

# TECHNISCHE UNIVERSITÄT BERGAKADEMIE FREIBERG

Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik

Institut für Mechanik und Fluidodynamik

Lehrstuhl für Numerische Modellierung granularer Fließprozesse



---

## Diplomarbeit

zum Thema:

### **Numerische Simulation komplexer Partikel-Fluid- Wechselwirkungen in CFD und DEM: feuchte Kontakte und Sedimentationsprozesse in nichtnewtonschen Fluiden**

bearbeitet von: Fabian Uhlig, 48424, Studiengang Maschinenbau

1. Prüfer: Prof. Dr.-Ing. R. Schwarze

2. Prüfer: Dr.-Ing. K. Meltke

Betreuer: Prof. Dr.-Ing. R. Schwarze

Tag der Einreichung: 27.02.2012

## Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, Fabian Uhlig, die vorliegende Arbeit zum Thema

„Numerische Simulation komplexer Partikel-Fluid-Wechselwirkungen in CFD und DEM:  
feuchte Kontakte und Sedimentationsprozesse in nichtnewtonschen Fluiden“

ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt zu haben. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht und im Literaturverzeichnis aufgeführt.

Fabian Uhlig

Freiberg, 27.02.2012

# Inhaltsverzeichnis

<b>Eidesstattliche Erklärung</b> .....	<b>II</b>
<b>Inhaltsverzeichnis</b> .....	<b>III</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b> .....	<b>V</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b> .....	<b>VIII</b>
<b>Nomenklatur</b> .....	<b>IX</b>
<b>1 Einführung</b> .....	<b>1</b>
1.1 Aufgabenstellung.....	1
1.2 Einleitung und Motivation.....	2
<b>2 Grundlagen und Vorbetrachtungen</b> .....	<b>7</b>
2.1 Flüssigkeitsbrücken zwischen kugelförmigen Teilchen .....	7
2.1.1 Modellierung der Flüssigkeitsbrückenkräfte .....	9
2.1.2 Vergleichsdaten für Flüssigkeitsbrückenkräfte und makroskopische Stoffeigenschaften von granularen Medien.....	12
2.2 CFD-DEM-Kopplung.....	17
2.2.1 Unaufgelöste CFD-DEM-Kopplung .....	18
2.2.2 Aufgelöste CFD-DEM-Kopplung .....	20
2.2.3 Analytische Lösungen.....	22
<b>3 Umsetzung der Aufgabenstellung</b> .....	<b>25</b>
3.1 Implementierung der Flüssigkeitsbrücken in LIGGGHTS .....	25
3.1.1 Modellierung eines Kontaktereignisses mit Flüssigkeitsbrücken .....	28
3.1.2 Implementierung des Flüssigkeitsbrückenmodells.....	32
3.2 Implementierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung.....	34
3.2.1 Zeitlicher Ablauf der Kopplung zwischen OpenFOAM und LIGGGHTS .....	34
3.2.2 Eingabe von Simulationsparametern.....	37
3.2.3 Dynamische Gitterverfeinerung.....	38
3.2.4 Gestaltung der Impulserhaltungsgleichungen .....	40
3.2.5 Gestaltung der Impulsaustauschgleichungen .....	43

---

3.3	Validierungssimulationen.....	44
3.3.1	Gestaltung der Simulation zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft ....	44
3.3.2	Gestaltung der Simulation zur Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung .....	44
<b>4</b>	<b>Auswertung der Ergebnisse.....</b>	<b>46</b>
4.1	Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft.....	46
4.2	Simulation der Ringscherzelle: Analyse der makroskopischen Stoffeigenschaften eines feuchten Granulates .....	50
4.3	Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung.....	69
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse .....</b>	<b>74</b>
<b>6</b>	<b>Ausblick .....</b>	<b>79</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>81</b>
<b>Anhang</b>	<b>.....</b>	<b>86</b>

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abbildung 1.1:</b> Darstellung eines Pelletiertellers .....	3
<b>Abbildung 1.2:</b> Darstellung von Eisenoxidkugeln, die im Pelletierverfahren hergestellt wurden.....	4
<b>Abbildung 2.1:</b> Schematische Darstellung der Flüssigkeitsbrücke zwischen zwei kugelförmigen, monodispersen Teilchen.....	7
<b>Abbildung 2.2:</b> Schematische Darstellung eines feuchten Partikelsystems für verschiedene Sättigungsgrade $S$ .....	8
<b>Abbildung 2.3:</b> Querschnitt in der $x$ - $z$ Ebene der an der Symmetrieachse $z$ halbierten Ringscherzelle .....	13
<b>Abbildung 2.4:</b> Aufteilung eines Viertels der Ringscherzelle für die 2D-Mittlung im Raum .....	14
<b>Abbildung 2.5:</b> Darstellung der Simulation eines fluidisierten Bettes.....	17
<b>Abbildung 2.6:</b> Schematische Darstellung des Größenverhältnisses zwischen den Partikeln und dem CFD-Gitter in der unaufgelösten CFD-DEM-Kopplung .....	18
<b>Abbildung 2.7:</b> Schematische Darstellung des Größenverhältnisses zwischen den Partikeln und dem CFD-Gitter in der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung.....	20
<b>Abbildung 2.8:</b> Schematische Darstellung der Lokalisierungsmethode von Partikeln im CFD-Gitter .....	21
<b>Abbildung 3.1:</b> Erstes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells.....	28
<b>Abbildung 3.2:</b> Zweites Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells .....	28
<b>Abbildung 3.3:</b> Drittes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells .....	29
<b>Abbildung 3.4:</b> Viertes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells.....	30
<b>Abbildung 3.5:</b> Durchmesser Verhältnis $(d_{eff} - d_p)/d_p$ als Funktion des Flüssigkeitsanteils $D$ für ein Dichteverhältnis $\rho_p/\rho_f = 2$ .....	31
<b>Abbildung 3.6:</b> Programmablaufplan zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte und zur Bestimmung der Anzahl der Flüssigkeitskontakte.....	32
<b>Abbildung 3.7:</b> Programmablauf der CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® .....	35
<b>Abbildung 3.8:</b> Ordnerstruktur einer CFD-DEM-Simulation zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® .....	37
<b>Abbildung 3.9:</b> Schematische Darstellung der dynamischen CFD-Gitterverfeinerung in OpenFOAM® .....	39

<b>Abbildung 3.10:</b> Schematische Darstellung der in der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung auftretenden Simulationsbereiche.....	40
<b>Abbildung 4.1:</b> Schematische Darstellung des Aufbaus der Testsimulation zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft.....	46
<b>Abbildung 4.2:</b> Numerische Lösung (Rot) der dimensionslosen Flüssigkeitsbrückenkraft $F_B$ als Funktion des dimensionslosen Abstandes $s$ .....	47
<b>Abbildung 4.3:</b> Numerische Lösung (Rot) der dimensionslosen Energie $E_B$ als Funktion des dimensionslosen Abstandes $s$ .....	48
<b>Abbildung 4.4:</b> Zeitlicher Verlauf der Energie für die Ringscherzellensimulation in den ersten 15 s, für einen Flüssigkeitsanteil von $D_3 = 0.05$ .....	51
<b>Abbildung 4.5:</b> Kleiner Zeitausschnitt des zeitlichen Energieverlaufes der Ringscherzellensimulation mit einer Zeitauflösung von $\Delta t = 0.01$ s für einen Flüssigkeitsanteil von $D_3 = 0.05$ .....	53
<b>Abbildung 4.6:</b> Spur des gemittelten Fabric-Tensors als Funktion des Produktes aus Porosität $\varepsilon$ und der mittleren Kontaktanzahl pro Partikel $c$ , für einen Flüssigkeitsanteil von $D_3 = 0.05$ .....	55
<b>Abbildung 4.7:</b> Scherspannung als Funktion des Druckes für das trockene Granulat (schwarz) im Vergleich mit den Referenzdaten (rot).....	56
<b>Abbildung 4.8:</b> Scherspannung als Funktion des Druckes für einen Flüssigkeitsanteil von $D_3 = 0.05$ (schwarz), im Vergleich zum trockenem Zustand (rot).....	57
<b>Abbildung 4.9:</b> Scherspannung als Funktion des Druckes für verschiedene Flüssigkeitsanteile $D_i$ .....	57
<b>Abbildung 4.10:</b> Dynamische Viskosität $\eta$ als Funktion der Scherrate $I$ für den trockenen (rot) und feuchten ( $D_3 = 0.05$ ) Zustand (schwarz) des Granulates.....	59
<b>Abbildung 4.11:</b> Dynamische Viskosität $\eta$ als Funktion der dimensionslosen Scherrate $I$ , für verschiedene Flüssigkeitsanteile $D_i$ .....	60
<b>Abbildung 4.12:</b> Dynamische Viskosität $\eta$ des Granulates als Funktion der Scherrate $\gamma$ , für verschiedene Flüssigkeitsanteile $D_i$ , in einem Druckbereich von $p > 250$ Pa.....	61
<b>Abbildung 4.13:</b> Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine Scherratenbereiche $\Delta\gamma_i$ in einem Druckbereich $p > 250$ Pa.....	63
<b>Abbildung 4.14:</b> Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche $\Delta I_i$ in einem Druckbereich $p > 250$ Pa.....	64
<b>Abbildung 4.15:</b> Scherrate als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen $r - z$ Querschnitt der Ringscherzelle für einen Flüssigkeitsanteil $D_3 = 0.05$ .....	66

---

<b>Abbildung 4.16:</b> Darstellung der nach Gleichung (2.11) berechneten Formen der Scherbänder als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen $r - z$ Querschnitt der Ringscherzelle, für verschiedene Flüssigkeitsanteile $D_i$ .....	67
<b>Abbildung 4.17:</b> Aufbau der Testsimulation zur Validierung der CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® .....	69
<b>Abbildung 4.18:</b> Darstellung des für die Validierungssimulationen verwendeten CFD-Gitters.....	70
<b>Abbildung 4.19:</b> Rot: Sedimentationsgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens als Funktion der Zeit für die Reynoldszahl $Re = 0.04$ .....	71
<b>Abbildung 4.20:</b> Rot: Sedimentationsgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens als Funktion der Zeit für die Reynoldszahl $Re = 0.5$ .....	72

## Tabellenverzeichnis

<b>Tabelle 2.1:</b> Abmessung der für die Simulationen verwendeten Ringscherzelle .....	13
<b>Tabelle 3.1:</b> Vergleich zwischen den Partikelattributen der Partikelart granular und granular_liquid .....	26
<b>Tabelle 4.1:</b> Überblick über die in der Validierungssimulation der Flüssigkeitsbrückenkraft verwendeten Simulationsparameter .....	49
<b>Tabelle 4.2:</b> Simulationsparameter und Partikeleigenschaften für die Simulation der Ringscherzelle.....	50
<b>Tabelle 4.3:</b> Übersicht über die aus den Flüssigkeitsanteilen $D_i$ resultierenden mittleren Sättigungsgrade $S_i$ und Volumenanteile $V_p/V_{f,i}$ in der Ringscherzelle.....	51
<b>Tabelle 4.4:</b> Übersicht über die mittleren Gesamtenergien $E_{ges,i}$ der in der Scherzelle befindlichen Teilchen und deren Variationskoeffizienten $\vartheta_i$ für die verschiedenen Simulationskonfigurationen.....	52
<b>Tabelle 4.5:</b> Steigungen $\zeta_1$ , Reibungswinkel $\psi_i$ und Verschiebungen $\tau_{0,i}$ der Geraden, auf denen die Simulationswerte oberhalb der Grenzschertrate $\gamma_c \approx 0.02$ 1/s, bei verschiedenen Flüssigkeitsanteilen $D_i$ , im Scherspannungs-Druckdiagramm kollabieren.....	58
<b>Tabelle 4.6:</b> Zusammenfassung der Fit-Parameter $A_{1,i}$ und $A_{2,i}$ der Geraden, die die Viskositätsverläufe $\eta_i(D)$ in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine Scherratenbereiche $\Delta\gamma_i$ wiedergeben.....	63
<b>Tabelle 4.7:</b> Zusammenfassung der Fit-Parameter $A_{1,i}$ und $A_{2,i}$ der Geraden, die die Viskositätsverläufe $\eta_i(D)$ in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche $\Delta I_i$ wiedergeben.....	65
<b>Tabelle 4.8:</b> Zusammenfassung der Mittelpunktpositionen $R_{z,i}$ , Breiten $B_i$ , sowie die Breiten bezogen auf den Partikeldurchmesser $B_i/d_p$ der Scherbänder an der Oberfläche der Ringscherzelle .....	68
<b>Tabelle 4.9:</b> Zusammenfassung der geometrischen Abmessungen und Simulationsparameter zur Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®.....	70

# Nomenklatur

## Lateinische Buchstaben

<b>Größe:</b>	<b>Erklärung:</b>	<b>Einheit:</b>
<i>A</i> .....	Berechnungsparameter	[-]
<i>B</i> .....	Breite,	[m]
<i>C</i> .....	Strömungskoeffizient	[-]
<i>D</i> .....	Relativer Flüssigkeitsanteil	[-]
<i>E</i> .....	Energie	[Nm]
<i>F</i> .....	Kraft	[N]
<i>I</i> .....	Dimensionslose Scherrate	[-]
<i>K</i> .....	Impulsaustauschterm	[N]
<i>R</i> .....	Hauptradius der Flüssigkeitsbrückenkrümmung, Abstand in radiale Richtung	[m],[m]
<i>Re</i> .....	Reynoldszahl	[-]
<i>S</i> .....	Sättigungsgrad, Spannungsvektor	[-],[N/m <sup>2</sup> ]
<i>V</i> .....	Volumen	[m <sup>3</sup> ]
<i>X</i> .....	Korrektorexponent	[-]
<i>c</i> .....	Kontaktanzahl	[-]
<i>d</i> .....	Durchmesser	[m]
<i>e</i> .....	Restitutionskoeffizient	[-]
<i>f</i> .....	Einflussfaktor	[-]
<i>g</i> .....	Erdbeschleunigung	[m/s <sup>2</sup> ]
<i>h</i> .....	Höhe	[m]
<i>i</i> .....	Zähindex	[-]
<i>j</i> .....	Zähindex	[-]
<i>k</i> .....	Federsteifigkeit	[N/m]
<i>m</i> .....	Masse	[kg]
<i>n</i> .....	Einheitsnormalenvektor, Teilchenzahl	[-],[-]
<i>p</i> .....	Druck	[N/m <sup>2</sup> ]
<i>r</i> .....	Radius, radiale Position	[m], [m]
<i>s</i> .....	Abstand	[m]

$t$ .....	Zeit	[s]
$touch$ .....	Berührungs-Flag	[-]
$u$ .....	Geschwindigkeit	[m/s]
$w$ .....	Gewichtungsfaktor einer Größe	[-]
$x$ .....	Ortskoordinate, Position in x-Richtung	[m]
$y$ .....	Position in y-Richtung	[m]
$z$ .....	Position in z-Richtung, Gitterzelle	[m],[-]

### Griechische Buchstaben

<b>Größe:</b>	<b>Erklärung:</b>	<b>Einheit:</b>
$B$ .....	Grenzfläche	[-]
$\Omega$ .....	Simulationsbereich	[-]
$\alpha$ .....	Neigungswinkel, Volumenanteil	[°], [-]
$\beta$ .....	Halber Füllungswinkel	[°]
$\gamma$ .....	Oberflächenspannung	[N/m]
$\dot{\gamma}$ .....	Scherrate	[1/s]
$\delta$ .....	Teilchenüberlappung	[m]
$\varepsilon$ .....	Porosität	[-]
$\zeta$ .....	Scherintensität	[-]
$\theta$ .....	Kontaktwinkel	[°]
$\vartheta$ .....	Variationskoeffizient	[%]
$\mu$ .....	Reibungskoeffizient	[-]
$\xi$ .....	Dimensionsloses Flüssigkeitsvolumen	[-]
$\rho$ .....	Dichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma$ .....	Spannung	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau$ .....	Scherspannung	[N/m <sup>2</sup> ]
$\nu$ .....	Dämpfungskonstante	[Ns/m]
$\varphi$ .....	Position in Umfangsrichtung	[rad]
$\psi$ .....	Reibungswinkel nach Mohr	[°]
$\omega$ .....	Rotationsgeschwindigkeit	[1/s]
$\phi$ .....	Skalarfeld	[m <sup>2</sup> /s]

---

**Indizes**

---

<b>Größe:</b>	<b>Erklärung:</b>
<i>O</i> .....	Anfang
<i>B</i> .....	Flüssigkeitsbrücke
<i>D</i> .....	Druck
<i>L</i> .....	Flüssig / Liquid
<i>P</i> .....	Pelletierteller
<i>R</i> .....	Ring
<i>S</i> .....	Stau
<i>W</i> .....	Wand
<i>au</i> .....	Außen
<i>b</i> .....	Behälter
<i>c</i> .....	Kritisch / Critical
<i>eff</i> .....	Effektiv
<i>f</i> .....	Fluid/Flüssigkeit
<i>g</i> .....	Gitter
<i>ges</i> .....	Gesamt
<i>i</i> .....	Zählindex
<i>in</i> .....	Innen
<i>k</i> .....	Kontakt, im Kontakt
<i>kin</i> .....	Kinetisch
<i>n</i> .....	Normalrichtung
<i>p</i> .....	Partikel
<i>r</i> .....	Relativ
<i>rot</i> .....	Rotatorisch
<i>s</i> .....	Sink
<i>t</i> .....	Tangentialrichtung
<i>tr</i> .....	Trocken
<i>tmp</i> .....	Temporär
<i>w</i> .....	Widerstand
<i>z</i> .....	Zelle, Zentrum

---

---

**Abkürzungen**

---

<b>Größe:</b>	<b>Erklärung:</b>
CD.....	Compact Disc
CFD.....	Computational Fluid Dynamics
DEM.....	Diskrete Elemente Methode
MPI.....	Message Passing Interface

TU BERGAKADEMIE FREIBERG  
Fakultät Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik  
Lehrstuhl Strömungsmechanik und Strömungsmaschinen



## Aufgabenstellung zur Diplomarbeit

### **Numerische Simulation komplexer Partikel-Fluid- Wechselwirkungen in CFD und DEM: feuchte Kontakte und Sedimentationsprozesse in nichtnewtonschen Fluiden**

Granulare Fließprozesse treten in vielen technischen und natürlichen Vorgängen in Form von Mehrphasenströmungen auf. Zur mathematischen Beschreibung solcher komplexen Strömungen müssen eine Vielzahl von physikalischen Einflüssen berücksichtigt werden, unter anderem der Einfluss von flüssigen Phasen auf die Bewegung der Partikel.

Im Rahmen der Diplomarbeit sollen neue Modellansätze untersucht werden, mit deren Hilfe die Kopplung zwischen flüssigen Phasen und komplett eingetauchten Partikeln voll aufgelöst erfasst, bzw. bei der Ausbildung von Flüssigkeitsbrücken zwischen ansonsten trockenen Partikeln durch erweiterte Kontaktmodell beschrieben werden können. Für die Untersuchungen werden gängige Programme für Diskrete Elemente (DEM) Simulationen (Programm LIGGGHTS) und Computational Fluid Dynamics Simulationen (CFD) (Programm OpenFOAM®) verwendet.

Im Einzelnen sind folgende Punkte zu bearbeiten:

- Dokumentation der Modellansätze
- Modellentwicklung für exemplarische Probleme
  - sedimentierendes Partikel (CFD-DEM-Simulationen)
  - feuchtes Granulat in Ringscherzelle (DEM-Simulationen)
- Numerische Simulationen für diese beiden Problemstellungen
- Auswertung und Vergleich der Simulationsergebnisse mit bekannten analytischen, bzw. experimentellen Ergebnissen
- Diskussion und Darstellung der Befunde

Betreuer (TU Bergakademie Freiberg):

Prof. R. Schwarze  
Dr. K. Meltke  
DI J. Lampke

Betreuer (UTwente):

Prof. S. Luding

## 1.2 Einleitung und Motivation

Wandernde Sanddünen in der Wüste, Erdbeben von durchnässten Böden, oder Blutkörperchen in unserem Kreislauf sind nur einige Beispiele für das Auftreten von granularen Medien in unserer Umwelt. Darüber hinaus ist die Handhabung von Granulaten ein wichtiger Bestandteil von technischen Prozessen. Schätzungen gehen davon aus, dass ca. 10 % des weltweiten Energiebedarfes für die Verarbeitung, Lagerung und den Transport von granularen Materialien und deren Aggregaten verwendet wird. Damit nehmen solche Materialien, nach Wasser, den zweiten Platz bei den von Menschen meist verwendeten Stoffen ein [Duran 1999].

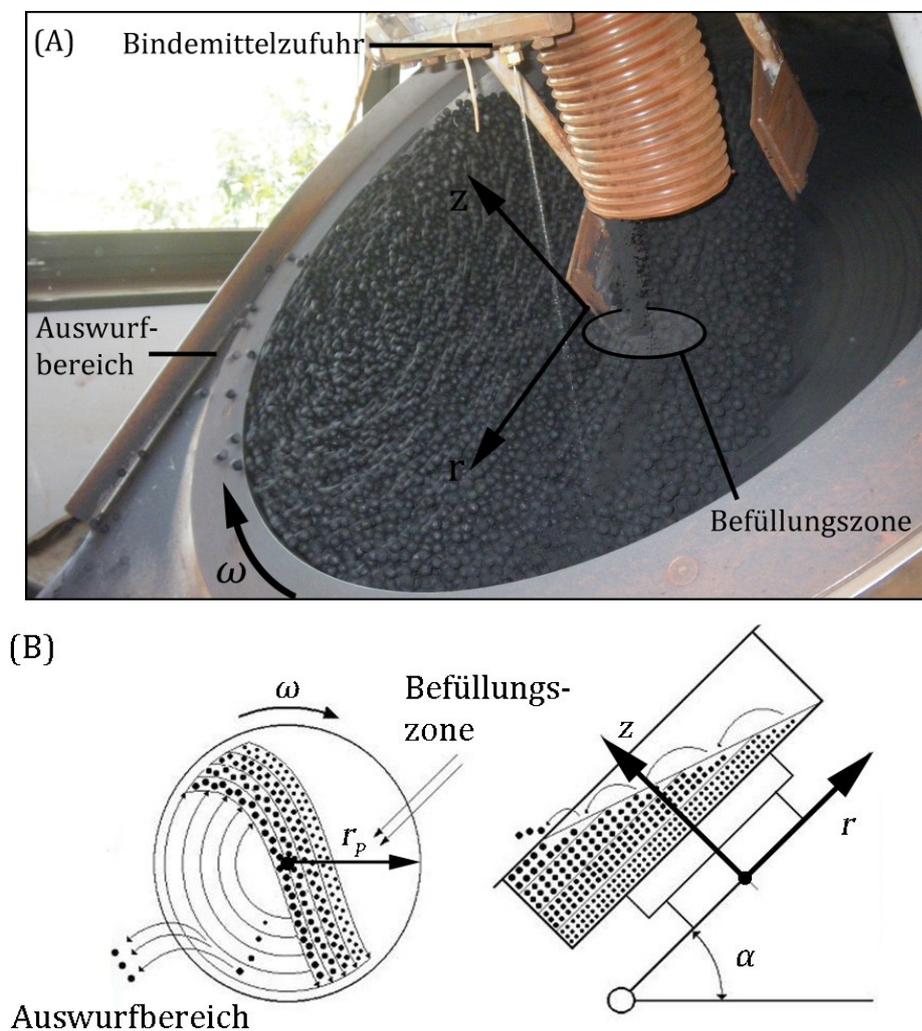
Trotz dieses vielfältigen Vorkommens granularer Materialien, kann das Fließverhalten solcher Stoffe in vielen realen Prozessen nur unzureichend beschrieben werden. Dies liegt vor allem an den nicht linearen und dissipativen Wechselwirkungen zwischen den Partikeln, die zu einzigartigen Phänomenen wie Entmischung, Klumpenbildung, Brückenbildung und Scherbandformationen führen [Singh 2010]. Neben experimentellen Versuchen gibt es eine Vielzahl von Forschergruppen, die sich damit beschäftigen numerische Modelle zu entwickeln, um reale Prozesse rechnergestützt zu beschreiben und mit deren Hilfe industrielle Anlagen auszulegen, bzw. zu optimieren.

Grundsätzlich gibt es zwei Ansätze um granulare Strömungen numerisch zu berechnen. Zum Einen kann ein kontinuumsmechanischer Ansatz gewählt werden. Dabei wird das granulare Medium als kontinuierliches Fluid betrachtet, für das die bekannten Erhaltungsgleichungen, wie Masseerhaltung, Energieerhaltung und Impulserhaltung formuliert werden können. Diese Gleichungen lassen sich mit geeigneten Verfahren, wie zum Beispiel der Finiten Volumen Methode, räumlich diskretisieren und zeitlich integrieren [Ferziger 2002]. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, dass auch Simulationen mit hohen Teilchenzahlen in relativ kurzer Zeit gelöst werden können, da die Partikelskalen nicht aufgelöst werden. Jedoch wird für dieses Verfahren die Kenntnis von makroskopischen Stoffeigenschaften, wie zum Beispiel die Zähigkeit, vorausgesetzt, welche für granulare Medien häufig nicht bekannt sind [Rudert 2009].

Auf der anderen Seite kann ein numerisches Modell verwendet werden, bei dem der Abstraktionsgrad zum realen Medium minimiert wird. Dieses wird durch die Diskrete Elemente Methode realisiert. Bei diesem Verfahren werden alle Teilchen als einzelne Körper betrachtet und deren Bewegung unter Verwendung von Newtons Gesetzen der Mechanik berechnet [Cundall 1979] [Herrmann 1998] [Kishino 2001]. Gegenüber dem kontinuumsmechanischen Ansatz werden für die Simulation mikroskopische Stoffei-

genschaften, wie die Dichte, oder Steifigkeit des Partikels benötigt, die oft bekannt, bzw. sich mit vergleichsweise geringem experimentellem Aufwand bestimmen lassen. Dem gegenüber steht der durch die hohe Auflösung (bis auf Teilchenebenen) bedingte erhöhte Speicher- und Rechenaufwand.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Stärken der beiden Berechnungsmodelle miteinander zu verknüpfen, um die Grundlage zur Simulation von komplexen Partikelsystemen, mit großen Teilchenanzahlen zu schaffen. Ein solches System kann im Maschinenbau zum Beispiel in der Aufbereitungstechnik gefunden werden. In Abbildung 1.1 ist ein realer Pelletierteller (A) und eine schematische Darstellung des Pelletiertellers (B) zu sehen, dessen Prozess gleichzeitig den Hintergrund dieser Arbeit darstellt.



**Abbildung 1.1:** Darstellung eines Pelletiertellers: (A) seitliche Frontansicht des realen Pelletiertellers, (B) links Aufsicht, rechts seitliche Schnittansicht der schematischen Darstellung des Pelletiertellers, in geänderter Form aus [Tyler 2011]

Der Pelletierteller ist ein flachzylindrisch geformter Behälter mit dem Außenradius  $r_p$ , der sich um seine in z-Achsenrichtung orientierte Symmetrieachse mit der Winkelge-

schwindigkeit  $\omega$  dreht. Die Trommel, die den Prozessraum darstellt, ist um einen Winkel  $\alpha$  gegenüber der Horizontalen geneigt.

Zum Beginn des Verarbeitungsprozesses befindet sich ein feinkörniges Pulver, wie zum Beispiel Eisenoxid, auf dem Pelletierteller. Durch die Rotation der Trommel wird das Pulver, je nach Rotationsrichtung, einseitig in Umfangsrichtung gefördert. Auf Grund der Erdanziehungskraft fällt das Granulat ab einer bestimmten Umfangsposition  $\varphi$  zu Boden, bevor es erneut in Umfangsrichtung transportiert wird. Betrachtet man die Form der Grenzfläche, bei der der Übergang zwischen dem pulverfreien Teil des Pelletiertellers, zum Pulver fördernden Teil stattfindet, so lässt sich die für diesen Prozess typische Nierenform erkennen.

Während des Vorganges wird das Granulat mit einem Bindemittel, meist Wasser, befeuchtet, um die Agglomeration und die Mitnahme des Pulvers durch den Pelletierteller zu verbessern [Lampke 2008]. So kommt es auf dem Pelletierteller zu einer Abrollbewegung des granularen Mediums, bei der sich mehrere kleine Teilchen verbinden und ein großes kugelförmiges Teilchen formen. Trifft ein Teilchen auf die untere Begrenzung des Pelletiertellers, so besteht die Möglichkeit, dass die Aufprallkräfte zu groß werden und das Teilchen zerbricht. Dementsprechend wachsen die Partikel, bis sich ein Gleichgewicht zwischen Wachstum der Teilchen und Zerstörung der Partikel auf Grund der für große Teilchen erhöhten Aufprallkräfte bildet. Die Beigabe von neuem Pulver in den Pelletierteller bewirkt, dass das Pulvervolumen in der Trommel steigt. Dementsprechend fallen die an Oberfläche befindlichen Teilchen unter Einfluss der Zentrifugalkraft ab einer kritischen Pulvermenge aus der in Symmetrieachsenrichtung geöffneten Trommel.

In Abbildung 1.2 sind beispielhaft Eisenoxidkugeln dargestellt, die im zuvor beschriebenen Pelletierverfahren hergestellt wurden.



**Abbildung 1.2:** Darstellung von Eisenoxidkugeln, die im Pelletierverfahren hergestellt wurden

Die Besonderheit des Prozesses liegt darin, dass sich die großen Teilchen, die eine höhere Rohdichte aufweisen als die kleineren Partikel, an der Oberfläche des bewegten Pulvers ansammeln [Richard 1980]. Dieser Effekt ist fundamental für granulare Materialien und kann immer dann beobachtet werden, wenn das Granulat aus Teilchen mit unterschiedlichen Eigenschaften besteht [Bridgewater 1976] [Bridgewater 1993]. Dabei hat sowohl der Teilchendurchmesser, die Teilchenform, die Oberflächenbeschaffenheit, das Teilchenmaterial und viele weitere Eigenschaften einen Einfluss auf den Segregationsvorgang [Dahl 2004] [Gray 2005]. Ziel des Pelletierprozesses ist es, einen ausfallenden Partikelstrom mit möglichst enger Korngrößenverteilung zu erreichen.

Die variierbaren Betriebsparameter des Pelletiertellers, die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ , der Neigungswinkel  $\alpha$ , das Volumen  $V_L$  des beigefügten Bindemittels, sowie der Volumenstrom  $\dot{V}_p$  der einströmenden Partikel, bestimmen den Volumenstrom und den Durchmesser der ausfallenden Teilchen. Derzeit gibt es kein rechnerisches Verfahren um diese beiden Größen in Abhängigkeit von  $\omega$ ,  $\alpha$ ,  $V_L$  und  $\dot{V}_p$  zu prognostizieren. Daher muss durch Experimente, bzw., bei einer im realen Betrieb befindlichen Anlage, durch Probieren herausgefunden werden, welches die optimalen Betriebsparameter sind. Darüber hinaus wird vermutet, dass ein Großteil des im Pelletierteller befindlichen Pulvers nicht an der Agglomerationsbildung beteiligt ist und nur als nicht am eigentlichen Prozess beteiligte Masse mitgeführt wird. Falls dies bestätigt werden kann, gibt es einen großen Spielraum für die Optimierungen der Pelletiertellerkonstruktion.

Zu diesem Zweck ist es notwendig die Strömung des Granulates im Pelletierteller räumlich zu beschreiben. Auf Grund der optischen Dichtheit der am Prozess beteiligten Materialien, kann das Strömungsfeld jedoch nur an der Oberfläche und nicht im gesamten Prozessraum experimentell bestimmt werden. Daher besteht der Bedarf rechnergestützte Modelle zu entwickeln, die in der Lage sind dieses zu realisieren.

Auf Grund der starken Größenunterschiede und der örtlichen Separation zwischen kleinen und großen Teilchen, variieren die makroskopischen Stoffeigenschaften des Pulvers in Abhängigkeit von der Position im Pelletierteller stark. Dementsprechend kann kein reiner kontinuumsmechanischer Simulationsansatz für diesen Prozess gewählt werden. Vielmehr besteht die Möglichkeit die Bewegung der großen Teilchen mit der Diskreten Elemente Methode zu beschreiben, während die kleinen Teilchen als Kontinuum approximiert und deren Bewegung mit einem klassischen CFD-Modell berechnet werden. In diesem Ansatz besteht die Notwendigkeit die Wechselwirkung zwischen dem als Fluid betrachteten Pulver und den diskreten Teilchen zu modellieren.

Zwar ist es möglich die gesamte Strömung im Pelletierteller mit der Diskreten Elemente Methode zu bestimmen, dies bedeutet jedoch auf Grund der sehr hohen Teilchenanzahl im feinen Pulver einen enormen Rechenaufwand, der selbst durch Parallelisierung der Berechnungen nicht zu bewältigen ist.

Die Simulation des gesamten Pelletiertellers unter Berücksichtigung aller physikalischen Teileffekte übersteigt den Umfang einer Diplomarbeit. Aus diesem Grund liegt der Schwerpunkt dieser Arbeit auf die Betrachtung der beiden Extremfälle von schwach befeuchteten Teilchen (Fall 1), bei denen sich Flüssigkeitsbrücken zwischen Partikeln ausbilden und vollständig in Flüssigkeit eingetauchten Granulaten (Fall 2), bei der eine Wechselwirkungskraft zwischen der festen und fluiden Phase entsteht. Auf Grund der unterschiedlichen physikalischen Grundlagen der beiden Extremfälle liegt eine Zweiteilung dieser Arbeit, mit zwei vollständig voneinander getrennten numerischen Ansätzen vor.

Zum Einem besteht die Aufgabe darin das zuvor beschriebene CFD- und DEM-Verfahren miteinander zu koppeln, um die Interaktion zwischen der Fluiden- und Teilchenphase in vollständig befeuchteten Partikelsystemen realitätsnah zu modellieren (vgl. Kap. 3.2). Zum Anderem soll das DEM-Programm LIGGGHTS, das in der Lage ist trockene Teilchensysteme zu simulieren, um die Modellierung von Flüssigkeitsbrücken in schwach befeuchteten Granulaten erweitert werden (vgl. Kap. 3.1). Anschließend wird ein so genanntes „micro-macro averaging“ in Verbindung mit einer Ringscherzellensimulation verwendet, um die makroskopischen Stoffeigenschaften eines feuchten Granulates zu bestimmen [Lätzel 2001] [Luding 2004a] [Luding 2004b] (vgl. Kap. 4.2). Dieses Verfahren kann nur auf den Fall 1, von leicht feuchten Teilchen angewendet werden. Die generierten Materialeigenschaften können anschließend verwendet werden, um die Stoffeigenschaften von granularen Medien im Kontinuumsansatz zu beschreiben.

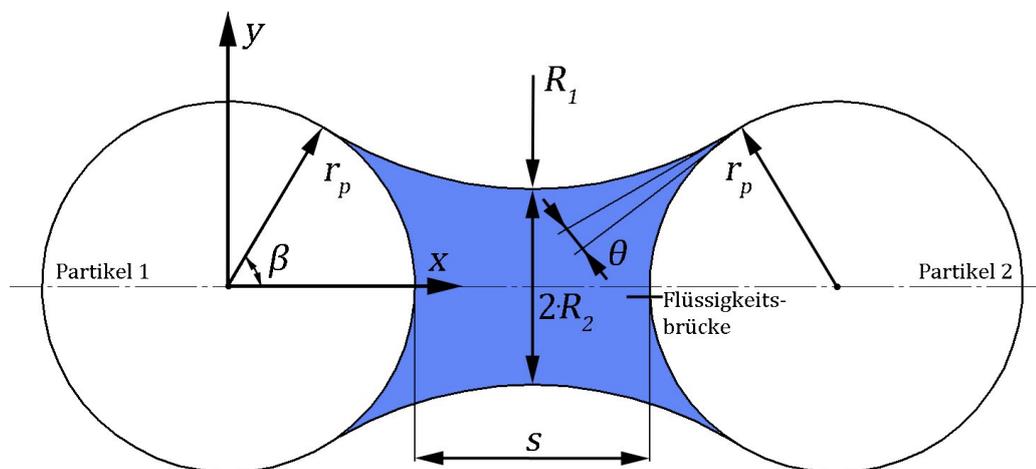
Diese Schritte sind wichtige Elemente auf dem Weg zur vollständigen Simulation des Pelletierprozesses und dienen als Grundlage für zukünftige Arbeiten auf diesem Gebiet.

