbahnen zu berechnen. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Rückwirkung der dispersen Phase auf die Fluidphase nicht berücksichtigt. Die Turbulenzmodulation sowie der Massenaustausch der Phasen werden hier vernachlässigt.

In der mathematischen Betrachtung ist die Bewegung einer Partikel definiert durch die Änderung der lokalen Koordinaten, der Partikeltranslation sowie der Rotationsgeschwindigkeit. Die Gleichungen zur Beschreibung des Bewegungsverhaltens einer Partikel werden aus dem 2. Newton'schen dynamischen Grundgesetz hergeleitet. Die Partikeln

tauschen mit ihrer umgebenden Fluidphase Impulse aus. Die Bewegungsgleichungen haben die folgende Form:

Koordinatenänderung:
$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p$$
 (57)

Translation:
$$m_p \frac{d\overrightarrow{u_p}}{dt} = \sum \overrightarrow{F}_i + \overrightarrow{F_g}$$
 (58)

Rotation:
$$I_p \frac{d\vec{\mathbf{w}}_p}{dt} = \sum \vec{T}_i$$
 (59)

Bei der Gleichung für die Partikelrotation ist I_p das Trägheitsmoment des Partikels und $\sum \overrightarrow{T_i}$ ist die Summe der an dem Partikel angreifenden Momente. Diese Momente können z.B. aerodynamischer Natur sein, d.h. durch die Reibung zwischen der Partikeloberfläche und dem umgebenden Fluid entstehen. Die Verfolgung der Partikelbahn erfolgt durch Lösung der Bewegungsgleichung für jeden Zeitschritt. Zunächst wird näher auf die Einzelheiten der Bewegungsgleichung eingegangen.

3.4.1 Fluiddynamische Kräfte auf eine Partikel

Die translatorische Bewegungsgleichung der Partikeln ergibt sich aus der Bilanzierung der auf die Partikeln wirkenden fluiddynamischen und äußeren Kräfte. Diese sind:

• die Widerstandskraft

Bei den hier betrachteten Fällen ist die Widerstandskraft auf eine sich in der Strömung bewegende Partikel im Vergleich zu allen Kräften dominierend. Der Widerstand entsteht durch Reibung der Fluidmoleküle an der Partikeloberfläche und durch die Druckkraftverteilung auf der Partikeloberfläche. Die Formel für die Widerstandskraft ergibt sich wiefolgt:

$$F_p = \frac{3}{4} m_p \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{r}_p d_p^2} C_D Re_p v_{rel}$$
(60)

Der Widerstandsbeiwert C_D ist eine Funktion der Partikel-Reynoldszahl Re_p . Im Bereich kleiner Partikel-Reynoldszahlen (im sogenannten Stokes'schen Bereich $Re_p << I$) ergibt sich folgende einfache Form für den Widerstandsbeiwert $C_D = 24/Re_p$. Bei höheren Re_p nimmt die

Bedeutung der Trägheitskraft zu. Eine sehr häufig verwendete Korrelation zur Berechnung von C_D wurde bereits 1933 von Schiller & Naumann vorgeschlagen:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1.0 + 0.15 \ Re_p^{0.687} \right) \quad \text{für} \quad Re_p < 1000$$
 (61)

• die Kraft durch den Druckgradienten

Besteht ein Druckgradient in der Strömung, resultiert eine Kraft auf die Partikel. Mit der Annahme eines konstanten Druckgradienten über die Partikel ergibt sich die Druckkraft durch die Integration über der Partikeloberfläche:

$$\overrightarrow{F}_{p} = -\frac{m_{f}}{\mathbf{r}_{f}} \nabla p = m_{p} \frac{\mathbf{r}_{f}}{\mathbf{r}_{p}} \frac{d\overrightarrow{u}_{f}}{dt} - m_{p} \frac{\mathbf{r}_{f}}{\mathbf{r}_{p}} \overrightarrow{g}$$
(62)

Die Druckkraft setzt sich aus der Druckkraft (erster Term) und der Auftriebskraft (zweiter Term) zusammen. Die Auftriebskraft wird dann meistens mit der Gewichtskraft zusammenfasst. Die Druckkraft ist nur dann von Bedeutung, wenn der Gradient sehr groß ist oder wenn die Dichte des Teilchenmaterials gering gegenüber der Fluiddichte ist. Dies ist für turbulente Gas-Feststoff-Strömungen nicht der Fall.

• die virtuelle Massenkraft

Bei der Beschleunigung der Partikeln muss auch das Fluid in der direkten Umgebung der Partikeln mitbeschleunigt werden, so dass sich ein zusätzlicher Formwiderstand ergibt. Die virtuelle Massenkraft stellt demzufolge nichts anderes dar, als die Masse des mitgenommenen Fluids multipliziert mit der relativen Beschleunigung zwischen den beiden Phasen.

$$F_{VM} = m_p C_{VM} \boldsymbol{g}_p \frac{d}{dt} \left(u_f - u_p \right) \tag{63}$$

Sie ist direkt proportional zum Dichteverhältnis $\mathbf{g}_p = \mathbf{r}_f / \mathbf{r}_p$, d.h. die Größe der Kraft nimmt mit sinkendem \mathbf{g}_p ab. Der Koeffizient C_{VM} beschreibt den Anteil des mitgenommenen Fluidvolumens relativ zum Partikelvolumen. Bei niedrigem Volumenanteil der dispersen Phase ist der Wert $C_{VM} = 0.5$ üblich.

• die Saffman-Kraft

Befindet sich die Partikel in einer Scherströmung, stellt sich eine ungleichmäßige Druckverteilung über der Teilchenoberfläche ein, und es resultiert eine Querkraft senkrecht

zur Richtung der größeren Relativgeschwindigkeit. Hier angegeben, ist die Gleichung für die Saffman-Kraft nach der Arbeit von Saffman (1962):

$$F_{AS} = 1,615 \quad d_p^2 \quad \sqrt{\mathbf{rm}} \cdot v_{rel} \cdot \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|^{0.5} \tag{64}$$

Die Größe der Saffman-Kraft steigt mit zunehmendem Partikeldurchmesser, steigendem Schergradienten und wachsender Schlupfgeschwindigkeit.

