Institut für Kontinuumsmechanik

Action von partikelbeladenen 3D Strömungen mit einem gekoppe FEM-DEM-Ansatz

reivi-Deivi-Alisa Bircan Avci

> Leibniz Universität Hannover

3N 978-3-941302-08-;

B13/3

Modellierung und numerische Simulation B von partikelbeladenen 3D Strömungen mit einem gekoppelten FEM-DEM-Ansatz

Bircan Avci

Institut für Kontinuumsmechanik

> Diese Dissertation befasst sich mit der Entwicklung eines numerischen Merkzeugs zur Simulation von partikelbeladenen 3D Mehrphasenströmungen. Es wird ein Fluid-Partikel-Löser entwickelt, bei dem zur Lösung der Phasen, also der Fluidphase und der dispergierten Partikelphase, zwei etablierte numerische Methoden herangezogen werden. Dabei kommt zur Behandlung des Fluidfeldes die FEM zum Einsatz und die Partikelphase wird im Kontext der DEM betrachtet. Neben diesen beiden Modulen des Lösers stellt das Modul, das die FEM-DEM-Kopplung übernimmt und die Erfassung der ^Phasenwechselwirkung sicherstellt, bei der Softwareentwicklung einen schwerpunkt dar. Die beiden physikalischen Felder werden in dieser Arbeit un der Partikelskala gekoppelt, wobei alle im Fluid dispergierten Partikel ndividuell als Volumenkörper abgebildet und beschrieben werden (Direkte undividuell als Volumenkörper abgebildet und beschrieben werden (Direkte undividuell simulation). Zur Realisierung der Kopplung wird auf ein Konzept der weitverbreiteten Fictitious-Domain-Methoden zurückgegriffen.



Bircan Avci | Modellierung und numerische Simulation von partikelbeladenen 3D Strömungen

Modellierung und numerische Simulation von partikelbeladenen 3D Strömungen mit einem gekoppelten FEM-DEM-Ansatz

Von der Fakultät für Maschinenbau der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur

genehmigte Dissertation von

Dipl.-Ing. Bircan Avci

geboren am 27.08.1974 in Bakirköy/Istanbul

2013

Herausgeber:

Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Peter Wriggers

Verwaltung:

Institut für Kontinuumsmechanik Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover Appelstraße 11 30167 Hannover

Tel: +49 511 762 3220 Fax: +49 511 762 5496 Web: www.ikm.uni-hannover.de

© Dipl.-Ing. Bircan Avci Institut für Kontinuumsmechanik Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover Appelstraße 11 30167 Hannover

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, dieses Heft ganz oder teilweise auf photomechanischem, elektronischem oder sonstigem Wege zu vervielfältigen.

ISBN 978-3-941302-08-2

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Peter Wriggers 2. Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. Manfred Bischoff

Tag der Promotion: 19.08.2013

So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig, man muss sie für fertig erklären, wenn man nach Zeit und Umständen das Möglichste getan hat.

Johann Wolfgang von Goethe (1749-1832)

Zusammenfassung

Problemstellungen, in denen Fluid-Partikel-Strömungen auftreten, sind in der Natur und in vielen technischen Bereichen anzutreffen. Diese Form der Strömung, die in die Kategorie der Mehrfeldprobleme einzuordnen ist, setzt sich aus einer kontinuierlichen Fluidphase und einer dispergierten Partikelphase zusammen. Die Wechselwirkung zwischen den Phasen einer partikelbeladenen Mehrphasenströmung ist durch hochkomplexe physikalische Zusammenhänge gekennzeichnet. Angesichts der Tatsache, dass numerische Simulationsverfahren sich in diesem Bereich noch im Anfangsstadium ihrer Entwicklung befinden, greift man, um die charakteristischen Phänomene einer Problemstellung dieser Klasse zu studieren, bis heute noch in erster Linie auf Laborexperimente zurück. In den letzten Jahren sind die Forschungsaktivitäten in diesem Fachbereich bezüglich der numerischen Verfahren erfreulicherweise überdurchschnittlich gestiegen, sodass ein großer Fortschritt im Entwicklungsstand der entsprechenden Simulationsmethoden verzeichnet werden kann. Dieser Aspekt wird von der einhergehenden Computerentwicklung intensiv mitgetragen.