## 2 Grundlagen und Vorbetrachtungen

Dieses Kapitel beinhaltet die wesentlichen Grundlagen und Vorbetrachtungen zur Bearbeitung der Aufgabenstellung. Zunächst wird die Beschaffenheit und Modellierung von Flüssigkeitsbrücken in granularen Medien erläutert. Anschließend wird ein ausführlicher Überblick über die verschiedenen Teilaspekte der CFD-DEM-Kopplung gegeben, bevor im letzten Teil ein bereits erprobtes Verfahren zur statistischen Analyse von dichten Partikelsystemen vorgestellt wird.

### 2.1 Flüssigkeitsbrücken zwischen kugelförmigen Teilchen

Diese Arbeit konzentriert sich auf die Verwendung eines einfachen Modells zur Beschreibung der Flüssigkeitsbrückenbildung und die Berechnung der daraus resultierenden Flüssigkeitskräfte (vgl. Kap. 2.1.1). Daher werden zur geeigneten Wahl des Flüssigkeitsbrückenmodells zunächst einige Annahmen getroffen. Zur Vereinfachung soll es sich bei den untersuchten Teilchen um kleine, monodisperse und kugelförmige Partikel handeln. In Abbildung 2.1 ist eine schematische Darstellung zweier solcher Teilchen zu sehen, die mit einer Flüssigkeitsbrücke miteinander verbunden sind.



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Flüssigkeitsbrücke zwischen zwei kugelförmigen, monodispersen Teilchen

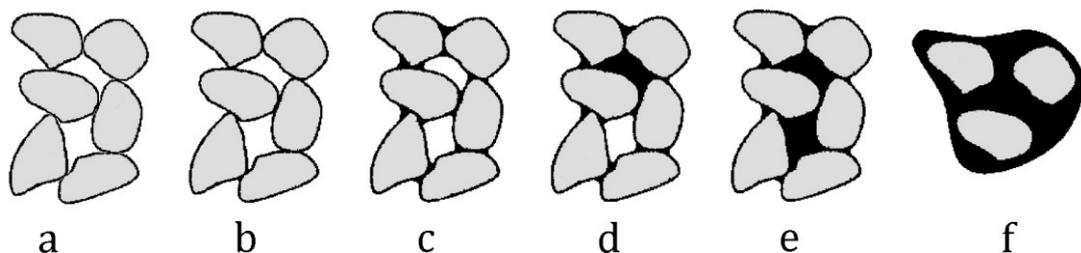
Die beiden Teilchen mit dem Radius  $r_p$  befinden sich zueinander in einem Abstand  $s$ , gemessen von den Oberflächen der beiden Kontaktpartner. Die räumliche Form der blau dargestellten Flüssigkeitsbrücke zwischen den Partikeln, lässt sich mit den Kontaktwinkel  $\theta$ , den halben Füllungswinkel  $\beta$  und den Hauptkrümmungsradien der Flüssigkeitsbrücke  $R_1$  und  $R_2$  beschreiben. Dabei wird von dem Profil der Flüssigkeitsbrücke angenommen, dass sie die Form eines kreisförmigen Bogens besitzt. Die exakte

Bestimmung des Flüssigkeitsprofils erfordert komplexe numerische Berechnungen, selbst wenn es sich um den einfachen Fall zweier gleich großer Kugeln handelt [Erle 1971]. Es wurde allerdings gezeigt, dass diese Annahme nur einen Fehler, bei der Berechnung des Flüssigkeitsbrückenquerschnitts und des Flüssigkeitsvolumens, in der Größenordnung von 1% verursacht [Jaques 1979], welches einen akzeptablen Wert darstellt.

Werden zwei Partikel voneinander getrennt, zwischen denen sich eine Flüssigkeitsbrücke ausgebildet hat, so reißt diese ab einer kritischen Länge  $s_c$ . Lian et al. [Lian 1993] hat folgenden Gleichung zur Bestimmung des kritischen Abstandes aufgestellt und sehr gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten gefunden.

$$s_c = (1 + 0.5 \cdot \theta) \cdot \sqrt[3]{V_B} \quad (2.1)$$

Wobei  $V_B$  das Volumen der Flüssigkeitsbrücke ist. Die Gültigkeit von Gleichung (2.1) ist durch den Kontaktwinkel begrenzt und es gilt die Voraussetzung  $\theta < 40^\circ$ . Weiterhin muss zur Beschreibung der Form und den damit verbundenen Einfluss der Flüssigkeitsbrücken berücksichtigt werden, wie hoch der Sättigungsgrad  $S$  der Flüssigkeit im betrachteten Partikelsystem ist. Dieser ist als Verhältnis zwischen dem im Partikelsystem vorhanden Flüssigkeitsvolumen  $V_L$  und dem freien Volumen  $V$ , das nicht von fester Materie eingenommen wird, definiert  $S = V_L/V$ . In Abbildung 2.2 ist der Zustand eines feuchten Partikelsystems für verschiedene Sättigungsgrade  $S$  zu sehen.



**Abbildung 2.2:** Schematische Darstellung eines feuchten Partikelsystems für verschiedene Sättigungsgrade  $S$ , Partikelkörper grau, Partikelbegrenzung und Flüssigkeit schwarz, a trocken, b Absorptionsschicht, c „pendular Zustand“, d „funicular Zustand“, e Kapillarzustand, f Suspension, in geänderter Form aus [Weigert 1999]

Die verschiedenen Zustände sind dadurch gekennzeichnet, dass mit steigendem Flüssigkeitsvolumen  $V_L$  im Partikelsystem, das Volumen  $V_B$  in den einzelnen Flüssigkeitsbrücken zunimmt. Die Flüssigkeitsbrücken existieren individuell zwischen den einzelnen Partikeln, bis es zu einem Übergangszustand (d) kommt, den so genannten „funicular Zustand“, bei dem sowohl Flüssigkeitsvolumen in den Flüssigkeitsbrücken, als auch in

den Poren zwischen den Teilchen existieren. Viele technische Anlagen arbeiten jedoch im „pendular Zustand“ (c) der im Sättigungsbereich von  $S < 0.3$  liegt [Weigert 1999].

Ist das Flüssigkeitsvolumen in einem monodispersen Partikelsystem gleichmäßig über alle Kontakte verteilt, so lässt sich die Sättigung als Funktion des Volumenverhältnisses  $V_B/V_p$  und der Porosität  $\varepsilon$  beschreiben [Weigert 1999] [Pietsch 1967] [Schubert 1982], wobei letztere das Verhältnis zwischen dem Volumen aller Partikel und dem Gesamtvolumen des Simulationsraumes darstellt  $\varepsilon = V_{p,ges}/V$ .

$$S = \pi \cdot \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^2} \cdot \frac{V_B}{2 \cdot V_p} \quad (2.2)$$

Im Anschluss wird erläutert, auf welche Weise die Kräfte auf Grund der Flüssigkeitsbrücken berechnet werden und welche Vergleichsdaten vorliegen, mit denen die Ergebnisse des zu entwickelnden numerischen Verfahrens validiert werden können.

### 2.1.1 Modellierung der Flüssigkeitsbrückenkräfte

Unter den in Kapitel 2.1 beschriebenen Annahmen können die Kräfte berechnet werden, die durch die Flüssigkeitsbrücken zwischen zwei in Kontakt befindlichen Teilchen wirken. Eine Flüssigkeitsbrücke kann sich erst dann ausbilden, wenn sich die Oberflächen der beiden Partikel berühren, während die Flüssigkeitsbrücke bei der Trennung der Partikel bis zum Überschreiten des kritischen Abstandes  $s_c$  bestehen bleibt.

Die Flüssigkeitsbrückenkraft setzt sich aus zwei Komponenten zusammen. Zum Einem aus der Kraft auf Grund des hydrostatischen Druckes  $F_D$ , zum Anderem aus der Kraft auf Grund der Oberflächenflächenspannung der Flüssigkeit  $F_\gamma$  [R. Y. Yang 2003]. Neben den attraktiven Kräften  $F_D$  und  $F_\gamma$ , treten in Flüssigkeitsbrücken auch viskose Kräfte auf, die entgegen der Relativbewegung der Partikel wirken und proportional zu dieser sind. Diese Kräfte sind nur für feuchte Partikelströmungen relevant, bei denen Flüssigkeiten mit hoher Viskosität verwendet werden [Feng 1998], oder in denen hohe Relativbewegungen zwischen den Teilchen auftreten. Da im Rahmen dieser Arbeit für die Flüssigkeit zwischen den Partikel die Stoffeigenschaften von Wasser, mit vergleichsweise geringer Viskosität, verwendet werden (vgl. Kap. 4.1 u. 4.2) und die Relativgeschwindigkeiten zwischen den Partikeln in der Ringscherzellensimulation sehr niedrig sind, werden diese Kräfte vernachlässigt. Das vorgestellte Verfahren zur Modellierung der Flüssigkeitsbrücken lässt sich jedoch ohne größeren Aufwand um die Be-

rücksichtigung der viskosen Kräfte erweitern, deren Berechnung zum Beispiel von Lian et al. [Lian 1993] beschrieben wird.

Es existieren zwei weit verbreitete Ansätze um die attraktiven Kräfte und damit die aus den beiden Kraftkomponenten resultierende Flüssigkeitsbrückenkraft  $F_B$  zu berechnen. Bei der Boundary-Methode ist  $F_B$  an dem Kontaktpunkt zwischen Flüssigkeit und Festkörper lokalisiert, wobei  $F_D$  an der Stelle wirkt, an der sich die axiale Projektion des Flüssigkeitskontaktes auf der Oberfläche der Kugel befindet [Lian 1993] [Hotta 1974]. Die aus der Oberflächenspannung resultierende Kraft  $F_\gamma$  greift an der Kontaktlinie der Dreiphasengrenze zwischen Festkörper, Flüssigkeit und umgebenden Gas an [Weigert 1999].

$$F_B = F_D + F_\gamma = -[2\pi\gamma r_p \cdot \sin(\beta) \sin(\beta + \theta) \pi r_p^2 p_K \cdot \sin^2 \beta] \cdot n \quad (2.3)$$

Hierbei ist  $n$  der Einheitsnormalenvektor der Oberfläche des Partikels am Kontaktpunkt der Flüssigkeitsbrücke. Der Kapillardruck  $p_K$  wird mit der Laplace-Young-Gleichung berechnet [R. Y. Yang 2003].

$$p_K = \gamma \left( \frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.4)$$

Die zweite Variante ist die Gorge-Methode und besteht darin, dass die Flüssigkeitsbrückenkraft am Hals der Flüssigkeitsbrücke bestimmt wird. Die von Fisher [Fisher 1926] entwickelte Methode beschreibt  $F_B$  mit folgender Gleichung.

$$F_B = \pi d_p \gamma \cdot \frac{1}{1 + \tan(0.5 \cdot \beta)} \quad (2.5)$$

Gleichung (2.5) gilt unter der Voraussetzung, dass eine vollständige Benetzung des Partikels durch die Flüssigkeit stattfindet. Es gilt die Bedingung  $\theta = 0^\circ$ . Sowohl Gleichung (2.3), als auch Gleichung (2.5) vernachlässigen den Einfluss der Schwerkraft auf die Form der Flüssigkeitsbrücke.

Da die Krümmungsradien  $R_1$  und  $R_2$  eine Funktion des halben Füllungswinkel  $\beta$  sind, muss zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft bei beiden vorgestellten Methoden  $\beta$  bekannt sein. Auf Grund der Tatsache, dass für die Boundary-Methode ein beliebiger Kontaktwinkel  $\theta$  gewählt werden kann, wird diese Methode bevorzugt und in dieser Arbeit zur Modellierung der Flüssigkeitsbrücken verwendet.

Zur Berechnung des halben Füllungswinkel sind in der Vergangenheit eine Vielzahl von Gleichungen entwickelt wurden [Weigert 1999]. Diese beschreiben im Wesentlichen den Zusammenhang zwischen dem halben Füllungswinkel  $\beta$  und dem Flüssigkeitsvolumen  $V_B$  in der Flüssigkeitsbrücke. Ein Großteil der zum Teil sehr langen und komplizierten Formeln können nur implizit gelöst werden. Daher hat Weigert [Weigert 1999] eine einfache, explizite und empirische Gleichung formuliert (s. Gleichung (2.6)), die gute Übereinstimmungen mit experimentellen und anderen numerischen Daten zeigt.

$$V_B = 0.96 \cdot r_p^3 \sin^4(\beta) \cdot (1 + 6 \cdot s^*) \cdot (1 + 1.1 \cdot \sin(\theta)) \quad (2.6)$$

Die Größe  $s^*$  ist der Abstand  $s$  zwischen den Oberflächen der miteinander interagierenden Partikel, bezogen auf den Durchmesser  $d_p$  der Teilchen  $s^* = s/d_p$ . Gleichung (2.6) gilt für monodisperse Partikel und liefert akkurate Ergebnisse in einem Sättigungsbereich von  $0.05 < S < 0.30$ . Damit liegt die Oberegrenze des Sättigungsgrades im Übergangsbereich zwischen dem „pendular“ und „funicular Zustand“ (vgl. Kap. 2.1), sodass Gleichung (2.6) für die meisten technisch relevanten Anwendung verwendet werden kann. Durch Umformen kann der halbe Füllungswinkel als Funktion des Flüssigkeitsvolumen in der Flüssigkeitsbrücke und des Abstandes  $s$  berechnet werden.

$$\beta = \arcsin \left[ \left( \frac{V_B}{0.96 \cdot r_p^3 \cdot (1 + 6 \cdot s^*) \cdot (1 + 1.1 \cdot \sin(\theta))} \right)^{1/4} \right] \quad (2.7)$$

Da der Abstand zwischen den Oberflächen der interagierenden Partikel auf triviale Weise bestimmt werden kann, verlagert sich die Aufgabenstellung auf die Ermittlung des Flüssigkeitsvolumens  $V_B$ . Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Verfahren wird in Abschnitt 3.1.1 beschrieben.

### 2.1.2 Vergleichsdaten für Flüssigkeitsbrückenkräfte und makroskopische Stoffeigenschaften von granularen Medien

Zur Validierung des entwickelten Verfahrens zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft, müssen die Simulationsdaten mit Vergleichsdaten überprüft werden. Da nach ausgiebiger Recherche keine experimentellen Daten zum Vergleich zur Verfügung stehen, wird eine Näherungsgleichung, wie sie von Willet et al. [Willet 2000] vorgestellt wurde, zur Validierung verwendet.

Diese beschreibt die dimensionslose Flüssigkeitsbrückenkraft  $\hat{F}_B$  als Funktion des dimensionslosen Abstandes  $\hat{s}$  zwischen den Partikeloberflächen.

$$\ln \hat{F}_B = A_1 - A_2 \cdot e^{A_3 \cdot \ln \hat{s} + A_4 \cdot \ln^2 \hat{s}} \quad (2.8)$$

Dabei ist der dimensionslose Abstand zwischen den Teilchenoberflächen  $\hat{s} = s \cdot \sqrt{r_p/V_B}$  und die dimensionlose Flüssigkeitsbrückenkraft  $\hat{F}_B = F/(2\pi r_p \gamma)$ . Die Gleichungen zur Ermittlung der Berechnungsparameter  $A_1$  bis  $A_4$  sind auf Grund ihrer Länge an dieser Stelle nicht angegeben, können jedoch im Anhang auf S. 86 gefunden werden. Gleichung (2.8) ist für Kontaktwinkel  $\theta < 50^\circ$  und für dimensionlose Flüssigkeitsvolumen  $\hat{V}_B = V_B/r_p^3 < 0.1$  gültig. Dabei liegt der Fehler der Näherungsgleichung im Bereich von 3 % gegenüber den experimentellen Daten [Willet 2000].

Zur weiteren Validierung des Flüssigkeitsbrückenmodells kann die dimensionslose Energie  $\hat{E}_B = E_B/(r_p \gamma)$  zur vollständigen Trennung zweier Partikel, zwischen denen sich eine Flüssigkeitsbrücke ausgebildet hat, herangezogen werden. Diese kann durch die Näherungsgleichung (2.9) abgeschätzt werden [Simons 1994] und gilt für eine komplette Benetzung der Teilchen.

$$\hat{E}_B = A \cdot \sqrt{\hat{V}_B} \quad \text{für} \quad \theta = 0 \quad (2.9)$$

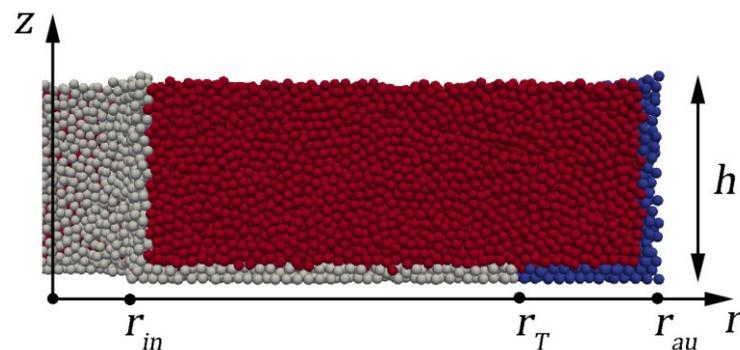
Der Berechnungsparameter  $A$  hat hierbei einen konstanten Wert von  $A = 1.8$ .

Neben der Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft, soll untersucht werden, wie sich die makroskopischen Stoffeigenschaften eines Partikelsystems in Abhängigkeit vom relativen Flüssigkeitsanteil  $D$  verhalten.

$$D = \frac{m_f}{m_p} \quad (2.10)$$

Hierbei ist  $m_f$  die Masse des im System enthaltenen Fluides und  $m_p$  die Masse aller im System befindlichen Partikel.

Als Vergleichsdaten für die Analyse der makroskopischen Stoffeigenschaften werden die Ergebnisse von Luding [Luding 2008] [Luding 2010] verwendet. Dabei handelt es sich um ein Ringscherzellensystem, in dem sich ein trockenes Pulver mit monodispersen, kugelförmigen Teilchen befindet. In Abbildung 2.3 ist die Simulationskonfiguration zu sehen, die durch den Querschnitt in der  $x$ - $z$  Ebene der an der Symmetrieachse  $z$  halbierten Ringscherzelle vollständig beschrieben werden kann.



**Abbildung 2.3:** Querschnitt in der  $x$ - $z$  Ebene der an der Symmetrieachse  $z$  halbierten Ringscherzelle

Die Ringscherzelle hat den Innenradius  $r_{in}$ , den Teilungsradius  $r_T$ , den Außenradius  $r_{au}$  und die Höhe  $h$ . Die Farbgebung ist von der Art der Teilchen abhängig. Die weißen Teilchen gehören zum inneren, nicht rotierenden Teil der Ringscherzelle, die blauen Teilchen zum äußeren, rotierenden Teil der Ringscherzelle und die roten Partikel zum granularen Medium, das sich innerhalb der Ringscherzelle befindet. Alle Teilchen besitzen die gleichen Stoffeigenschaften, jedoch sind die Wandteilchen an den jeweiligen Wänden fixiert, sodass es sich um eine Ringscherzelle mit strukturierten Wänden handelt. Dadurch wird der Impulsaustausch zwischen den Wänden und dem Granulat im Inneren erhöht. Die Dicke der Wände beträgt  $1.5 \cdot d_p$ . Die geometrischen Abmessungen der Ringscherzelle sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

**Tabelle 2.1:** Abmessung der für die Simulationen verwendeten Ringscherzelle

Abmessung	Wert [m]	Abmessung	Wert [m]
Höhe $h$	0.038	Innenradius $r_{in}$	0.0147
Teilungsradius $r_T$	0.085	Außenradius $r_{au}$	0.11
Wandstärke	$1.5 \cdot d_p$	—	—

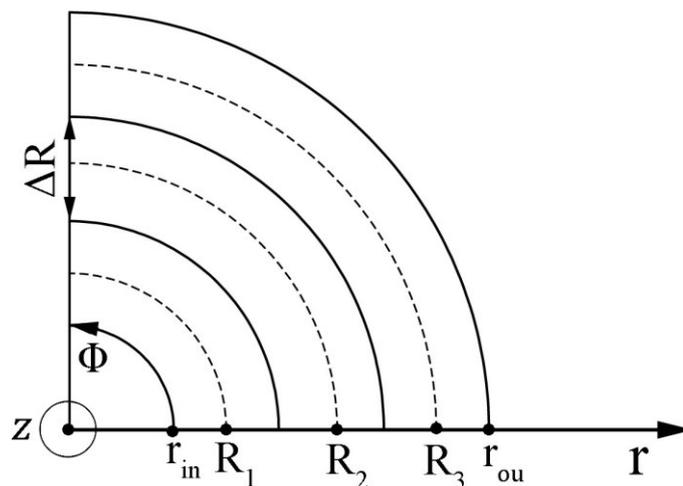
Die für die Simulation verwendete Ringscherzelle zeichnet sich dadurch aus, dass es sich um eine Ringscherzelle mit geteiltem Boden handelt. Diese Konfiguration hat den

Vorteil, dass die Hauptscherzone einen großen Abstand zu der Innen- und Außenwand der Ringscherzelle besitzt. Dadurch wird der Wandeinfluss auf die Ausbildung des Scherbandes minimiert und es kann beobachtet werden, wie sich die Form des Scherbandes mit steigendem Abstand zur Hauptscherzone entwickelt. Darüber hinaus kann der Verlauf des Scherbandes für diese Simulationskonfiguration durch eine universelle Profilkurve gefittet werden [Luding 2008], die wie folgt definiert ist [Fenistein 2003].

$$\frac{u_\phi(r)}{\omega \cdot r} = 0.5 + 0.5 \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{r - R_z}{B}\right) \quad (2.11)$$

Dabei ist  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit mit der die Scherzelle rotiert,  $R_z$  die radiale Position des Mittelpunktes des Scherbandes und  $B$  die Breite des Scherbandes. Die Position des Mittelpunktes des Scherbandes stimmt mit der Position des größten Geschwindigkeitsgradienten der Umfangsgeschwindigkeit  $u_\phi$  des Granulates in radialer Richtung überein.

Die Berechnung der makroskopischen Stoffeigenschaften erfolgt mit einem sogenannten „micro-macro averaging“, wie es von Lätzel et al. [Lätzel 2001] entwickelt wurde, dass bereits zur Auswertung von einer Vielzahl von anderen Ringscherzellen-geometrien verwendet wurde [Luding 2008] [Luding 2010] [Singh 2010] [Uhlig 2011]. Das Berechnungsverfahren benutzt eine Raum- und Zeitmittlung, um Tensorgrößen, wie den Spannungs-  $\sigma$ , oder Dehnungstensor  $\varepsilon$  zu bestimmen. In Abbildung 2.4 ist die Aufteilung eines Viertels der Ringscherzelle für die 2D-Mittlung im Raum dargestellt.



**Abbildung 2.4:** Aufteilung eines Viertels der Ringscherzelle für die 2D-Mittlung im Raum

Die Ringscherzelle wird in Teilringe aufgeteilt, die den Abstand  $R = r - r_{in}$  vom inneren Zylinder haben. Die Breite eines Ringes über den die Raummittlung stattfindet ist  $\Delta R$ , sodass sich ein Mittlungsvolumen  $V_R$  für einen Ring mit der Höhe  $h$  von  $V_R = 2\pi h R \Delta R$  ergibt. Die Position des  $i$ -ten Teilchens wird durch eine Kombination aus

der radialen Position  $r_i = (x_i, y_i)$ , der Position in Richtung der Zylinderachse  $z_i$  und der Orientierung in Umfangsrichtung  $\varphi_i = \tan^{-1}(y_i/x_i)$  beschrieben. Die Definition von  $\varphi_i$  gilt für  $x_i > 0$  und wird periodisch für  $x_i < 0$  weitergeführt, sodass  $\varphi_i$  im Intervall  $[-\pi, \pi]$  gefunden werden kann [Uhlig 2011].

Bei der Raum- und Zeitmittlung wird die Annahme getroffen, dass sich die Partikelbewegung im Ringscherzellensystem in einem stationären Zustand befindet, sodass Bewegungen und dementsprechend Geschwindigkeitsgradienten in radiale Richtung vernachlässigt werden können. Darüber hinaus werden im Mittlungsverfahren die berechneten Größen innerhalb eines Partikels als konstant angenommen.

Gleichung (2.12) zeigt beispielhaft anhand des gemittelten Spannungstensors  $\bar{\sigma}$ , wie die Berechnung von Tensorgrößen im verwendeten Mittlungsverfahren erfolgt.

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V_R} \sum_{p \in V_R} w_{p,V_p} \sum_{c=1}^{c_p} F_k \otimes x_k \quad (2.12)$$

Es erfolgt eine Summierung über alle Partikel  $p$  die sich im aktuellen Mittlungsvolumen mit dem Volumen  $V_R$  befinden. Der Beitrag des betrachteten Partikels am Mittelwert  $w_{p,V_p}$  ist proportional zum Volumen des Partikels im aktuellen Mittlungsvolumen. In der Summierung über alle Kontakte  $k_p$  des aktuell betrachteten Partikels wird das Tensorprodukt  $\otimes$  zwischen der Kontaktkraft  $F_k$  und der Position des Kontaktpunktes  $x_k$  gebildet.

Alle zum Vergleich der makroskopischen Stoffeigenschaften relevanten Größen können aus den Berechnungsgrößen des „micro-macro averaging“, oder aus einfach zu bestimmenden Größen, wie dem Geschwindigkeitsgradient, abgeleitet werden. Eine solche Größe ist die Scherrate  $\dot{\gamma}$  [Luding 2008].

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial z}\right)^2} \quad (2.13)$$

Weiterhin wird eine dimensionslose Scherrate  $I$  eingeführt, wie sie von GDR MiDi formuliert wurde [MiDi 2004].

$$I = \dot{\gamma} d_p \cdot \sqrt{\frac{\rho_p}{p}} \quad (2.14)$$

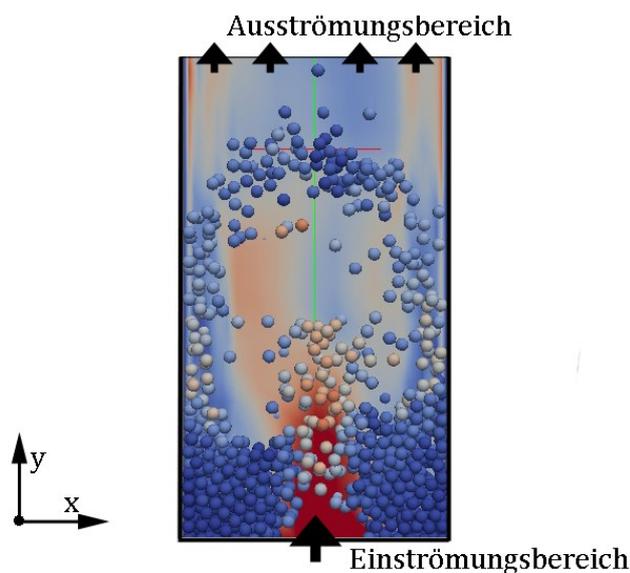
Die Dimensionslose Scherrate korreliert in der doppelt logarithmischen Darstellung linear mit dem Quotienten aus Scherspannung  $\tau$  und Scherrate  $\dot{\gamma}$ , welcher gleichwertig mit der dynamischen Viskosität  $\eta_f$  in einem Fluid ist.

Abschließend wird die Scherspannung  $\tau$ , unter der Annahme, dass die Spannungskomponente  $\sigma_{rz}$  des Spannungstensors im Vergleich zu den anderen Komponenten klein ist, wie folgt definiert.

$$|\tau| = \sqrt{\sigma_{r\varphi}^2 + \sigma_{z\varphi}^2} \quad (2.15)$$

## 2.2 CFD-DEM-Kopplung

Die CFD-DEM-Kopplung modelliert die Wechselwirkung zwischen der festen und flüssigen Phase in einem Zweiphasensystem, das aus diskreten Teilchen besteht, die sich in einem als Kontinuum angenommenen Fluid bewegen. In Abbildung 2.5 ist ein fluidisiertes Bett zusehen, das ein solches System repräsentiert.



**Abbildung 2.5:** Darstellung der Simulation eines fluidisierten Bettes, Einfärbung in Abhängigkeit vom Betrag der Geschwindigkeit

Die Einfärbung der Partikel und des Fluides ist proportional zum Betrag der Geschwindigkeit. Dabei repräsentieren rot eingefärbte Bereiche hohe und blaue Bereiche niedrige Geschwindigkeiten.

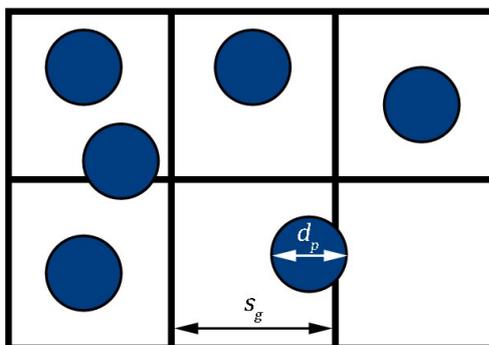
Das in Abbildung 2.5 dargestellte fluidisierte Bett besteht aus einem Behälter, in dem ein Fluid einseitig, im mittleren Drittel des Behälters ein- und auf der entgegengesetzten Seite, über die volle Breite des Behälters, ausströmt. Diese Konfiguration hat zur Folge, dass sich eine Hauptströmungsrichtung in positive  $y$ -Richtung ausbildet. Neben dem Fluid befinden sich Partikel in dem Behälter, die sich frei bewegen können. Auf Grund der Relativbewegung zwischen den Teilchen und dem Fluid treten Wechselwirkungskräfte zwischen den beiden Phasen auf, sodass die Partikel in Hauptströmungsrichtung beschleunigt werden. Die Gravitation bewirkt, dass die Teilchen wieder zu Boden fallen, sobald die Wechselwirkungskräfte nicht mehr ausreichend groß sind, um die Partikel entgegen der Erdbeschleunigung, die in negative  $y$ -Richtung wirkt, zu befördern. Da das Fluid nur im mittleren Drittel des Behälters einströmt, bildet sich ein Partikelwirbel aus, in dem die Partikel im mittleren Teil von der Strömung mitgerissen und im äußeren Teil zu Boden fallen.

Die größte Herausforderung besteht darin die Wechselwirkungskräfte korrekt zu bestimmen, wobei es verschiedene Verfahren gibt, um diese zu berechnen (vgl. Kap. 2.2.1 und Kap. 2.2.2). Alle Verfahren behandeln die einzelnen Phasen für sich alleine jedoch identisch. Für die flüssige Phase gelten die aus der Strömungsmechanik bekannten Erhaltungsgleichungen, wie Impuls-, Masse- und Energieerhaltung [Ferziger 2002]. Auf der anderen Seite wird die Bewegung der Partikel gemäß der Diskreten Elemente Methode bestimmt [Rhodes 2008].

Im Folgenden werden zwei CFD-DEM-Kopplungsverfahren vorgestellt, die sich im Wesentlichen in der Auflösung der Fluidphase durch das CFD-Gitter unterscheiden [Van der Hoef 2008]. Außerdem wird erläutert, wie die CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® gestaltet ist. Abschließend werden analytische Lösungen für die Sedimentation von einzelnen Teilchen in einem newtonschen Fluid vorgestellt, die zur Validierung des numerischen Verfahrens dienen.

### 2.2.1 Unaufgelöste CFD-DEM-Kopplung

Das unaufgelöste CFD-DEM-Kopplungsverfahren zeichnet sich dadurch aus, dass die Partikel nicht durch das verwendete CFD-Gitter aufgelöst werden [Goniva 2010]. Das Größenverhältnis zwischen den Partikeln und dem CFD-Gitter ist schematisch in Abbildung 2.6 dargestellt.



**Abbildung 2.6:** Schematische Darstellung des Größenverhältnisses zwischen den Partikeln und dem CFD-Gitter in der unaufgelösten CFD-DEM-Kopplung

Es gilt die Bedingung, dass der Partikeldurchmesser  $d_p$  viel kleiner ist, als die Ausbreitung  $s_g$  der Gitterzelle in die jeweilige Raumrichtung  $d_p \ll s_g$ . Liegt ein solches System vor, so lässt sich ein Volumenanteil der flüssigen Phase  $\alpha_f$  und ein Impulsaustauschterm  $K_{fp}$  für den Impulsaustausch zwischen den Teilchen und der Flüssigkeit in den Erhaltungsgleichungen des Fluides einführen.

$$\alpha_f = \frac{V_f}{V_z} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial \alpha_f \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f u_f) = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \alpha_f \rho_f u_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f u_f u_f) = -\alpha_f \nabla p - K_{fp} + \nabla \cdot (\alpha_f \tau) + \alpha_f \rho_f g \quad (2.18)$$

Dabei spiegelt Gleichung (2.17) die modifizierte Massenerhaltungsgleichung und Gleichung (2.18) die modifizierte Impulserhaltungsgleichung wieder. Die Größe  $V_z$  ist das Volumen der jeweiligen Gitterzelle,  $V_f$  das Volumen des Fluides in der jeweiligen Gitterzelle,  $\rho_f$  die Dichte des Fluids,  $u_f$  die Geschwindigkeit des Fluids,  $\tau$  die Scherspannung im Fluid und  $g$  die Erdbeschleunigung. In der Literatur ist eine Vielzahl von Ansätzen zu finden [Rhodes 2008] [Goniva 2010], um den Impulsaustauschterm  $K_{fp}$  zu berechnen. Dabei ist dieser in der Regel eine Funktion von der Reynoldszahl  $Re_p$  der Partikel, von dem Widerstandsbeiwert  $C_w$  der Partikel (vgl. Kap. 2.2.3) und vom Volumenanteil  $\alpha_f$  des Fluides.