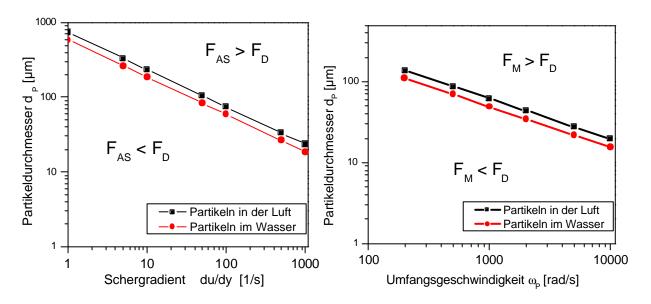


Bild 11 Verhältnis der Saffman-Kraft bzw. der Magnuskraft zur Widerstandskraft in Abhängigkeit vom Schergradienten und der Umfangsgeschwindigkeit (Sommerfeld 1996)

• die Magnuskraft

Die Magnuskraft ergibt sich aus der Eigenrotation der Partikeln in der Strömung. Durch die Rotation stellt sich auf Grund der Relativgeschwindigkeit an der Partikeloberfläche eine ungleichmäßige Druckverteilung ein. Auf der Seite der Partikel, die sich in Strömungsrichtung bewegt, wird das Fluid beschleunigt (der Druck sinkt), Auf gegenüberliegenden Seite wird es abgebremst (der Druck steigt an). Dieser Druckunterschied verursacht eine Kraft quer zur Strömungsrichtung. Die Gleichung zur Bestimmung der Magnuskraft ist in der Arbeit von Rubinow & Keller gegeben:

$$F_{M} = \frac{\mathbf{p}}{8} \mathbf{r}_{F} d_{p}^{3} \left(\overrightarrow{\mathbf{w}}_{rel} \times \overrightarrow{\mathbf{v}}_{rel} \right)$$
 (65)

Hier sind $\vec{\mathbf{w}}_{rel}$ und \vec{v}_{rel} die Partikelrotations- und Translationsgeschwindigkeit relativ zum Fluid.

Da Wirkung Magnuskraft der relativen Rotationsdie der von und Translationsgeschwindigkeit abhängig ist, setzte Sommerfeld (1996) diese Kräfte Verhältnis zur Stokes'schen Widerstandskraft. Der Einfluss dieser Kräfte im Rahmen der Lagrangeschen Berechnung wird über einen Grenzpartikeldurchmesser verdeutlicht, und ist im Bild 11 dargestellt. Bei jeder Umfangsgeschwindigkeit (oder jedem Schergradienten) ergibt sich ein Grenzpartikeldurchmesser, oberhalb welchem die Magnusskraft F_M (oder die Saffmankraft F_{AS}) größer als die Widerstandskraft ist.

Für die Feststoff-Gas-Strömungen ergeben sich die Widerstandskraft und die Gewichtskraft als relevante wirkende Kräfte auf die Partikeln. Die Partikelbewegungsgleichungen in der vorliegenden Arbeit werden mit diesen Kräften bilanziert. Die Kraft durch die virtuellen Massen, die Saffman-Kraft, die Magnuskraft sowie die Basset-Kraft wurden gemäß hohem Dichteverhältnis, oder geringer Schergradient sowie geringem Partikeldurchmesser vernachlässigt.

3.4.2 Turbulente Dispersion von Partikeln

Die wichtigste Eigenschaft der Turbulenz in einer Mehrphasenströmung ist die intensive Dispersion sowie die Mischung der dispersen Phase. Die Ausbreitung der Partikeln während des Transportvorgangs wird durch die turbulenten Wirbel verursacht. Die Partikeln erfahren die Schwankungsgeschwindigkeit des Fluids und verlassen die Hauptströmungsrichtung. Dadurch kommt die intensive Mischung zu Stande.

Die Lagrangesche Berechnung der dispersen Phase beinhaltet die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung der Partikelbewegung. Die benötigte momentane Fluidgeschwindigkeit setzt sich aus der mittleren Strömungsgeschwindigkeit, welche aus der Euler'schen Lösung bekannt ist, und dem Schwankungsanteil zusammen, welcher in Verbindung mit dem Dispersionsmodell zufällig generiert wird. Die Modellierung der Partikeldispersion in turbulenten Strömungen ist eine komplexe Aufgabe. Gosman & Ioannides (1981) stellten das diskrete Wirbellebensdauer-Dispersionsmodell vor. Hierin wurde der Schwankungsanteil aus einer Gauß'schen Verteilungsfunktion generiert, deren Varianz proportional zur lokalen turbulenten kinetischen Energie ist. Dann wurde die Bewegungsgleichung der Partikeln mit der unveränderten momentanen Fluidgeschwindigkeit über eine bestimmte Partikel-Wirbel-

Wechselwirkungszeit integriert. Die Partikel-Wirbel-Wechselwirkungszeit ist definiert als das Minimum zwischen der Wirbellebensdauer und der Zeit, die eine Partikel benötigt, um den Wirbel zu durchqueren. In diesem Modell wird das momentane Turbulenzgeschwindigkeitsfeld innerhalb des Wirbels als gleichverteilt angenommen. Kallio & Reeks (1989) bestimmten die modifizierten obige Modell. Sie Wirbellebensdauer Verteilungsfunktion, mittlerer Betrag exponentiellen deren gleich dem Lagrangeschen Zeitmaß ist. Burnage & Moon (1990) beschäftigen sich ebenfalls mit dieser Modellart. Ihre Modelle beinhalten ein zufälliges Zeit- und ein zufälliges Längenmaß. Die dynamische Bewegungsgleichung wird mit der unveränderten momentanen Geschwindigkeit solange integriert, bis die Integrationszeit oder der Abstand zwischen der Partikel und einem Fluidpunkt größer als das entsprechende zufällige Maß ist.