Das Ziel der vorliegenden Dissertation ist die Erarbeitung und Umsetzung eines numerischen Werkzeugs zur Simulation von partikelbeladenen 3D Mehrphasenströmungen. Hierfür wird ein Fluid-Partikel-Löser entwickelt, bei dem zur Lösung der beiden Phasen zwei etablierte numerische Methoden herangezogen werden. Dabei kommt zur Behandlung des Fluidfeldes die Finite-Elemente-Methode (FEM) zum Einsatz und die Partikelphase wird im Kontext der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) betrachtet. Neben diesen beiden Modulen des Lösers stellt das Modul, das die FEM-DEM-Kopplung übernimmt und die Erfassung der Phasenwechselwirkung sicherstellt, bei der Softwareentwicklung einen Schwerpunkt dar. Die beiden physikalischen Felder werden in dieser Arbeit auf der Partikelskala gekoppelt, wobei alle im Fluid dispergierten Partikel individuell als Volumenkörper abgebildet und beschrieben werden (*Direkte Numerische Simulation*). Zur Realisierung der Kopplung wird auf ein Konzept der weitverbreiteten *Fictitious-Domain*-Methoden zurückgegriffen.

Das physikalische Modell, auf dem die FEM-Diskretisierung des Fluidfeldes basiert, ist bei diesem Ansatz durch die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen gegeben. Die Lösung des algebraischen Gleichungssystems, das aus der Diskretisierung hervorgeht, erfolgt hier im Rahmen der geometrischen Mehrgittermethode. Um die auf die Partikeloberflächen angreifenden Strömungskräfte zu bestimmen, wird ein deterministischer Ansatz verfolgt. Hierbei wird die Strömungskraft eines Partikels direkt aus seiner unmittelbaren Fluidumgebung bestimmt. Die Wechselwirkungen zwischen Partikeln untereinander sowie zwischen Partikeln und Systemberandungen werden anhand von Konstitutivgleichungen erfasst. Diese umfassen den Normalkontakt, die Adhäsion, die Reibung und den Rollwiderstand. Des Weiteren wird eine Strategie zur Handhabung der entsprechenden Datenstruktur bezüglich der Umsetzung der DEM-Kontaktsuchalgorithmen vorgestellt.

Der erarbeitete FEM-DEM-Ansatz zur Simulation von 3D Fluid-Partikel-Strömungen wird anhand einer Reihe von Testbeispielen verifiziert. Zum Abschluss der Arbeit erfolgt eine Demonstration der Einsatzfähigkeit und Tauglichkeit des entwickelten numerischen Werkzeugs durch Simulation von drei komplexeren Beispielen.

Schlagworte: Mehrphasenströmung, Fluid-Partikel-Interaktion, FEM-DEM-Kopplung, Direkte Numerische Simulation

<u>ii ______</u>

Abstract

Problems related to fluid-particle flows are present in nature and in many technical fields. These flows belong to the category of multifield problems which consist of a continuous fluid phase and a dispersed particle phase. The interaction between the phases of a particle-laden multiphase flow is characterized by highly complex physical processes. Due to the fact that numerical simulation methods for fluid-particle interaction are in an early stage of development, one usually still prefers laboratory experiments to investigate the characteristic properties of such multiphase systems. Fortunately, research activities focusing on the development of numerical methods relevant to this area have significantly increased in recent years. This resulted in considerable advances in simulation approaches that rely on these methods. Of course, the development is supported intensively by the progress in computer technology.

The aim of this thesis is the design and implementation of a numerical tool for the simulation of 3D particle-laden multiphase flows. For this purpose, a fluid-particle solver is developed, where the fluid phase and the dispersed particle phase are solved by two well-established numerical methods. Here, the fluid and the particle phases are treated, respectively, within the framework of the Finite Element Method (FEM) and the Discrete Element Method (DEM). Beside these two solver modules, the third module, which is responsible for the FEM-DEM coupling and which accounts for the phase interaction, plays a central role in the development of the framework. In this work, the two physical fields are coupled at the particle scale, where all the dispersed particles are modeled and described as having a body volume (*Direct Numerical Simulation*). The coupling scheme implemented within this approach is based on the *Fictitious Domain* method.