Eine weit verbreitete Berechnungsmethode stellen die von Di Felice [Felice 1994] vorgestellten empirischen Näherungsgleichungen dar.

$$F_w = \frac{1}{2} \rho_f \cdot (u_f - u_p) \cdot |u_f - u_p| C_w \cdot \frac{d_p^2 \cdot \pi}{4} \alpha_f^{1-X} \quad (2.19)$$

$$C_w = \left( 0.63 + \frac{4.8}{Re_p} \right)^2 \quad (2.20)$$

$$X = 3.7 - 0.65 \cdot e^{-\frac{(1.5 - \log Re_p)^2}{2}} \quad (2.21)$$

$$\Rightarrow K_{pf} = \frac{\alpha_f \cdot |\sum_i F_{w,i}|}{V_z} \quad (2.22)$$

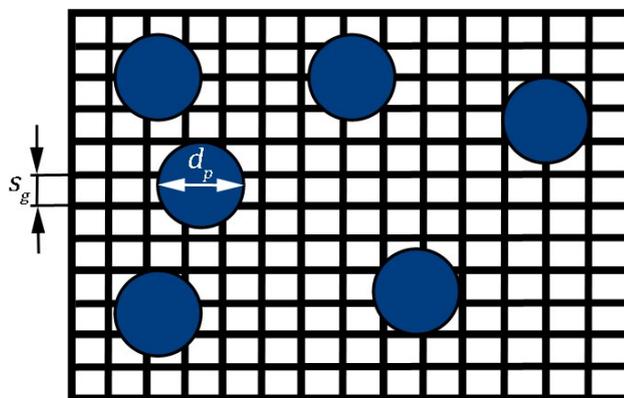
Hierbei ist  $F_{w,i}$  die auf das  $i$ -te Teilchen, das sich in der aktuell betrachteten Zelle mit dem Zellenvolumen  $V_z$  befindet, wirkende Widerstandskraft und  $X$  ein Korrektorexponent für den Volumenanteil des Fluides. Die Ermittlung des Impulsaustauschterms nach Di Felice dient nur als Beispiel, da in dieser Arbeit nicht auf alle populären Berechnungsansätze eingegangen werden kann. Modelle die einen kleineren Fehler gegenüber experimentellen Ergebnissen aufweisen und in jüngerer Zeit erschienen sind, sind zum Beispiel die Berechnungsverfahren von Koch et al. [Hill 2001], oder Beestra et

al. [Beetstra 2007]. Neben der Widerstandskraft können je nach der Beschaffenheit der Simulation weitere Kräfte einen entscheidenden Einfluss auf die Partikelbewegung haben und müssen in Gleichung (2.18) berücksichtigt werden. So wird in den oben beschriebenen Ansatz der Druckgradient (Druckkräfte), die Partikelrotation (Magnus-Kräfte), die Partikelbeschleunigung (Virtuelle Massenkräfte) und der Geschwindigkeitsgradient (Saffman-Kräfte) vernachlässigt.

Der Vorteil der unaufgelösten CFD-DEM-Kopplung liegt darin, dass ein relativ grobes Gitter für die CFD-Berechnung verwendet werden kann, da die Strömung um die Teilchen nicht aufgelöst werden muss, wodurch der Rechenaufwand sinkt. Andererseits muss bei diesem Ansatz sichergestellt werden, dass die unaufgelösten Skalen einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben.

### 2.2.2 Aufgelöste CFD-DEM-Kopplung

Gegenüber der unaufgelösten CFD-DEM-Kopplung wird die Strömung um die Partikel bei der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung räumlich aufgelöst [Hager 2011]. In Abbildung 2.7 ist das Größenverhältnis zwischen den Partikeln und den verwendeten CFD-Gitter bei der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung schematisch dargestellt.

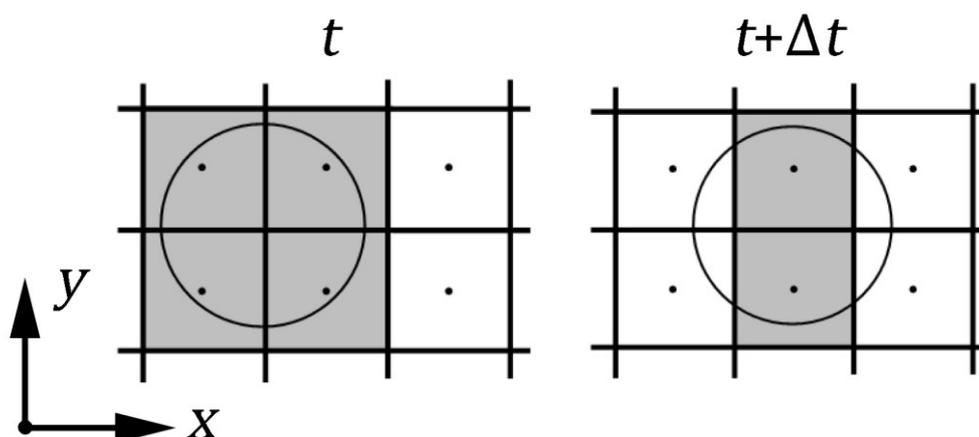


**Abbildung 2.7:** Schematische Darstellung des Größenverhältnisses zwischen den Partikeln und dem CFD-Gitter in der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung

Es gilt die Bedingung, dass der Partikeldurchmesser  $d_p$  viel größer ist, als die Ausbreitung  $s_g$  der Gitterzelle in die jeweilige Raumrichtung  $d_p \gg s_g$ . Ähnlich wie in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, wird bei der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung in den Impulserhaltungsgleichung für die flüssige Phase ein Impulsaustauschterm eingeführt. Dieser muss jedoch dank der räumlich Auflösung der Partikel nicht durch Näherungsgleichungen approximiert werden, sondern es können direkt die auf die Oberfläche der Partikel wirkenden viskosen Kräfte und Drückkräfte aus dem umgebenden Strömungsfeld abgeleitet werden [Shirgaonkar 2009]. Da die aufgelöste CFD-DEM-Kopplung im Rahmen

dieser Arbeit genauer untersucht werden soll, wird an dieser Stelle auf eine detaillierte Beschreibung der Berechnungsgleichungen verzichtet und für weitere Informationen auf Kap. 3.2 verwiesen.

Die aufgelöste CFD-DEM-Kopplung benötigt eine Lokalisierung der Partikel im CFD-Gitter. Eine Möglichkeit der Lokalisierung besteht darin, die Gitterzellen als von einem Partikel eingenommen Bereich zu definieren, deren Mittelpunkt innerhalb der äußeren Begrenzung der Partikel liegen. Dieses Vorgehen wird schematisch in Abbildung 2.8 dargestellt.



**Abbildung 2.8:** Schematische Darstellung der Lokalisierungsmethode von Partikeln im CFD-Gitter, links zum Zeitpunkt  $t$ , rechts zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$ , in geänderter Form aus [Hager 2011]

Zur Veranschaulichung wurde in Abbildung 2.8 ein sehr grobes CFD-Gitter verwendet. Das Partikel bewegt sich in positive  $x$ -Richtung. Es ist die Position des Teilchens zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten  $t$  und  $t + \Delta t$  dargestellt. Während das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  durch vier Gitterzellen repräsentiert wird, sind es zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  nur zwei Gitterzellen.

Dadurch wird offensichtlich, dass die Repräsentation der Teilchen eine starke Gittergrößenabhängigkeit aufweist, solange ein statisches Gitter, das heißt ein Gitter mit festen Zellengrößen, verwendet wird. Diese Gittergrößenabhängigkeit wurde bereits in anderen Untersuchungen beobachtet [Hager 2011] [Kanarska 2010]. Dabei wurde festgestellt, dass die minimale Gittergröße, um akkurate Ergebnisse zu erzielen, eine Funktion der maximal auftretenden Reynoldszahl der Partikel ist (vgl. Kap. 2.2.3) und die erforderliche Gittergröße im Verhältnis zum Durchmesser des Partikels für 2D-Simulationen zwischen  $d_p/s_z = 8$  ( $Re_p = 1$ ) bis  $d_p/s_z = 64$  ( $Re_p = 100$ ) liegt. Diese Abhängigkeit dient als Anhaltspunkt zur Wahl der CFD-Gitterauflösung für die in dieser Arbeit durchgeführten CFD-DEM-Simulationen.

### 2.2.3 Analytische Lösungen

Die Sedimentation eines einzelnen Teilchens in einem newtonschen Fluid wurde in der Vergangenheit bereits ausführlich experimentell untersucht [Stokes 1880-1905]. Aus den experimentellen Untersuchungen und physikalischen Überlegungen wurden analytische Lösungen abgeleitet, die das Sedimentationsverhalten als Funktion der Reynoldszahl  $Re_p$  des Teilchens beschreiben.

$$Re_p = \frac{\rho_f \cdot d_p \cdot |u_p - u_f|}{\eta_f} \quad (2.23)$$

Wobei  $\eta_f$  die dynamische Viskosität des Fluids ist. In der Strömungsmechanik wird zwischen drei grundlegenden Strömungsregimen unterschieden, die durch den Betrag der auftretenden Reynoldszahl festgelegt sind.

Der Stokesche Bereich ist für die Bewegung einer einzelnen Kugel in einem Fluid für Reynoldszahlen  $Re_p \leq 0.3$  definiert. In diesem Bereich herrscht ein linearer Zusammenhang zwischen dem Widerstandsbeiwert  $C_w$  und der Reynoldszahl des Partikels  $C_w = 24/Re_p$  [Surek 2007].

Der Übergangsbereich reicht von  $Re_p > 0.3$  bis  $Re_p < 500$  und ist dadurch charakterisiert, dass ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen der Reynoldszahl und dem Widerstandsbeiwert vorliegt. Zur Beschreibung des Zusammenhanges zwischen den beiden Größen wurde eine Vielzahl von Näherungsformeln entwickelt [Surek 2007].

$$C_w = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) \quad (2.24)$$

Die empirische Gleichung (2.24) wurde von Schiller [Schiller 1935] aufgestellt und nähert den Übergangsbereich mit einem mittleren Fehler von  $\pm 7\%$  an [Rhodes 2008].

Nach dem Übergangsbereich folgt der Newtonsche Bereich, der sich in den Grenzen zwischen  $500 < Re_p$  bis  $Re_p \leq 2 \cdot 10^5$  befindet. Der Newtonsche Bereich zeichnet sich dadurch aus, dass der Widerstandsbeiwert unabhängig von der Reynoldszahl wird und einen konstanten Wert von  $C_w = 0.44$  annimmt [Surek 2007].

Eine Gleichung zur Bestimmung des Widerstandsbeiwertes über alle Strömungsregime wurde von Haider [Haider 1989] formuliert (vgl. Gl. (2.25)), wobei diese einen mittleren quadratischen Fehler von 2.4 % aufweist.

$$C_w = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + 0.1806 \cdot Re_p^{0.6459}) + \left( \frac{0.4251}{1 + \frac{6880.95}{Re_p}} \right) \quad (2.25)$$

Die Kenntnis des Widerstandsbeiwertes erlaubt es die Kraft auf das sedimentierende Teilchen zu bestimmen und sowohl die stationäre, als auch die zeitliche abhängige Sinkgeschwindigkeit zu berechnen [Rhodes 2008]. Der Widerstandsbeiwert eines umströmten Körpers beschreibt dabei das Verhältnis zwischen der auf den Körper in Strömungsrichtung wirkenden Kraft  $F_w^*$  und des auftretenden Staudruckes  $p_s = 0.5\rho_f u_p^2$  [Bollrich 2007].

$$C_w = \frac{F_w^*}{0.5\rho_f u_p^2} \quad (2.26)$$

Dabei ist  $F_w^*$  die auf das Partikel wirkende Widerstandskraft, bezogen auf die projizierte Fläche des Teilchens.

$$F_w^* = \frac{2 \cdot F_w}{\pi d_p^2} \quad (2.27)$$

Bei der freien Sedimentation des einzelnen Teilchens wirken lediglich die Widerstandskraft  $F_w$  und die Schwerkraft  $F_g$  auf Grund der Erdbeschleunigung auf das Partikel. Dementsprechend lässt sich mit den Gleichungen (2.24)-(2.27) eine Differentialgleichung für die Sinkgeschwindigkeit  $u_s$  des Partikels aufstellen.

$$m_p \cdot \frac{\partial u_s}{\partial t} = F_w + F_g = \frac{\pi d_p^2 \rho_f u_s^2 C_w}{8} + m_p \cdot g \quad (2.28)$$

Durch geeignete numerische Integrationsverfahren kann mit Gleichung (2.28) der zeitliche Verlauf der Sinkgeschwindigkeit bestimmt werden. Die stationäre Sinkgeschwindigkeit leitet sich aus der Bedingung  $\frac{\partial u_s}{\partial t} = 0$  ab. Demnach gilt beispielsweise für die stationäre Sinkgeschwindigkeit im Stokeschen Bereich folgende Gleichung.

$$u_s = \frac{d_p g \cdot (\rho_p - \rho_f)}{9\eta_f} \quad \text{für } Re_p \leq 0.3 \quad (2.29)$$

Bei der Verwendung von Gleichung (2.28) muss berücksichtigt werden, dass diese auf Grund der Näherungsgleichungen für den Widerstandsbeiwert, speziell im Übergangsbereich, mit Fehlern behaftet ist. Nichtsdestotrotz eignet sich Gleichung (2.28) in Kom-

bination mit Gleichung (2.25), um die Simulationsergebnisse der CFD-DEM-Kopplung zu validieren.

Abschließend sei angemerkt, dass die in diesem Abschnitt vorgestellten Gleichungen unter der Voraussetzung gelten, dass das einzelne Partikel in einem Behälter sedimentiert, dessen Wände unendlich weit vom Partikel entfernt sind und somit keinen Einfluss auf die Sedimentation haben. Experimente zeigen jedoch, dass die Sedimentation in endlichen Behältern maßgeblich durch die Wände beeinflusst wird [Francis 1933] [Fidleris 1961] [Ataíde 1999]. Dabei erreicht das Teilchen in einem begrenzten Behälter nur einen Bruchteil der theoretischen Sinkgeschwindigkeit.

Das Verhältnis zwischen der stationären Sinkgeschwindigkeit in einem begrenzten Behälter  $u_s^*$  und der stationären Sinkgeschwindigkeit in einem unendlich großen Behälter  $u_s$ , wird durch den Wandeinflussfaktor  $f_W$  beschrieben. Eine einfache empirische Näherungsformel für den Wandeinflussfaktor, dessen Gültigkeitsbereich durch die Reynoldszahl  $Re_p < 0.3$ , sowie durch den Partikel- zu Behälterdurchmesser Verhältnis  $d_p/d_B < 0.97$  begrenzt ist, wurde von Francis et al. [Francis 1933] aufgestellt [Rhodes 2008].

$$f_W = \frac{u_s^*}{u_s} = \left(1 - \frac{d_p}{d_B}\right)^{2.25} \quad \text{für } Re_p < 0.3; \quad d_p/d_B < 0.97 \quad (2.30)$$

Einen größeren Anwendungsbereich hat die empirische Näherungsformel von Ataíde et al. [Ataíde 1999], welche für Reynoldszahlen  $0.38 < Re_p < 310.7$  und Durchmesser-Verhältnissen  $d_p/d_B < 0.61$  verwendet werden kann. Die mittlere Abweichung von Gleichung (2.31) zu den experimentellen Messungen beträgt dabei 3.85 %.

$$f_W = \frac{1.092}{1 + A_1 \cdot Re_p^{A_2}} \quad \text{für } 0.38 < Re_p < 310.7; \quad d_p/d_B < 0.61 \quad (2.31)$$

$$A_1 = 0.1 \cdot e^{8.54 \cdot \frac{d_p}{d_B}}; \quad A_2 = -0.042 - 0.939 \cdot \frac{d_p}{d_B} \quad (2.32)$$

Dementsprechend müssen die Simulationsdaten mit Gleichung (2.30), bzw. Gleichung (2.31) korrigiert werden, um die nach Gleichung (2.28) theoretisch berechneten stationären Sinkgeschwindigkeiten zu erreichen.

## 3 Umsetzung der Aufgabenstellung

In diesem Kapitel wird die Umsetzung der Aufgabenstellung beschrieben. Zunächst wird erläutert wie die Implementierung zur Modellierung der Flüssigkeitsbrücken aufgebaut ist. Anschließend wird detailliert die Gestaltung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® dargestellt. Im letzten Abschnitt wird die Beschaffenheit der Validierungssimulationen zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft und der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung erläutert.

Im Folgenden werden Befehle innerhalb des LIGGGHTS-, oder OpenFOAM-Eingabeskript, sowie im Programmcode mit fett gedruckten Buchstaben hervorgehoben. Außerdem repräsentieren kursiv geschriebene Wörter Dateinamen in der LIGGGHTS, oder OpenFOAM® Ordnerstruktur.

### 3.1 Implementierung der Flüssigkeitsbrücken in LIGGGHTS

Die Modellierung von Flüssigkeitsbrücken ist zum Zeitpunkt dieser Arbeit nicht Bestandteil der offiziellen LIGGGHTS-Version und wurde vollständig im Rahmen dieser Arbeit entwickelt. Der allgemeine Berechnungsablauf zur Bestimmung der Partikelbewegung, die Implementierung des Kontaktmodells und die Implementierung der Zeitintegration in LIGGGHTS wurde bereits ausführlich in der Arbeit von Uhlig [Uhlig 2011] beschrieben und wird als Grundlage für diese Arbeit vorausgesetzt.

Zur Implementierung der Flüssigkeitsbrücken wurde zunächst ein neuer **atom\_style** eingeführt, dessen Programmcode in den Quelldateien *atom\_vec\_granular\_liquid.h* und *atom\_vec\_granular\_liquid.cpp* enthalten ist. Der **atom\_style** im LIGGGHTS-Eingabeskript legt fest, welche Art von Partikeln in der Simulation verwendet werden und bestimmt, welche Attribute, wie z. B. die Geschwindigkeit, oder die Masse, ein Partikel besitzen kann. Diese Attribute werden für jedes in der Simulation befindliche Teilchen gespeichert und es kann in anderen Teilen des Programmcodes auf diese zugegriffen werden, um sie nach Bedarf zu manipulieren.

Bei der neu eingeführten Partikelart **granular\_liquid** handelt es sich um eine Erweiterung der Partikelart **granular**, welche standartmäßig für DEM-Simulationen verwendet wird. Dabei wurden neue Attribute eingeführt, die zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft notwendig sind. Tabelle 3.1 enthält einen Vergleich zwischen den in den Partikelarten **granular** und **granular\_liquid** berücksichtigten Partikelattributen.

**Tabelle 3.1:** Vergleich zwischen den Partikelattributen der Partikelart **granular** und **granular\_liquid**

<b>granular</b>	$ID_i$	$Typ_i$	$x_i$	$u_i$	$\omega_i$	–	–
<b>granular_liquid</b>	$ID_i$	$Typ_i$	$x_i$	$u_i$	$\omega_i$	$c_{L,i}$	$D_i$

Dabei ist  $ID_i$  die Identifikationsnummer,  $Typ_i$  der Typ,  $x_i$  der Ortsvektor,  $u_i$  der Geschwindigkeitsvektor,  $\omega_i$  der Winkelgeschwindigkeitsvektor,  $c_{L,i}$  die Anzahl der Flüssigkeitsbrückenkontakte und  $D_i$  der relative Flüssigkeitsanteil (vgl. Kap. 2.1.2.) des  $i$ -ten Teilchens. Diese Attribute sind in der angegebenen Reihenfolge auch in der Startdatei der Simulation zu definieren, sofern der **read\_data** Befehl im LIGGGHTS-Eingabeskript verwendet wird (vgl. Referenz [Uhlig 2011]).

Weiterhin wurde ein neuer **pair\_style** zur Standardversion von LIGGGHTS hinzugefügt, dessen Programmcode in den Quelldateien *pair\_gran\_hooke\_history\_simple\_liquid.h* und *pair\_gran\_hooke\_history\_simple\_liquid.cpp* hinterlegt ist. Dieser legt im LIGGGHTS-Eingabeskript das verwendete Kontaktmodell fest. Dementsprechend enthalten die angegebenen Quelldateien die Gleichungen zur Berechnung der Kontaktkräfte.

Das neu eingeführte Kontaktmodell **gran/hook/history/stiffness/liquid** ist eine Erweiterung des standartmäßig in LIGGGHTS enthaltenen Kontaktmodells **gran/hook/history/stiffness**. Das Kontaktmodell realisiert ein lineares Federgesetz [Duran 1999], bei dem die Feder- und Dämpfungskonstanten für die Normal- und Tangentialfeder direkt im LIGGGHTS-Eingabeskript eingegeben werden können, wie es bereits von Uhlig [Uhlig 2011] beschrieben wurde. Das Flüssigkeitsbrückenkontaktmodell baut das bestehende Modell um die Eingabe von Simulationsparametern zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte und um die Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte selbst (vgl. Kap. 3.1.1) aus. Die neu eingeführten Simulationsparameter und die im LIGGGHTS-Eingabeskript zu verwendenden Eingabebefehle werden im Folgenden beschrieben. Dabei wird die gleiche Nomenklatur wie in der LIGGGHTS-Dokumentation verwendet.

- Kontaktwinkel  $\theta$  der Flüssigkeitsbrücke (vgl. Kap. 2.1).
  - Skriptbefehl:
   
**fix id all property/global contactangle scalar value**
- Dichte der Flüssigkeit  $\rho_f$  mit der die Partikel befeuchtet sind.
  - Skriptbefehl:
   
**fix id all property/global densityliquid scalar value**

- Oberflächenspannung  $\gamma$  der Flüssigkeit mit der die Partikel befeuchtet sind.
  - Skriptbefehl:  
**fix id all property/global surfacetension scalar value**
- Dynamische Viskosität  $\eta_f$  der Flüssigkeit mit der die Partikel befeuchtet sind.
  - Skriptbefehl:  
**fix id all property/global dynamicviscosity scalar value**

Die Eingabe der restlichen Materialeigenschaften der Partikel erfolgt genauso, wie es in der Standardversion von LIGGGHTS vorgesehen ist (vgl. LIGGGHTS Dokumentation).

Neben dem Kontaktmodell zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte, wurde ein zweites Kontaktmodell eingeführt, dessen Programmcode in den Quelldateien *pair\_gran\_hooke\_history\_simple\_liquid\_fstat.h* und *pair\_gran\_hooke\_history\_simple\_liquid\_fstat.cpp* enthalten ist. Das Kontaktmodell **gran/hook/history/stiffness/liquid/fstat** ist identisch mit **gran/hook/history/stiffness/liquid**, jedoch wurde es um die Funktion erweitert, die Kontaktdaten zur statistischen Analyse der Simulation in regelmäßigen Abständen auszuschreiben. Dieses Verfahren wurde bereits von Uhlig [Uhlig 2011] diskutiert, sodass an dieser Stelle nicht weiter auf die Details dieses Kontaktmodells eingegangen wird.

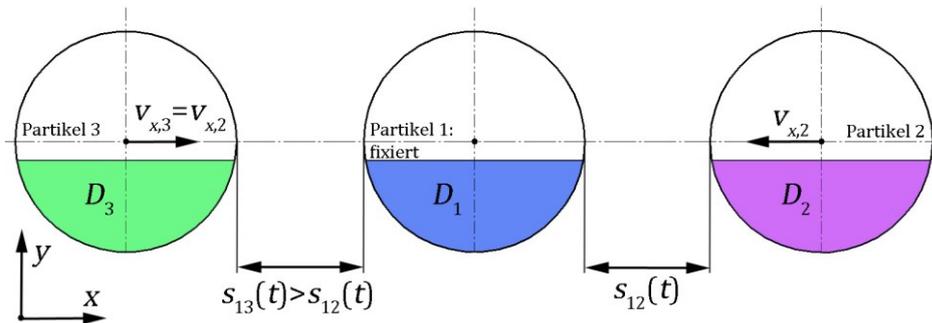
Neben den hier beschriebenen, bzw. auf andere Quellen verwiesenen Änderungen, kann die modifizierte LIGGGHTS Version genauso verwendet werden, wie die Standardversion von LIGGGHTS.

Der Programmcode der modifizierten LIGGGHTS Version ist so gestaltet, dass er für weiterführende Flüssigkeitsbrückenmodelle (vgl. Kap. 3.1.1) einfach nachvollziehbar und erweiterbar ist. So ist es zum Beispiel ohne größeren Aufwand möglich, den Austausch von Flüssigkeit zwischen den Partikeln zu modellieren, oder den effektiven Partikeldurchmesser mit der Flüssigkeitsfilmdicke zu beaufschlagen. Beide hier angesprochene Funktionen sind in der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten LIGGGHTS Version nicht enthalten (vgl. Kap. 3.1.1). Außerdem ist die modifizierte LIGGGHTS Version ohne Beschränkungen auf mehreren Rechenkernen parallelisierbar.

Der Programmcode der modifizierten LIGGGHTS Version ist in der Arbeit beigefügten CD enthalten (*DEM/liggghts\_liquid*).

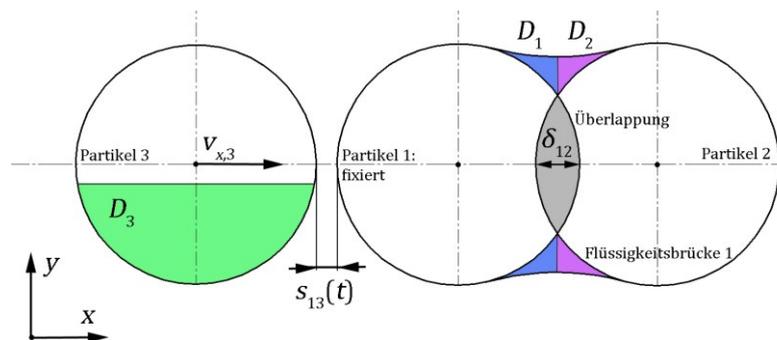
### 3.1.1 Modellierung eines Kontaktereignisses mit Flüssigkeitsbrücken

Anhand Abbildung 3.1 bis Abbildung 3.4 wird ein Kontaktereignis zwischen drei kugelförmigen, monodispersen Partikeln, mit dem einheitlichen Flüssigkeitsanteil  $D_1 = D_2 = D_3$  beschrieben, bei der sich eine, bzw. zwei Flüssigkeitsbrücken ausbilden. Es wird erläutert welche Annahmen in dieser Arbeit für ein solches Ereignis getroffen werden. Die nachfolgende Erklärung kann analog auf die Kollision zwischen vier, oder mehr Teilchen mit unterschiedlichen Flüssigkeitsanteilen übertragen werden.



**Abbildung 3.1:** Erstes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells, Partikel berühren sich nicht

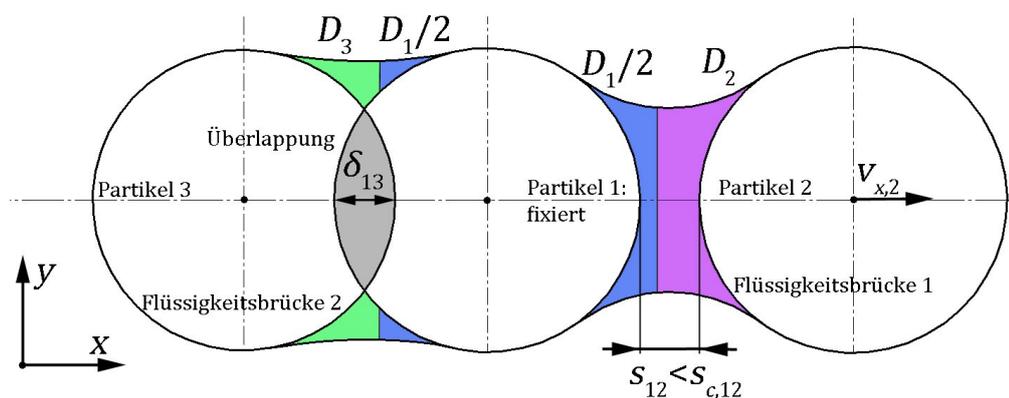
Im ersten Ereignis (s. Abbildung 3.1) bewegen sich Partikel 2 und 3 parallel zur  $x$ -Achse auf das ruhende, fixierte Teilchen 1 zu. Der Betrag der Relativbewegung zwischen Partikel 1 und 2  $v_{r,12} = v_{x,1} - v_{x,2}$ , bzw. zwischen 1 und 3  $v_{r,13} = v_{x,1} - v_{x,3}$  ist identisch, jedoch ist der Abstand  $s_{13}$  zwischen 1 und 3 größer, als zwischen 1 und 2. Auf Grund dessen erfolgt zunächst eine Kollision zwischen Teilchen 1 und 2. Der Flüssigkeitsanteil der einzelnen Partikel ist symbolisch mit einer farblich ausgefüllten Fläche dargestellt. Die Farbgebung (Partikel 1 Blau, Partikel 2 Magenta, Partikel 3 Grün) dient der späteren Unterscheidung der Flüssigkeitsanteile bei der Ausbildung von Flüssigkeitsbrücken.



**Abbildung 3.2:** Zweites Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells, Partikel 1 und 2 sind im Kontakt

Zum Beginn des Kontaktes der Teilchen (s. Abbildung 3.2) wird die Bedingung  $s_{12} \leq 0$  erreicht und es kommt nachfolgend zum Überlappen der Teilchen, welche die Verformung der Teilchen auf Grund der Hertzschen Pressung modelliert [Luding 1998]. Die auf die Teilchen wirkende Kontaktkraft  $F_{k,12}$  ist im verwendeten linearen Federgesetz proportional zu der Überlappung  $\delta_{12}$  und den Relativgeschwindigkeiten in Normal-  $u_{n,12}$  und Tangentialrichtung  $u_{t,12}$ . Die Überlappungszone der Partikel ist in Abbildung 3.2 grau eingefärbt. Neben der Kontaktkraft kann sich außerdem die Flüssigkeitsbrücke zwischen den Teilchen ausbilden, sodass die Flüssigkeitsbrückenkraft  $F_{B,12}$  anfängt zu wirken. Die Form der Flüssigkeitsbrücke wird durch den Blau und Magenta gefärbten Bereich schematisch abgebildet, wobei die Flächenanteile proportional zum Anteil des Flüssigkeitsvolumens von Partikel 1 (Blau), bzw. von Partikel 2 (Magenta) am Gesamtvolumen der Flüssigkeitsbrücke verteilt sind.

In dieser Arbeit wird die Annahme getroffen, dass sich die gesamte Flüssigkeit mit der ein Teilchen befeuchtet ist, gleichmäßig auf der Oberfläche verteilt und vollständig zur Ausbildung der Flüssigkeitsbrücke zur Verfügung steht. Sobald ein Partikel ein oder mehrere Kontakt hat, bewegt sich die gesamte Flüssigkeit von der Oberfläche in die Flüssigkeitsbrücke. Weiterhin wird, wie von Yang et al. [R. Y. Yang 2003] vorgeschlagen, angenommen, dass die Flüssigkeit gleichmäßig über alle Flüssigkeitskontakte  $n_L$  des Partikels verteilt wird. Dementsprechend fließt das sich auf Partikel 1  $V_{L,1}$  und das auf Partikel 2  $V_{L,2}$  befindliche Flüssigkeitsvolumen in die Flüssigkeitsbrücke zwischen 1 und 2. Das Volumen der Flüssigkeitsbrücke zwischen 1 und 2 beträgt somit  $V_{B,12} = V_{L,1} + V_{L,2}$ .

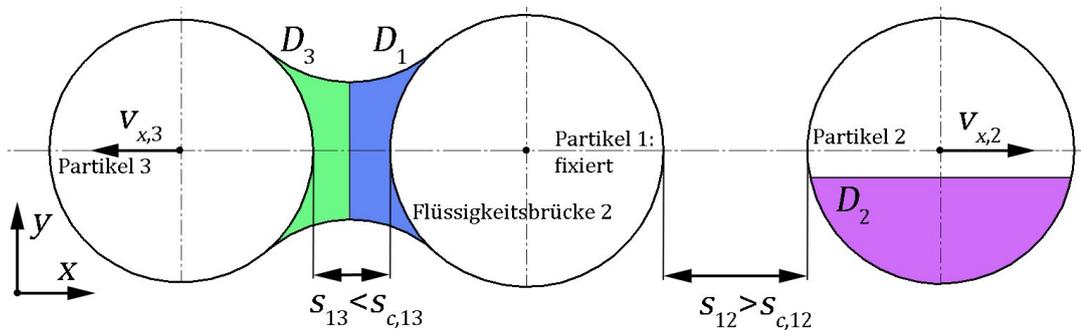


**Abbildung 3.3:** Drittes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells, Partikel 1 und 2, sowie Partikel 1 und 3 sind im Kontakt

Zum Zeitpunkt des dritten Ereignisses (s. Abbildung 3.3) kollidiert Partikel 3 mit dem fixierten Teilchen 1. Wie zuvor wirkt eine Kontaktkraft  $F_{k,13}$  zwischen Teilchen 1 und 3

und es bildet sich eine Flüssigkeitsbrücke mit der Flüssigkeitsbrückenkraft  $F_{B,13}$  aus. Die Oberflächen der Teilchen 1 und 2 sind nicht mehr im Kontakt, es gilt die Bedingung  $0 < s_{12} < s_{c,12}$ . Während die Kontaktkraft  $F_{k,12}$  zwischen den Teilchen 1 und 2 nicht mehr wirkt, da die Oberflächen der Partikel nicht mehr überlappen, wirkt weiterhin die attraktive Kraft der Flüssigkeitsbrücke  $F_{B,12}$ .

In dem hier vorgestellten Modell besitzt jedes Teilchen einen konstanten Flüssigkeitsanteil  $D_i$ . Daher ist es nicht möglich, dass Flüssigkeit zwischen den Partikeln übertragen wird, wie es zum Beispiel von Yang et al. [Y. Z. Yang 1998] beschrieben wird. Der Flüssigkeitsanteil wird jedoch für jedes Teilchen separat gespeichert, sodass es möglich ist, dass sich dieser zwischen den Partikeln unterscheidet und ein Flüssigkeitsaustauschmodell einfach nachträglich implementiert werden kann. Analog zu den zuvor beschriebenen Annahmen fließt das gesamt vom Partikel 3  $V_{L,3}$  beförderte Flüssigkeitsvolumen in die Flüssigkeitsbrücke zwischen 1 und 3. Teilchen 1 besitzt nun zwei Flüssigkeitskontakte  $n_{k,1} = 2$ , sodass das von Partikel 1 transportierte Flüssigkeitsvolumen  $V_{L,1}$  auf beide Flüssigkeitsbrücken gleichmäßig aufgeteilt wird. Somit beträgt das Volumen der Flüssigkeitsbrücke zwischen Partikel 1 und 2  $V_{B,12} = \frac{V_{L,1}}{n_{k,1}} + V_{L,2} = 0.5 \cdot V_{L,1} + V_{L,2}$ , und zwischen den Partikeln 1 und 3  $V_{B,13} = 0.5 \cdot V_{L,1} + V_{L,3}$ .



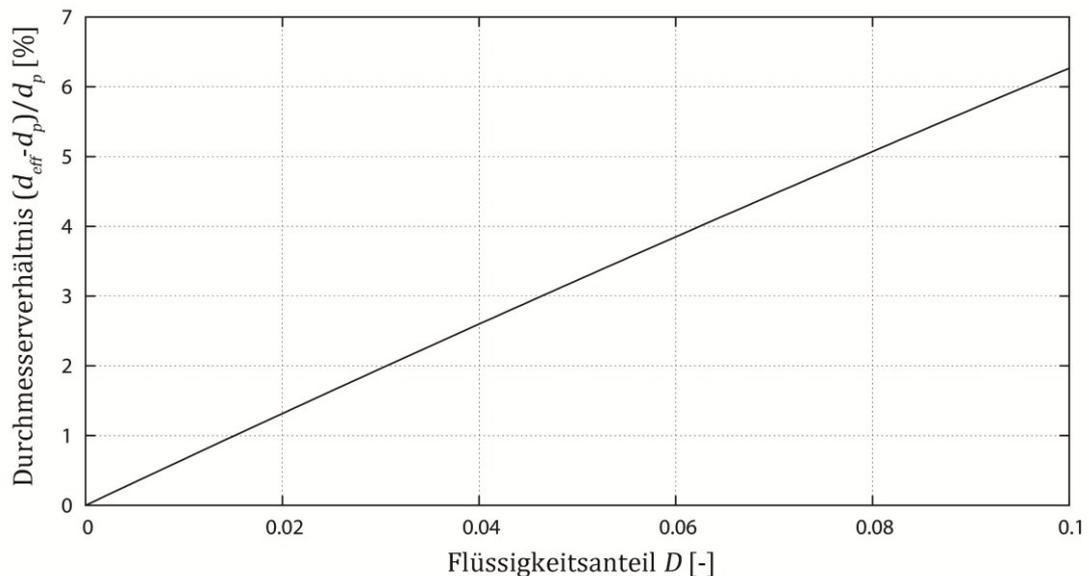
**Abbildung 3.4:** Viertes Ereignis zur Erläuterung des Flüssigkeitsbrückenmodells, Partikel 1 und 3 sind im Kontakt

Zum Zeitpunkt des letzten relevanten Ereignisses (s. Abbildung 3.4) überschreitet der Abstand zwischen Teilchen 1 und 2 die kritische Länge  $s_{c,12}$  (vgl. Kap. 2.1), sodass die Flüssigkeitsbrücke reißt. Damit hat Partikel 2 keinen und Partikel 1 und 3 jeweils einen Kontaktpartner. Das Flüssigkeitsvolumen in der Flüssigkeitsbrücke zwischen 1 und 3 beträgt  $V_{B,13} = V_{L,1} + V_{L,3}$ . Das Reißen der Flüssigkeitsbrücke zwischen Partikel 1 und 3 geschieht analog beim Überschreiten des kritischen Abstandes  $s_{c,13}$  (hier nicht dargestellt). Nach der vollständigen Trennung der Partikel besitzen alle Teilchen ihren ursprünglichen Feuchtigkeitsanteil  $D_i$ .