In vorliegender Arbeit wurde das Markov-Sequenz-Dispersionsmodell angewandt. Die Validierung dieses Modells mit experimentellen Daten wurde von Sommerfeld (1996) für verschiedene Strömungskonfigurationen wie z.B. Gitterturbulenz und ebene Scherschicht durchgeführt. Hier werden noch einmal die Grundzüge dieses Modells beschrieben.

Bei diesem Verfahren werden zwei Schritte für die Berechnung der momentanen Fluidfluktuation entlang der Partikelbahn benötigt. Im ersten Schritt wird die momentane Geschwindigkeitsfluktuation entlang eines Fluidelements unter der Verwendung der Lagrangeschen Korrelationsfunktion bestimmt:

$$u_{i\,n+1}^{\,f} = R_{L\,i}(\Delta t)\,u_{i\,n}^{\,f} + \sigma_{i\,}\sqrt{1 - R_{L\,i}^{\,2}(\Delta t)}\,\xi_{n} \tag{66}$$

Der Index i steht für alle drei Richtungskomponenten x, y und z im kartesischen Koordinatensystem. Korrelation Im zweiten Schritt wird die zwischen der Geschwindigkeitsfluktuation Fluidelements am Ort des und am Ort der **Partikel** berücksichtigt. Hierfür werden die Euler'schen Korrelationskoeffizienten verwendet:

$$u_{i,n+1}^{p} = R_{E,i} \left(\Delta r \right) \ u_{i,n}^{p} + \mathbf{S}_{i} \sqrt{1 - R_{E,i}^{2} \left(\Delta r \right)} \ \mathbf{V}_{n}$$
 (67)

Diese beiden Schritte können durch Definition einer resultierenden Korrelationsfunktion

$$R_{P,i}(\Delta t, \Delta r) = R_{I,i}(\Delta t)R_{F,i}(\Delta r) \tag{68}$$

zu einer Gleichung zusammengefasst werden:

$$u_{i,n+1}^{f} = R_{P,i}(\Delta t, \Delta r)u_{i,n}^{f} + \mathbf{s}_{F,i}\sqrt{1 - R_{P,i}^{2}(\Delta t, \Delta r)}\mathbf{x}_{i}$$
(69)

Hierin ist ξ_i eine gaußverteilte Zufallzahl mit dem Mittelwert Null und der Standardabweichung Eins. Der erste Term auf der rechten Seite stellt den korrelierten Anteil dar, der zweite Term ist der Betrag der Geschwindigkeitsfluktuation.

Um die mittlere Drift der Partikeln aus Gebieten mit höherer Turbulenz zu vermeiden, wurde diese Gleichung um einen dritten Term erweitert, der sich analog zu den Überlegungen von Legg & Raupach (1982) aus der Impulsgleichung ergibt:

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} \tag{70}$$

Damit lassen sich unter der Voraussetzung, dass die Gradienten der Reynoldsspannungen normal zur Hauptströmungsrichtung dominieren, folgende Beziehungen für die auf die Partikeln wirkenden Geschwindigkeitsfluktuationen aufstellen:

$$u_{n+1}^{p} = R_{p,u} \left(\Delta t \right) u_{n}^{p} + \mathbf{s}_{u} \sqrt{1 - R_{p,u}^{2} \left(\Delta t \right)} \mathbf{x}_{n} + \left(1 - R_{p,u} \left(\Delta t \right) \right) T_{L,u} \frac{\partial \overrightarrow{u v}}{\partial y}$$

$$(71)$$

$$v_{n+1}^{p} = R_{p,v} \left(\Delta t \right) v_{n}^{p} + \mathbf{S}_{v} \sqrt{1 - R_{p,v}^{2} \left(\Delta t \right)} \mathbf{V}_{n} + \left(1 - R_{p,v} \left(\Delta t \right) \right) T_{L,v} \frac{\partial v' v'}{\partial v}$$

$$(72)$$

$$w_{n+1}^{p} = R_{p,w} \left(\Delta t \right) \quad w_{n}^{p} + \mathbf{S}_{w} \sqrt{1 - R_{p,w}^{2} \left(\Delta t \right)} \quad \mathbf{c}_{n}$$

$$(73)$$

Die Lagrangesche Autokorrelationsfunktion der Geschwindigkeit kann mit einer exponentiellen Funktion angenähert werden:

$$R_L(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L}\right) \tag{74}$$

Das Lagrangesche integrale Zeitmaß T_L ergibt sich aus:

$$T_L = c_T \frac{\mathbf{S}_F^2}{\mathbf{\rho}} \quad \text{mit} \quad c_T = 0.4 \tag{75}$$

Die Varianz der Fluktuationsgeschwindigkeit des Fluids σ_F an der Partikelposition wurde aus der turbulenten kinetischen Energie anhand der Beziehung $\mathbf{s}_F^2 = 2/3 \, k$ errechnet. Die räumliche Korrelation der individuellen Geschwindigkeitskomponenten von zwei willkürlichen, räumlich getrennten Punkten kann mittels des Euler'schen Korrelationstensors $R_{E,ij}(\Delta r)$ mit Benutzung der longitudinalen und transversalen Korrelationskoeffizienten $f(\Delta r)$ und $g(\Delta r)$ (nach Karman & Horwarth 1938) dargestellt werden:

$$R_{E,ij}(\Delta r) = \left\{ f(\Delta r) - g(\Delta r) \right\} \frac{r_i r_j}{r^2} + g(\Delta r) \mathbf{d}_{ij}$$
(76)

Bei der Berechnung wurden alle drei Hauptkomponenten, d.h. $R_{E,x}(\mathbf{D}r)$, $R_{E,y}(\mathbf{D}r)$ und $R_{E,z}(\mathbf{D}r)$, betrachtet. Der longitudinale und transversale Korrelationskoeffizient für ein homogenes isotrop turbulentes Strömungsfeld werden wie folgt angegeben:

$$f(\Delta r)_i = \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_{E,i}}\right)$$
 und $g(\Delta r)_i = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_{E,i}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta r}{L_{E,i}}\right)$ (77)