The physical model on which the FEM discretization of the fluid field is based is given by the incompressible Navier-Stokes equations. The solution of the system of algebraic equations resulting from the discretization is obtained in the framework of a geometric multigrid method. The presented work employs a deterministic approach for the computation of the fluid forces acting on the particle surface. Here, the fluid force on a particle is determined directly from the flow field in its vicinity. In order to model the interaction among the particles and also between the particles and solid domain boundaries, a number of constitutive equations are implemented in the DEM involving normal contact, adhesion, friction and rolling resistance. Furthermore, this work includes a strategy to handle the data structure in terms of the implementation of the search algorithms for the particle contact detection.

The developed FEM-DEM approach for the simulation of 3D fluid-particle flows is verified by several test computations. In closing, three complex examples are presented which demonstrate the performance and capability of the developed numerical tool.

Keywords: multiphase flow, fluid-particle interaction, FEM-DEM coupling, Direct Numerical Simulation

Vorwort und Danksagung

Diese Arbeit ist im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Leibniz Universität Hannover entstanden. Während die erste Phase dieses Promotionsprojekts am Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik (IBNM) bearbeitet wurde, ist die Umsetzung der Haupt- und Endphase der Arbeit in die Zeit meiner wissenschaftlichen Beschäftigung am Institut für Kontinuumsmechanik (IKM) zu zuordnen. Die Anfertigung der Arbeit wurde durchgehend von meinem Doktorvater Herr Professor Peter Wriggers betreut.

Herrn Professor Peter Wriggers gilt mein herzlicher Dank für seine Anregung zu dieser Arbeit und für seine wissenschaftliche Anleitung. Des Weiteren möchte ich mich bei ihm für das entgegengebrachte Vertrauen und für das ideale wissenschaftliche Umfeld bedanken, welches ich in der Promotionsphase hatte. Die Zusammenarbeit mit ihm brachte mich nicht nur in fachlicher Hinsicht sehr viel weiter, sondern auch in persönlicher.

Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Professor Manfred Bischoff für seine sofortige Bereitschaft zur Übernahme des Mitberichts und für die zügige Durchsicht des Manuskripts. Ferner möchte ich mich bei ihm für das gezeigte Interesse an der Arbeit bedanken. Ebenso herzlich danke ich Herrn Professor Lutz Rissing, dass er den Vorsitz der Prüfungskommission übernommen hat.

Meinen Kollegen am IBNM und IKM danke ich für das stets angenehme Arbeitsklima. Dabei möchte ich besonders die sehr schöne und fruchtvolle Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Ilker Temizer hervorheben. Lieber Ilker, Dir ebenfalls noch vielen Dank für die tolle Freundschaft, die uns verbindet.

Außerdem möchte ich mich bei meinen lieben Eltern und Geschwistern für ihre Unterstützung und Förderung danken, die sie mir während der Promotion gegeben haben.

Mein innigster Dank gilt meiner Frau Tünay. Nicht nur ihre motivierende und unermüdliche Unterstützung hat mir die Promotion vor allem in der schwierigen Phase der Arbeit erleichtert, sondern ihre immer vorhandene Geduld und ihr großes Verständnis haben auch zum Gelingen dieses Projekts entscheidend beigetragen. Schließlich möchte ich ihr noch außerordentlichen Dank für die sorgfältige Durchsicht des Manuskripts aussprechen. Tünay, Deine einzigartige, mich begeisternde Lebensfreude bildet für mich stets ein Lichtblick und ist mithin auch meine Freude – Danke!

Bircan Avci

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	1		
	1.1	Motivation und Zielsetzung	1		
	1.2	Gliederung der Arbeit	2		
2	Grundsätzliche Betrachtungen zu Mehrphasenströmungen				
	2.1	Allgemeines	3		
	2.2	Grundlegende Größen und Beziehungen	7		
	2.3	Phasenwechselwirkung	9		
3	Mechanische Grundlagen				
	3.1	Betrachtungsweisen	13		
	3.2	Lagrangesche und Eulersche Kinematik	16		
	3.3	Divergenz- und Transport-Theorem	19		
	3.4	Bilanzgleichungen	20		
	3.5	Starrkörperdynamik	23		
	3.6	Fluiddynamik	26		
4	Finite-Elemente-Methode zur Berechnung der Fluidphase 31				
-	4.1	Das Anfangs-Randwertproblem der Navier-Stokes-Gleichungen	32		
	4.2	Diskretisierung	34		
		4.2.1 Räumliche Diskretisierung	34		
		4.2.2 Zeitliche Diskretisierung	40		
	4.3	Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen	41		
5	Diskrete-Elemente-Methode zur Berechnung der dispersen Phase 51				
0	5.1	Allgemeines	51		
	5.2	Kinematik und Kontakt	54		
	5.3	Kontaktbedingungen und ihre Regularisierung	57		
		5.3.1 Kontaktbedingungen	60		
		5.3.2 Regularisierung	63		
	5.4	Konstitutivbeziehungen	64		
		5.4.1 Normalkontakt	65		
		5.4.2 Adhäsion	71		
		5.4.3 Reibung	78		
		5.4.4 Rollwiderstand	82		
	5.5	Zeitintegration	85		
	5.6	Standardtests	87		
	5.7	Kontaktsuche	98		
6	FEN	M-DEM-Kopplung für die Fluid-Partikel-Wechselwirkung	105		
0	6.1	Allgemeines	105		