Abschließend sei angemerkt, dass die Tatsache, dass der auf den Teilchen befindliche Flüssigkeitsfilm den effektiven Durchmesser  $d_{eff}$  der Partikel erhöht, vernachlässigt wird. Diese Annahme beruht darauf, dass in der Ringscherzellensimulation, die den Schwerpunkt dieser Arbeit darstellt, alle im System befindlichen Partikel im Kontakt sind und sich somit die gesamte Flüssigkeit innerhalb von Flüssigkeitsbrücken und nicht auf der Oberfläche der Teilchen befindet. Die Berechnung des effektiven Durchmessers lässt sich jedoch ohne größeren Aufwand nachträglich implementieren und ist durch folgende Gleichung gegeben.

$$d_{eff,i} = d_{p,i} \cdot \sqrt[3]{1 + D_i \cdot \frac{\rho_{p,i}}{\rho_f}} \quad (3.1)$$

Dabei zeigt sich, dass das Verhältnis zwischen dem effektiven Partikeldurchmesser  $d_{eff}$  und dem ursprünglichen Partikeldurchmesser  $d_p$  lediglich eine Funktion des Flüssigkeitsanteils und dem Dichteverhältnis zwischen der Partikel- und Flüssigkeitsdichte ist. Abbildung 3.5 zeigt beispielhaft das Durchmesser Verhältnis  $(d_{eff} - d_p)/d_p$  als Funktion des Flüssigkeitsanteils  $D$  für ein Dichteverhältnis  $\rho_p/\rho_f = 2$ , welches dem Dichteverhältnis in der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Ringscherzellensimulation entspricht.



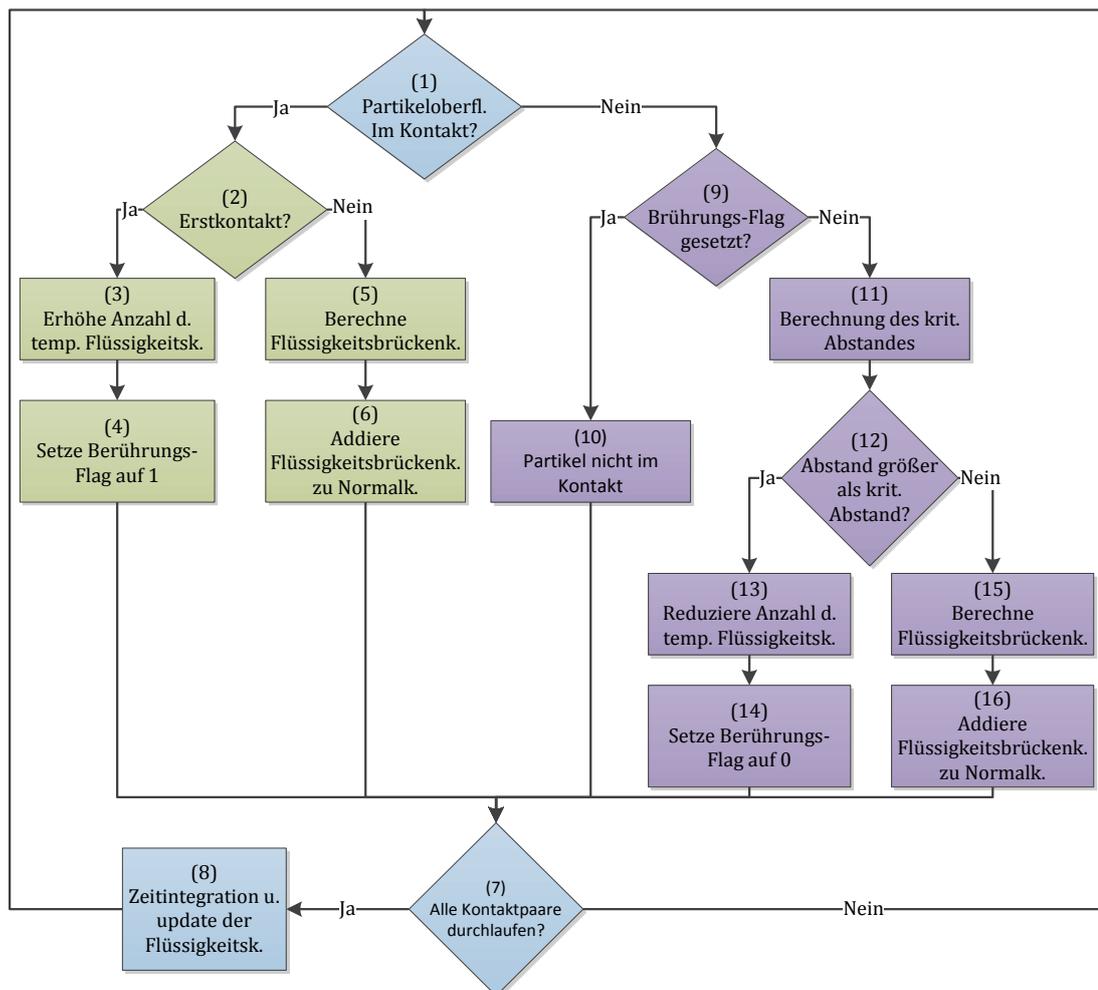
**Abbildung 3.5:** Durchmesser Verhältnis  $(d_{eff} - d_p)/d_p$  als Funktion des Flüssigkeitsanteils  $D$  für ein Dichteverhältnis  $\rho_p/\rho_f = 2$

Geht man davon aus, dass ab einem Durchmesser Verhältnis von  $(d_{eff} - d_p)/d_p = 1\%$  der Einfluss des effektiven Durchmessers nicht mehr vernachlässigbar ist, da der Bereich der üblichen Oberflächenrauigkeit der Partikel überschritten wird, so zeigt sich,

dass bereits bei relativ geringen Flüssigkeitsanteilen von ca.  $D = 0.02$  diese Grenze erreicht wird. Daher wird die Notwendigkeit deutlich, dass diese Abhängigkeit für Partikelströmungen mit Einzelkontakten überprüft werden und beim Überschreiten eines kritischen Flüssigkeitsanteils der effektive Partikeldurchmesser verwendet werden sollte.

### 3.1.2 Implementierung des Flüssigkeitsbrückenmodells

Die Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte erfolgt innerhalb des neu eingeführten Kontaktmodells **gran/hook/history/stiffness/liquid**, bzw. **gran/hook/history/stiffness/liquid/fstat** (vgl. Kap. 3.1). Die Implementierung des in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Kontaktverhaltens in LIGGGHTS, wird anhand des in Abbildung 3.6 dargestellten Programmablaufplans dargestellt. Ziel ist es das Volumen in den Flüssigkeitsbrücken in einem expliziten Verfahren zu berechnen, um die Berechnungszeit der Kontaktkräfte zu minimieren.



**Abbildung 3.6:** Programmablaufplan zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkräfte und zur Bestimmung der Anzahl der Flüssigkeitskontakte

Die Berechnung der Kontaktkraft auf Grund der sich berührenden Oberflächen wird nicht beschrieben, ein detaillierter Programmablaufplan kann jedoch in der Arbeit von Uhlig [Uhlig 2011] gefunden werden. Im ersten Schritt (1) wird überprüft, ob sich die Oberflächen der momentan betrachteten Partikel  $i$  und  $j$  berühren. Sollte die Bedingung erfüllt sein, wird überprüft (2), ob es sich im aktuellen Zeitschritt um einen Erstkontakt zwischen den Partikeln handelt, oder ob sich die Teilchen im vorhergehenden Zeitschritt bereits beführt haben. Dies geschieht über den so genannten Berührungs-Flag  $touch_{ij}$ . Beträgt dieser 1 so haben sich die Teilchen im vorhergehenden Zeitschritt bereits berührt. Für den Wert 0 handelt es sich um einen Erstkontakt.

Im Falle des Erstkontaktes (3) wird die Anzahl der temporären Flüssigkeitskontakte  $c_{L,i,tmp}^n$ , die nach jeder Zeitintegration auf den Wert Null zurückgestellt wird, für beide Kontaktpartner um Eins erhöht. Außerdem (4) wird der Berührungs-Flag auf den Wert  $touch_{ij} = 1$  gesetzt. Es wird nur die Anzahl der temporären Flüssigkeitskontakte und nicht die Anzahl der Flüssigkeitskontakt  $c_{L,i}^{n-1}$ , mit der die Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft (vgl. Schritt (5) und (15)), bzw. des kritischen Abstandes stattfindet (vgl. Schritt (11)), verändert. Anderenfalls können unterschiedliche Ergebnisse für die Berechnung von  $F_{B,i}$  und  $s_{c,i}$  resultieren, je nachdem in welcher Reihenfolge über die Kontaktpaare iteriert wird. Sollte eine Aktualisierung der Anzahl der Flüssigkeitskontakte innerhalb des aktuellen Zeitschrittes gewünscht sein, so müsste ein implizites Berechnungsverfahren verwendet werden.

Sollte es sich nicht um einen Erstkontakthandeln (5), so wird die Flüssigkeitsbrückenkraft nach den in Kap. 2.1 vorgestellten Gleichungen berechnet, wobei die Anzahl der Flüssigkeitsbrücken aus dem letzten Zeitschritt verwendet wird. Anschließend (6) wird  $F_{B,ij}$  zu der Normalkraft der Teilchen addiert.

Im nächsten Schritt (7) wird überprüft, ob bereits über alle Kontaktpaare iteriert wurde. Sollte dies der Fall sein, so erfolgt (8) die Zeitintegration der Partikel. Der Programmcode für die Zeitintegration ist in der Quelldateien `fix_nve_sphere.h` und `fix_nve_sphere.cpp` enthalten. Zusätzlich wird der Wert für die Anzahl der temporären Flüssigkeitskontakte  $c_{L,i,tmp}^n$  zu der Anzahl der für die Berechnung (aktuellen) verwendeten Flüssigkeitskontakte addiert  $c_{L,i}^n = c_{L,i}^{n-1} + c_{L,i,tmp}^n$ . Wurden nicht alle Kontaktpaare durchlaufen, beginnt der nächste Programmdurchlauf mit dem Startpunkt (1).

Da die Flüssigkeitsbrückenkraft über den Zeitpunkt der Trennung der Oberflächen des Kontaktpaares hinaus wirkt, wird bei negativer Entscheidung im Schritt (1) überprüft (9), welchen Wert der Berührungs-Flag hat. Für den Fall, dass  $touch_{ij} = 0$  gilt, ist

keine Flüssigkeitsbrücke zwischen den Teilchen vorhanden (10) und es wird direkt zur Iteration über alle Kontaktpaare (7) übergegangen.

Im anderen Fall bestand im vorhergehenden Zeitschritt noch einen Flüssigkeitsbrücke zwischen den Partikeln. Es folgt (11) die Berechnung des kritischen Abstandes  $s_{c,ij}$ , basierend auf die Anzahl der Flüssigkeitskontakte zum vorhergehenden Zeitschritt. Im Anschluss wird überprüft (12), ob der Abstand  $s_{ij}$  den kritischen Abstand überschreitet.

Sollte dies der Fall sein, so endet der Flüssigkeitskontakt des Partikelpaares und (13) die temporäre Anzahl der Flüssigkeitskontakte  $c_{L,i,tmp}^n$  wird um Eins reduziert. Zudem (14) wird der Berührungs-Flag des Kontaktpaares auf den Wert Null gesetzt.

Im alternativen Szenario ist eine Flüssigkeitsbrücke vorhanden und (15) es wird die Flüssigkeitsbrückenkraft wie in Schritt (5) bestimmt. Anschließend (16) wird die Flüssigkeitsbrückenkraft zur Normalkraft der Partikel addiert, bevor im letzten Schritt (7) die Iteration über die restlichen Kontaktpaare erfolgt.

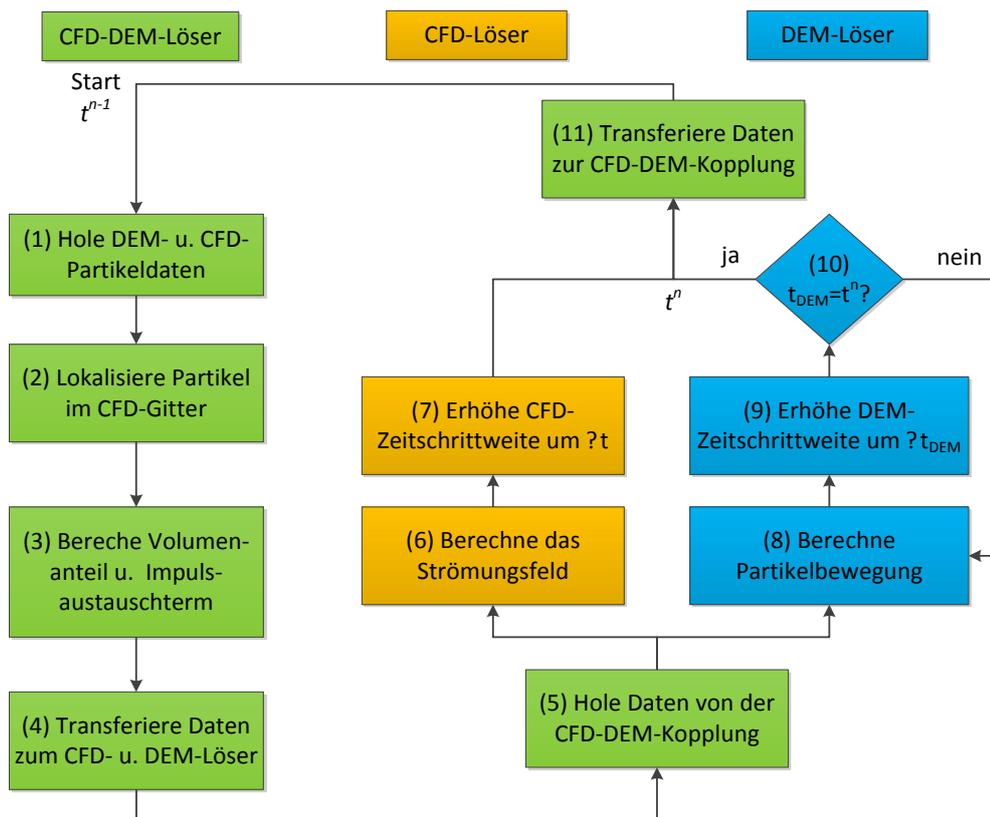
Damit wurden der Ablauf der Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft für einen Zeitschritt beschrieben, sodass im nächsten Zeitschritt erneut von Punkt (1) gestartet wird.

## 3.2 Implementierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung

In diesem Kapitel wird die zwischen OpenFOAM® und LIGGGHTS realisierte aufgelöste CFD-DEM-Kopplung beschrieben. Da zum Zeitpunkt dieser Arbeit keine Dokumentation über die Funktionsweise der Kopplung existiert, wird zunächst ein Überblick über die Eingabe der Simulationsparameter gegeben. Anschließend wird der Vorgang der CFD-Gitterverfeinerung beschrieben, bevor in den letzten beiden Kapiteln die für die Impulserhaltung und dem Impulsaustausch zu lösenden Gleichungssysteme erläutert werden.

### 3.2.1 Zeitlicher Ablauf der Kopplung zwischen OpenFOAM und LIGGGHTS

Da bei der CFD-DEM-Kopplung zwei numerische Löser miteinander verbunden werden, ist es erforderlich zu beschreiben, wie diese innerhalb eines Berechnungszeitschrittes zeitlich aufgerufen werden. In Abbildung 3.7 ist der Programmablaufplan für die in dieser Arbeit verwendete Kopplung zwischen dem CFD-Löser OpenFOAM® und dem DEM-Löser LIGGGHTS dargestellt.



**Abbildung 3.7:** Programmablauf der CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®

Der Programmablaufplan ist in drei Teile untergliedert, die farblich gekennzeichnet sind. Zum Einem gibt es den CFD-DEM-Löser Abschnitt (Grün), in dem Operationen durchgeführt werden, deren Ergebnisse sowohl für den DEM- (Blau), als auch für den CFD-Löser (Gelb) benötigt werden. Innerhalb eines Zeitschrittes beeinflussen sich LIGGGHTS und OpenFOAM® nicht. Sowohl OpenFOAM®, als auch LIGGGHTS nutzen zur Lösung des aktuellen Strömungsfeldes, bzw. der aktuellen Partikelbewegung das Strömungsfeld, bzw. die Position und Geschwindigkeit der Partikel aus dem letzten Zeitschritt. Dementsprechend handelt es sich bei diesem Kopplungsschema um eine explizite Kopplung.

Zum besseren Verständnis wurde zwischen dem aktuellen Zeitschritt in der DEM- $t_{DEM}$  und dem aktuellen Zeitschritt in der CFD-Berechnung  $t_{CFD}$  unterschieden, da sich die Zeitschrittweite  $\Delta t_{DEM}$  für die DEM-, bzw.  $\Delta t_{CFD}$  für die CFD-Berechnung unterscheiden kann. Dabei markiert der Exponent  $n - 1$ , dass Daten aus dem vorhergehenden Zeitschritt verwendet werden und der Exponent  $n$ , dass Daten aus dem aktuellen Zeitschritt benutzt werden.

Zum Beginn des aktuellen Zeitschrittes (1) werden die DEM-Partikeldaten und CFD-Strömungsfeldaten aus dem letzten Zeitschritt an den CFD-DEM-Löser übergeben.

Anschließend (2) wird überprüft, in welchen CFD-Gitterzellen sich die jeweiligen Partikel befinden, bzw. welche Gitterzellen bei der aufgelösten Kopplung zu einem Partikel gehören (vgl. Kap. 2.2.2). Unter Verwendung dieser Daten wird anschließend (3) die Verteilung des Volumenanteils  $\alpha_f$  und der Impulsautauschterm  $K_{pf}$  bestimmt. Der letzte Schritt (4) des CFD-DEM-Löser besteht darin, die Daten an OpenFOAM® und LIGGGHTS weiterzugeben.

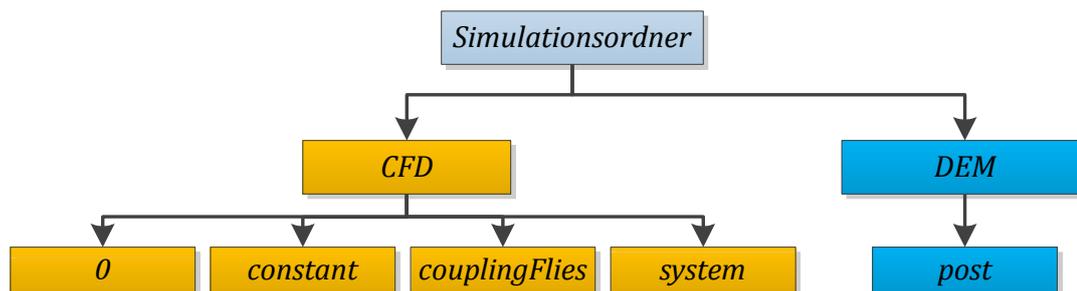
Sowohl OpenFOAM®, als auch LIGGGHTS (5) empfängt die Daten des CFD-DEM-Lösers. Basierend auf diesen Daten (6) wird das aktuelle Strömungsfeld berechnet. Abschließend (7) wird im CFD-Löser der CFD-Zeitschritt  $t_{CFD}^{n-1}$  um die CFD-Zeitschrittweite  $\Delta t_{CFD}$ , die gleich der globalen Zeitschrittweite  $\Delta t$  entspricht, erhöht.

Parallel (8) verwendet LIGGGHTS die Daten des CFD-DEM-Lösers um die aktuelle Partikelbewegung zu berechnen. Der DEM-Zeitschritt  $t_{DEM}^{n-1}$  wird anschließend (9) um die DEM-Zeitschrittweite  $\Delta t_{DEM}$  erhöht und erreicht den Zeitschritt  $t_{DEM}^{n-1+\Delta t_{DEM}}$ . Es wird nicht automatisch der nächste globale Zeitschritt  $t^n$  erreicht, da die DEM-Zeitschrittweite um ein vielfaches kleiner sein kann, als die globale Zeitschrittweite. Die Reduzierung der DEM-Zeitschrittweite ist erforderlich, wenn die physikalischen Zeitskalen in der DEM-Berechnung wesentlich kleiner sind, als die CFD-Zeitskalen. Dementsprechend durchläuft der DEM-Löser eine Schleife zwischen Abschnitt (8) und (10), bis der DEM-Zeitschritt im Kontrollabschnitt (10) den globalen Zeitschritt erreicht. Im letzten Schritt (11) werden die CFD- und DEM-Daten an den CFD-DEM Löser für den nächsten Zeitschritt übergeben. Der nächste Zeitschritt beginnt und der Programmablaufplan startet wieder bei (1).

Der Datentransfer zwischen den einzelnen Lösern ist frei wählbar. So ist es entweder möglich die zu transferierende Daten in eine Datei zu schreiben, die von den anderen Lösern eingelesen wird, oder der Datentransfer wird über das Message Passing Interface (MPI) realisiert. Letzteres ermöglicht die Parallelisierung der Berechnung auf mehreren Prozessorkernen, was die Lösung der Simulationsaufgabe erheblich beschleunigen kann.

### 3.2.2 Eingabe von Simulationsparametern

Zur folgenden Beschreibung der Eingabe von Simulationsparametern in der CFD-DEM-Kopplung wird die Kenntnis von OpenFOAM® und LIGGGHTS vorausgesetzt. Ein CFD-DEM-Simulationsordner besteht aus einem CFD- (Gelb) und einem DEM-Unterordner (Blau). Im DEM-Unterordner befinden sich das LIGGGHTS-Eingabeskript und alle für die DEM-Berechnung erforderlichen Extradateien. Im CFD-Unterordner befinden sich die OpenFOAM® Eingabedateien mit den entsprechenden Unterordnern. Ein Überblick über die Ordnerstruktur einer CFD-DEM-Simulation ist in Abbildung 3.8 zu sehen.



**Abbildung 3.8:** Ordnerstruktur einer CFD-DEM-Simulation zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®

Die wesentlichen Unterschiede zu der Einzelnutzung von OpenFOAM®, bzw. LIGGGHTS befinden sich in der CFD-Ordnerstruktur. Zunächst gibt es den Unterordner *CFD/couplingFiles*. Im Falle des Datenaustausch zwischen den DEM- und den CFD-Löser durch das Ausschreiben und Einlesen von Dateien erfolgt (vgl. Kap. 3.2.1), werden in diesem Unterordner die Kopplungsdaten gespeichert.

Die übrigen Änderungen gegenüber der Standardversion von OpenFOAM® sind im Unterordner *CFD/constant* zu finden. Dort ist zunächst die Datei *couplingProperties* enthalten. In dieser Datei wird das Kopplungs-Intervall in Abhängigkeit von der Zeitschrittweite der DEM-Berechnung mit dem Befehl **couplingInterval** gewählt. Ist die Zeitschrittweite der DEM-Berechnung gleich der Zeitschrittweite der CFD-Berechnung, beträgt dieser Wert 1. Ist die Zeitschrittweite der DEM-Berechnung ein Bruchteil der Zeitschrittweite der CFD-Berechnung, so beträgt der Wert gleich dem Kehrwert des Bruchteiles.

Weiterhin erfolgt die Wahl des Modells mit dem die Bestimmung des Volumenanteils der flüssigen Phase erfolgt (**voidFractionModel**). Zum Zeitpunkt dieser Arbeit steht für die aufgelöste CFD-DEM-Kopplung nur das **bigParticle** Modell zur Verfügung. Die wesentlichen Eigenschaften, die über den Befehl **bigParticleProps** bestimmt werden können, sind die maximale Anzahl an Gitterzellen die von einem Partikel eingenommen

werden kann (**maxCellsPerParticle**) und der Volumenanteil der einer Zelle zugewiesen wird, die innerhalb eines Partikels liegt (**alphaMin**). Die dritte Eigenschaft **scaleUpVol** dient zum skalieren des Durchmessers des Partikels und sollte für die aufgelöste Kopplung den Wert 1 haben.

Das **locateModel** bestimmt welche Zellen als von einem Partikel eingenommene Zellen deklariert werden. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit ist nur die Wahl **standard** möglich, welches das in Kapitel 2.2.2 beschriebene Verfahren nutzt. Des Weiteren wird über den **dataExchangeModel** der Datenaustausch zwischen den CFD- und DEM-Löser gewählt. Zur Auswahlen stehen **mpi** für das Message Passing Interface und **twoWayFiles** für den Datenaustausch über das Speichern und Auslesen von Dateien.

Der letzte wichtige Unterpunkt ist der **forceModels** Befehl, welcher festlegt, welche Kräfte auf die Partikel übertragen werden. Neben der Widerstandskraft auf Grund der Relativbewegung zwischen dem Fluid und den Partikeln (**ShirgaonkarIB**) (vgl. Kap. 3.2.5), können Extrakräfte, wie die Auftriebskraft (**Archimedes**), berücksichtigt werden.

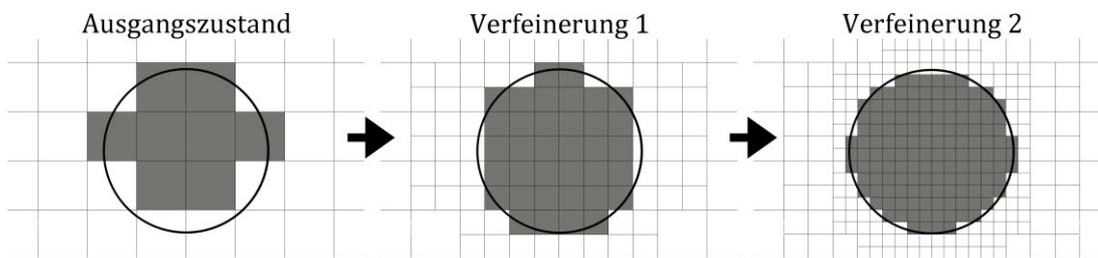
Der **meshMotionModel**, **averagingModel** und **regionModel-Befehl** spielt für die aufgelöste Kopplung, bzw. für diese Arbeit keine Rolle, sodass darauf nicht näher eingegangen wird.

Die Zweite Datei, die die CFD-DEM-Kopplung steuert, ist die *liggghtsCommands* Datei. Diese Datei wird entweder jeden Zeitschritt (**runEveryCouplingStep on**), oder einmalig (**runOnce on**) beim Start der Simulation aufgerufen. Im Unterpunkt **command** können Befehle an LIGGGHTS übergeben werden. Der Standardbefehl, der in dieser Datei hinterlegt ist, ist der der **run \$couplingInterval** Befehl. Dadurch wird LIGGGHTS mitgeteilt, wie viel Teilzeitschritt das LIGGGHTS-Eingabeskript ausführen soll, bevor OpenFOAM® für den nächsten globalen Zeitschritt aufgerufen wird. Die Variable **couplingInterval** wurde zuvor in der *couplingProperties* Datei festgelegt (s. o.).

### 3.2.3 Dynamische Gitterverfeinerung

Die Auflösung der Teilchen durch das CFD-Gitter hat einen starken Einfluss auf die Ergebnisse der CFD-DEM-Kopplung (vgl. Kap. 2.2.2). OpenFOAM® bietet mit der **dynamicFvMesh** Funktion die Möglichkeit das CFD-Gitter dynamisch, an bestimmten Stellen des Simulationsraumes zu verfeinern. Dieses Werkzeug kann genutzt werden, um das CFD-Gitter dynamisch in Bereichen zu verfeinern, in dem ein Teilchen lokalisiert wurde. Dabei erfolgt die Steuerung der Gitterverfeinerung durch die Eingabedatei

*CFD/constant/dynamicMeshDict*. Die Funktionsweise der Gitterverfeinerung wird schematisch in Abbildung 3.9 dargestellt.



**Abbildung 3.9:** Schematische Darstellung der dynamischen CFD-Gitterverfeinerung in OpenFOAM®, Weiß: Vom Fluid eingenommene Gitterzellen, Schwarzer Kreis: Äußere Kontur des Partikels, Grau: Vom Partikel eingenommene Gitterzellen

In Abbildung 3.9 ist ein einzelnes Partikel dargestellt, dessen Kontur durch einen schwarzen Kreis gekennzeichnet ist. Es findet eine zweifache Verfeinerung des CFD-Gitters in Bereichen statt, in dem das Partikel lokalisiert wurde. Dabei sind Gitterzellen, die als vom Partikel eingenommene Gitterzellen lokalisiert wurden, grau eingefärbt, wohin gegen die vom Fluid gefüllten Zellen weiß sind. Während die Kontur des Partikels im Anfangszustand nur sehr schlecht widergegeben wird, wird nach zwei Verfeinerungsschritten bereits eine gute Abbildung erreicht. Dabei wird die Anzahl der Gesamtzellen gegenüber einem statischen Gitter gering gehalten, da ausschließlich eine Verfeinerung des Gitters in Umkreis des Partikels stattfindet.

Die Verfeinerung des CFD-Gitters erfolgt alle **refineInterval** Zeitschritte. Das Volumenfeld auf Grundlage dessen die Verfeinerung stattfindet, wird durch den **field** Befehl festgelegt. Im Falle der CFD-DEM-Kopplung sollte das Volumenfeld **interFace** verwendet werden. In diesem Feld befinden sich die Informationen, welche Zellen von einem Teilchen eingenommen werden, bzw. in welchen Zellen sich die flüssige Phase befindet. Dabei haben von Partikeln eingenommene Zellen den Wert **alphaMin**, der in der *couplingProperties* Datei festgelegt wird (vgl. Kap. 3.2.2) und die restlichen Zellen den Wert 1.

Die Kenntnis der in **interFace** gespeicherten Werte spielt bei der Definition der unteren (**lowerRefineLevel**) und oberen Verfeinerungsgrenzen (**upperRefineLevel**) eine Rolle. Die Verfeinerung des Gitters findet graduell bei einem Übergang des Volumenfeldes zwischen diesen beiden Werten statt. Es ist daher sinnvoll die untere Grenze mit den Wert **alphaMin** und die obere Grenze mit dem Wert 1 zu wählen, damit eine Verfeinerung des Gitters bei dem Übergang zwischen dem Fluid und den Partikeln stattfindet.

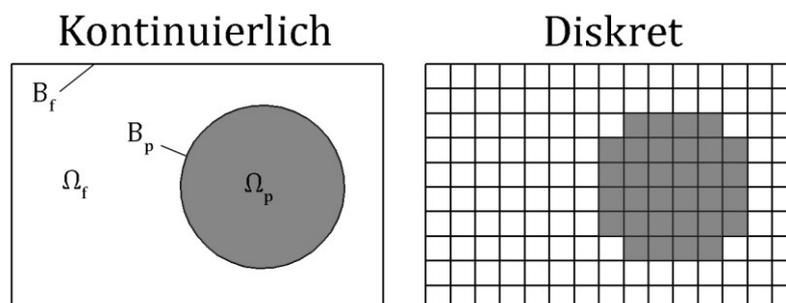
Die Vergrößerungsgrenze wird mit dem Befehl **unrefineLevel** gewählt. Alle Zellen deren Wert kleiner ist als die Vergrößerungsgrenze und bei denen im aktuellen Zeitschritt keine Verfeinerung stattfindet, werden auf ihre ursprüngliche Größe zurückgesetzt. Außerdem bleiben Zellen verfeinert, die innerhalb des Umkreise mit dem Durchmesser **nBufferLayers** Zellen einer Zelle liegen, die im aktuellen Zeitschritt verfeinert wurde. Der Standardwert für diesen Befehl beträgt bei der CFD-DEM-Kopplung 1.

Die Verfeinerung der Zelle bedeutet, dass deren Volumen halbiert wird. Die maximale Verfeinerung einer Zelle, das heißt wie oft das Volumen einer Zelle halbiert werden darf, wird über den **maxRefinement** Befehl limitiert. Der Wert sollte so gewählt werden, dass das kleinste Teilchen, nach der maximal zulässigen Verfeinerung, durch ausreichen viele Gitterzellen repräsentiert wird. Außerdem wird die Verfeinerung durch die maximal zulässige Anzahl von Gitterzellen **maxCells** in der Simulation eingeschränkt. Die Begrenzung der Gitterzellenanzahl stellt lediglich sicher, dass der Rechenaufwand nicht zu groß wird.

Der letzte Unterpunkt **correctFluxes** realisiert, dass das Fluss-Feld der kontinuierlichen Phase auf der Oberfläche der Zellen neu berechnet wird, bei denen eine Gitterverfeinerung stattgefunden hat. Die Berechnung erfolgt auf Basis einer Interpolation des entsprechenden Geschwindigkeitsfeldes.

### 3.2.4 Gestaltung der Impulserhaltungsgleichungen

Die Herleitung des Berechnungsablaufes zur Lösung der Impulserhaltungsgleichung stammt von Shirgaonkar et al. [Shirgaonkar 2009], wobei es sich bei diesem Verfahren um eine „Fictitious Domain Method“ handelt. Zum besseren Verständnis der vorgestellten Gleichungen sind in Abbildung 3.10 schematisch die verschiedenen Simulationsbereiche anhand eines einzelnen Teilchen in einem inkompressiblen Fluid dargestellt, das sich in einem abgeschlossenen Raum befindet.



**Abbildung 3.10:** Schematische Darstellung der in der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung auftretenden Simulationsbereiche, links kontinuierliche Darstellung, rechts diskrete Darstellung, in geänderter Form aus [Hager 2011]

Der Bereich der flüssigen Phase ist mit dem Symbol  $\Omega_f$  und der Bereich der festen Phase mit  $\Omega_p$  gekennzeichnet. Analog erfolgt die Nomenklatur der äußeren Begrenzung der Flüssigkeit  $B_f$  und der äußeren Grenzfläche des Partikels  $B_p$ . Der Bereich des gesamten Simulationsgebietes  $\Omega$  beinhaltet sowohl den Bereich der flüssigen Phase, als auch den Bereich der festen Phase  $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_p$ .

Unter Verwendung dieser Bereiche können die Erhaltungsgleichungen, Randbedingungen und Anfangsbedingungen des betrachteten Systems formuliert werden.

$$\rho_f \cdot \left( \frac{\partial u_f}{\partial t} + u_f \cdot \nabla u_f \right) = -\nabla p_f + \eta_f \Delta u_f \quad \text{in } \Omega \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot u_f = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (3.3)$$

$$u_f = u_{B_f} \quad \text{auf } B_f \quad (3.4)$$

$$u_f = u_p \quad \text{und} \quad \sigma_f \cdot n_p = S_{B_p} \quad \text{auf } B_p \quad (3.5)$$

$$u(x, t = 0) = u_0(x) \quad \text{in } \Omega \quad (3.6)$$

Die Impulserhaltungs- (3.2) und Massenerhaltungsgleichung (3.3) sind im gesamten Simulationsraum gültig, wobei zur Vereinfachung der Gleichungen die Annahme getroffen wurde, dass Auftriebskräfte keine Rolle spielen. An der Begrenzungsfläche der Flüssigkeit und an der Begrenzungsfläche des Partikels gilt die Haftbedingung [Surek 2007], die durch Gleichungen (3.4) und (3.5) festgelegt wird. Das Produkt zwischen dem Spannungstensor des Fluides  $\sigma_f$  und den äußeren Normalvektor  $n_p$  des Partikels, ergibt den Spannungsvektor  $S_{B_p}$  von der flüssigen Phase auf die Oberfläche des Partikels. Letztere Randbedingung formuliert die Kopplung des Impulsaustausches zwischen der flüssigen und Festen Phase, wie sie von Mittal et al. [Mittal 2005] beschrieben wurde. Gleichung (3.6) ist die Anfangsbedingung der Simulation.

Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt in drei Schritten.

*Schritt 1:* Zunächst wird eine zeitdiskretisierte Version der Navier-Stokes-Gleichung aufgestellt. In OpenFOAM® wird die Impulserhaltungsgleichung in Kombination mit der Massenerhaltungsgleichung, den Randbedingungen und der Anfangsbedingung in einem PISO-Verfahren [Ferziger 2002] gelöst. Dieses Verfahren eignet sich zur impliziten Lösung von inkompressiblen Strömungen. Als Resultat ergibt sich nach einem Zeitschritt ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld  $\hat{u}_f$  und ein zu korrigierendes Druckfeld  $\tilde{p}_f$ .

Die Anwesenheit des Partikels wird bei der Lösung zunächst vernachlässigt, wodurch eine spätere Korrektur notwendig wird.

*Schritt 2:* Im zweiten Schritt wird die Bewegung des Partikels aus dem letzten Zeitschritt auf die Flüssigkeit übertragen. Da es sich bei dem betrachteten Teilchen um einen starren Körper handelt, muss keine Deformation des Körpers berücksichtigt werden. Die Informationen über die Translations-  $u_p$  und Winkelgeschwindigkeit  $\omega_p$  des Teilchens, stammen aus dem DEM-Löser. Damit gilt folgende Bedingung für das Geschwindigkeitsfeld  $\tilde{u}$  innerhalb des Teilchens.

$$\tilde{u}_f = u_p + \omega_p \times r_p \text{ in } \Omega_p \quad (3.7)$$

Durch diesen Schritt entsteht ein zu korrigierendes Geschwindigkeitsfeld  $\tilde{u}_f$  im gesamten Berechnungsgebiet, da die Massenerhaltung durch das externe Aufprägen des Geschwindigkeitsfeldes innerhalb des Partikels nicht mehr erfüllt ist. Der zweite Schritt ist äquivalent dazu eine Zusatzkraft  $F$  in der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichung (hier nicht dargestellt) einzuführen.

$$\rho_f \cdot \frac{\tilde{u}_f - \hat{u}_f}{\Delta t} = F \quad (3.8)$$

*Schritt 3:* Im letzten Schritt wird eine Korrektur durchgeführt, sodass die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes erfüllt ist. Zu diesem Zweck wird zunächst ein Skalarfeld  $\phi$  eingeführt.

$$u_f^n = \tilde{u}_f - \nabla \phi \quad (3.9)$$

Das Geschwindigkeitsfeld  $u_f^n$  ist das Geschwindigkeitsfeld zum neuen Zeitschritt. Aus Gleichung (3.3) leitet sich eine zu lösende Poisson-Gleichung für  $\phi$  ab.

$$\Delta \phi = \nabla \cdot \tilde{u}_f \quad (3.10)$$

Abschließend wird unter Verwendung der Lösung aus Gleichung (3.10) das Druckfeld  $\tilde{p}$  korrigiert.

$$p_f^n = \tilde{p}_f + \frac{\rho_f \cdot \phi}{\Delta t} \quad (3.11)$$

Das vorgestellte Gleichungssystem lässt sich auf beliebig viele Teilchen im Berechnungssystem erweitern, oder für abweichende Randbedingungen modifizieren.

### 3.2.5 Gestaltung der Impulsaustauschgleichungen

Die Berechnung der gesamten Widerstandskraft  $F_{w,i,ges}$  des  $i$ -ten Partikels ergibt sich aus dem Integral der orts- und zeitabhängigen Widerstandskräfte  $F_{w,i} = f(x, t)$  über das Volumen des Partikels.

$$F_{w,i,ges} = \int_{\Omega_{p,i}} F_{w,i}(x, t) dV \quad (3.12)$$

Die Lokalisierung von  $\Omega_{p,i}$  im diskreten CFD-Gitter erfolgt in der aktuellen CFD-DEM-Kopplung nach dem in 2.2.2 beschriebenen Verfahren. Die Widerstandskraft  $F_{w,i}$  ist eine auf das Volumen des Partikels bezogene Kraft, sodass dessen Einheit  $[N/m^3]$  beträgt. Die diskrete Form von Gleichung (3.12) lautet wie folgt.

$$F_{w,i,ges} = \sum_{z \in \Omega_{p,i}} F_{w,i,z}(x, t) \cdot V_z \quad (3.13)$$

Es erfolgt eine Summierung der Teilwiderstandskräfte  $F_{w,i,z}$  innerhalb aller Gitterzellen  $z$ , die von dem Partikel  $i$  eingenommen werden. Die Gewichtung der Widerstandskräfte erfolgt jeweils mit dem zugehörigen Volumen der CFD-Gitterzelle  $V_z$ .

Die auf das Partikel  $i$  wirkende Widerstandskraft setzt sich aus einem viskosen und druckabhängigen Teil zusammen. Diese können explizit aus dem Geschwindigkeits- und Druckfeld des letzten Zeitschrittes bestimmt werden.

$$F_{w,i,z} = \eta_{f,z} \cdot \Delta u_{f,z}^{n-1} - \nabla p_z^{n-1} \quad (3.14)$$

Die berechneten Widerstandskräfte können ein hochfrequentes Rauschen aufweisen. Dieses Verhalten ist typisch für die „Fictitious Domain Method“ [Shirgaonkar 2009], wenn sich die Grenze zwischen der festen und flüssigen Phase innerhalb eines fixierten Eulerschen CFD-Gitters bewegt.

### 3.3 Validierungssimulationen

Um die Funktionsfähigkeit des Flüssigkeitsbrückenmodells und der CFD-DEM-Kopplung zu validieren, wurden verschiedene Testsimulationen durchgeführt, deren Zielstellung im Folgenden vorgestellt wird.

#### 3.3.1 Gestaltung der Simulation zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft

Die Simulation zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft ist so gestaltet, dass neben dieser keine anderen Kräfte einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben. Die korrekte Implementierung der Normal- und Tangentialkräfte wurde mit geeigneten Testsimulationen überprüft [Uhlig 2011]. Ziel ist es die Ergebnisse der in Kap. 2.1.2 vorgestellten Näherungsformeln für die Flüssigkeitsbrückenkraft als Funktion des Abstandes der Partikeloberflächen und die Energie zur vollständigen Trennung der Teilchen zu reproduzieren. Außerdem wird überprüft, ob das Reißen der Flüssigkeitsbrücke bei der kritischen Länge  $s_c$  stattfindet und die gleichen Resultate bei der Parallelisierung der Simulation auf mehreren Rechenkernen erzielt werden. Zum besseren Vergleich der Resultate wird eine dimensionslose Darstellung der Simulationsergebnisse gewählt.

Die Simulation der Ringscherzelle ist an die Arbeit von Luding [Luding 2008] angelehnt und soll zeigen, dass das neue Flüssigkeitsbrückenmodell auf große und komplexe Simulationen angewendet werden kann. Zu diesem Zweck werden zunächst die Resultate für die makroskopischen Stoffeigenschaften des Granulates im trockenen Zustand, unter Verwendung des neuen Modells reproduziert. Außerdem soll die Abhängigkeit der makroskopischen Stoffeigenschaften des Granulates in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil  $D$  untersucht werden.

#### 3.3.2 Gestaltung der Simulation zur Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung

Die Testsimulation zur Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung wird so einfach wie möglich gestaltet, um nur einen kleinen Spielraum für die Interpretation der Ergebnisse zu lassen. Ziel ist es die Resultate der in Abschnitt 2.2.3 eingeführten Näherungsformel für die Sinkgeschwindigkeit eines einzelnen Partikels in einem

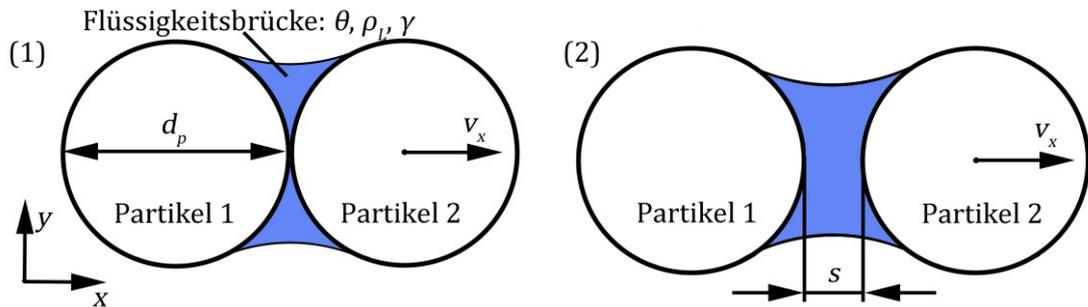
newtonschen Fluid zu reproduzieren. Dabei ist der Wandeinfluss auf die Simulationsergebnisse durch die begrenzte Berechnungsgeometrie zu berücksichtigen.

## 4 Auswertung der Ergebnisse

Die Auswertung der Ergebnisse umfasst die Validierung des in LIGGGHTS implementierten Flüssigkeitsbrückenmodell und die Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®. Außerdem werden durch das Auswerten der Simulation einer dreidimensionalen Ringscherzelle die makroskopischen Stoffeigenschaften eines feuchten Granulates mit den trockenen Stoffeigenschaften verglichen. Die Geometrie und Simulationsparameter der Ringscherzellensimulation sind an die Arbeit von Luding [Luding 2008] angelehnt.

### 4.1 Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft

Die vorgestellte Testsimulation analysiert das neu in LIGGGHTS eingeführte Flüssigkeitsbrückenmodell (vgl. Kap. 2.1 und 3.1), ohne den Einfluss anderer Kontaktkräfte, wie zum Beispiel die Normal- oder Tangentialkontaktkraft, zu berücksichtigen. Der Aufbau der Testsimulation wird in Abbildung 4.1 schematisch dargestellt.



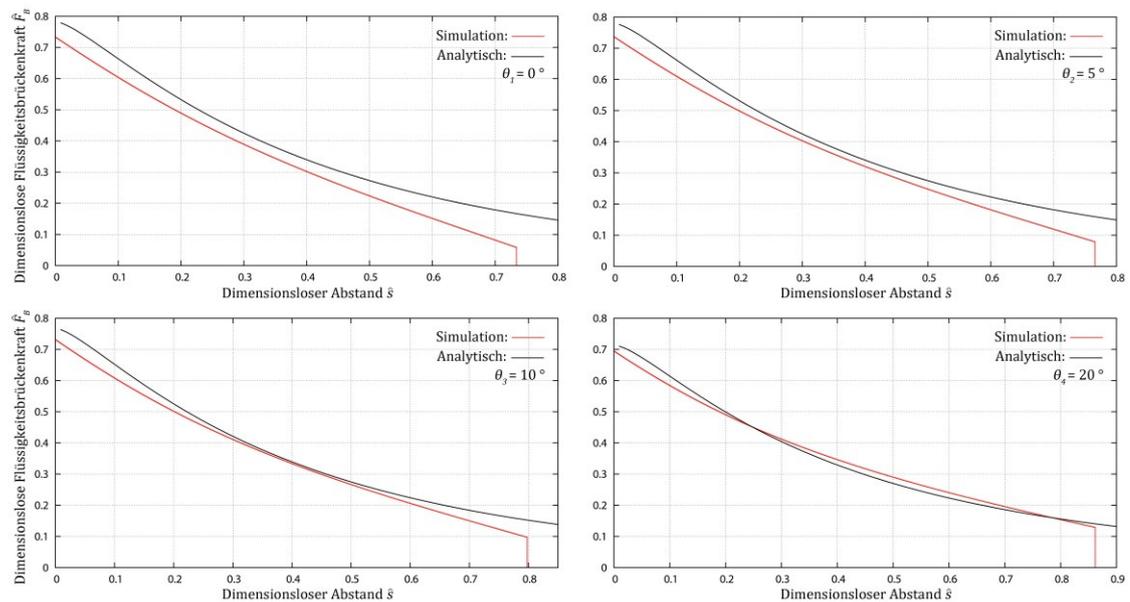
**Abbildung 4.1:** Schematische Darstellung des Aufbaus der Testsimulation zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft, (1) Positionierung zum Beginn der Simulation, (2) Positionierung zu einem späteren Zeitpunkt der Simulation

Die Simulation umfasst zwei Partikel mit dem Partikeldurchmesser  $d_p = 0.01$  m. Zum Beginn der Simulation (1) berühren sich die Oberflächen der Partikel  $s = 0$  m, jedoch wirken keine Kontaktkräfte, da sich die Teilchen nicht überlappen. Zwischen den Partikeln hat sich eine Flüssigkeitsbrücke ausgebildet, sodass eine Flüssigkeitsbrückenkraft  $F_B$  auf die Teilchen wirkt. Die Stoffeigenschaften der Flüssigkeit umfassen den Kontaktwinkel  $\theta$ , die Flüssigkeitsdichte  $\rho_L$  und die Oberflächenspannung  $\gamma$ , wobei diese mit den Stoffeigenschaften von Wasser übereinstimmen.

Während die Position des Partikels 1 fixiert ist, wird Partikel 2 mit einer konstanten, niedrigen Geschwindigkeit  $v_x$  in positive  $x$ -Richtung bewegt. Nach dem Start der Simulation wächst der Abstand zwischen den Partikeloberflächen (2). Die Flüssigkeitsbrü-

cke bleibt bestehen, solange der Abstand zwischen den Teilchenoberflächen kleiner ist, als der kritische Abstand  $s_c$ . Sobald der kritische Abstand zwischen den Teilchenoberflächen überschritten wird, reißt die Flüssigkeitsbrücke und es wirken keine weiteren Kräfte mehr auf die einzelnen Teilchen.

Während des Trennungsvorganges wird die auf die Teilchen wirkende Flüssigkeitsbrückenkraft gemessen. In Abbildung 4.2 ist der Verlauf der dimensionslosen Flüssigkeitsbrückenkraft  $\hat{F}_B$  als Funktion des dimensionslosen Abstandes  $\hat{s}$  zwischen den Partikeloberflächen, im Vergleich mit den Ergebnissen aus der Näherungsformel (2.8) (vgl. Kap 2.1.2) für verschiedene Kontaktwinkel  $\theta_i$  dargestellt.



**Abbildung 4.2:** Numerische Lösung (Rot) der dimensionslosen Flüssigkeitsbrückenkraft  $\hat{F}_B$  als Funktion des dimensionslosen Abstandes  $\hat{s}$  zwischen den Partikeloberflächen, im Vergleich mit den Ergebnissen aus der Näherungsformel (2.8) (Schwarz)

Das dimensionslose Flüssigkeitsvolumen beträgt in der Simulation  $\hat{V}_B = 0.1$  und die Porosität  $\varepsilon = \pi/6$ . Damit wird in der Simulation ein Sättigungsgrad (vgl. Gl. (2.2)) von  $S = 0.065$  erreicht. Diese Werte entsprechen dem oberen Gültigkeitsbereich der analytischen Lösung und näherungsweise dem unteren Gültigkeitsbereich der im numerischen Algorithmus verwendeten Formeln (vgl. Kap. 2.1.1). Da keine Vergleichsdaten für höhere Sättigungsgrade vorliegen, wird sich zur Validierung der Flüssigkeitsbrückenkraft auf diese Simulationskonfiguration beschränkt.

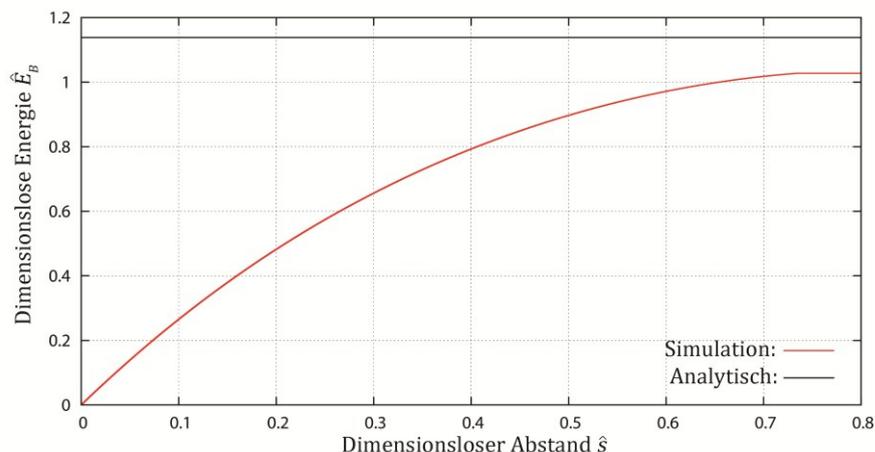
Die roten Graphen zeigen die Kraftverläufe der Simulationsdaten, während die schwarzen Graphen die Verläufe der nach Gleichung (2.8) berechneten Flüssigkeitsbrückenkraft widerspiegelt. Im ersten Fall, bei dem der Kontaktwinkel  $\theta_1 = 0^\circ$  beträgt, fällt die dimensionslose Flüssigkeitsbrückenkraft mit steigendem dimensionslosem

Oberflächenabstand in der Simulation und der analytischen Lösung ab. Der Verlauf der gezeigten Graphen ist ähnlich, jedoch liegen die Simulationswerte während des gesamten Trennungsvorganges unterhalb der analytischen Lösung. Die mittlere Abweichung bezogen auf die analytische Lösung beträgt  $\Delta\hat{F}_{B,1} = 18.26\%$  und die maximale Abweichung  $\Delta\hat{F}_{B,1,max} = 62.78\%$  am Ende des Trennungsvorganges. Im Bereich von  $\hat{s} = 0.73$  reißt die Flüssigkeitsbrücke und die Flüssigkeitsbrückenkraft der numerischen Lösung fällt schlagartig auf den Wert Null. Dieser Effekt wird bei der analytischen Lösung nicht berücksichtigt.

Die Erhöhung des Kontaktwinkels reduziert die Abweichung zwischen der analytischen und numerischen Lösung. Die Simulationsdaten liegen für einen Kontaktwinkel  $\theta_3 < 10^\circ$  weiterhin unterhalb der Vergleichsdaten, wohin gegen bei einem Kontaktwinkel von  $\theta_4 = 20^\circ$  die numerisch ermittelte Flüssigkeitsbrückenkraft im Bereich von  $0.25 < \hat{s} < 0.8$  oberhalb der analytischen Lösung liegt. Darüber hinaus kann beobachtet werden, dass bei der Erhöhung des Kontaktwinkels die maximal wirkende Flüssigkeitsbrückenkraft sinkt und der kritische Abstand, bei dem die Flüssigkeitsbrücke reißt, steigt (vgl. Gl. (2.1)).

Im Hinblick auf den Fehler der Näherungsgleichung (2.8) und den Messfehlern auf deren Grundlage diese abgeleitet wurde [Willet 2000], wird der in Abbildung 4.2 dargestellte Vergleich als ein gutes Ergebnis betrachtet.

Ein ähnliches Resultat zeigt sich im zeitlichen Verlauf der dimensionslosen Energie  $\hat{E}_B$  zum Trennen der Partikel. Dieser ist in Abbildung 4.3 als Funktion des dimensionslosen Abstandes  $\hat{s}$  der Teilchenoberflächen für die vollständige Benetzung der Partikel zu sehen.



**Abbildung 4.3:** Numerische Lösung (Rot) der dimensionslosen Energie  $\hat{E}_B$  als Funktion des dimensionslosen Abstandes  $\hat{s}$  zwischen den Partikeloberflächen im Vergleich mit dem Ergebnis aus der Näherungsformel (2.9) (Schwarz),  $\theta = 0$

Wieder zeigt der rote Graph die Ergebnisse der Simulation, während der schwarze Graph den Endwert der nach Gleichung (2.9) berechneten Energie zur vollständigen Trennung der Partikel veranschaulicht. Der dimensionslose Energieverlauf nähert sich asymptotisch dem Wert zur vollständigen Trennung der Teilchen an. Dieser beträgt in der Simulation  $\hat{E}_B = 1.03$  und für die analytische Lösung  $\hat{E}_B = 1.14$ , was einer prozentualen Abweichung von 9.65 % im Bezug zur analytischen Lösung entspricht. Wie zuvor beobachtet, liegt der numerische Wert unterhalb der analytischen Lösung, was zu erwarten ist, da die Energie zur Trennung der Partikel eine Funktion der Flüssigkeitsbrückenkraft ist.

Allgemein kann festgehalten werden, dass die Simulationsergebnisse der Flüssigkeitsbrückenkraft unterhalb der Vergleichsdaten liegen, die aus Experimenten abgeleitet wurden. Unter Berücksichtigung der Annahmen die zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft getroffen wurden und der Fehler der Näherungsformeln, sowie Messfehlern der Vergleichsdaten, werden die Simulationsergebnisse als gute Näherung angesehen. Damit wurde gezeigt, dass das entwickelte Berechnungsmodell zur Ermittlung der Flüssigkeitsbrückenkraft, im Rahmen der Referenzdaten akkurate Ergebnisse liefert.

Abschließend enthält Tabelle 4.1 einen Überblick über die in der Validierungssimulation verwendeten Simulationsparameter.

**Tabelle 4.1:** Überblick über die in der Validierungssimulation der Flüssigkeitsbrückenkraft verwendeten Simulationsparameter, Zeile 1 Partikeleigenschaften, Zeile 2 Flüssigkeitseigenschaften, Zeile 3-4 allgemeine Simulationsparameter

Größe	Wert	Größe	Wert
Partikeldurchmesser: $d_p$	0.01 m	Partikeldichte: $\rho_p$	2600 kg/m <sup>3</sup>
Oberflächenspannung: $\gamma$	0.07275 N/m	Flüssigkeitsdichte: $\rho_L$	1000 kg/m <sup>3</sup>
Simulationszeit: $t_s$	3 s	Trennungsgeschw.: $v_x$	0.001 m/s
Zeitschrittweite: $\Delta t$	$1 \cdot 10^{-6}$ s	–	–

Die erforderlichen Eingabedateien zur Durchführung der Validierungssimulation sind auf der dieser Arbeit beigefügten CD enthalten (*Simulations/Liquid\_Validation*).

## 4.2 Simulation der Ringscherzelle: Analyse der makroskopischen Stoffeigenschaften eines feuchten Granulates

Die Simulation der Ringscherzelle besteht aus zwei Abschnitten. Zunächst wird der trockene Zustand des verwendeten Granulates simuliert, um das neu eingeführte Flüssigkeitsbrückenmodell mit bereits vorhandenen Ergebnissen zu vergleichen. Diese Maßnahme stellt sicher, dass keine Programmierfehler in Programmteilen eingeführt wurden, die nicht zum Berechnungsteil der Flüssigkeitsbrückenkräfte gehören. Im Speziellen wird die korrekte Übergabe von Simulationsdaten an die verschiedenen Prozessorkerne während der Parallelisierung der Berechnung kontrolliert. Im zweiten Abschnitt wird die Abhängigkeit des Flüssigkeitsanteils auf die makroskopischen Stoffeigenschaften des Granulates dargestellt und diskutiert.

Als Simulationsgeometrie wird die in Abschnitt 2.1.2 beschriebene Ringscherzelle verwendet, die mit einer Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  rotiert. Die Simulationsparameter, Partikeleigenschaften und Flüssigkeitseigenschaften sind in Tabelle 4.2 enthalten. Letztere stimmen mit den Stoffeigenschaften von Wasser überein, wobei von einer vollständigen Benetzung der Partikel ausgegangen wird.

**Tabelle 4.2:** Simulationsparameter und Partikeleigenschaften für die Simulation der Ringscherzelle, Zeile 1-4 Partikeleigenschaften, Zeile 5-6 Flüssigkeitseigenschaften, Zeile 7 Kontaktzeit  $t_c$  für trockene, reibungsfreie Partikel und Restitutionskoeffizient  $e$  [Luding 1998], Zeile 8-9 allgemeine Simulationsparameter

Größe	Wert	Größe	Wert
Normalfederkonst.: $k_n$	110 N/m	Normaldämpfungskoeff.: $\nu_n$	$2 \cdot 10^{-3}$
Tangentialfederkonst.: $k_t$	12 N/m	Tangentialdämpfungskonst.: $\nu_t$	$0.5 \cdot 10^{-3}$
Reibungskoeffizient: $\mu$	0.01	Partikeldurchmesser: $d_p$	$2 \cdot 10^{-3}$ m
Partikeldichte: $\rho_p$	2000 kg/m <sup>3</sup>	–	–
Oberflächenspannung: $\gamma$	0.07275 N/m	Kontaktwinkel: $\theta$	0 °
Flüssigkeitsdichte: $\rho_L$	1000 kg/m <sup>3</sup>	–	–
Kontaktzeit: $t_c$	$6.14 \cdot 10^{-4}$ s	Restitutionskoeffizient: $e$	0.864
Zeitschrittweite: $\Delta t$	$5 \cdot 10^{-6}$ s	Simulationszeit: $t_s$	110 s
Winkelgeschwindigk.: $\omega$	$2\pi \cdot 10^{-2}$ 1/s	Teilchenanzahl: $n$	209301

Die verschiedenen Simulationen wurden jeweils auf acht bis sechzehn Prozessorkernen durchgeführt, sodass die Möglichkeit der Parallelisierung von LIGGHTS genutzt wurde. Die makroskopischen Stoffeigenschaften wurden für die Flüssigkeitsanteile  $D_1 = 0$ ,  $D_2 = 0.01$ ,  $D_3 = 0.05$ ,  $D_4 = 0.1$ ,  $D_5 = 0.2$  und  $D_6 = 0.4$  untersucht, wobei die

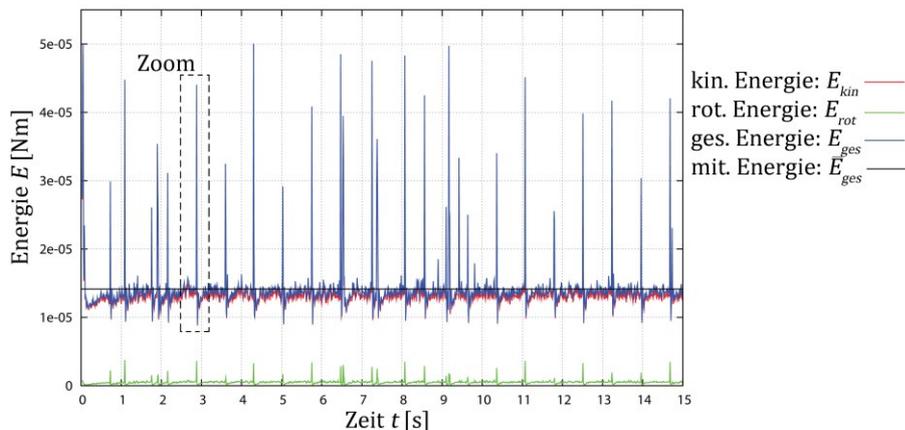
Wände der Ringscherzelle aus trockenen Partikeln bestehen. Die Flüssigkeitsanteile wurden so gewählt, dass die erwartete Abhängigkeit der makroskopischen Stoffeigenschaften vom Flüssigkeitsanteil möglichst deutlich sichtbar wird. Die aus den Flüssigkeitsanteilen resultierenden mittleren Sättigungsgrade  $\bar{S}_i$  in der Ringscherzelle sind in Tabelle 4.3 aufgelistet.

**Tabelle 4.3:** Übersicht über die aus den Flüssigkeitsanteilen  $D_i$  resultierenden mittleren Sättigungsgrade  $\bar{S}_i$  und Volumenanteile  $V_p/V_{f,i}$  in der Ringscherzelle

Flüssigkeitsanteil: $D_i$	Sättigungsgrad: $\bar{S}_i$	Volumenanteil: $V_p/V_{f,i}$
$D_1 = 0.00$	0.00	–
$D_2 = 0.01$	0.01	$V_p/V_{f,2} = 50$
$D_3 = 0.05$	0.05	$V_p/V_{f,3} = 10$
$D_4 = 0.10$	0.10	$V_p/V_{f,4} = 5$
$D_5 = 0.20$	0.19	$V_p/V_{f,5} = 2.5$
$D_6 = 0.40$	0.39	$V_p/V_{f,6} = 1.25$

Tabelle 4.3 zeigt, dass die aus den Flüssigkeitsanteilen  $D_2 = 0.01$  und  $D_6 = 0.40$  ermittelten Sättigungsgrade außerhalb des Gültigkeitsbereich von  $0.05 < S < 0.30$  der Berechnungsgleichung (2.7), zur Ermittlung des halben Füllungswinkels, liegen. Diese Tatsache muss bei der Beurteilung der nachfolgenden Auswertung der Simulationsergebnisse berücksichtigt werden.

Zum Beginn der Auswertung der einzelnen Simulationen wird überprüft, ob sich das System in einem stationären Zustand befindet. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 4.4 beispielhaft die kinetische  $E_{kin}$ , die rotatorische Energie  $E_{rot}$  und die Gesamtenergie  $E_{ges} = E_{kin} + E_{rot}$  der in der Scherzelle befindlichen Teilchen, die einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$  besitzen, als Funktion der Zeit zu sehen.



**Abbildung 4.4:** Zeitlicher Verlauf der Energie für die Ringscherzellensimulation in den ersten 15 s, für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$

Der blaue Graph zeigt den zeitlichen Verlauf der Gesamtenergie, der rote Graph den zeitlichen Verlauf der kinetischen und der grüne Graph den zeitlichen Verlauf der rotatorischen Energie der Teilchen. Die durchgezogene schwarze Linie repräsentiert den Mittelwert der Gesamtenergie während der kompletten Simulationsdauer. Außerdem zeigt der schwarz gestrichelte Rahmen den Zoombereich für die spätere Auswertung des Energieverlaufes an.

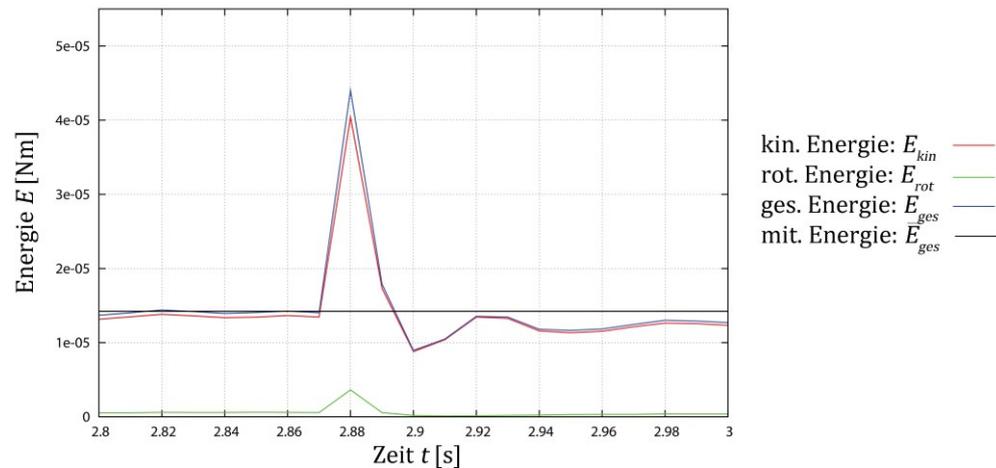
Tabelle 4.4 enthält eine Übersicht über die mittleren Gesamtenergien  $\bar{E}_{ges,i}$  und deren zugehörigen Variationskoeffizienten  $\vartheta_i$  (Standartabweichung/Mittelwert) für die verschiedenen Simulationskonfigurationen.

**Tabelle 4.4:** Übersicht über die mittleren Gesamtenergien  $\bar{E}_{ges,i}$  der in der Scherzelle befindlichen Teilchen und deren Variationskoeffizienten  $\vartheta_i$  für die verschiedenen Simulationskonfigurationen

Flüssigkeitsant.	$\bar{E}_{ges,i}$ [Nm]	$\vartheta_i$ [%]	Flüssigkeitsant.	$\bar{E}_{ges,i}$ [Nm]	$\vartheta_i$ [%]
$D_1 = 0$	$1.628 \cdot 10^{-5}$	8.8	$D_2 = 0.01$	$1.421 \cdot 10^{-5}$	21.5
$D_3 = 0.05$	$1.418 \cdot 10^{-5}$	32.2	$D_4 = 0.10$	$1.420 \cdot 10^{-5}$	36.8
$D_5 = 0.20$	$1.428 \cdot 10^{-5}$	46.9	$D_6 = 0.40$	$1.421 \cdot 10^{-5}$	52.0

Zunächst wird deutlich, dass die Gesamtenergie der Teilchen in der feuchten Ringscherzelle niedriger ausfällt, als in der trockenen Ringscherzelle. Die Daten zeigen (hier nicht gezeigt), dass dieses Verhalten auf die niedrigere kinetische Energie der Partikel im feuchten Zustand zurückgeführt werden kann. Die Variation der Feuchtigkeit in der Ringscherzelle hat keinen wesentlichen Einfluss auf die Gesamtenergie der Teilchen. Die kohäsive Wirkung der Flüssigkeitsbrücken bewirkt, dass sich die Partikel in der feuchten Ringscherzelle, gegenüber dem trockenem Zustand, stärker wie ein starrer Festkörper verhalten. In makroskopischen Stoffeigenschaften ausgedrückt, steigt die Viskosität des granularen Mediums, wodurch der Abfall der Gesamtenergie um ca. 12.5 % im feuchten Zustand erklärt werden kann.

Der zeitliche Energieverlauf weist zum Teil starke Energiespitzen auf, die in Abbildung 4.4 deutlich sichtbar, bzw. in Tabelle 4.4 durch den Variationskoeffizienten beschrieben werden. Dabei ist zu sehen, dass sich diese Tendenz mit steigendem Flüssigkeitsanteil verstärkt. Um einen genaueren Einblick in den zeitlichen Verlauf einer Energiespitze zu bekommen, wird in Abbildung 4.5 ein kleiner Zeitausschnitt des Energieverlaufes mit einer Zeitauflösung von  $\Delta t = 0.01$  s für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$  dargestellt. Dieser Zeitausschnitt ist auch in Abbildung 4.4 kenntlich gemacht (gestrichelter, schwarzer Rahmen).



**Abbildung 4.5:** Kleiner Zeitausschnitt des zeitlichen Energieverlaufes der Ringscherzellensimulation mit einer Zeitauflösung von  $\Delta t = 0.01$  s für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$

Im Zeitraum von  $t = 2.87$  s bis  $t = 2.885$  s ist eine Energiespitze zu erkennen, womit das Ereignis einer Energiespitze ca.  $\Delta t \approx 0.02$  s andauert (dies gilt auch für andere Energiespitzen). Die Energiespitze ist dadurch gekennzeichnet, dass sowohl die kinetische, als auch die rotatorische Energie schlagartig auf einen, im Vergleich zum Mittelwert der kinetischen und rotatorischen Energie (Daten hier nicht gezeigt), hohen Wert ansteigt. Außerhalb dieses Ereignisses befinden sich die Gesamtenergiewerte nahe der mittleren Gesamtenergie für die komplette Simulationsdauer. Im Einklang mit Abbildung 4.4 setzt sich die Gesamtenergie hauptsächlich aus der kinetischen Energie zusammen, wohin gegen die rotatorische Energie auf Grund der Reibungsfreiheit ( $\mu = 0.01$ ) der Partikel eine untergeordnete Rolle spielt.