Das integrale Längenmaß für die drei Richtungen, d.h. in der Längsrichtung x und den lateralen Richtungen y und z wurde aus folgenden Beziehungen bestimmt:

$$L_{E,x} = 1.1 T_L \mathbf{s}_F$$
 und $L_{E,y} = L_{E,z} = 0.5 L_{E,x}$ (78)

3.4.3 Modellierung der Partikel-Partikel-Kollisionen

Bei einer Zweiphasenströmung liefern die fluiddynamischen Kräfte den nötigen Impuls zum Partikeltransport. Bei Kollisionen der Partikeln in der Strömung wird Impuls innerhalb der dispersen Phase ausgetauscht. Die Impulsübertragung durch Kollision ist die Umverteilung der kinetischen Energie der Partikellängsbewegung sowie der Partikelrotation innerhalb der Partikelphase. Darüber hinaus treten Impulsverluste auf. Man unterscheidet zwei Bereiche in der Zweiphasenströmung. In verdünnter Zweiphasenströmung dominiert die fluiddynamische Impulsübertragung den Impulsumverteilungsvorgang sowie den Impulsverlust der dispersen Phase. In dichter Zweiphasenströmung wird die Entwicklung der Partikelgeschwindigkeit hauptsächlich durch Kollisionen beeinflusst. Der fluiddynamische Transport bestimmt somit nicht das Transportverhalten. Außerdem begünstigen die Partikelkollisionen relevante Effekte, welche für industrielle Prozesse von großer Bedeutung sind. Beim pneumatischen Transport von Partikeln mit mittlerer Massenbeladung ($\mathbf{m}_p \approx 0.35$) z.B. verursachen die Partikel-Partikel-Kollisionen die gleichmäßige Konzentrationsverteilung den Rohrquerschnitt. In Partikelabscheidern führen Partikel-Partikel-Kollisionen zur Agglomeration kleiner an großen Partikeln. Damit erhöht sich die Abscheideleistung für die kleinen Partikeln.

Heute kann man die Einflüsse der Kollisionen auf die statistischen Eigenschaften der dispersen Phase durch numerische Methoden simulieren. In den letzten Jahren wurden bereits

verschiedene numerische Modelle zur Beschreibung der Partikel-Partikel-Kollisionen in turbulenten Strömungen entwickelt. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich auf das stochastische Partikel-Partikel-Kollisionsmodell von Sommerfeld (2001). Eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit dieses Modells ist das Vorliegen einer stationären Strömung. Durch die Betrachtung der Kollision als ein stochastisches Ereignis lässt sich der Algorithmus zur Detektion der Kollision vereinfachen. Der Rechenaufwand wird reduziert, und der Bedarf an Speicherkapazität ist gering.

Der entwickelten Partikel-Partikel-Berechnungsalgorithmus des stochastischen Kollisionsmodells besteht aus zwei Berechnungsschritten. Im ersten Schritt wird die Lagrangesche Simulation der Partikelbahn ohne Berücksichtigung der Kollisionen durchgeführt. Dieser Schritt dient der Bestimmung der charakteristischen lokalen Mittelwerte der dispersen Phase für jedes Kontrollvolumen. Die Mittelwerte werden zur Bestimmung der Kollisionswahrscheinlichkeit benutzt. Zu den Mittelwerten zählen die Anzahldichte, die Größenverteilung und die mittlere Geschwindigkeit sowie die Schwankungsgeschwindigkeit der Partikeln in Abhängigkeit von deren Größe. Im zweiten Schritt werden die Partikelbahnen erneut berechnet. Bei der Zeitschrittberechnung der Partikelbahnen wird in jedem Zeitschritt ein fiktiver Kollisionspartner generiert. Die fiktiven Partikeln sind Repräsentanten der lokalen Eigenschaften der Partikelphase. Die Geschwindigkeitskomponenten der fiktiven Partikeln setzen sich aus der lokalen mittleren Geschwindigkeit und der Schwankungsgeschwindigkeit zusammen, letztere aus einer Gaußverteilung um den lokalen RMS-Betrag gewonnen wurde. Bei Generation der fiktiven Partikelschwankungsgeschwindigkeit Geschwindigkeit der betrachteten Partikeln berücksichtigt. Der Grad der Korrelation hängt vom Ansprechverhalten der Partikeln ab. Die Geschwindigkeiten kleiner Partikeln sind stark miteinander korreliert (turbulent shear limit, Saffman & Turner 1956). Für sehr große Partikeln sind sie komplett unkorreliert (kinetic theory limit, Abrahamson 1975).

Das Ansprechverhalten der Partikeln wird durch die turbulente Stokes-Zahl charakterisiert. Sie ist das Verhältnis der Partikelrelaxationszeit zum Lagrangeschen integralen Zeitmaß: nichtlinearen $St = \mathbf{t}_{p} \mathcal{I}_{L}$ Die Partikelrelaxationszeit wird aus dem Widerstandsterm bestimmt. Das Lagrangesche integrale Zeitmaß ergibt sich aus dem turbulenten Dispersionsmodell. Beim stochastischen Kollisionsmodell wurde die Korrelation zwischen der Fluktuationsgeschwindigkeit der fiktiven Partikeln $u'_{fict,i}$ und der der betrachteten Partikeln *u* ′_{real,i} durch folgende Beziehung (Sommerfeld 2001) beschrieben:

$$u'_{fict,i} = R(St)u'_{real,i} + \mathbf{s}_{P,i} \sqrt{1 - R(St)^2} \mathbf{x}$$
(79)