	$6.2 \\ 6.3 \\ 6.4$	Fictitious Boundary Method	107 108 115
7	Nur	nerische Beispiele	127
	7.1	Sedimentation von 125 Partikeln	127
	7.2	Bidisperses Gemisch mit Auftriebs- und Absinkpartikeln	132
	7.3	Partikelbeladene Rohrströmung	137
8	Zusa	ammenfassung und Ausblick	143
\mathbf{A}	Partikel-Wand-Kontakt 14		
Literaturverzeichnis 15			
Curriculum Vitae 17			

Kapitel 1: Einleitung

1.1 Motivation und Zielsetzung

Fluid-Partikel-Strömungen sind in vielen natürlichen und technischen Bereichen des täglichen Lebens zugegen. In einer natürlichen Umgebung trifft man auf solche Mehrphasenströmungen u.a. in Form von Regen-, Schnee- und Hagelschauer. In Anbetracht der Feinstaubbelastung der Luft in Großstädten kommen die dortigen Menschen tagtäglich mit einem Fluid-Partikel-System in Berührung. Andere natürliche Umgebungsbedingungen, die sich in diesem Zusammenhang anführen lassen, sind beispielsweise sedimentbeladene Strömungen in Fließ- und Küstengewässern, pyroklastische Ströme bei Vulkaneruptionen oder Sandstürme in Wüsten. Auch in technischen Strömungsprozessen der heutigen Industrie sind Fluid-Partikel-Strömungen besonders oft vorzufinden, wobei es sich zumeist um Prozesse und Problemstellungen aus den Bereichen Umwelt-, Verfahrens- oder Medizintechnik handelt. Als typische Problemstellungen können hier wie etwa das Mischen von granularen Medien in Wirbelschichtmischern, die Staubabscheidung in Filteranlagen, der Sandtransport bei der Erdölförderung sowie der pneumatische Feststofftransport in Rohrleitungen angeführt werden. Die bei derlei technischen Mehrfeldproblemen stattfindenden Transportvorgänge zeichnen sich grundsätzlich durch sehr komplexe Zusammenhänge aus gekoppelten Fluid-Partikel-Bewegungen aus. Eine mögliche Herangehensweise, um diese Zusammenhänge zu studieren, ist die experimentelle Untersuchung der individuellen Problemstellungen. Die Durchführung von Experimenten ist bei solchen komplexen mehrphasigen Strömungen im Allgemeinen sehr aufwendig und dementsprechend teuer. Oft liegt obendrein der Fall vor, dass die entsprechenden Systeme experimentell schwer oder überhaupt nicht zugänglich sind, und häufig lassen sich die wesentlichen Phänomene messtechnisch nicht erfassen. Insofern gilt ein bedeutender Teil der industriellen und universitären Forschungsinteressen und -aktivitäten neben der Weiterentwicklung von experimentellen Methoden auch dem Fortschritt numerischer Simulationsmethoden. Die Entwicklung von leistungsfähigen Verfahren zur Simulation von Mehrphasenströmungen wird durch das stetig steigende Leistungspotenzial der Hardwaretechnologie der Rechenmaschinen intensiv unterstützt. In Kombination mit den heutzutage zur Verfügung stehenden Rechnerleistungen und effizienten Softwareprogrammen hat man in der computergestützten Ingenieurswissenschaft bereits einen Stand der Entwicklung erreicht, bei dem man im Grunde mit gewissen Vereinfachungen in der Lage ist, Ausschnitte von technischen partikelbeladenen Mehrphasenströmungssystemen numerisch qualitativ zu beschreiben. Zur quantitativen Simulation realitätsnaher komplexer Systeme im Ganzen bedarf es aber sowohl auf dem Bereich der Modellbildung als auch der Numerik noch erheblichen Forschungsbedarf und Forschungsaufwand.