Das Auftreten von regelmäßig zu beobachtenden Energiespitzen, deren Intensität mit steigendem Flüssigkeitsanteil zunimmt, kann auf verschiedene Weise interpretiert werden. Zunächst muss festgehalten werden, dass das verwendete Flüssigkeitsbrückenmodell so aufgebaut ist, dass bei der Trennung der Partikel, bzw. bei einem Neukontakt von Partikeln sofort eine Flüssigkeitsbrücke aufgebaut wird. Die damit verbundene Flüssigkeitsbrückenkraft springt bei der Trennung der Partikel, bzw. in der umgekehrten Reihenfolge bei einem Neukontakt von Partikeln, von einem endlichen Kraftwert, auf den Wert Null. Diese Diskontinuität des Kraftverlaufes kann zu den großen Schwankungsbereichen im zeitlichen Energieverlauf führen, die mit steigendem Flüssigkeitsanteil wachsen. Dabei wird jedoch auch mit Abbildung 4.5 nicht klar, ob die Energiespitzen auf einzelne Kontakt Ereignisse mit vorherig beschriebener Diskontinuität zurückgeführt werden können, oder ob es sich dabei um eine Art Kettenreaktion handelt, bei der mehrere Teilchen beteiligt sind. Um zu erfahren, ob und welche der

beiden Varianten zutreffend ist, muss der zeitliche Energieverlauf mit einer höheren zeitlichen Auflösung bestimmt werden.

Neben diesem Erklärungsansatz kann die Ursache der Energiespitzen auch auf die Berechnungsgeometrie zurückgeführt werden. So ist es möglich, dass Partikel in bestimmten Bereichen, speziell im Teilungsbereich der strukturierten Ringscherzelle eingeklemmt werden. Dadurch kann eine große Überlappung zwischen den Teilchen in der Ringscherzelle und den zwangsweise bewegten Wandteilchen entstehen. Übersteigt die Kontaktkraft einen kritischen Wert, kann sich das eingeklemmte Teilchen lösen und wird auf Grund der hohen Kontaktkraft stark Beschleunigt, wodurch die kinetische Energie schlagartig ansteigt. Die Bewegung wird anschließend durch die umgebenden Partikel gedämpft, sodass sich die lokale Partikelbewegung wieder normalisiert.

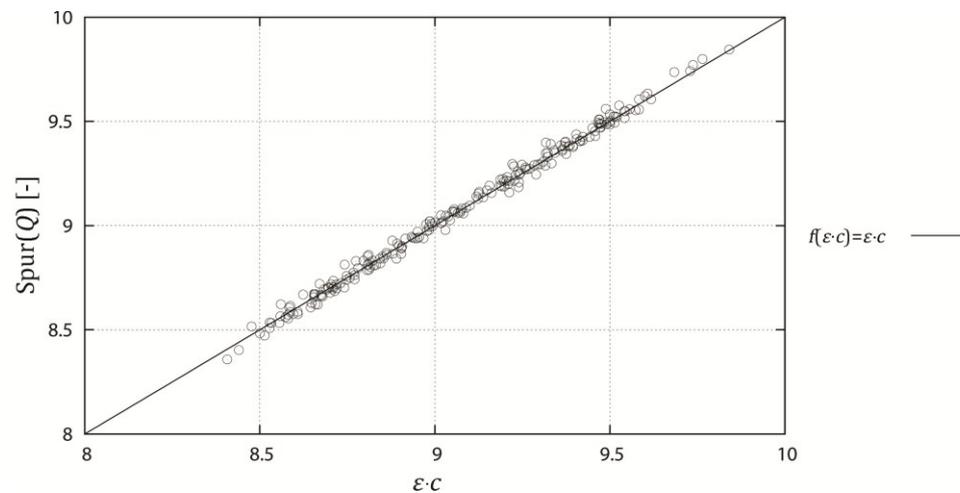
Neben diesen beiden einzelnen Erklärungsansätzen ist es auch denkbar, dass sich die Diskontinuität im Flüssigkeitskraftverlauf und letzterer Erklärungsansatz überlagern und eine Kombination aus beiden Vorgängen vorliegt. Die vorhandenen Daten reichen jedoch nicht aus, um die Ursache der Energiespitzen eindeutig zu bestimmen.

Zur Auswertung der Simulationen wird der zeitliche Verlauf der Gesamtenergie betrachtet. Nimmt die Gesamtenergie der Teilchen im Rahmen eines Schwankungsbereiches einen stationären Wert an, so wird davon ausgegangen, dass sich das betrachtete System in einem stationären Zustand befindet. Es ist zu erkennen, dass dieser Zustand unter Vernachlässigung der Energiespitzen bereits nach ca. 1 s bis 2 s erreicht wird. Um für die Zeitmittlung der statistischen Analyse sicher zu gehen, dass das System nach dem Rotationsstart des äußeren Bereiches global einen stationären Zustand erreicht hat, erfolgt die Auswertung der Simulationsdaten für den Zeitraum  $t_s \geq 5$  s.

Zur räumlichen Mittelung wurde die Ringscherzelle radial in 39 Teilringe aufgeteilt. Die radiale Ausdehnung eines Ringes beträgt somit  $\Delta R = 2.82 \cdot 10^{-3}$  m. In Rotationsachsenrichtung wird die Scherzelle in 20 Ebenen unterteilt. Damit ergibt sich eine Ausdehnung von  $h = 1.9 \cdot 10^{-3}$  m einer Ebene in Rotationsachsenrichtung. Demzufolge sind die Abmessungen zur räumlichen Mittelung in  $r$ - und  $z$ -Richtung in der Größenordnung eines einzelnen Partikels. Diese Wahl ist ein guter Richtwert für eine akkurate Raummittlung, bei gleichzeitig hoher räumlicher Auflösung [Lätzel 2001].

Zur Beurteilung der Qualität des statistischen Verfahrens wird in Abbildung 4.6 beispielhaft die Spur des gemittelte Fabric-Tensor als Funktion des Produktes aus Porosi-

tät  $\varepsilon$  (vgl. Kap.2.1) und der mittleren Kontaktzahl pro Partikel  $c$ , für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$  dargestellt.

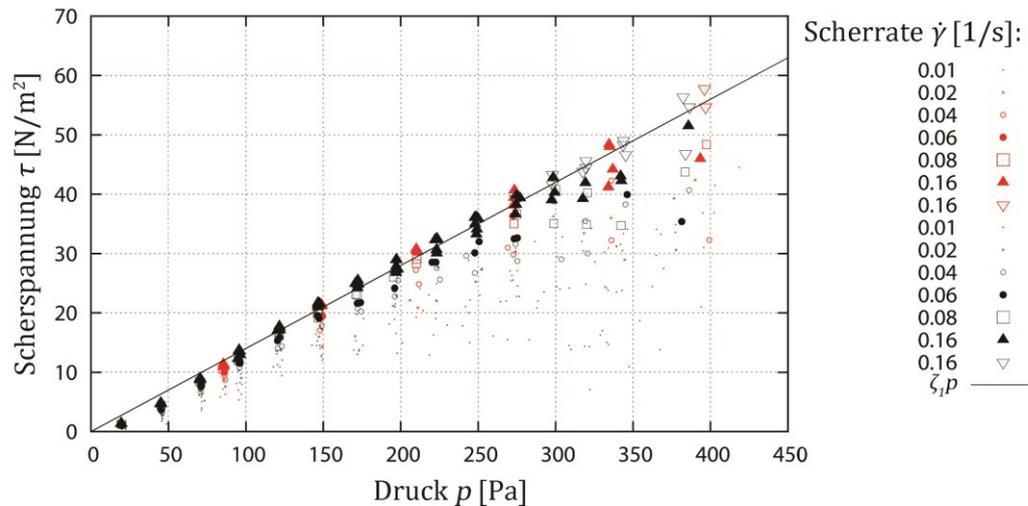


**Abbildung 4.6:** Spur des gemittelten Fabric-Tensors als Funktion des Produktes aus Porosität  $\varepsilon$  und der mittleren Kontaktzahl pro Partikel  $c$ , für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$

Auf Grund der Tatsache, dass für die Simulation monodisperse Partikel verwendet werden, wird erwartet, dass alle Punkte auf einer Ursprungsgeraden mit der Steigung 1 liegen (schwarze Linie) [Lätzel 2001]. Dieser Zusammenhang wird mit einer Abweichung von weniger als 1 % erfüllt, sodass von einer ordnungsmäßigen Funktion des statistischen Verfahrens ausgegangen werden kann. Ähnliche Ergebnisse zeigen sich für die anderen untersuchten Flüssigkeitsanteile (Ergebnisse hier nicht gezeigt).

Im nächsten Schritt werden die Simulationsergebnisse des trockenen Granulates mit den Referenzdaten verglichen [Luding 2008]. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 4.7 die Scherspannung als Funktion des Druckes für die neuen Daten und Vergleichsdaten dargestellt.

Die Verschiedenen Symbole geben unterschiedliche Scherraten an. Dabei korrespondieren große Symbole mit hohen Scherraten, während kleine Symbole niedrige Scherraten signalisieren. Darüber hinaus sind die Simulationsergebnisse schwarz und die Vergleichsdaten rot eingefärbt. Wie bereits in anderen Arbeiten beobachtet wurde [Luding 2008] [Singh 2010] [Uhlig 2011], liegt der Verlauf der Scherspannung oberhalb einer Grenzschertrate  $\dot{\gamma} > \dot{\gamma}_c \approx 0.02$  1/s auf einer Ursprungsgeraden mit der Steigung  $\zeta_1$ . Lediglich für kleine  $p < 100$  N/m<sup>2</sup> und große Drücke  $p > 350$  N/m<sup>2</sup> ist ein leichter Abfall zu erkennen, wobei die Streuung der Daten für hohe Drücke ebenfalls zunimmt. Die Abweichungen im hohen Druckbereich wurden von Singh et al [Singh 2010] auf die verschiedene Rotationsgeschwindigkeit der Scherzelle zurückgeführt.



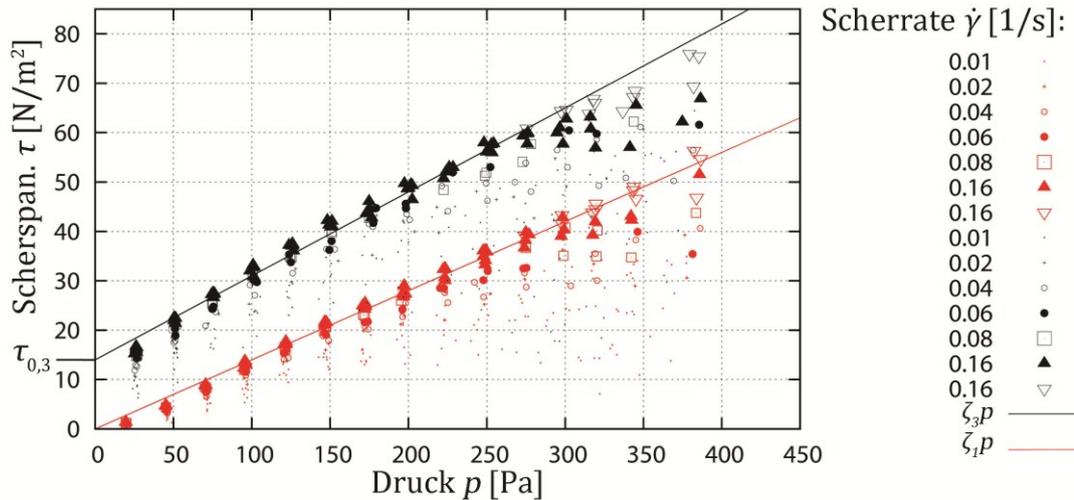
**Abbildung 4.7:** Scherspannung als Funktion des Druckes für das trockene Granulat (schwarz) im Vergleich mit den Referenzdaten (rot) [Luding 2008], verschiedene Symbole geben unterschiedliche Scherraten an, wobei große Symbole hohe und kleine Symbole niedrige Scherraten repräsentieren

Partikel in Bodennähe werden demnach speziell im Teilungsbereich der Scherzelle einer hohen Scherrate ausgesetzt, ohne dass die im Rest der Scherzelle erforderlichen Scherspannungen erreicht werden. Aus der Steigung der Geraden  $\tau/p \approx \zeta_1 \approx 0.14$ , auf der die Daten liegen, kann der makroskopische Reibungswinkel  $\psi_1$  des trockenen Granulates nach Mohr bestimmt werden  $\psi_1 = \arcsin(\zeta_1)$ . Obwohl die Partikel mikroskopisch nahezu reibungsfrei sind ( $\mu = 0.01$ ), ergibt sich ein Reibungswinkel von  $\psi_1 \approx 8^\circ$ .

Da die Simulationsdaten sehr gute Übereinstimmungen mit den Referenzdaten zeigen, wird davon ausgegangen, dass keine Programmierfehler in Programmteilen eingeführt wurden, die nicht zum Berechnungsteil der Flüssigkeitsbrückenkräfte gehören.

Im Vergleich zum trockenen Zustand ergibt sich ein anderes Bild für den Scherspannungsverlauf des feuchten Granulates. Abbildung 4.8 stellt die Scherspannung als Funktion des Druckes, für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$ , im Vergleich zum trockenen Granulat dar.

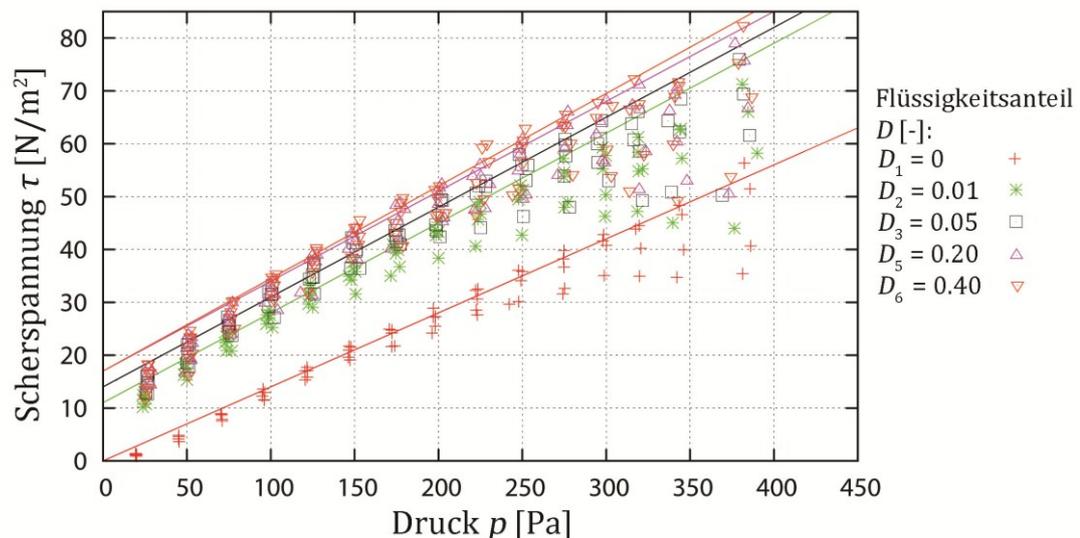
Die Simulationsdaten des feuchten Zustandes sind schwarz, während die Ergebnisse des trockenen Zustandes rot eingefärbt sind. Erneut ergibt sich oberhalb einer Grenzschertrate von  $\dot{\gamma}_c \approx 0.02$  1/s ein linearer Zusammenhang zwischen der Scherspannung und dem Druck für die feuchten Partikel. Jedoch nimmt die Steigung  $\zeta$  und damit der Reibungswinkel  $\psi$  gegenüber dem trockenem Granulat zu und steigt auf ca.  $\psi_3 = 9.8^\circ$ . Außerdem ist die Gerade, auf denen die Scherspannungspunkte kollabieren, keine Ursprungsgerade, sondern eine Gerade die um den Betrag  $\tau_{0,3} \approx 14$  N/m<sup>2</sup> in positive Ordinatenrichtung verschoben ist.



**Abbildung 4.8:** Scherspannung als Funktion des Druckes für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$  (schwarz), im Vergleich zum trockenem Zustand (rot), verschiedene Symbole geben unterschiedliche Scherraten an, wobei große Symbole hohe und kleine Symbole niedrige Scherraten repräsentieren

Demnach bewirken die kohäsiven Eigenschaften der Flüssigkeitsbrücken, dass das feuchte Granulat bei gleichem Druck höhere Scherspannungen übertragen kann. Diese Eigenschaft bleibt auch für sehr niedrige Drücke im granularen Medium bestehen. Für kleine  $p < 100 \text{ N/m}^2$  und große Drücke  $p > 350 \text{ N/m}^2$  fallen die Scherspannungswerte im feuchten Zustand, äquivalent zum trockenen Zustand unterhalb der Geraden auf denen sich die restlichen Werte befinden.

Die Abhängigkeit des Scherspannungsverlaufes  $\tau(p)$  vom Flüssigkeitsanteil  $D_i$  im Partikelsystem wird in Abbildung 4.9 veranschaulicht.



**Abbildung 4.9:** Scherspannung als Funktion des Druckes für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$ , zur besseren Darstellung wird nur jeder zweite Datensatz visualisiert

Die Farbgebung signalisiert den Flüssigkeitsanteil  $D_i$  der jeweiligen Scherspannungskurve und kann der Legende entnommen werden. Damit die Darstellung nicht zu unübersichtlich wird, wird der Scherspannungsverlauf für den Flüssigkeitsanteil  $D_4 = 0.10$  nicht gezeigt und es ist nur jeder zweite Datensatz zu sehen.

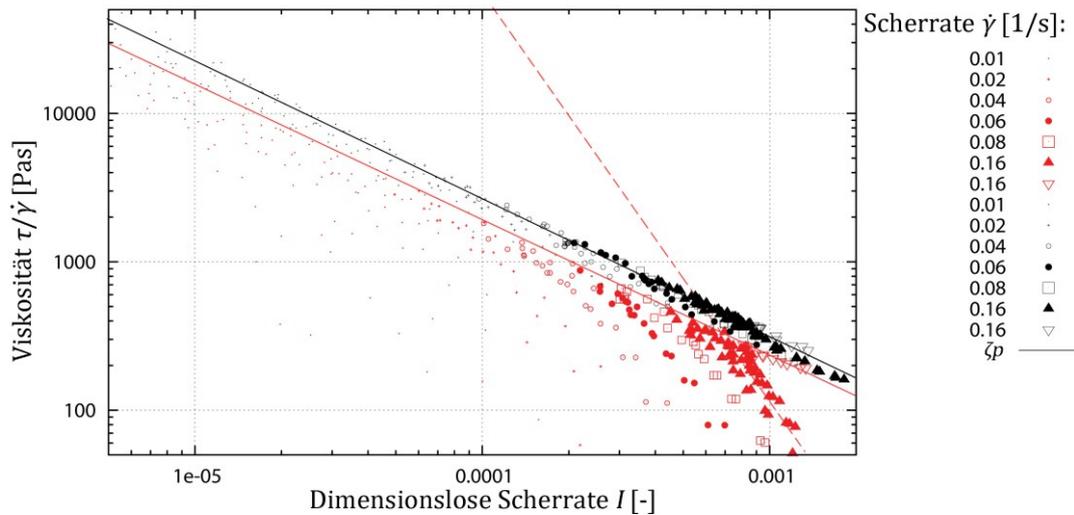
Die Erhöhung des Flüssigkeitsanteils hat keine wesentliche Auswirkung auf die Steigung der Geraden und damit auf den Reibungswinkel des Granulates. Im Gegensatz dazu steigt die Verschiebung  $\tau_{0,i}$  mit wachsendem Flüssigkeitsanteil. Demnach werden durch die Erhöhung des Flüssigkeitsanteiles die kohäsiven Eigenschaften des Partikelsystems verstärkt, sodass bei gleichem Druck höhere Scherraten übertragen werden können. Ab einem Flüssigkeitsanteil von  $D_5 = 0.20$  bleibt der Scherspannungsverlauf annähernd konstant, sodass die Daten für  $D_5$  und  $D_6$  zusammenfallen. Für alle Flüssigkeitsanteile ist der zuvor beobachtete und diskutierte Scherspannungsabfall für niedrige und hohe Drücke erkennbar.

Tabelle 4.5 enthält die Steigungen  $\zeta_i$ , Reibungswinkel  $\psi_i$  und Verschiebungen  $\tau_{0,i}$  der Geraden, auf denen die Simulationen oberhalb der Grenzscherate  $\dot{\gamma}_c \approx 0.02$  1/s, bei verschiedenen Flüssigkeitsanteilen  $D_i$ , im Scherspannungs-Druckdiagramm kollabieren.

**Tabelle 4.5:** Steigungen  $\zeta_i$ , Reibungswinkel  $\psi_i$  und Verschiebungen  $\tau_{0,i}$  der Geraden, auf denen die Simulationen oberhalb der Grenzscherate  $\dot{\gamma}_c \approx 0.02$  1/s, bei verschiedenen Flüssigkeitsanteilen  $D_i$ , im Scherspannungs-Druckdiagramm kollabieren

Flüssigkeitsant.: $D_i$	Steigung: $\zeta_i$	Reibungswinkel: $\psi_i$	Verschiebung: $\tau_{0,i}$
$D_1 = 0$	0.14	$8^\circ$	0 Nm
$D_2 = 0.01$	0.17	$9.8^\circ$	11 Nm
$D_3 = 0.05$	0.17	$9.8^\circ$	14 Nm
$D_4 = 0.10$	0.17	$9.8^\circ$	15 Nm
$D_5 = 0.20$	0.17	$9.8^\circ$	17 Nm
$D_6 = 0.40$	0.175	$10.1^\circ$	17 Nm

Die veränderten Scherspannungsverläufe für das feuchte Granulat haben Auswirkungen auf die Viskositätsverläufe des Partikelsystems. Zunächst wird in Abbildung 4.10 der Quotient aus Scherspannung  $\tau$  und Scherrate  $\dot{\gamma}$ , der gleichwertig mit der dynamischen Viskosität  $\eta$  in einem Fluid ist, als Funktion der dimensionslosen Scherrate  $I = \dot{\gamma} d_p \cdot \sqrt{\rho_p / p}$  für den trockenen und feuchten ( $D_3 = 0.05$ ) Zustand dargestellt (vgl. Kap. 2.1.2).



**Abbildung 4.10:** Dynamische Viskosität  $\eta$  als Funktion der Scherrate  $I$  für den trockenen (rot) und feuchten ( $D_3 = 0.05$ ) Zustand (schwarz) des Granulates, verschiedene Symbole geben unterschiedliche Scherraten an, wobei große Symbole hohe und kleine Symbole niedrige Scherraten repräsentieren

Die Wahl der Symbole ist identisch mit den Symbolen in den vorherigen  $\tau(p)$ -Darstellungen. Die Simulationsdaten des feuchten Zustandes sind schwarz, während die Ergebnisse des trockenen Zustandes rot eingefärbt sind. In beiden Fällen fällt der Viskositätsverlauf einem Potenzgesetz gehorchend mit wachsender dimensionsloser Scherrate ab. Die Werte im feuchten Zustand liegen im gesamten Scherratenbereich oberhalb der Werte des trockenen Granulates. Darüber hinaus kann für die trockenen Partikel zwei verschiedene Regime erkannt werden, die in der doppelt logarithmischen Darstellung durch die unterschiedliche Steigung des Viskositätsverlaufes gekennzeichnet sind.

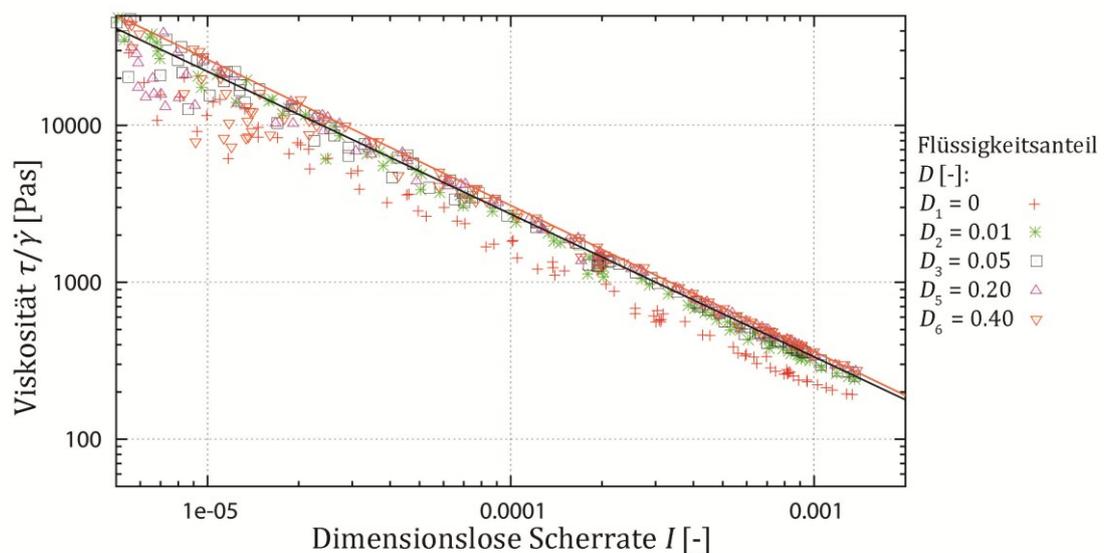
Das erste Regime (Daten auf roter durchgezogener Linie) ist das scherratenkontrollierte Regime und tritt in Bereichen hoher Drücke ( $p > 250$  Pa) auf (Daten hier nicht gezeigt). Es ist dadurch gekennzeichnet, dass die Viskosität im Wesentlichen eine Funktion der Scherrate und nahezu unabhängig von der Scherspannung und damit vom Druck (Zusammenhang zwischen Scherrate u. Druck siehe Abbildung 4.8) ist.

Das zweite Regime (Daten auf roter gestrichelter Linie) ist das scherspannungskontrollierte Regime und tritt in Bereichen niedriger Drücke ( $p < 250$  Pa) auf (Daten hier nicht gezeigt). Im Gegensatz zum ersten Regime hat die Viskosität eine geringe Abhängigkeit von der Scherrate, sondern ist überwiegend eine Funktion der Scherspannung und damit vom Druck (Zusammenhang zwischen Scherrate u. Druck siehe Abbildung 4.8). Eine detaillierte Analyse dieser beiden Regime und deren Auswirkungen auf die

makroskopischen Stoffeigenschaften eines Granulates wird voraussichtlich in Kürze von Singh et al. veröffentlicht.

Die beiden zuvor beschriebenen Bereiche können auch im feuchten Granulat beobachtet werden (Daten hier nicht gezeigt). Dadurch, dass der Scherspannungs-Druckverlauf um den Wert  $\tau_{0,3} = 14 \text{ Nm}$  in positive Ordinatenrichtung verschoben ist, fallen die Viskositätswerte des scherspannungskontrollierten Bereiches allerdings mit den Werten des scherratenkontrollierten Regimes im  $\eta(I)$ -Verlauf zusammen. Die beiden Regime können in dieser Darstellung nicht mehr erkannt werden, sodass sich eine sehr gute Korrelation zwischen der Viskosität und der dimensionslosen Scherrate in der doppelt logarithmischen Darstellung ergibt. Diese Veränderung des Viskositätsverlaufes als Funktion der dimensionslosen Scherrate ergibt sich auch für die anderen Flüssigkeitsanteile.

Die Abhängigkeit des Viskositätsverlaufes  $\eta(I)$  vom Flüssigkeitsanteil  $D_i$  im Partikel-system wird in Abbildung 4.11 im Druckbereich  $p > 250 \text{ Pa}$  veranschaulicht.

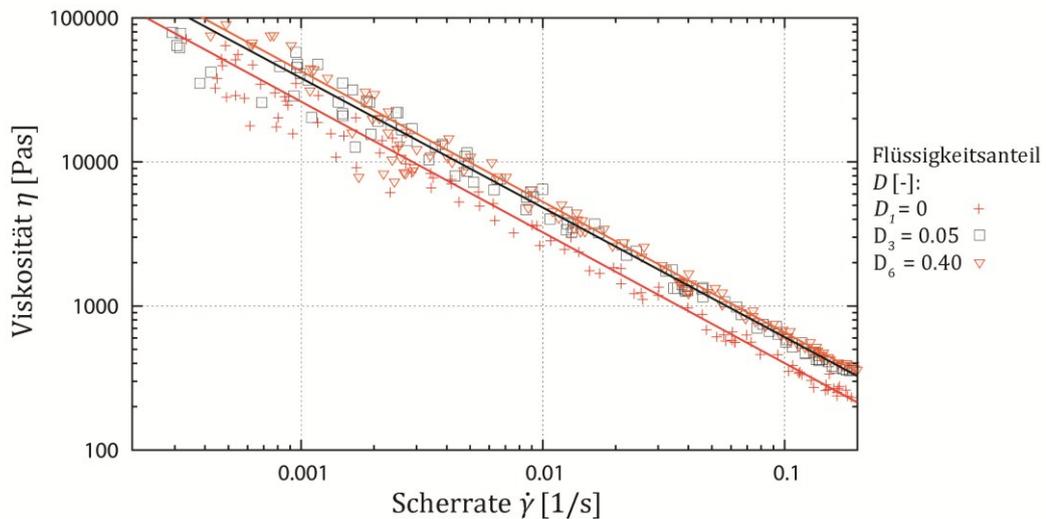


**Abbildung 4.11:** Dynamische Viskosität  $\eta$  als Funktion der dimensionslosen Scherrate  $I$ , für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$ , in einem Druckbereich  $p > 250 \text{ Pa}$

Die Farbgebung signalisiert erneut den Flüssigkeitsanteil  $D_i$  der jeweiligen Viskositätskurve und kann der Legende entnommen werden. Damit die Darstellung nicht zu unübersichtlich wird, wird der Scherspannungsverlauf für den Flüssigkeitsanteil  $D_4 = 0.10$  nicht gezeigt. Da die Viskosität nicht nur eine Funktion der Scherrate, sondern auch eine Funktion des Drucks ist (Daten hier nicht gezeigt), wurde der Verlauf der Viskosität nur im scherratenkontrollierten Regime ( $p > 250 \text{ Pa}$ ) angegeben, in dem die Viskosität näherungsweise unabhängig vom Druck ist.

Alle Daten fallen in der doppelt logarithmischen Darstellung linear mit der dimensionslosen Scherrate ab, deren Verläufe für den Flüssigkeitsanteil  $D_3 = 0.05$  (schwarze Gerade) und den Flüssigkeitsanteil  $D_6 = 0.40$  (orange Gerade) mit zwei Geraden verdeutlicht werden. Dabei wird ersichtlich, dass nur eine geringe Abhängigkeit der Viskosität vom Flüssigkeitsanteil besteht, sodass die Daten für die feuchten Partikelsysteme zusammenfallen. Die Viskositätswerte für das trockene Granulat liegen unterhalb der Werte des feuchten Granulates.

Ein ähnliches Bild ergibt sich für die dynamische Viskosität  $\eta$  des Granulates als Funktion der Scherrate  $\dot{\gamma}$ , dass für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$  in einem Druckbereich von  $p > 250$  Pa in Abbildung 4.12 zu sehen ist.



**Abbildung 4.12:** Dynamische Viskosität  $\eta$  des Granulates als Funktion der Scherrate  $\dot{\gamma}$ , für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$ , in einem Druckbereich von  $p > 250$  Pa

Die Farbgebung signalisiert den Flüssigkeitsanteil  $D_i$  der jeweiligen Viskositätskurve und kann der Legende entnommen werden. Um die Abhängigkeit der Viskosität vom Druck zu unterdrücken, werden die Verläufe der Viskosität nur im scherratenkontrollierten Regime ( $p > 250$  Pa) angegeben, in dem die Viskosität näherungsweise unabhängig vom Druck ist. Zur besseren Darstellung werden die Ergebnisse für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_2 = 0.01$ ,  $D_4 = 0.10$  und  $D_4 = 0.20$  nicht gezeigt.

Sowohl im trockenen, als auch im feuchten Zustand zeigt der Verlauf der Viskosität ein klar nicht newtonsches Verhalten. Dabei fällt  $\eta$  in der doppelt logarithmischen Darstellung linear mit der Scherrate ab. Dieses Verhalten stimmt qualitativ mit experimentellen Daten im hohen Scherratenbereich ( $\dot{\gamma} > 0.8$  1/s) überein [Schwarze 2008]. Im Gegensatz zu den experimentellen Daten knickt der Viskositätsverlauf für niedrige Scherraten nicht ab. Eine Möglichkeit um diese Abweichung zu erklären, liegt darin,

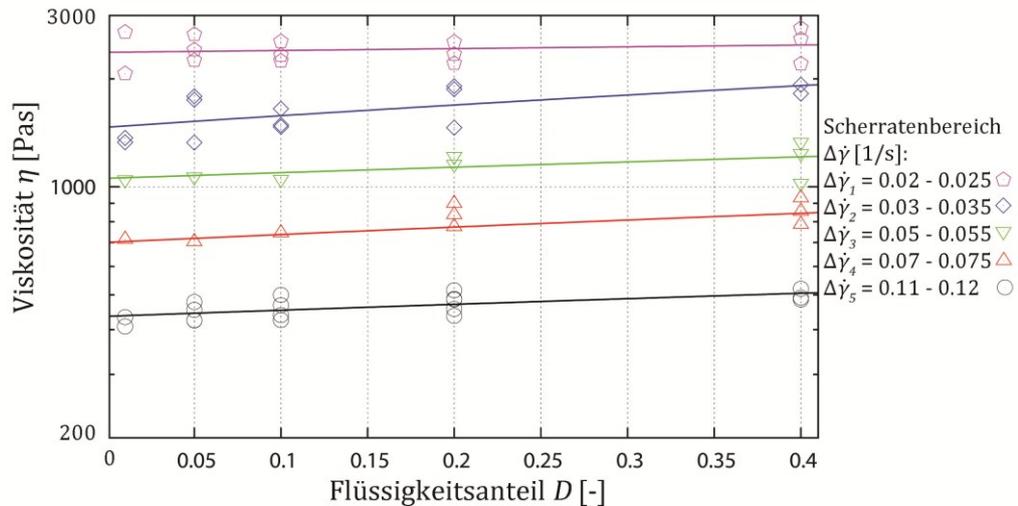
dass die Fließkurve der in der Simulation betrachteten Partikel erst bei höheren Scherraten abknickt.

Weiterhin wird gezeigt, dass mit steigendem Flüssigkeitsanteil die Viskosität bei konstanter Scherrate zunimmt. Dabei findet zunächst ein großer Sprung zwischen dem trockenen  $D_1 = 0$  und leicht feuchten Zustand  $D_3 = 0.05$  statt, während die Unterschiede für höhere Flüssigkeitsanteile ( $D_6 = 0.40$ ) vergleichsweise gering sind. Die Verläufe sind untereinander nahezu parallel. Experimentelle Daten [Schwarze 2008] deuten an, dass bei vergleichbaren granularen Materialien die Viskosität mit steigendem Flüssigkeitsanteil für niedrige Scherraten abnimmt. Aus dieser Beobachtung wurde geschlossen, dass die Flüssigkeit für niedrige Scherraten eine Art „Schmiereffekt“, bewirkt, der den Reibkoeffizienten  $\mu$  zwischen den Partikel reduziert. Dieser Effekt wurde im numerischen Algorithmus nicht berücksichtigt, sodass ein solches Verhalten auch nicht in den Fließkurven gefunden werden kann.