 $\mathbf{s}_{P,i}$ ist der lokale RMS-Wert der Partikelgeschwindigkeitskomponente. \mathbf{x} ist eine gaußverteilte Zufallzahl mit dem Mittelwert Null und der Standardabweichung Eins. Die erzeugten Schwankungsgeschwindigkeitskomponenten setzen sich aus einem korrelierten Anteil und einem zufälligen Anteil zusammen. Mit steigender Stokes-Zahl nimmt der korrelierte Term ab und der zufällige Anteil zu. Im Einklang mit Ergebnissen der Large-Eddy-Simulation wurde folgende Abhängigkeit der Korrelationsfunktion R(St) von der Stokes-Zahl gefunden (Sommerfeld 2001):

$$R(St) = \exp\left(-0.55 \cdot St^{0.4}\right) \tag{80}$$

Die Entscheidung über das Auftreten einer Kollision basiert auf der Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit, welche aus der kinetischen Gastheorie hergeleitet wurde. Dabei werden die korrelierten Geschwindigkeiten der Partikeln berücksichtigt:

$$P_{coll} = \frac{\mathbf{p}}{4} (d_{p1} + d_{p2})^2 \left| \vec{u}_{p1} - \vec{u}_{p2} \right| N_p \Delta t$$
 (81)

In dieser Gleichung sind d_{p1} und d_{p2} die Partikeldurchmesser, $u_{rel} = \left| \vec{u}_{p1} - \vec{u}_{p2} \right|$ ist die momentane relative Geschwindigkeit zwischen der betrachteten und der fiktiven Partikel, und N_p ist die Anzahl der Partikeln pro Volumeneinheit im betrachteten Kontrollvolumen.

Ein Kollisionszylinder wurde als Bilanzraum um die fiktiven Partikeln definiert. Dieser ist im Bild 12a dargestellt. Der Kollisionszylinder wird so gewählt, dass die Richtung des relativen Geschwindigkeitsvektors und die Richtung der axialen Achse des Kollisionszylinders zusammenfallen. Durch diese Auswahl sind nur die axiale und die radiale Komponente des dreidimensionalen relativen Geschwindigkeitsvektors relevant für die weitere Berechnung.

In dem hier beschriebenen Modell wird der Kollisionspunkt auf der Oberfläche der betrachteten Partikel nicht benötigt. Stattdessen wird die Lage des Mittelpunktes der fiktiven Partikel im Querschnitt des Kollisionszylinders bestimmt. Dazu dient eine Prozedur mit einem Zufallprozess (Sommerfeld 2001). Ein Koordinatensystem wurde betrachtet, bei dem sich die Kollektorpartikel in Ruhe befindet. Die normierten Koordinaten der Lage des Mittelpunktes der fiktiven Partikel ergeben sich aus zwei gleichverteilten Zufallzahlen Y und Z im Bereich [-1,1]. Dabei gilt die Bedingung, dass die Koordinaten innerhalb eines Kreises

mit einem Durchmesser von $(d_{p1} + d_{p2})/2$ liegen müssen. Somit ergibt sich die Bedingung für die seitliche Versetzung $L_a \le \frac{d_{p1} + d_{p2}}{2}$ (siehe Bild 12b).

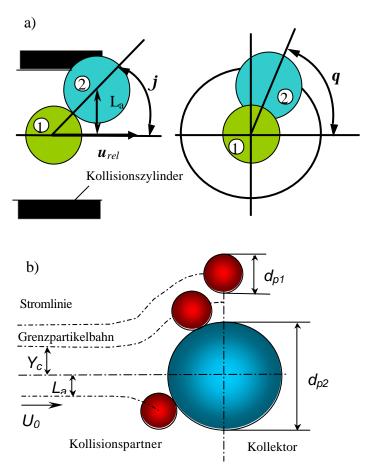


Bild 12 a) Konfiguration der Partikel-Partikel-Kollision b) Modellierung der Auftreffwahrscheinlichkeit

Die Generation der erwähnten Koordinaten dient der Bestimmung der Kollisionswinkel j und q, welche zur Berechnung der Geschwindigkeiten nach der Kollision benötigt werden. Gemäß der Darstellung im Bild 12b wurde der laterale Abstand L_a des Kollisionspunkts zur Achse des Kollisionszylinders bestimmt, der für die Berechnung der Auftreffwahrscheinlichkeit benötigt wird:

$$L_{a} = \frac{(d_{p1} + d_{p2})\sqrt{XX^{2} + ZZ^{2}}}{2} \quad mit \quad \frac{2L_{a}}{d_{p1} + d_{p2}} \le 1$$

$$\mathbf{j} = \arcsin\left(L_{a}\right)$$

$$\mathbf{q} = \arctan\left(\frac{Y}{Z}\right)$$
(82)

Zur Vorhersage der Auftreffwahrscheinlichkeit wird das Modell von Schuch & Löffler (1978) herangezogen. Für Partikeln, die kleiner als das Kolmogorowsche Wirbelmaß sind, wurde angenommen, dass die Strömung in unmittelbarer Nähe der Partikeln laminar ist. Außerdem wird die Auftreffwahrscheinlichkeit nur bei der Existenz von großen Größenunterschieden zwischen den Partikeln berechnet. Bei der Kollision von Partikeln mit gleicher Größe wurde eine Effizienz von 100 % angenommen.

Das Ansprechverhalten des Kollisionspartners in der Strömung um die Kollektorpartikel wird anhand eines Trägheitsparameters (relative Partikel-Stokes-Zahl) charakterisiert. Aus der Arbeit von Schuch & Löffler (1978) wurde die folgende Formel entnommen:

$$St_{rel} = \frac{\mathbf{r}_{p} \left| \vec{u}_{p1} - \vec{u}_{p2} \right| d_{p}^{2}}{18 \ \mathbf{m} \ d_{p}}$$
 (83)

In der Gleichung sind d_P und \mathbf{r}_P der Durchmesser und die Dichte der kleinen Partikeln. d_k ist der Durchmesser der großen Partikel. Die Auftreffwahrscheinlichkeit ist definiert als:

$$\boldsymbol{h}_{p} = \left(\frac{2Y_{c}}{d_{K} + d_{p}}\right)^{2} = \left(\frac{St_{rel}}{St_{rel} + a}\right)^{b} \tag{84}$$

wobei a und b Reynoldszahl-abhängige Konstanten sind. Nach Löffler (1988) haben diese Konstanten die Werte a=0.65 und b=3.7 für $Re_k < 1$. Y_c ist der radiale Abstand der Grenzpartikelbahn zur Achse des Kollisionszylinders (siehe Bild 12b). Um den Sperreffekt (d.h. die Partikeln treffen wegen ihrer Größe auf den Kollektor) in der Kollisionseffizenz noch mitzuberücksichtigen, wurde der Radius der Projektionsfläche als die Summe der beiden Partikelradien modelliert.