Das Hauptziel dieser Arbeit besteht in der Entwicklung eines numerischen Werkzeugs zur Simulation von 3D Fluid-Partikel-Systemen. Der dafür zu erarbeitende Löser soll so

konzipiert sein, dass dieser auf rein deterministischen Methoden basiert und alle im Fluid dispergierten Partikel individuell abbildet. In diesem Zusammenhang werden in der Literatur zwei unterschiedliche Konzepte zur Behandlung von Fluid-Partikel-Systemen verfolgt. Neben dem Ansatz die Partikel vereinfacht als idealisierte Massenpunkte im Fluid zu betrachten und die jeweils auf ein Partikel wirkende Strömungskraft aus semiempirischen Beziehungen zu bestimmen, finden sich im Fachschrifttum auch die weitaus aufwendigeren Methoden, bei denen die Teilchen als umströmte Volumenkörper beschrieben werden. In diesem Fall rufen die Partikel folgerichtig den Effekt einer Fluidverdrängung hervor. Was die Partikelströmungskräfte hier angeht, so lassen sich diese angesichts der bestehenden direkten Wechselwirkung der Phasen über ihre Volumenkopplung unmittelbar aus den lokalen Strömungsfeldern um die Körperoberflächen ermitteln. Dieser zweite Ansatz ermöglicht durch die Auflösung und Erfassung der lokalen Fluid-Partikel-Interaktion sowohl verdünnte als auch dichte partikelbeladene Strömungen zu beschreiben. Die Letztgenannten zeichnen sich dadurch aus, dass bei ihnen das örtliche Fluidfeld um ein Partikel in der Regel von der Umströmung der Nachbarpartikel beeinflusst wird. Da in der vorliegenden Arbeit solche Systeme betrachtet werden sollen, wo dieser Aspekt eine wichtige Rolle spielt, wird hier der volumengekoppelte Ansatz favorisiert. Der zu erarbeitende Fluid-Partikel-Löser soll nach seiner Umsetzung anhand einer Reihe von Testbeispielen getestet und bewertet werden. Für den Löser soll ferner die Zielformulierung gelten, dass dieser in der Lage ist, die Bildung und das Zerfallen von Agglomeraten in Mehrphasenströmungen zu beschreiben. Dieses Vorhaben stellt an die algorithmische Datenstruktur der Partikelsoftware eine entsprechend große Herausforderung.

1.2 Gliederung der Arbeit

Im Folgenden werden in Kapitel 2 grundsätzliche Betrachtungen zu partikelbeladenen Mehrphasenströmungen vorgenommen. Hier werden zunächst einige wesentliche Größen und Beziehungen vorgestellt, auf welche im Laufe der Arbeit öfters Bezug genommen wird. Im Anschluss daran erfolgt eine Darstellung der verschiedenen Formen der Phasenwechselwirkung, die bei der Modellierung von Fluid-Partikel-Strömungen zu differenzieren sind. In Kapitel 3 werden nach Besprechung der gängigen Ansätze zu den Betrachtungsweisen der Kinematik eines materiellen Körpers die in dieser Arbeit zum Tragen kommenden mechanischen Grundgleichungen zur Beschreibung der Phasenbewegungen präsentiert. Das hieran anschließende Kapitel 4 widmet sich der numerischen Behandlung der Strömungsgleichungen (Strömungslöser-Modul). Kapitel 5 gilt den Konstitutivgleichungen für die Beschreibung des Partikelkontakts, den Kontaktsuchmethoden und den numerischen Methoden zur Lösung der Bewegungsgleichungen der Partikel (Partikellöser-Modul). Mit der algorithmischen Umsetzung bezüglich der Kopplung dieser beiden numerischen Module befasst sich **Kapitel 6**. Zum Abschluss des Kapitels wird die durchgeführte Kopplung anhand einer Reihe von Testbeispielen verifiziert. Die Anwendung des entwickelten Fluid-Partikel-Lösers auf komplexe Systeme wird in Kapitel 7 demonstriert. Diese Arbeit schließt dann mit einer kurzen Zusammenfassung und einem Ausblick auf mögliche Weiterentwicklungen des Verfahrens mit Kapitel 8 ab.