Außerdem zeigen die experimentellen Daten, dass die Viskosität mit steigendem Flüssigkeitsanteil für hohe Scherraten zunimmt. Daraus wurde abgeleitet, dass die kohäsiven Kräfte im Partikel-Flüssigkeitssystem, nach dem Überschreiten einer kritischen Scherrate, die „Schmiereffekte“ überwiegen, sodass die Viskosität für hohe Flüssigkeitsanteile anwächst. Dabei weisen die Steigungen der Fließkurven für steigende Flüssigkeitsanteile ebenfalls höhere Werte auf. Dem gegenüber steht der parallele Verlauf der numerisch generierten Fließkurven. Die Abweichung zu den experimentellen Daten kann zum Einem dadurch erklärt werden, dass der Unterschied zwischen den Steigungen der Fließkurven erst bei höheren Scherraten deutlich wird. Außerdem könnten an diesem Effekt die viskosen Kräfte in der Flüssigkeitsbrücke beteiligt sein, die in dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Flüssigkeitsbrückenmodell vernachlässigt wurden.

Um die Abhängigkeit der Viskosität vom Flüssigkeitsanteil besser zu verdeutlichen, wird in Abbildung 4.13 die Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine Scherratenbereiche  $\Delta\dot{\gamma}_i$  dargestellt.

Die Farbgebung gibt den betrachteten Scherratenbereich an und kann der Legende entnommen werden. Die Daten werden für kleine Scherratenbereiche angegeben, in denen die Viskosität näherungsweise konstant ist. Um den Einfluss des Druckes auszuschließen, werden die Verläufe der Viskosität nur im scherratenkontrollierten Regime ( $p > 250$  Pa) angegeben, in dem die Viskosität näherungsweise unabhängig vom Druck ist.



**Abbildung 4.13:** Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine Scherratenbereiche  $\Delta\dot{\gamma}_i$  in einem Druckbereich  $p > 250$  Pa

Die Viskosität steigt, wie zuvor beobachtet, mit sinkender Scherrate. Außerdem besteht eine geringe Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil, sodass die Viskosität für hohe Flüssigkeitsanteile anwächst. Die Fit-Parameter  $A_{1,i}$  und  $A_{2,i}$  der Geraden  $\eta_i(D) = A_{1,i} \cdot D + A_{2,i}$ , die die Viskositätsverläufe  $\eta_i(D)$  in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine Scherratenbereiche  $\Delta\dot{\gamma}_i$  wiedergeben, sind in Tabelle 4.6 zusammengefasst.

**Tabelle 4.6:** Zusammenfassung der Fit-Parameter  $A_{1,i}$  und  $A_{2,i}$  der Geraden, die die Viskositätsverläufe  $\eta_i(D)$  in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine Scherratenbereiche  $\Delta\dot{\gamma}_i$  wiedergeben,  $\Delta\eta_{0,01,tr}$  prozentualer Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und trockenen Zustand,  $\Delta\eta_{0,01,0,4}$  prozentualer Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil

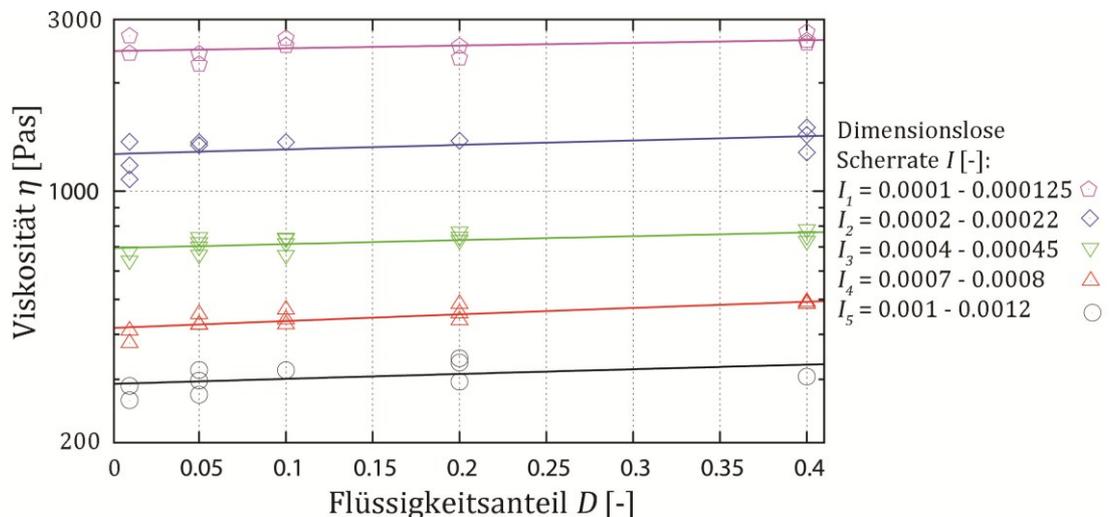
Scherratenbereich: $\Delta\dot{\gamma}_i$	Fit-Para. 1: $A_{1,i}$	Fit-Para. 2: $A_{2,i}$	Visk.-anstieg: $\Delta\eta_{0,01,tr}$	Visk.-anstieg: $\Delta\eta_{0,01,0,4}$
$\Delta\dot{\gamma}_1 = 0.02 - 0.025$ 1/s	283.40	2370.06	73.9 %	4.8 %
$\Delta\dot{\gamma}_2 = 0.03 - 0.035$ 1/s	1119.44	1466.24	15.8 %	30.5 %
$\Delta\dot{\gamma}_3 = 0.05 - 0.055$ 1/s	390.57	1056.14	68.6 %	14.8 %
$\Delta\dot{\gamma}_4 = 0.07 - 0.075$ 1/s	357.80	700.83	24.8 %	20.4 %
$\Delta\dot{\gamma}_5 = 0.11 - 0.12$ 1/s	173.29	435.93	30.4 %	15.9 %

Es ist keine klare Tendenz der Steigung der Geraden in Abhängigkeit von der Scherrate zu erkennen. Die Steigung für den Scherratenbereich  $\Delta\dot{\gamma}_2$  scheint ein Ausreißer zu sein, da der Steigungswert deutlich über den anderen Werten liegt. Die Steigung für den höchsten Scherratenbereich  $\Delta\dot{\gamma}_5$  fällt am geringsten aus, wobei nicht klar ist, ob dies eine Tendenz ist, oder ob dieser Wert innerhalb des Schwankungsbereichs der Daten liegt. Geht man von einer konstanten Steigung der Viskosität als Funktion des Flüssig-

keitsanteils über alle Scherratenbereiche aus, so ergibt sich eine mittlere Steigung von  $\bar{A}_1 = 301.3 \Delta\eta/\Delta D$  (unter Vernachlässigung von  $\Delta\dot{\gamma}_2$ ). Um ein Gefühl für den Anstieg der Viskosität zu bekommen, ist neben den Fit-Parametern auch der prozentuale Anstieg der Viskosität gegenüber dem leicht feuchten ( $D_2 = 0.01$ ) und dem trockenen Zustand  $\Delta\eta_{0.01,tr}$ , als auch der prozentuale Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil ( $D_6 = 0.4$ )  $\Delta\eta_{0.01,0.4}$  angegeben. Es zeigt sich, dass der prozentuale Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und trockenen Zustand höher ausfällt, als zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten Flüssigkeitsanteil (unter Vernachlässigung von  $\Delta\dot{\gamma}_2$ ). Ersterer bewegt sich zwischen  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 24.8\%$  bis  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 73.9\%$ , während letzterer zwischen  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 4.8\%$  und  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 20.4\%$  rangiert. Geht man von einem konstanten prozentualen Anstieg der Viskosität aus, so ergibt sich für den mittleren Anstieg zwischen dem trockenen und leicht feuchten Zustand ein Wert von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,tr} = 49.4\%$  und zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten Feuchtigkeitsanteil ein Wert von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,0.4} = 14\%$ .

Es bleibt in weiteren Simulationen zu zeigen, ob die Annahme einer konstanten Steigung der Viskosität über alle Scherratenbereich, die Annahme eines konstanten prozentualen Anstieges über alle Scherratenbereich, oder keine dieser beiden Annahmen zutreffend ist.

Ein ähnliches Bild ergibt sich für die Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche, wie es in Abbildung 4.14 zu sehen ist.



**Abbildung 4.14:** Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche  $\Delta I_i$  in einem Druckbereich  $p > 250$  Pa

Auch hier gibt die Farbgebung den betrachteten dimensionslosen Scherratenbereich an und kann der Legende entnommen werden. Die Daten werden für kleine dimensionslose Scherratenbereiche angegeben, in denen die Viskosität näherungsweise konstant ist. Um den Einfluss des Druckes auszuschließen, werden die Verläufe der Viskosität nur im scherratenkontrollierten Regime ( $p > 250$  Pa) angegeben, in dem die Viskosität näherungsweise unabhängig vom Druck ist.

Die Viskosität steigt für sinkende dimensionslose Scherraten und wachsende Flüssigkeitsanteile. Die Fit-Parameter  $A_{1,i}$  und  $A_{2,i}$  der Geraden  $\eta_i(D) = A_{1,i} \cdot D + A_{2,i}$ , die die Viskositätsverläufe  $\eta_i(D)$  in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche  $\Delta I_i$  wiedergeben, sind in Tabelle 4.7 zusammengefasst.

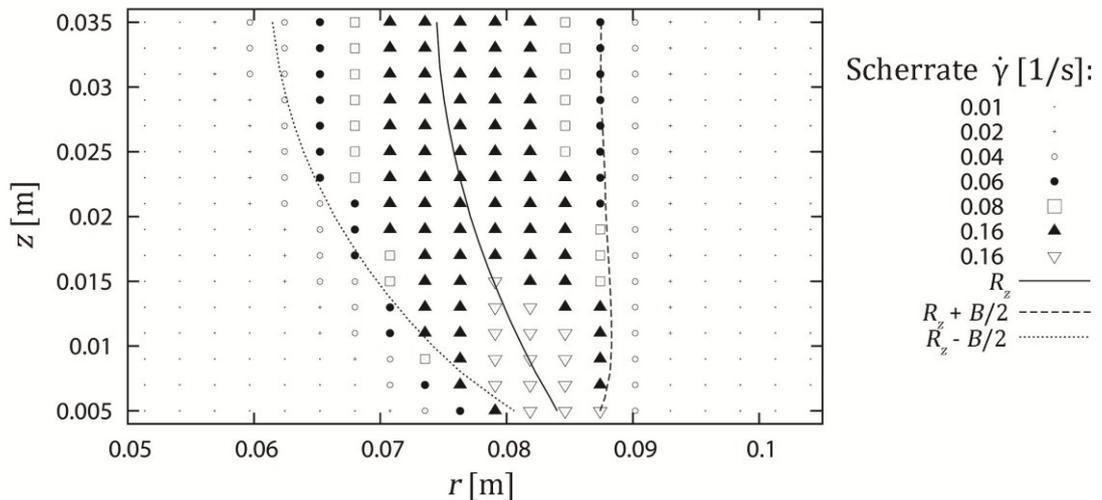
**Tabelle 4.7:** Zusammenfassung der Fit-Parameter  $A_{1,i}$  und  $A_{2,i}$  der Geraden, die die Viskositätsverläufe  $\eta_i(D)$  in einem Kleinste-Quadrate-Fit für verschiedene kleine dimensionslose Scherratenbereiche  $\Delta I_i$  wiedergeben,  $\Delta\eta_{0.01,tr}$  prozentualer Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und trockenen Zustand,  $\Delta\eta_{0.01,0.4}$  prozentualer Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil

Scherratenbereich: $\Delta\dot{\gamma}_i$	Fit-Para. 1: $A_{1,i}$	Fit-Para. 2: $A_{2,i}$	Visk.-anstieg: $\Delta\eta_{0.01,tr}$	Visk.-anstieg: $\Delta\eta_{0.01,0.4}$
$I_1 = 0.0001 - 0.000125$	442.78	2451.25	55.4 %	7.2 %
$I_2 = 0.0002 - 0.00022$	383.10	1268.31	37.2 %	12.1 %
$I_3 = 0.0004 - 0.00045$	183.55	694.36	50.9 %	10.6 %
$I_4 = 0.0007 - 0.0008$	190.18	416.67	53.3 %	18.3 %
$I_5 = 0.001 - 0.0012$	95.82	291.30	36.6 %	13.1 %

Die Steigungen der Fit-Geraden wachsen tendenziell mit sinkender Scherrate. Die Werte der Geradensteigungen im  $\eta_i(D)$ -Plot für unterschiedliche kleine Scherratenbereiche (vgl. Tabelle 4.6) und für unterschiedliche kleine dimensionslose Scherratenbereiche (vgl. Tabelle 4.7) liegen in der gleichen Größenordnung. Geht man von einer konstanten Steigung der Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils über alle dimensionslosen Scherratenbereiche aus, so ergibt sich eine mittlere Steigung von  $\bar{A}_1 = 259.1 \Delta\eta/\Delta D$ . Um ein Gefühl für den Anstieg der Viskosität zu bekommen, ist auch hier neben den Fit-Parametern der prozentuale Anstieg der Viskosität gegenüber dem leicht feuchten ( $D_2 = 0.01$ ) und dem trockenen Zustand  $\Delta\eta_{0.01,tr}$ , als auch der prozentuale Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil ( $D_6 = 0.4$ )  $\Delta\eta_{0.01,0.4}$  angegeben. Es zeigt sich wie zuvor, dass der prozentuale Anstieg der Viskosität zwischen dem leicht feuchten und trockenen Zustand höher ausfällt, als zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem

höchsten Flüssigkeitsanteil. Ersterer bewegt sich zwischen  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 37.2\%$  bis  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 55.4\%$ , während letzterer zwischen  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 7.2\%$  und  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 18.3\%$  rangiert. Geht man auch hier von einem konstanten prozentualen Anstieg der Viskosität aus, so ergibt sich für den mittleren Anstieg zwischen dem trockenen und leicht feuchten Zustand ein Wert von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,tr} = 46.7\%$  und zwischen dem leicht feuchten und dem Zustand mit dem höchsten Feuchtigkeitsanteil ein Wert von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,0.4} = 12.3\%$ .

Abschließend wird die Auswirkung der Anwesenheit von Flüssigkeitsbrücken auf die Form der Scherbänder untersucht. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 4.15 die Scherrate als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen  $r$ - $z$  Querschnitt der Ringscherzelle, sowie die nach Gleichung (2.11) berechnete Form des Scherbandes für einen Flüssigkeitsanteil von  $D_3 = 0.05$  zu sehen.

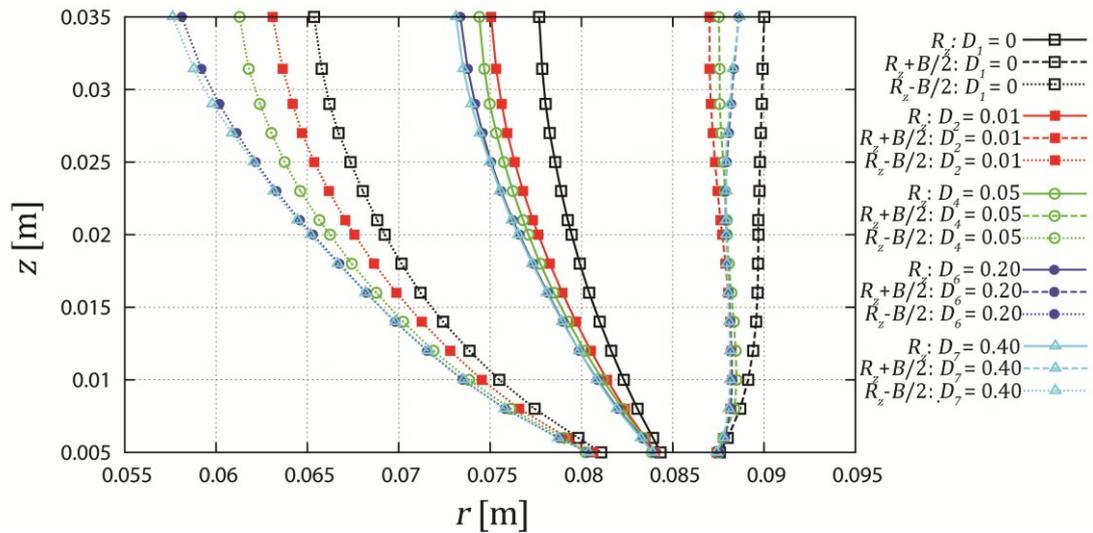


**Abbildung 4.15:** Scherrate als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen  $r$ - $z$  Querschnitt der Ringscherzelle für einen Flüssigkeitsanteil  $D_3 = 0.05$ , verschiedene Symbole geben unterschiedliche Scherraten an, wobei große Symbole hohe und kleine Symbole niedrige Scherraten repräsentieren, die Linien markieren den nach Gleichung (2.11) berechneten Bereich des Scherbandes

Erneut geben verschiedene Symbole unterschiedliche Scherrate an, wobei große Symbole hohe Scherraten und kleine Symbole niedrige Scherraten repräsentieren. Der Mittelpunkt des Scherbandes (durchgezogene, schwarze Linie) verläuft vom Boden, zur Oberfläche der Ringscherzelle und damit mit steigendem Abstand zur Hauptscherzone nach innen. Dabei bleibt die radiale Position  $R_{z,3} \approx 0.075$  m in Oberflächennähe nahezu konstant. Die Begrenzung des Scherbandes in radiale Richtung wird durch die gestrichelten Linien angegeben. Dabei wird deutlich, dass die Breite  $B_3$  des Scherbandes mit steigendem Abstand zur Hauptscherzone zunimmt und sich ab einer Höhe von  $h \approx 0.03$  m ein nahezu konstanter Wert von  $B_3 = 0.026$  m einstellt. Bezogen auf den

Partikeldurchmesser des Granulates entspricht dieser Wert einer Breite von  $B_3/d_p = 13.01$  Partikeldurchmessern. Diese Beobachtungen stimmen quantitativ mit anderen numerischen Ergebnissen [Luding 2008] und zu 80 % – 90 % mit experimentellen Daten überein [Fenistein 2004].

Im letzten Schritt sind in Abbildung 4.16 die nach Gleichung (2.11) berechneten Formen der Scherbänder als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen  $r$ - $z$  Querschnitt der Ringscherzelle, für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$  dargestellt.



**Abbildung 4.16:** Darstellung der nach Gleichung (2.11) berechneten Formen der Scherbänder als Funktion der radialen und vertikalen Position im ringsymmetrischen  $r$ - $z$  Querschnitt der Ringscherzelle, für verschiedene Flüssigkeitsanteile  $D_i$

Die Farbgebung der Graphen signalisiert den Flüssigkeitsanteil, bei dem sich die jeweilige Scherbandform ausgebildet hat und kann der Legende entnommen werden. Während die durchgezogenen Linien die Mittelpunkte der Scherbänder repräsentieren, geben die gestrichelten Linien die radialen Begrenzungen der Scherbänder an.

Qualitativ stimmen die Verläufe der Scherbänder für alle Flüssigkeitsanteile überein. Die Mittelpunkte  $R_{z,i}$  der Scherbänder bewegen sich mit steigendem Abstand zu Hauptscherzone nach innen und es stellt sich ab einer bestimmten Höhe jeweils ein konstanter Wert für die radiale Position ein. Ein ähnliches Verhalten kann für die Breite  $B_i$  der Scherbänder beobachtet werden. Wie zuvor nimmt die Breite jeweils vom Boden zur Oberfläche der Ringscherzelle zu und es stellt sich ab einer bestimmten Höhe ein konstanter Wert für die Breite ein.

Mit steigendem Flüssigkeitsanteil verlaufen die Mittelpunkte der Scherbänder stärker in Richtung des Inneren der Ringscherzelle. Dabei ist bemerkenswert, dass bereits

bei einem geringen Flüssigkeitsanteil von  $D_2 = 0.01$  ein starker Unterschied zum Scherbandverlauf im trockenen Zustand vorliegt. Hierbei beträgt die radiale Position des Scherbandes im trockenen Zustand  $R_{z,1} = 0.0777$  m, während sie im feuchten Zustand auf  $R_{z,2} = 0.0751$  m abfällt. Bei weiterer Erhöhung des Flüssigkeitsanteils verringert sich die radiale Position des Scherbandmittelpunktes kontinuierlich, bis sich bei einem Flüssigkeitsanteil von  $D_5 = 0.20$  eine Art Sättigungszustand einstellt. Dieser ist dadurch gekennzeichnet, dass bei weiterer Erhöhung des Flüssigkeitsanteils ( $D_6 = 0.40$ ) sowohl die radiale Position des Scherbandmittelpunktes, als auch die Breite des Scherbandes nahezu unverändert bleibt.

Die Scherbandbreite fällt für geringe ( $D_2 = 0.01$ ) Flüssigkeitsanteile leicht unterhalb der Scherbandbreite im trockenen Zustand und liegt im Bereich von ca. 12 Partikeldurchmessern. Mit steigendem Flüssigkeitsanteil nimmt die Scherbandbreite und damit der Bereich des Impulsaustausches zwischen den Teilchen kontinuierlich zu, bis sich bei  $D_5 = 0.20$  der zuvor beschriebene Sättigungszustand einstellt. Im Sättigungsbereich liegt die Scherbandbreite bei ca. 15.5 Partikeldurchmessern.

Tabelle 4.8 enthält eine Zusammenfassung der Mittelpunktpositionen  $R_{z,i}$ , Breiten  $B_i$  und die Breiten bezogen auf den Partikeldurchmesser  $B_i/d_p$  der Scherbänder an der Oberfläche der Ringscherzelle, für die verschiedenen untersuchten Flüssigkeitsanteile  $D_i$ .

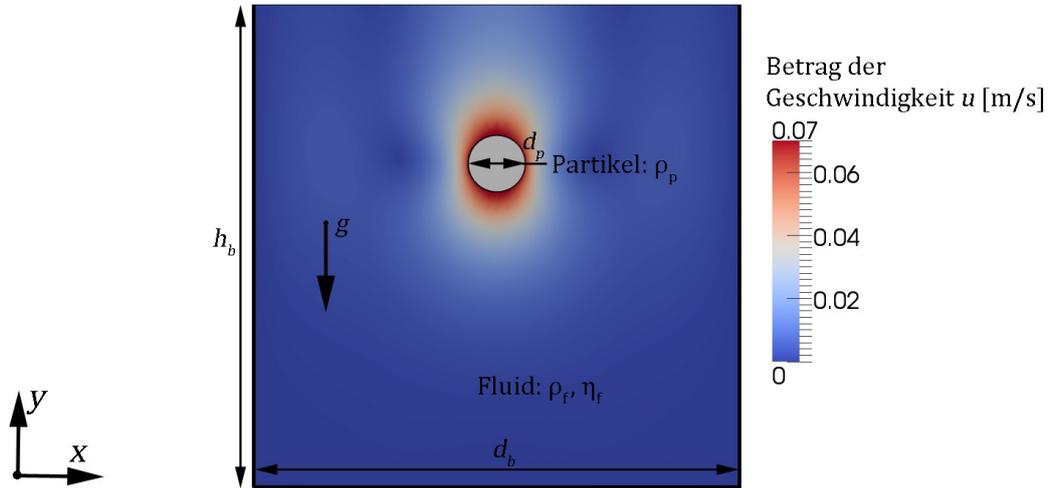
**Tabelle 4.8:** Zusammenfassung der Mittelpunktpositionen  $R_{z,i}$ , Breiten  $B_i$ , sowie die Breiten bezogen auf den Partikeldurchmesser  $B_i/d_p$  der Scherbänder an der Oberfläche der Ringscherzelle, für die verschiedenen untersuchten Flüssigkeitsanteile  $D_i$

Flüssigkeitsanteil: $D_i$	Radiale Mittelpunktsp.: $R_{z,i}$	Breite: $B_i$	Breite: $B_i/d_p$
$D_1 = 0.00$	0.0777 m	0.0246 m	12.32
$D_2 = 0.01$	0.0751 m	0.0239 m	11.96
$D_3 = 0.05$	0.0745 m	0.0260 m	13.01
$D_4 = 0.10$	0.0741 m	0.0272 m	13.61
$D_5 = 0.20$	0.0734 m	0.0305 m	15.25
$D_6 = 0.40$	0.0731 m	0.0310 m	15.52

Alle erforderlichen Eingabedateien zur Durchführung der verschiedenen Ringscherzellensimulationen sind auf der dieser Arbeit beigelegten CD enthalten (*Simulations/Ring\_Shear\_Cell*).

### 4.3 Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung

In der Testsimulation soll die aufgelöste CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® validiert werden. Der Aufbau der Testsimulation ist in Abbildung 4.17 dargestellt.

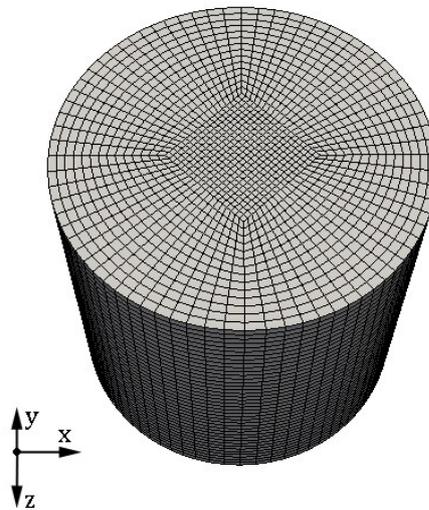


**Abbildung 4.17:** Aufbau der Testsimulation zur Validierung der CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®, Grau: Sedimentierendes Partikel, Blau-Rot: Fluid, Einfärbung des Fluides in Abhängigkeit vom Betrag der Geschwindigkeit

Ein einzelnes kugelförmiges Partikel (Grau) mit dem Durchmesser  $d_p$  und der Dichte  $\rho_p$  befindet sich in einem begrenzten, nach oben geöffneten, zylinderförmigen Behälter, der mit einem newtonschen Fluid (Blau-Rot), mit der Dichte  $\rho_f$  und der dynamischen Viskosität  $\eta_f$ , gefüllt ist. Die Abmessungen des Behälters können mit dem Durchmesser  $d_b$  und der Höhe  $h_b$  beschrieben werden.

Das Teilchen befindet sich zum Beginn der Simulation im Ruhezustand, sodass alle Geschwindigkeitskomponenten  $u$  den Wert 0 haben. Durch die Erdbeschleunigung, die in negative  $y$ -Richtung wirkt, startet das Teilchen zu sedimentieren. Der Betrag der Teilchengeschwindigkeit in  $y$ -Richtung steigt an, bis sich ein Gleichgewicht zwischen der Erdanziehungskraft und der auf das Partikel wirkenden Widerstandskraft einstellt. Nach dem Erreichen des Gleichgewichtes sedimentiert das Partikel mit der stationären Sinkgeschwindigkeit  $u_s^*$ . Dieser Zustand ist in Abbildung 4.17 dargestellt, wobei die Einfärbung des Fluides proportional zum Betrag der Geschwindigkeit ist.

In Abbildung 4.18 ist das für die Validierungssimulationen verwendete CFD-Gitter zu sehen.



**Abbildung 4.18:** Darstellung des für die Validierungssimulationen verwendeten CFD-Gitters

Das CFD-Gitter besteht aus fünf Teilbereichen. Im Inneren befindet sich ein Quader, der von vier gleichen Teilzylindern umgeben ist, die jeweils ein Kreissegment als Grundfläche haben. Während der Simulation befindet sich das Partikel ausschließlich im Quader des CFD-Gitters, sodass für diesen eine höhere Gitterauflösung gewählt wird. Im Ausgangszustand wird das Partikel von 44 ( $Re = 0.04$ ) bis 148 ( $Re = 0.5$ ) Gitterzellen repräsentiert. Zur ausreichend hohen räumlichen Auflösung des Partikels (vgl. Kap. 2.2.2) wird eine 2-fach dynamische Verfeinerung des CFD-Gitters in Bereichen des Partikels durchgeführt (vgl. Kap. 3.2.3), sodass dieses nach der Gitteranpassung durch ca. 3100 ( $Re = 0.04$ ) bis 10400 ( $Re = 0.5$ ) Gitterzellen aufgelöst wird.

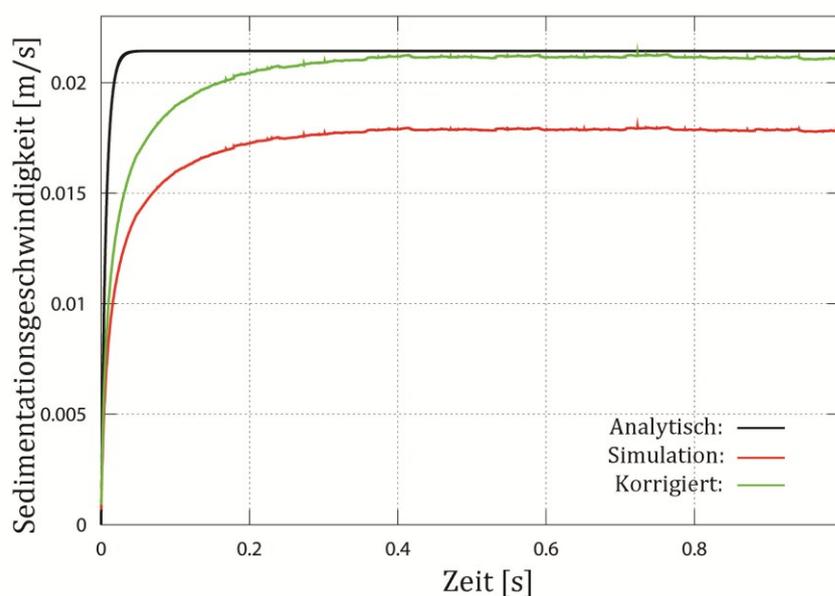
Die geometrischen Abmessungen des Behälters und des Partikels, sowie alle weiteren Simulationsparameter können aus Tabelle 4.9 entnommen werden.

**Tabelle 4.9:** Zusammenfassung der geometrischen Abmessungen und Simulationsparameter zur Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM®

Größe	Wert	Größe	Wert
Behälterhöhe: $h_b$	0.5 m	Behälterdurchm.: $d_b$	0.5 m
Fluiddichte: $\rho_f$	1 kg/m <sup>3</sup>	Partikeldichte.: $\rho_p$	1.5 kg/m <sup>3</sup>
Partikeldurchm. ( $Re = 0.04$ ): $d_p$	0.04 m	Partikeldurchm. ( $Re = 0.5$ ): $d_p$	0.06 m
Fluidviskosität ( $Re = 0.04$ ): $\eta_f$	$2.0 \cdot 10^{-2} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	Fluidviskosität ( $Re = 0.5$ ): $\eta_f$	$1.05 \cdot 10^{-2} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
Zeitschrittweite: $\Delta t$	$5 \cdot 10^{-5} \text{ s}$	Erdbeschleunigung: $g$	9.81 m/s

Die Kopplung zwischen dem CFD- und DEM-Löser wird zu jedem Zeitschritt durchgeführt, wobei die Zeitschrittweite so gewählt wurde, dass keine Zeitschrittweitenabhängigkeit der Ergebnisse besteht. Neben der Zeitschrittweite, dem Durchmesser des Partikels und der Dichte des Teilchens, werden keine weiteren Informationen, wie die Federkonstante in Normalrichtung, usw. für die DEM-Berechnungen benötigt, da kein Kontakt des Partikels stattfindet. Die Einstellungen in OpenFOAM® zur Orts- und Zeitdiskretisierung der Erhaltungsgleichungen, sowie die verwendeten Löser zur Bestimmung des Druckfeldes, usw. können im Anhang auf Seite 87 gefunden werden.

In Abbildung 4.19 ist die Sedimentationsgeschwindigkeit des Teilchens als Funktion der Zeit, im Vergleich mit der nach Gleichung (2.28) berechneten zeitabhängigen Sedimentationsgeschwindigkeit für die Reynoldszahl  $Re = 0.04$  dargestellt.



**Abbildung 4.19:** Rot: Sedimentationsgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens als Funktion der Zeit für die Reynoldszahl  $Re = 0.04$ , Grün: Nach Gl. (2.30) korrigierte Sedimentationsgeschwindigkeit, Schwarz: Analytische Sedimentationsgeschwindigkeit nach Gl. (2.28)

Die angegebene Reynoldszahl bezieht sich auf die Reynoldszahl, die sich beim Erreichen der stationären Sedimentationsgeschwindigkeit einstellt. Somit kann der Strömungszustand in das Stokesche Strömungsregime ( $Re \leq 0.3$ ) eingeordnet werden (vgl. Kap. 2.2.3). Der rote Graph stellt den zeitlichen Verlauf der Simulationsergebnisse dar. Da die Simulation in einem endlichen Behälter durchgeführt wird, werden die Simulationsdaten unter Berücksichtigung des Wandinflusses (vgl. Kap. 2.2.3) korrigiert (grüner Graph). Die analytische Lösung ist schwarz eingefärbt.

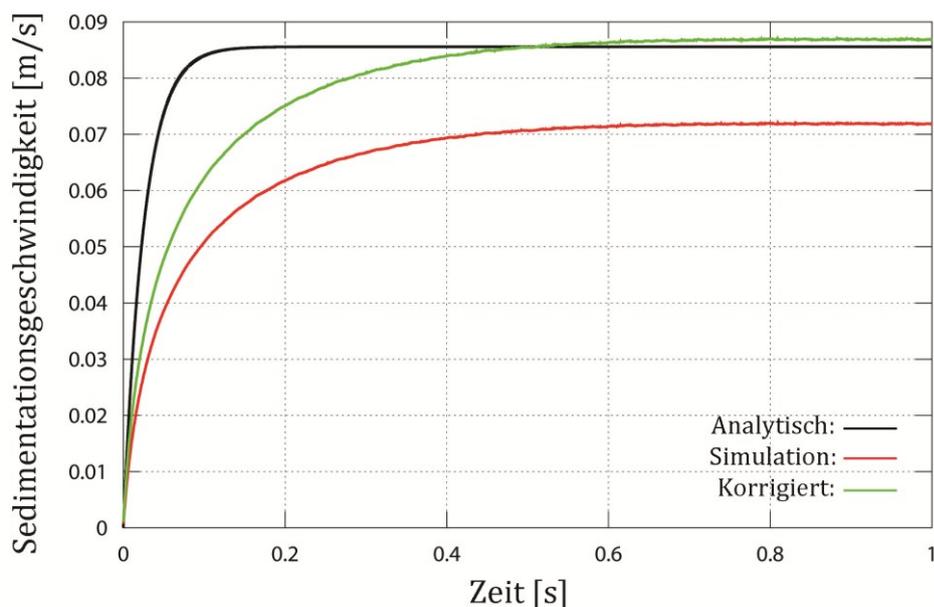
Wie zu erwarten, steigt die Sedimentationsgeschwindigkeit zunächst stark an und nähert sich anschließend asymptotisch der stationären Sinkgeschwindigkeit. Die korri-

gierten Simulationsdaten zeigen für die stationäre Sinkgeschwindigkeit gute Übereinstimmungen mit der analytischen Lösung. Die Abweichung zur analytischen Lösung ist ab dem Zeitpunkt  $t = 0.4$  s nahezu konstant und beträgt im Mittel 1.3 % bezogen auf die analytische, stationäre Sedimentationsgeschwindigkeit.

Gegenüber der stationären Lösung zeigen sich signifikante Abweichungen des dynamischen Verhaltens. Während die analytische Lösung die stationäre Sinkgeschwindigkeit bereits nach ca.  $t = 0.03$  s erreicht, stellt sich dieser Zustand in der Simulation erst nach ca.  $t = 0.4$  s ein. Dementsprechend benötigt das Partikel in der Simulation ca. 13-mal mehr Zeit um den stationären Zustand zu erreichen, als es nach der analytischen Lösung zu erwarten wäre. Die Ursache für den zeitlich abweichenden Verlauf liegt darin, dass die auf das Partikel wirkende Widerstandskraft zu schnell ansteigt.

Weiterhin kann beobachtet werden, dass die Simulationsdaten ein leichtes hochfrequentes Rauschen aufweisen. Diese Erscheinung kann auf das Rauschen des Impulsaustauschterms zurückgeführt werden, welches typisch für die „Fictitious Domain Method“ ist (vgl. Kap. 3.2.5). Das Rauschen kann jedoch mit geeigneten Filtermethoden reduziert werden [Shirgaonkar 2009].