Um das Kollisionsereignis zu detektieren, wurde eine gleichverteilte Zufallzahl *RN* im Intervall [0,1] generiert. Eine Kollision findet statt, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$RN < P_{coll}$$
 und $L_a < Y_c$. (85)

Die Geschwindigkeiten der Stoßpartner nach der Kollision wurden in dem oben genannten Koordinatensystem des schrägen Zusammenstoßes berechnet. Bei der Lösung der Impulsgleichung in Verbindung mit dem Coulomb'schen Reibungsgesetz wurden folgende Gleichungen zur Bestimmung der Translations- und Rotationsgeschwindigkeiten der Stoßpartner nach der Kollision hergeleitet:

$$u_{p1}^* = u_{p1} + \frac{J_x}{m_{p1}} \tag{86}$$

$$v_{p1}^* = v_{p1} + \frac{J_y}{m_{p1}} \tag{87}$$

$$w_{p1}^* = w_{p1} + \frac{J_z}{m_{p1}} \tag{88}$$

$$\boldsymbol{w}_{n1}^{*x} = \boldsymbol{w}_{n1}^{x} \tag{89}$$

$$\mathbf{w}_{p1}^{*y} = \mathbf{w}_{p1}^{y} - \frac{5J_{z}}{m_{p1}d_{p1}}$$
(90)

$$\mathbf{w}_{p1}^{*z} = \mathbf{w}_{p1}^{z} - \frac{5J_{y}}{m_{p1}d_{p1}} . {91}$$

 J_i stellt die Komponenten des Impulsübergangs von Partikel 1 zu Partikel 2 dar. Für die x-Komponente gilt:

$$J_{x} = -(1 - e)\left(u_{p1} - u_{p2}\right) \frac{m_{p1}m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}}$$
(92)

Die Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt errechnet sich aus der Translations- und der Rotationsgeschwindigkeit vor dem Stoß:

$$u_R = \sqrt{u_{Ry}^2 + u_{Rz}^2} \tag{93}$$

$$u_{Ry} = \left(v_{p1} - v_{p2}\right) + \frac{d_{p1}}{2}\omega_{P1}^z + \frac{d_{p2}}{2}\omega_{P2}^z \tag{94}$$

$$u_{Rz} = -\frac{d_{p1}}{2}\omega_{P1}^{y} - \frac{d_{p2}}{2}\omega_{P2}^{y}$$
(95)

Die Komponenten des Impulses J_y und J_z sind abhängig von der Art des Stoßes. Für den Gleitstoß ergibt sich:

$$J_{y} = -\mu_{d} \frac{u_{Ry}}{u_{R}} \left| J_{x} \right| \quad \text{und}$$
 (96)

$$J_z = -\mu_d \frac{u_{Rz}}{u_R} |J_x| \tag{97}$$

Für den Haftstoß erhält man:

$$J_{y} = -\frac{2}{7}u_{Ry}\frac{m_{p1}m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}} \qquad \text{und}$$
 (98)

$$J_z = -\frac{2}{7} u_{Rz} \frac{m_{p1} m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}} \tag{99}$$

Die Bedingung für den Haftstoß erhält man in Abhängigkeit vom Haftreibungskoeffizienten μ_0 und den Geschwindigkeiten vor dem Stoß:

$$\left| u_{R} \right| < \frac{7}{2} \, \mathbf{m}_{0} \left(1 + e \right) \left| u_{p1} - u_{p2} \right| \tag{100}$$

Hierin steht e für den Restitutionskoeffizienten, \mathbf{m}_l ist der Reibungskoeffizient. Beide sind als Stoffkonstanten anhand von Experimenten zu bestimmen. m_{p1} und m_{p2} sind die Massen der betrachteten und der fiktiven Partikel. Letztendlich werden die berechneten Geschwindigkeiten in das ursprüngliche Koordinatensystem rücktransformiert.

3.4.4 Modellierung des Agglomerationsvorgangs

Die Partikelagglomeration in der turbulenten Strömung hat folgende charakteristische Eigenschaften: Zunächst hängt die Kinetik dieses Prozesses wesentlich sowohl vom lokalen turbulenten Zustand der Strömung der Fluidphase als auch von der lokalen Verteilung der Eigenschaften der Partikelphase ab. Das Wachstum von Partikeln bei der Agglomeration ist ein diskontinuierlicher Prozess. Der Agglomerationsvorgang findet bei Partikeln aller Größen statt. Die gesamte Masse des Partikelsystems bleibt bei der Agglomeration erhalten. Dadurch reduziert sich die Anzahlkonzentration der Partikeln im System. Kleine Partikeln haften bevorzugt an größeren. Deshalb verlagert sich die Partikelgrößenverteilung in Richtung größerer Partikeln.

Die Modellierung des Agglomerationsvorgangs basiert auf dem vorgestellten Partikel-Partikel-Kollisionsmodell (siehe Kapitel 3.4.3). Bei diesem Modell wird die Kollisionswahrscheinlichkeit für die gerade betrachtete Partikel in jedem Zeitschritt mit Hilfe der in jedem Kontrollvolumen vorliegenden, mittleren Partikelanzahlkonzentrationsverteilung und mittleren Partikelgeschwindigkeitsverteilung berechnet. Da der Kollisionsvorgang der betrachteten Partikeln mit dem fiktiven Kollisionspartner ein stochastisches Ereignis ist, ist die Auswahl des Agglomerationspartners auch ein stochastisches Ereignis.