Kapitel 2: Grundsätzliche Betrachtungen zu Mehrphasenströmungen

2.1 Allgemeines

Klassifizierung von Gemischen

Unter einem dispersen Fluidgemisch versteht man ein System, das aus einem gasförmigen oder flüssigen Dispersionsmittel und einer darin mehr oder weniger fein dispergierten Phase zusammengesetzt ist.¹ Der Aggregatzustand der dispergierten Phase kann dabei fest, flüssig oder gasförmig sein. Ferner kann er aber auch eine Kombination dieser einzelnen Zustände darstellen, insofern die disperse Phase in der Hinsicht aus dementsprechend verschiedenen Stoffen besteht. In der Regel differenziert man hier mit Bezug auf den Feinheitsgrad (Dispersionsgrad) dieser Phase – genauer gesagt, hinsichtlich des charakteristischen Durchmessers \emptyset ihrer dispergierten Stoffteilchen (Partikel) – zwischen homogenen und heterogenen Gemischen oder Lösungen und Dispersionen (siehe z. B. [77, 145]):

- Lösungen (Ø ≤ 1 nm): Lösungen stellen Gemische dar, bei denen sich die Bestandteile der inneren und äußeren Phase auf molekularer Ebene vermischen. Daher spricht man bei Lösungen auch von molekulardispersen Gemischen. Als molekulardispers gelten Systeme wie Alkohol-Wasser-Gemische, Luft, Kochsalzlösungen, Zuckerlösungen oder dergleichen. Bezeichnend ist für derlei Systeme, dass sie ein homogenes, einphasiges Erscheinungsbild aufweisen, welches auch auf mikroskopischer Ebene frei von sichtbaren Phasengrenzflächen ist.
- Dispersionen ($\emptyset \gtrsim 1 \text{ nm}$): Bei Dispersionen lassen sich die Phasengrenzflächen angesichts der Abmessungen der dispergierten Stoffteilchen bereits mittels einer einfachen optischen Vergrößerung zum Teil aber auch schon allein mit dem bloßen Auge klar feststellen. In diesem Sinne unterscheidet man hier weiter, noch feiner zwischen kolloiddispersen Gemischen ($\emptyset \approx 1 \text{ nm} 0.1 \mu \text{m}$) und grobdispersen Gemischen ($\emptyset \gtrsim 0.1 \mu \text{m}$). Dispersionen verfügen also über ein heterogenes, mehrphasiges Erscheinungsbild. Einige Beispiele von typischen heterogenen Systemen finden sich in Tab. 2.1 zusammengestellt.

Eigenschaften von Dispersionen²

Die dispersen Stoffteilchen sind bei kolloiddispersen Gemischen wesentlich größer als bei Lösungen – aber doch noch so fein, dass sie durch die Brownschen Bewegungen der Fluidmoleküle des Dispersionsmittels daran gehindert werden, unter ihrer Gewichtskraft

 $^{^{1}}$ Als Synonym zum Begriffspaar 'Dispersionsmittel und dispergierte Phase' werden in dieser Arbeit auch die Bezeichnungen 'äußere und innere Phase' sowie 'kontinuierliche und disperse Phase' verwendet.

²In den folgenden Ausführungen wird davon ausgegangen, dass die Dispersionen sich in einer ruhenden Umgebung befinden.

Aggregatzustände der	Beispiele für
Phasenkomponenten	heterogene Fluidgemische
Flüssigkeit - Feststoff	Sand in Wasser, Blut
Flüssigkeit - Flüssigkeit	Wasser in Öl, Öl in Wasser
Flüssigkeit - Gas	Flüssige Schäume, Blasensäule
Gas - Flüssigkeit	Regen, Nebel
Gas - Feststoff	Rauch, Schneelawine

Tabelle 2.1: Heterogene Fluidgemische – klassifiziert nach Aggregatzuständen der Phasenkomponenten (äußere Phase - innere Phase).