Zur weiteren Validierung ist in Abbildung 4.20 die Sedimentationsgeschwindigkeit eines Teilchens als Funktion der Zeit, im Vergleich mit der nach Gleichung (2.28) berechneten zeitabhängigen Sedimentationsgeschwindigkeit für die Reynoldszahl  $Re = 0.5$  dargestellt.



**Abbildung 4.20:** Rot: Sedimentationsgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens als Funktion der Zeit für die Reynoldszahl  $Re = 0.5$ , Grün: Nach Gl. (2.31) korrigierte Sedimentationsgeschwindigkeit, Schwarz: Analytische Sedimentationsgeschwindigkeit nach Gl. (2.28)

Erneut bezieht sich die angegebene Reynoldszahl auf die Reynoldszahl, die sich beim Erreichen der stationären Sedimentationsgeschwindigkeit einstellt. Damit ist die Simulation im anfänglichen Übergangsbereich ( $0.3 < Re \leq 500$ ) angesiedelt (vgl. Kap. 2.2.3). Die Farbgebung ist identisch mit der in Abbildung 4.19 beschriebenen Darstellung.

Sowohl die analytische Lösung, als auch die Simulationsdaten erreichen gegenüber den Ergebnissen für  $Re = 0.04$  zu einem späteren Zeitpunkt den stationären Zustand. Während die analytische Lösung die stationäre Sinkgeschwindigkeit nach ca.  $t = 0.15$  s erreicht, benötigt das Partikel in der Simulation ca.  $t = 0.6$  s. Damit wird der zeitliche Verlauf wieder qualitativ reproduziert, jedoch braucht das Teilchen in der Simulation ca. 4-mal länger als die analytische Lösung erwarten lässt.

Wie zuvor zeigen die korrigierten Simulationsdaten für die stationäre Sinkgeschwindigkeit gute Übereinstimmungen mit der analytischen Lösung. Die Abweichung zur analytischen Lösung ist ab dem Zeitpunkt  $t = 0.6$  s nahezu konstant und beträgt im Mittel 1.4 % bezogen auf die analytische, stationäre Sedimentationsgeschwindigkeit.

Bei der Beurteilungen der Abweichung zur analytischen Lösung muss berücksichtigt werden, dass die analytische Lösung selbst eine Näherungsformel als Grundlage hat. Außerdem sind die Formeln zur Berechnung des Wandeinflusses mit Fehlern behaftet.

In dem dieser Arbeit zugrunde liegenden technischen Prozess des Pelletiertellers werden Reynoldszahlen, für die sich durch das feine Pulver bewegenden Pellets erwartet, die unterhalb von  $Re = 0.5$  liegen. Damit konnte gezeigt werden, dass sich das zwischen LIGGGHTS und OpenFOAM® realisierte, aufgelöste CFD-DEM-Kopplungsverfahren eignet, um stationäre Bewegungsvorgänge in diesem Reynoldszahlenbereich mit hoher Genauigkeit zu beschreiben. Dynamische Vorgänge sind mit Fehlern behaftet, deren Ursachen zu ergründen und korrigieren sind, sofern diese bei der Simulation der technischen Anwendung von Bedeutung sind.

Die erforderlichen Eingabedateien zur Durchführung der Validierungssimulationen sind auf der dieser Arbeit beigefügten CD enthalten (*Simulations/Coupling\_Validation*).

## 5 Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die theoretischen Grundlagen zur Berechnung von Flüssigkeitsbrücken in leicht feuchten Partikelsystemen und zur Kopplung von CFD-DEM-Simulationen gesammelt und einige ausgewählte Methoden vorgestellt. Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Ansätze wurden diskutiert. Anschließend wurden Modelle ausgewählt, von denen ausgegangen wird, dass sie die geeignete Grundlage für die zukünftige, räumlich und zeitlich aufgelöste Simulation der Partikelströmung im Pelletierteller, der den technischen Hintergrund dieser Arbeit darstellt, bilden.

Anschließend wurde ein explizites Berechnungsverfahren zur Berechnung der Flüssigkeitsbrückenkraft in leicht feuchten Granulaten entwickelt. Das neue DEM-Kontaktmodell wurde in dem Open Source Programm LIGGGHTS implementiert und beinhaltet den vollen Funktionsumfang von LIGGGHTS, wozu die Verwendung eines Eingabe-Scripts und die Parallelisierung mittels MPI gehören. Alle Änderungen wurden dokumentiert und die Verwendung der neuen Befehle zusammengefasst.

Das Flüssigkeitsbrückenmodell wurde für den einfachen Fall von sich zwei im Kontakt befindlichen Teilchen validiert. Zu diesem Zweck wurden die Simulationsdaten der Flüssigkeitsbrückenkraft während der Trennung der Teilchen, mit der Lösung der empirischen Näherungsgleichung (2.8) von Willet et al. [Willet 2000] verglichen. Die Validierung beschränkt sich auf Grund des Gültigkeitsbereich der Berechnungsgleichungen auf einen Sättigungsgrad von  $S = 0.065$  des Partikelsystems und einem Kontaktwinkelbereich von  $\theta = 0^\circ$  bis  $\theta = 20^\circ$ . Im Rahmen dieses Anwendungsbereiches beträgt die mittlere Abweichung der Simulationsdaten gegenüber den Vergleichsdaten weniger als 18.26 %, wobei die größten Abweichungen für einen Kontaktwinkel von  $\theta = 0^\circ$  beobachtet wurden. Im Hinblick auf den Fehler der Näherungsgleichung (2.8) und den Messfehlern auf deren Grundlage diese abgeleitet wurde [Willet 2000], werden diese Ergebnisse als gute Näherung betrachtet.

Darüber hinaus wurde das neu implementierte Flüssigkeitsbrückenmodell verwendet, um die makroskopischen Stoffeigenschaften eines feuchten Granulates in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil zu bestimmen. Zu diesem Zweck wurde das von Lätzel et al. [Lätzel 2001] vorgestellte Mittelungsverfahren, in Verbindung mit einer Ringscherzellensimulation verwendet, um Raum- und Zeitgemittelte Tensorgrößen, wie den Spannungstensor, im granularen Medium zu bestimmen. Zur Validierung des Statistik- und Simulationsverfahrens wurden die Simulationsdaten für das trockene Granulat mit vorhandenen Referenzdaten [Luding 2008] [Singh 2010] verglichen. Dabei wurden gute

Übereinstimmungen gefunden, sodass von einer ordnungsmäßigen Funktionsweise des Statistikverfahrens und des Programmcodes bei vollständiger Parallelisierung ausgegangen wird.

Darauf folgend wurden die Simulationen des feuchten Partikelsystems ausgewertet. Dabei ergibt sich sowohl für den trockenen, als auch für den feuchten Zustand oberhalb einer Grenzscherate von  $\dot{\gamma}_c \approx 0.02$  1/s ein linearer Zusammenhang zwischen der Scherspannung  $\tau$  und dem Druck  $p$  im Partikelsystem, wobei für kleine  $p < 100$  N/m<sup>2</sup> und große Drücke  $p > 350$  N/m<sup>2</sup> eine leichte Abweichung von diesem Zusammenhang zu erkennen ist. Die Steigungen der Geraden, auf denen die Daten jeweils kollabieren, korrespondieren mit dem makroskopischen Reibungswinkel  $\psi$  nach Mohr. Das feuchte Granulat weist einen vom Flüssigkeitsanteil nahezu unabhängigen Reibungswinkel von  $\psi = 9.8^\circ$  auf, wohin gegen der Reibungswinkel des trockenen Granulates  $\psi = 8.0^\circ$  beträgt. Demnach erhöhen die kohäsiven Eigenschaften der Flüssigkeitsbrücken den Reibungswinkel des Partikelsystems. Darüber hinaus sind die Geraden der feuchten Partikel in der  $\tau(p)$ -Darstellung um den Betrag  $\tau_0$  in positive Scherratenrichtung (Ordinatenrichtung) verschoben, während die Simulationsergebnisse der trockenen Partikel auf einer Ursprungsgerade liegen. Die Verschiebung nimmt dabei mit wachsendem Flüssigkeitsanteil zu und liegt zwischen  $\tau_{0,2} = 11$  Nm für den niedrigsten betrachteten Flüssigkeitsanteil ( $D_2 = 0.01$ ) und  $\tau_{0,5} = \tau_{0,6} = 17$  Nm für die höchsten betrachteten Flüssigkeitsanteile ( $D_5 = 0.2, D_6 = 0.4$ ). Das feuchte Granulat ist damit in der Lage, bei gleichem Druck, höhere Scherspannungen zu übertragen, wobei diese Eigenschaft mit wachsendem Flüssigkeitsanteil zunimmt, bis sich bei einem Flüssigkeitsanteil von  $D_5 = 0.2$  eine Sättigung einstellt, bei der nur noch eine kleine Änderung der  $\tau(p)$ -Abhängigkeit zu beobachten ist.

In der Auswertung der Viskositätsverläufe wird zwischen dem scherratenkontrollierten und scherspannungskontrollierten Regime unterschieden. Ersteres zeichnet sich dadurch aus, dass die Viskosität  $\eta$  im Wesentlichen eine Funktion der Scherrate  $\dot{\gamma}$  ist, während im zweiten Regime die Viskosität überwiegend vom Druck  $p$  kontrolliert wird. In der Darstellung der Viskosität als Funktion der dimensionslosen Scherrate  $I$  sind diese Regime deutlich für das trockene Partikelsystem zu beobachten. Die beiden Bereiche liegen in der doppelt logarithmischen  $\eta(I)$ -Darstellung auf Geraden mit unterschiedlichen Steigungen. Dadurch, dass die Scherspannungs-Druckverläufe des feuchten Granulates um einem Betrag  $\tau_0$  in positive Scherspannungsrichtung verschoben sind, können diese beiden Bereiche in der  $\eta(I)$ -Darstellung für das feuchte Granulat

nicht mehr erkannt werden. Dementsprechend liegen alle Daten des feuchten Granulates auf einer einzigen Geraden.

Sowohl in dem Verlauf der Viskosität als Funktion der dimensionslosen Scherrate  $I$ , als auch als Funktion der Scherrate  $\dot{\gamma}$ , liegen die Viskositätswerte des feuchten Granulates oberhalb des trockenen Partikelsystems. Dabei ist erstaunlich, dass es bei konstanter dimensionslosen Scherrate, bzw. bei konstanter Scherrate einen großen Unterschied zwischen dem leicht feuchten Granulat ( $D_2 = 0.01$ ) und dem trockenen Granulat (prozentuale Abweichung von  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 24.8\%$  bis  $\Delta\eta_{0.01,tr} = 73.9\%$ ), gibt, während bei weiterer Erhöhung des Flüssigkeitsanteils nur eine vergleichsweise geringe Abhängigkeit der Viskosität vom Flüssigkeitsanteil beobachtet werden kann (prozentuale Abweichung von  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 4.8\%$  bis  $\Delta\eta_{0.01,0.4} = 20.4\%$ ). Die Änderung der Viskosität in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil liegt für unterschiedliche konstante Scherraten (kleine Scherratenbereich), bzw. für unterschiedliche konstante dimensionslose Scherraten (kleine dimensionslose Scherratenbereiche) in der gleichen Größenordnung, wobei die Relation zwischen der Viskosität und dem Flüssigkeitsanteil für sinkende Scherraten zu steigen scheint. Geht man von einer konstanten Steigung der Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils über alle Scherratenbereiche, bzw. über alle dimensionslose Scherratenbereiche aus, so ergibt sich eine mittlere Steigung von  $\bar{A}_1 = 301.3 \Delta\eta/\Delta D$  für die betrachteten Scherratenbereiche, bzw. eine mittlere Steigung von  $259.1 \Delta\eta/\Delta D$  für die betrachteten dimensionslosen Scherratenbereiche. Nimmt man auf der anderen Seite eine konstante prozentuale Steigung der Viskosität als Funktion des Flüssigkeitsanteils über alle Scherratenbereiche, bzw. über alle dimensionslose Scherratenbereiche an, so ergibt sich eine mittlere prozentuale Steigung von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,tr} = 49.4\%$  (zwischen trocken und leicht feucht) und  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,0.4} = 14\%$  (zwischen leicht feucht und stark feucht) für die betrachteten Scherratenbereiche, bzw. eine mittlere prozentuale Steigung von  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,tr} = 46.7\%$  (zwischen trocken und leicht feucht) und  $\Delta\bar{\eta}_{0.01,0.4} = 12.3\%$  (zwischen leicht feucht und stark feucht) für die betrachteten dimensionslosen Scherratenbereiche.

Es bleibt in weiteren Simulationen zu zeigen, ob die Annahme einer konstanten Steigung der Viskosität über alle Scherratenbereiche, die Annahme eines konstanten prozentualen Anstieges über alle Scherratenbereiche, oder keine dieser beiden Annahmen zutreffend ist.

Der Flüssigkeitsanteil im Granulat hat ebenfalls einen Einfluss auf die Form der sich in der Ringscherzelle ausbildenden Scherbänder, welche mit dem Fit der universellen

Profilfunktion [Fenistein 2003] bestimmt wurden. Die Mittelpunkte der Scherbänder verschieben sich mit steigendem Abstand zur Hauptscherzone zum Mittelpunkt der Scherzelle, wobei diese Verschiebung in der Nähe der Hauptscherzone zunächst schnell und mit steigendem Abstand langsamer geschieht. In Oberflächennähe ( $h \approx 0.03$  m) sind die radialen Position der Scherbandmittelpunkte nahezu konstant. Die Verschiebung verstärkt sich mit wachsenden Flüssigkeitsanteil, sodass die radiale Position des Scherbandmittelpunktes für das trockene Granulat  $R_{z,1} = 0.0777$  m und für den höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil ( $D_6 = 0.4$ )  $R_{z,6} = 0.0731$  m beträgt. Ab einem Flüssigkeitsanteil von  $D_5 = 0.2$  stellt sich ein Sättigungszustand ein, sodass sich die Form der Scherbänder für  $D_5 = 0.2$  und  $D_6 = 0.4$  nahezu nicht unterscheiden.

Die Breite der Scherbänder nimmt mit steigendem Abstand zur Hauptscherzone ebenfalls zu. Dabei nimmt die Breite in der Nähe der Hauptscherzone zunächst schnell und mit steigendem Abstand langsamer zu. Auch hier bleibt die Breite in Oberflächennähe ( $h \approx 0.03$  m) nahezu konstant. Die Scherbandbreite nimmt mit steigendem Flüssigkeitsanteil im Granulat zu, bis sich ab einem Flüssigkeitsanteil von  $D_5 = 0.2$  der zuvor beschriebene Sättigungszustand einstellt. Für den trockenen Zustand beträgt die Scherbandbreite 0.0246 m, was bezogen auf den Partikeldurchmesser einer Breite von 12.32 Partikeldurchmessern entspricht. Die Breite erreicht für den höchsten untersuchten Flüssigkeitsanteil von  $D_6 = 0.4$  einen Wert von 0.0310 m, was bezogen auf den Partikeldurchmesser einer Breite von 15.52 Partikeldurchmesser entspricht.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde das räumlich aufgelöste CFD-DEM Kopplungsverfahren zwischen den Open Source Programmen OpenFOAM und LIGGGHTS untersucht. Dieses ist identisch mit dem von Shirgaonkar et al. [Shirgaonkar 2009] vorgestelltem Verfahren und basiert auf der „Fictitious Domain Method“ [Patankar 1999]. Die CFD-DEM-Kopplung befindet sich zum Zeitpunkt dieser Arbeit im Beta-Status, sodass Anpassungen und Korrekturen am bestehenden Programmcode durchgeführt wurden. Die Bedienung, der Ablauf und die zugrunde liegenden Berechnungsgleichung des Kopplungsverfahrens wurden vorgestellt und dokumentiert.

Darüber hinaus wurde das Kopplungsverfahren für den einfachen Fall eines einzelnen, unter Gravitationswirkung sedimentierenden Teilchens validiert. Dabei wird das Teilchen aus dem Ruhezustand auf die stationäre Sinkgeschwindigkeit beschleunigt. Die Simulationsdaten wurden unter Berücksichtigung des Wandeinflusses des umschließenden Behälters korrigiert [Francis 1933] [Ataíde 1999] und mit dem zeitlichen Verlauf von geeigneten analytischen Lösungen verglichen [Haider 1989]. Dabei wurden

in einem Reynoldszahlenbereich von  $Re = 0.04$  bis  $Re = 0.5$  gute Übereinstimmungen mit der stationären Sinkgeschwindigkeit der Vergleichsdaten gefunden, wobei die Mittlere Abweichung weniger als 1.4 % bezogen auf die analytische Lösung beträgt. Während des Beschleunigungsvorganges gibt es größere Abweichung, da die Widerstandskraft in der Simulation schneller ansteigt, als die analytischen Lösungen vorhersagen. Daraus resultiert in der Simulation eine um den Faktor 13 ( $Re=0.04$ ), bis 4 ( $Re=0.5$ ) längere Zeit zum Erreichen der stationären Sinkgeschwindigkeit. Die Abweichungen im dynamischen Bereich sind nicht geklärt und bedürfen weiterer Untersuchungen. Der betrachtete Reynoldszahlenbereich entspricht dem im Pelletierteller zu erwartenden Reynoldszahlenbereich für die sich durch das feine Pulver bewegenden Pellets, sodass die Eignung des Verfahrens zur Simulation der gekoppelten Fluid-Partikelströmung im Pelletierteller nachgewiesen wurde, sofern die Abweichungen für die dynamischen Vorgänge vernachlässigbar sind.

Der Programmcode der modifizierten LIGGGHTS-Version und des CFD-DEM-Kopplungsverfahrens, inklusive Installationsanweisungen für ein Ubuntu-Betriebssystem sind auf der dieser Arbeit beigelegten CD enthalten. Außerdem sind sämtliche Eingabedateien zur Ausführung der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen, sowie Dokumentationen zur Ausführung dieser Simulationen auf der CD zu finden.

## 6 Ausblick

Das entwickelte Verfahren zur Modellierung von Flüssigkeitsbrücken in granularen Medien bietet mehrere Ansatzpunkte zur Weiterentwicklung. So werden im aktuellen Modell keine viskosen Kräfte in den Flüssigkeitsbrücken berücksichtigt, die vor allem bei Flüssigkeiten mit hohen Viskositäten, oder bei hohen Relativgeschwindigkeiten im granularen Medium eine Rolle spielen. Außerdem wird der Einfluss des von den Partikeln transportierten Flüssigkeitsvolumens auf den effektiven Partikeldurchmesser und auf die Masse der Partikel vernachlässigt. Dieser Effekt sollte beachtet werden, falls Simulationen mit Einzelkontakten zwischen Partikeln durchzuführen sind, bzw. wenn ein nicht vernachlässigbarer Einfluss der Flüssigkeitsmasse auf die Simulationsergebnisse zu erwarten ist.

Die Diskontinuität des Kontaktkraftverlaufes bei der Trennung und beim Neukontakt von Partikeln resultiert möglicherweise in Energiespitzen des zeitlichen Energieverlaufes von gescherten granularen Materialien. Die Diskontinuität basiert auf der unphysikalischen Annahme, dass sich Flüssigkeitsbrücken sofort vollständig ausbilden. Um diesen Effekt abzuschwächen und näher an den realen physikalischen Vorgängen bei der Flüssigkeitsbrückenausbildung zu gelangen, sollten geeignete Ansätze gefunden werden. Im Hinblick auf die Simulation von realen granularen Strömungen, speziell für technische Anwendungen, sollte das bestehende Flüssigkeitsbrückenmodell für die Berechnung von polydispersen Partikelsystemen ausgebaut werden. Außerdem deuten experimentelle Untersuchungen an [Schwarze 2008], dass die Flüssigkeit in granularen Materialien für niedrige Scherratenbereiche einen „Schmiereffekt“ bewirkt, der den Reibkoeffizienten zwischen den Partikeln reduziert. Diese Wirkung wird im vorgestellten Flüssigkeitsbrückenmodell ebenfalls nicht beachtet, sodass weitere Anpassungen notwendig sind. Abschließend sollte das vorgestellte Modell mit experimentellen Daten validiert werden, indem zum Beispiel die makroskopischen Stoffeigenschaften der DEM-Berechnungen mit vorhanden, experimentell bestimmten Stoffeigenschaften verglichen werden.

Zur Simulation der Partikelströmung im Pelletierprozess ist es notwendig die freie Oberfläche des feinen Pulvers zu berechnen. Das aktuelle CFD-DEM-Kopplungsverfahren deckt diese Eigenschaft nicht ab, sodass in diesem Bereich weitere Anpassungen erforderlich sind. Zudem hat sich bei der Validierung der aufgelösten CFD-DEM-Kopplung gezeigt, dass instationäre Vorgänge in der Fluid-Festkörperwechselwirkung nur ungenau beschrieben werden können. Sofern diese

---

Erscheinungen einen wesentlichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben, sollte die Ursache für diese Abweichungen gefunden und korrigiert werden.

## 7 Literaturverzeichnis

- Ataíde, C. H. Pereira, C. H. Barrozo, M. A. S. *Wall effects on the terminal velocity of spherical particles in Newtonian and non-Newtonian fluids*. São Paulo: Braz. J. Chem. Eng. Vol.16(4), 1999.
- Beetstra, R., van der Hoef, M. A., Kuipers, J. A. M. *Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice Boltzmann simulations*. Enschede: Chem. Eng. Sci. 62, S. 246 - 255 , 2007.
- Bollrich, G. *Technische Hydromechanik 1 - Grundlagen*. : Verlag Bauwesen, ISBN 3-345-00912-9, 2007.
- Bridgewater, J. *Fundamental powder mixing mechanisms*. Powder Technology 15(2), S. 215-235, 1976.
- Bridgewater, J. *Mixing and segregation mechanisms in particle flow (In: Granular Matter A. Metha (Ed.) 161195*. Springer-Verlag, 1993.
- Cundall, P. A., Stack, O. D. L. *A discrete numerical model for granular assemblies*. : Geotechnique 29, S. 47-65, 1979.
- Dahl, S. R., Hrenya, C. M. *Size Segregation In Rapid, Granular Flows With Continuous Size Distributions*. : Physics of Fluids 16(1), 2004.
- Duran, J. *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials*. Berlin: Springer-Verlag, 1999.
- Erle, M. A., Dyson, D. C., Morrow, N. R. *Liquid bridges between cylinders, in a torus, and between spheres*. : A.I.Ch.E. J. 17, S. 115, 1971.
- Felice, Di. *The void function for fluid-particle interaction systems*. Genova: Int. J. of Multiphase Flow Vol. 20, S. 153-159, 1994.
- Feng, C. L., Yu, A. B. *Effect of Liquid Addition on the Packing of Mono-Sized Coarse Spheres*. : Powder Technol. 99(22), 1998.
- Fenistein, D., M. van Hecke. *Kinematics – wide shear zones in granular bulk flow*. Nature 425 (6955), S. 256, 2003.

- Fenistein, D., Van de Meent, J. W., Van Hecke, M. *Universal and wide shear zones in granular bulk flow.* : Phys. Rev. Lett. 92, 094301 e-print cond-mat/0310409, 2004.
- Ferziger, J. H., Peric, M. *Numerische Strömungsmechanik.* Berlin: Springer-Verlag, 2002.
- Fidleris, V., Whitmore, R. L. *Experimental Determination of Wall Effect for Spheres Falling Axially in Cylindrical Vessels.* : British Journal of Applied Physics, vol. 12, pp. 490-494, 1961.
- Fisher, R. A. *On the capillary forces in an ideal soil: Correction of formulae given by Haines, W. B., Agric, J.* Cambridge University Press: Agric. J. Sci. 16, 1926.
- Francis, A. W. *Wall effects in falling ball method for viscosity.* Cambridge: Physics, 4, S. 403, 1933.
- Goniva, C., Kloss, C., Hager, A. and Pirker, S. *An Open Source CFD-DEM Perspective.* Göteborg: Proc. of OpenFOAM Workshop, 2010.
- Gray, J. M. N. T., Thornton, A. R. *A theory for particle size segregation in shallow granular free-surface flows.* : Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences 461(2057), S. 1447-1473, 2005.
- Hager, A., Kloss, C., Pirker, S., Goniva, C. *Efficient realization of a resolved CFD-DEM method within an open source framework.* Linz: Johannes Kepler University, 2011.
- Haider, A., Levenspiel, O. *Drag coefficient and terminal velocity of spherical and non-spherical particles.* Corvallis: Powder Technology, 58, S. 63-70, 1989.
- Herminghaus, S. *Dynamics of wet granular matter.* Göttingen: Advances in Physics, 54:3, S. 221-261, 2005.
- Herrmann, J. H., Hovi, J. P., Luding, S. (eds.). *Physics of dry granular media.* Dordrecht: NATO-ASI Series E 350, Kluwer academic publishers, 1998.
- Hill, R. J., Koch, D. L., Ladd, J. C. *The first effects of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres.* Cambridge: J. of Fluid MEchanics, 448, S. 213-241, 2001.

- Hotta, K., Takeda, K., Inoya, K. *The capillary binding force of a liquid bridge*. Kyoto University: Powder Technol. 10, S. 231-242, 1974.
- Jaques, M. T., Horarongkura, A. D., Henry, J. D. *Feasibility of separation processes in liquid-liquid solid systems: free energy and stability analysis*. : A.I.Ch.E. J. 25(1), S. 160, 1979.
- Kanarska, Y. *Mesoscale simulations of particulate flows with parallel distributed Lagrange multiplier technique*. Tampa: ICMF 2010, 2010.
- Kishino, Y. *Powders & Grains*. Rotterdam: Balkema, 2001.
- Lampke, J. P., Silge, S. *Aufbauagglomeration mit Pelletiertellern - ein bedeutender Prozess in Zeiten weltweit steigender Eisenerznachfrage*. : Aufbereitungstechnik 49(8), S. 4-14, 2008.
- Lätzel, M., Luding, S., Herrmann, H. J. *Macroscopic material properties from quasi-static, microscopic simulations of a two-dimensional shear-cell*. : Granular Matter, 2(3), S. 123-125, e-print cond-mat/0003180, 2001.
- Lian, G., Thornton, C., Adams, M. J. *A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies*. Aston University: J. Colloid Interface Sci. 161, S. 138-147, 1993.
- Luding, S. *Collisions & Contacts between two particles*. Dordrecht: Physics of dry granular Media, eds. H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, Kluwer Academic Publishers, 1998.
- Luding, S. *Micro-macro models for anisotropic granular media*. Leiden: Modelling of Cohesive Frictional Materials, S.195-206, Vermeer, P. A., Ehlers, W., Herrmann, H. J., Ramm, E. (eds.), (ISBN 04 1536 023 4), 2004a.
- Luding, S. *Micro-macro models for anisotropic, frictional granular packings*. Int. J. Sol. Struc. 41(21), S. 5821-5836, 2004b.
- Luding, S. *The effect of friction on wide shear bands*. Enschede: Particulate Science and Technology 26(1), S. 33-42, 2008.

- Luding, S., und F. Alonso-Marroquin. *The critical-state yield stress (termination locus) of adhesive powders from a single numerical experiment*. Granular Matter 13(2), S. 109-119, 2010.
- MiDi, GDR. *On dense granular flows*. : Eur. Phys. J. E 14, S. 341-365, 2004.
- Mittal, R., Iaccarino, G. *Immersed boundary methods*. : Annu. Rev. Fluid Mech. 37, S. 239-261, 2005.
- Patankar, N. A., Singh, P., Joseph, D. D., Glowinski, R., Pan, T.-W. *A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particle flows*. Int. J. Multiphase Flow 26, S. 1509-1524, 1999.
- Pietsch, W., Rumpf, H. *Haftkraft, Kapillardruck, Flüssigkeitsvolumen und Grenzwinkel einer Flüssigkeitsbrücke zwischen zwei Kugeln*. Weinheim: Chem.-Ing.-Tech. 39, S. 885-893, 1967.
- Rhodes, M. *Introduction to Particle Technology*. Australia: Wiley Verlag, 2008.
- Richard, K. H. Sensing apparatus for pelletizing process. United States of America Patent 4344747. 23. July 1980.
- Rudert, A., Schwarze, R., Tilch, W., Bast, J. *Computational fluid dynamics of the core shooting process*. Freiberg: International Foundry Research 61(3), S. 2-9, 2009.
- Schiller, L., Naumann, A. *Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung*. Z. Ver. Deutsch. Ing. 77, S. 318-325, 1935.
- Schubert, H. *Kapillarität in porösen Feststoffsystemen*. Berlin Heidelberg New York: Springer Verlag, 1982.
- Schwarze, R. Rudert, A., Tilch, W., Bast, J. *Rheological behavior of sand-binder mixtures measured by a coaxial cylinder rheometer*. Freiberg: Int. foundry Research/Giessereiforschung 60(3), S. 1-7, 2008.
- Shirgaonkar, A. A., Maclver, M. A., Patankar, N. A. *A new mathematical formulation and fast algorithm for fully resolved simulation of self-propulsion*. Evanston: J. of Computational Physics 228, S. 2366-2390, 2009.

- Simons, S. J. R., Seville, J. P. K. *An analysis of the rupture energy of pendular liquid bridges*. : Chemical Engineering Science Vol. 49(14), S. 2331-2339, 1994.
- Singh, A., Luding, S. *Flow behavior at different shear rates for dry powders*. Nürnberg: World Congress Particle Technology 6, CD-Proceedings, 4 Seiten, Nürnberg Messe GmbH (Ed.), ISBN-978-3-00-030570-2, 2010.
- Stokes, G. G. *Mathematical and physical papers*. Cambridge: Cambridge University Press, 1880-1905.
- Surek, D., Stempin, S. *Angewandte Strömungsmechanik: für Praxis und Studium*. : Vieweg + Teubner Verlag, 2007.
- Tyler, W. S. *www.wstyler.ca*. Haver. 18. 12 2011. *www.wstyler.ca* [Zugriff am 18. 12 2011].
- Uhlig, F. *Numerische Simulationen von granularen Strömungen in einer Ringscherzelle unter Verwendung von LIGGGHTS*. Freiberg: Praxissemesterarbeit, TU Bergakademie Freiberg, 2011.
- Van der Hoef, M. A., Van Sint Annaland, M., Deen, N. G., Kuipers, J. A. M. *Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Fluidized Beds: A Multiscale Modeling Strategy*. Enschede: Annual Review of Fluid Mechanics 40, S. 47-70, ISSN 0066-4189, 2008.
- Weigert, T., Ripperger, S. *Calculation of the Liquid Bridge Volume and Bulk Saturation from the Half-Filling Angle*. Part. Part. Syst. Charact. 16, S. 238-242: Wiley-VCH, 1999.
- Willet, C. D., Adams, M. J., Johnson, S. A., Seville, J. P. K. *Capillary Bridges between Two Spherical Bodies*. : Langmuir 16, S. 9396-9405, 2000.
- Yang, R. Y., Zou, R. P., Yu, A. B. *Numerical Study of the Packing of Wet Coarse Uniform Spheres*. Sydney: American Institute of Chemical Engineers, 2003.
- Yang, Y., Zografis, G., Miller, E. E. *Capillary Flow Phenomena and Wettability in Porous Media*. : Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 122(1), 1998.

## Anhang

### Berechnungsparameter zur analytischen Lösung der Flüssigkeitsbrückenkraft

$$\begin{aligned}
 A_1 = & (-0.44507 + 0.050832 \cdot \theta - 1.1466 \cdot \theta^2) \\
 & + (-0.1119 - 0.000411 \cdot \theta - 0.1490 \cdot \theta^2) \cdot \ln(\hat{V}_B) \\
 & + (-0.012101 - 0.0036456 \cdot \theta - 0.01255 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^2 \\
 & + (-0.0005 - 0.0003505 \cdot \theta - 0.00029076 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^3
 \end{aligned} \tag{8.1}$$

$$\begin{aligned}
 A_2 = & (1.9222 - 0.57473 \cdot \theta - 1.2918 \cdot \theta^2) \\
 & + (-0.0668 - 0.1201 \cdot \theta - 0.22574 \cdot \theta^2) \cdot \ln(\hat{V}_B) \\
 & + (-0.0013375 - 0.0068988 \cdot \theta - 0.01137 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^2
 \end{aligned} \tag{8.2}$$

$$\begin{aligned}
 A_3 = & (1.268 - 0.01396 \cdot \theta - 0.23566 \cdot \theta^2) \\
 & + (0.198 + 0.092 \cdot \theta - 0.06418 \cdot \theta^2) \cdot \ln(\hat{V}_B) \\
 & + (0.02232 + 0.02238 \cdot \theta - 0.009853 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^2 \\
 & + (0.0008585 + 0.001318 \cdot \theta - 0.00053 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^3
 \end{aligned} \tag{8.3}$$

$$\begin{aligned}
 A_4 = & (-0.010703 + 0.073776 \cdot \theta - 0.34742 \cdot \theta^2) \\
 & + (0.03345 + 0.04543 \cdot \theta - 0.09056 \cdot \theta^2) \cdot \ln(\hat{V}_B) \\
 & + (0.0018574 + 0.004456 \cdot \theta - 0.006257 \cdot \theta^2) \cdot (\ln(\hat{V}_B))^2
 \end{aligned} \tag{8.4}$$

## OpenFOAM® Einstellungen zur Orts- und Zeitdiskretisierung der Erhaltungsgleichungen, sowie die verwendeten Löser zur Bestimmung der Zustandgrößenfelder

### fvSchemes-Datei:

```

ddtSchemes
{
    default    CrankNicholson 0.5;
}
gradSchemes
{
    default    Gauss linear;
    grad(p)    Gauss linear;
    grad(U)    Gauss linear;
}
divSchemes
{
    default    none;
    div(phi,U) Gauss limitedLinearV 1;
    div(phi,k) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,epsilon) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,R) Gauss limitedLinear 1;
    div(R)     Gauss linear;
    div(phi,nuTilda) Gauss limitedLinear 1;
    div((nuEff*dev(grad(U).T()))) Gauss linear;
    div(U)     Gauss linear;
}
laplacianSchemes
{
    default    none;
    laplacian(nuEff,U) Gauss linear corrected;
    laplacian((1|A(U)),p) Gauss linear corrected;
    laplacian((voidfraction2|A(U)),p) Gauss linear corrected;
    laplacian(DkEff,k) Gauss linear corrected;
    laplacian(DepsilonEff,epsilon) Gauss linear corrected;
    laplacian(DREff,R) Gauss linear corrected;
    laplacian(DnuTildaEff,nuTilda) Gauss linear corrected;
    laplacian(phi|B) Gauss linear corrected;
    laplacian(U) Gauss linear corrected;
}
interpolationSchemes
{
    default    linear;
    interpolate(U) linear;
}
snGradSchemes
{
    default    corrected;
}
fluxRequired
{
    default    no;
    p          ;
}

```

**fvSolution-Datei:**

```
solvers
{
  p
  {
    solver      PCG;
    preconditioner DIC;
    tolerance   1e-06;
    relTol     0;
  }
  pFinal
  {
    solver      PCG;
    preconditioner DIC;
    tolerance   1e-06;
    relTol     0;
  }
  U
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance   1e-05;
    relTol     0;
  }
  k
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance   1e-05;
    relTol     0;
  }
  epsilon
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance   1e-05;
    relTol     0;
  }
  R
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance   1e-05;
    relTol     0;
  }
  nuTilda
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance   1e-05;
    relTol     0;
  }
  phiIB
  {
    solver      PCG;
    preconditioner DIC;
    tolerance   1e-06;
    relTol     0;
  }
}
```

```
}  
}  
PISO  
{  
  nCorrectors 4;  
  nNonOrthogonalCorrectors 0;  
  pRefCell 0;  
  pRefValue 100000;  
}
```