Beim Euler/Lagrangeschen Verfahren wird eine Partikelgrößenverteilung durch eine Vielzahl diskreter Partikelklassen dargestellt. Jede Partikelklasse wird mit einer genügend großen Anzahl von Parcels (d.h. Pakete von Partikeln mit identischen Eigenschaften) präsentiert. Durch die Verfolgung der Partikelbahn eines Parcels der Klasse k durch das gesamte

Berechnungsgebiet unter der Anwendung des Partikel-Partikel-Kollisionsmodells kann die Kollisionshäufigkeit der Partikeln der betrachteten Klasse mit allen anderen Partikelklassen berechnet werden. Bei der Berücksichtigung der Auftreffwahrscheinlichkeit (siehe Kapitel 2.4.2 und 3.4.3) und der Haftwahrscheinlichkeit ergibt sich die Agglomerations-häufigkeit des betrachteten Parcels der Klasse k im betrachteten Berechnungsgebiet.

Es wird hier zunächst die Agglomeration von trockenen mikrometergroßen Staubpartikeln modelliert. Die Berechnung der Haftwahrscheinlichkeit basiert auf der Modellvorstellung von Hiller (1981) (siehe Kapitel 2.4.3). Die Haftung der Feststoffpartikeln wurde durch die Wirkung der van-der-Waals-Kraft hervorgerufen.

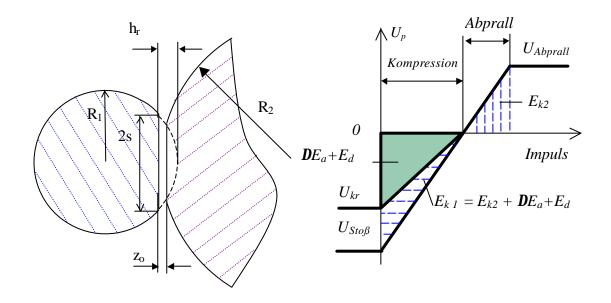


Bild 13 Geschwindigkeits-Impuls-Diagramm der Stoßphasen

Wenn zwei Partikeln kollidieren, wird ein Teil der kinetischen Stoßenergie durch die Verformungen an der Kontaktsfläche (siehe Bild 13) oder durch die Reibungsvorgänge im Innern der Körper aufgezehrt. Bei der Berücksichtigung der Haftenergie und kinetischen Energien kann eine Energiebilanz $E_{k1} = E_{k2} + DE_a + E_d$ aufgestellt werden, wobei E_{k1} die kinetische Energie der Partikeln vor dem Stoß, E_{k2} die kinetische Energie nach dem Abprallen und DE_a+E_d der Anteil der Energie ist, welcher durch die mechanische Deformation und die van-der-Waals-Energie dissipiert wurde. Unter vereinfachenden Annahmen läßt sich die kritische Geschwindigkeit U_{kr} , oberhalb der die Partikeln von einer festen Oberfläche abprallen können, mit Hilfe der Energiebilanz berechnen.

Mit der Haftbedingung $E_{k2} = 0$ und der Definition einer energetischen Stoßzahl erhält man aus der Energiebilanz die kritische Bedingung für beginnendes Haften:

$$E_{k_1k_r} = \frac{1}{k_{pl}^2} \Delta E_a$$
 bzw. $U_{k_r}^2 = \frac{12}{p r_p \cdot d_p^3} \cdot \frac{1}{k_{pl}^2} \cdot \Delta E_a$ (101)

Der Energieanteil durch die van-der-Waals-Haftung ergibt sich aus der Integration des vander-Waals-Haftdruck auf der Deformationsfläche über die Deformationstiefe $z_0 < z < h_{pl}$:

$$\Delta E_a = -\int_{z_0}^{\infty} p_{vdw} \cdot \boldsymbol{p} a^2 \cdot dz = -\frac{A}{12 \cdot z_0^2} \cdot d_p \cdot h_{pl}$$
(102)

Die Tiefe der plastischen Deformation kann mit der folgenden Beziehung angenähert werden:

$$h_{pl} = d_p \cdot U_1 \sqrt{1 - k_{pl}^2} \sqrt{\frac{\mathbf{r}_p}{6P_{pl}}}$$
(103)

Durch Einsetzen von (102) und (103) wurde aus (101) die kritische Geschwindigkeit U_{kr} nach Hiller (1981) hergeleitet:

$$U_{kr} = \frac{1}{d_p} \frac{\left(1 - k_{pl}^2\right)^{1/2}}{k_{pl}^2} \frac{A}{\mathbf{p} z_0^2 \sqrt{6 P_{pl} \mathbf{r}_p}}$$
(104)

Hier ist k_{pl} die energetische Stoßzahl, d_p und \mathbf{r}_p sind der Durchmesser und die Dichte der Partikeln. Für die Hamaker-Konstante wurde $A = 5,0\cdot10^{-19}$ J eingesetzt. Der minimale Kontaktsabstand wurde mit $z_0 = 4\cdot10^{-10}$ m angenommen. Für den Fließdruck P_{pl} , bei dem plastische Deformation auftritt, gibt es die Angaben für verschiedenen Materialien. Für Gläser beträgt er etwa $P_{pl} = 5\cdot10^9$ Pa. Für Kunstoff liegt er zwischen 10^7 und 10^8 Pa und für Stahl ist er bei $5\cdot10^8$ Pa (Hiller 1981).

Im Rahmen des Euler/Lagrangeschen Verfahrens repräsentiert ein Parcel einen Massenanteil oder Konzentrationsanteil von Partikeln der betrachteten Klasse *i.* Durch die Agglomeration mit anderen Partikeln (mit fiktiven Kollisionspartnern) besteht ein Austausch der Massen zwischen den Partikelklassen. Für die Berechnung der Größe des gebildeten Agglomerats wird vereinfachend angenommen, dass bei der Agglomeration volumenäquivalente Agglomerate gebildet werden. Damit wurde die Erfüllung der Massenbilanz gewährleistet.