(Schwerkraft) zu sedimentieren ggf. aufzuschwimmen. Denn jener Impulsaustausch, den die Fluidmoleküle infolge ihrer Brownschen Bewegung mit den kolloidalen Teilchen ausüben, hat hier zur Folge, dass diese recht feinen Teilchen eine zufällige und weitgehend ungerichtete Bewegung ausführen, sodass sie dementsprechend homogen im System verteilt verbleiben – anstatt in Richtung der Gravitation zu sedimentieren und letztlich sich abzulagern (siehe z. B. [40, 41]). Die Brownsche Molekularbewegung verleiht demnach kolloiddispersen Gemischen im Hinblick auf die Phasenentmischung eine gewisse Stabilität. In der Tat kann man bei vielen kolloidalen Systemen aber auch beobachten, wie sich disperse Stoffteilchen infolge ihrer Oberflächenladung (elektrostatische Kräfte, van der Waals-Kräfte) allmählich zu mehr oder minder großen Agglomeraten zusammenballen, siehe [102]. Dieser Umstand bringt mit sich, dass bei solchen Systemen entsprechend Agglomerate aus dem Gemisch ausfallen, sobald diese jeweils eine gewisse Größe erreichen, bei der die Gewichtskraft des Kolloidverbandes gegenüber den oben besagten Impulskräften dominiert. Somit gehen jene kolloidalen Systeme, die eine Tendenz zur Agglomeration haben, hinsichtlich der Phasenentmischung graduell von einem anfangs quasi-stabilen Zustand in einen instabilen über. Dahingegen erweisen sich grobdisperse Gemische diesbezüglich zumeist von vornherein als instabil, da bei ihnen die Gewichtskraft der einzelnen Stoffteilchen generell die überwiegend dominierende Größe darstellt. Insofern setzen die Phasen in diesem Fall schon zu Beginn der Beobachtung des Gemisches zur Entmischung an

Bemerkungen zur Modellierung von dispersen Gemischen

In Anbetracht dessen, dass Lösungen molekulardispers sind und sich ohnehin so verhalten, als ob sie aus einem einzelnen Reinstoff beständen, geht man bei diesen Gemischen im Rahmen der Strömungsmechanik von einem einheitlichen, kontinuierlichen Fluid aus und legt diesem ebenso kontinuierliche charakteristische Stoffeigenschaften zugrunde. Die Strömungen von Lösungen werden also als Einphasenströmung beschrieben. Dahingegen erfordert die Modellierung der Strömungen von Dispersionen – zum einen hinsichtlich der heterogenen Eigenschaft dieser Gemische, zum anderen mit Blick auf ihre Phasenentmischung – jene Art von Modellansätzen, mit denen die Koexistenz beider Phasen in der Strömung beschrieben werden kann, sprich im Sinne einer Mehrphasenströmung. Dass solch mehrphasige Strömungsmodelle im Gegensatz zu jenen einphasigen grundsätzlich sehr aufwendige Ansätze darstellen, und zwar sowohl auf der Modellierungsebene als auch in Bezug auf ihre numerische Behandlung, ist im Grunde offensichtlich – zumal bei jenen mehrphasigen Modellen mit der Fluidströmung zugleich auch noch die dispergierte Phase sowie die Interaktion der beiden Phasen mitabzubilden sind. In der vorliegenden Arbeit soll ein derartiger mehrphasiger Ansatz verfolgt und entwickelt werden.

Bei dem hier vorgestellten Konzept wird stets davon ausgegangen, dass das Dispersionsmittel eine linear-viskose Stoffeigenschaft besitzt – man spricht in dem Fall von einem Newtonschen Fluid – und dass sich die disperse Phase aus grobdispersen, kugelförmigen (sphärischen) Partikeln zusammensetzt, die als quasi-starre Objekte beschrieben werden. Diese Partikel sollen unter anderem in der Lage sein, entsprechend der Oberflächenbeschaffenheit und der Oberflächenenergie der abzubildenden dispergierten Stoffteilchen, untereinander Reibkräfte bzw. adhäsiv wirkende Kräfte zu übertragen. Was die Phasenkopplung in diesem Konzept anbelangt, so soll diesbezüglich eine vollständige Beschreibung der Phaseninteraktion vorgenommen werden, auf dass das hier entwickelte Modell mithin zur Simulation von Mehrphasenströmungen sowohl mit einem geringen als auch mit einem hohen volumenbezogenen Anteil der inneren Phase einsetzbar ist.