Durch die Agglomeration verändert sich die Größe der Partikeln im betrachteten Parcel.

$$d_{p-Agg}^3 = d_{p1}^3 + d_{p2}^3 \tag{105}$$

Der Massenanteil der neu gebildeten Partikeln ergibt sich als Summe der Massenanteile des betrachteten Parcels und des fiktiven Kollisionspartners an der Position und zum Zeitpunkt der Agglomeration. Zur Simulation einer Partikelgrößenverteilung ist es notwendig, Partikelverteilung geometrisch aufzuteilen. Bei der geometrischen Aufteilung ist Volumen der Partikeln der Klasse i+1 doppelt so groß wie das Volumen der Partikeln der Klasse i. Es ergibt sich somit eine proportionale Aufteilung des Partikeldurchmessers. Durch die Anwendung der geometrischen Aufteilung der Partikelgrößenverteilung wird Berechnungsalgorithmus vereinfacht und der Berechnungsaufwand reduziert. Da die neu gebildete Partikel innerhalb der vorgegebenen Partikelgrößenverteilung liegt, wird sie der Partikelgrößenklasse mit dem entsprechenden Massenanteil zugeordnet. Ab dem Zeitpunkt der Agglomeration verändert sich die Größe des Parcels. Dies führt zur Veränderung der Klasse der betrachteten Partikeln. Der Massenanteil des Parcels der alten Klasse muss Massenbilanz zu verschwinden. die erhalten. Außerdem müssen Partikelanzahldichte sowie die Verteilung der Partikelgrößen und Geschwindigkeitskomponenten in jedem Kontrollvolumen während der Rechnung unter Berücksichtigung der Kollisionen und Agglomerationen ständig erneuert werden. Diese Vorgehensweise ermöglicht, dass die Auswahl des fiktiven Kollisionspartners (oder Agglomerationspartners) aus der durch die vorherigen Agglomerationsvorgänge geänderten Anzahlkonzentration erfolgt und demzufolge von der Vorgeschichte beeinflusst wird.

Auch die Änderung der Translationgeschwindigkeitskomponenten der betrachteten Partikeln nach der Agglomeration mit den stochastischen, fiktiven Partikeln kann durch die Impulsgleichung neu berechnet werden:

$$u_{p-Agg}^* = \frac{m_{p1}u_{p1} + m_{p2}u_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}}; \quad v_{p-Agg}^* = \frac{m_{p1}v_{p1} + m_{p2}v_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}} \text{ und } w_{p-Agg}^* = \frac{m_{p1}w_{p1} + m_{p2}w_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}}$$
(106)

3.4.5 Berechnung der Mittelwerte der dispersen Phase in den einzelnen Kontrollvolumina

Da die zeitlichen Mittelwerte der Partikelphase in den Kontrollvolumina auf Grund der Lagrangeschen Betrachtungsweise nicht direkt vorliegen, müssen diese gesondert berechnet werden. Die Berechnung der einzelnen Größen erfolgt dabei gewichtet mit der Zeit sowie mit der Anzahl der Partikeln pro Parcel.

Für die mittlere Geschwindigkeitskomponente U_i , den mittleren Partikeldurchmesser d_p und die mittlere Dichte der Partikeln \mathbf{r}_p erhält man:

$$\bar{\boldsymbol{f}} = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{n_s} \boldsymbol{f}_n N_{p,n} \Delta t_n f_{s,n} \qquad \forall \qquad \boldsymbol{f} = U_i, d_p, \boldsymbol{r}_p$$
(107)

mit

$$N_{t} = \sum_{n=1}^{n_{s}} N_{p,n} \Delta t_{n} f_{s,n} . \tag{108}$$

Dabei ist $N_{P,n}$ die Anzahl der Partikeln im Parcel und $f_{s,n}$ der Faktor für den anteiligen Aufenthalt im betrachteten Kontrollvolumen für den Zeitschritt Dt_n ($f_{s,n} = 1$, wenn sich das Parcel während des gesamten Zeitschritts Δt im betrachteten Kontrollvolumen aufhält, ansonsten entsprechend $f_{s,n} < 1$).

Für die Standardabweichung der Geschwindigkeitskomponenten gilt:

$$\mathbf{s}_{\mathbf{f}} = \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_s} \mathbf{f}_n^2 N_{p,n} \Delta t_n f_{s,n} - \overline{\mathbf{f}^2}} \qquad \forall \qquad \mathbf{f} = v_i$$
(109)

Der mittlere Zeitschritt einer Partikel in einem bestimmten Kontrollvolumen errechnet sich mit:

$$\overline{\Delta t} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{n_s} N_{p,n} \Delta t_n f_{s,n}$$
(110)

wobei

$$N = \sum_{n=1}^{n_s} N_{p,n} f_{s,n} \tag{111}$$

Für die mittlere Verweilzeit einer Partikel in einem bestimmten Kontrollvolumen erhält man:

$$\overline{t_{ryol}} = \overline{\Delta t} \frac{n_{ps}}{n_{pe}} \tag{112}$$

wobei n_{ps} für die Anzahl der im befindlichen KV- Partikeln und n_{pe} für die Anzahl der Partikeleintritte in ein bestimmtes Kontrollvolumen mit dem Volumen V_{KV} steht.

Der mittlere Partikelvolumenanteil ergibt sich zu:

$$\overline{\boldsymbol{J}}_{p} = \frac{1}{V_{KV}} \sum_{n=1}^{n_{s}} \frac{\boldsymbol{p}}{6} d_{P,n}^{3} N_{p,n} f_{s,n} \frac{\Delta t_{n}}{t_{ref}}$$
(113)

Dabei ist t_{ref} die Gesamtbetrachtungszeit.