Wie aus dem vorangehenden Abschnitt hervorgeht, spielen kolloiddisperse Systeme in dieser Arbeit keine Rolle. Ohne Weiteres ist es aber möglich, den hier präsentierten Ansatz dahingehend zu erweitern, dass damit kolloidale Fluid-Partikel-Gemische im Kontext der Brownschen Dynamik beschrieben werden können. Da also die Modellierung von Kolloiddispersionen in den folgenden Kapiteln ausgeklammert wird, soll diese Problematik an dieser Stelle nicht weiter vertieft werden – stattdessen sei auf die Übersichtsarbeit von Li *et al.* [158] und die darin zitierten Veröffentlichungen verwiesen.

Bemerkung:

- Da bezüglich der Modellierung der dispersen Stoffteilchen in dieser Arbeit grundsätzlich von grobdispersen, sphärischen Partikeln ausgegangen wird, soll im Folgenden auf die zusätzlichen Bezeichnungen 'grobdispers' und 'sphärisch' verzichtet werden.
- Im Hinblick auf die nachfolgenden Ausführungen wird nun ein Phasenindex eingeführt:

$$\alpha := \alpha \{F, P\} = \begin{cases} F : \text{Dispersionsmittel (Fluid)} \\ P : \text{disperse Phase (Partikel)}. \end{cases}$$

Mit dem Index soll die Zugehörigkeit einer angeführten Variable (•) zu einer Phase α beschrieben werden: (•) $_{\alpha}$, sofern sich die Phasenzuordnung dieser Größe nicht unmittelbar erkennen oder aus dem Zusammenhang ableiten lässt.

Ein anschauliches Beispiel für eine Mehrphasenströmung

Um ein illustratives Beispiel vorab zu zeigen, das dem Typ der in dieser Arbeit zu behandelnden und zu simulierenden Mehrphasenströmungen entspricht, soll im Folgenden die 'pneumatische Förderung' betrachtet werden. So werden nachstehend in aller Kürze jene Strömungszustände beschrieben, die für dieses Beispiel der grobdispersen Gas-Feststoff-Strömung charakteristisch sind. Für detaillierte Erläuterungen hierzu sei auf die Bücher von Stieß [229] und Kraume [137] sowie auf die Veröffentlichung von Muschelknautz & Krambrock [189] verwiesen. Die 'pneumatische Förderung' bezeichnet eine Gas-Feststoff-Strömung, bei der feinkörnige Güter, wie z. B. Zucker, Getreide oder Kies, mittels Druckluft (Gas) durch eine Rohrleitung transportiert werden. In Abb. 2.1 sind jene Förder- oder Strömungszustände schematisch illustriert, die für die pneumatische Horizontalförderung charakteristisch sind. Eine der hier wesentlichen Größen, von denen der Förderzustand im Rohr abhängt, ist die Feststoffbeladung. Diese Kennzahl beschreibt das Massenstromverhältnis des geförderten Feststoffes zum durchgesetzten Gas. Liegt nun der Fall vor, dass der Transport des Gutes im Rohr bei niedriger Feststoffbeladung und hohen Gasgeschwindigkeiten erfolgt, so werden die Stoffteilchen in der Regel fliegend und dabei nahezu gleichmäßig über den Leitungsquerschnitt verteilt gefördert, was für den Zustand der Flugförderung bezeichnend ist. Wenn ausgehend von diesem Förderzustand die Gasgeschwindigkeiten um ein gewisses Maß abnehmen, sodass die Feststoffbeladung zunimmt, kann das Gut ab einer gewissen Beladung nicht mehr vollständig im Schwebezustand gefördert werden. Folglich fällt ein



Abbildung 2.1: Verschiedene Förder- bzw. Strömungszustände bei der pneumatischen Förderung von feinkörnigen Gütern (nach Stieß [229]).

Teil des Gutes aus der Strömung aus und sammelt sich über dem Rohrboden an, wo sich allmählich eine Schicht von Ablagerungen ausbildet. Im Folgenden wird die Ladung dann teils in Bodennähe als Strähne, teils über dem Boden fliegend gefördert. Dementsprechend spricht man an dieser Stelle von der Strähnenförderung. Sinken die Gasgeschwindigkeiten weiter, so stellt sich mit der Zeit die Dünen- und Ballenförderung ein, bei der sich die Ablagerungen quasi dünenartig durch die Leitung bewegen. Nach einer weiteren Abnahme der Gasgeschwindigkeit ergibt sich letztlich die Pfropfenförderung. Hier türmen sich die Ballen prinzipiell so auf, dass sie den Rohrquerschnitt vollständig einnehmen und Pfropfen bilden. In der Folge baut sich über die entstehenden einzelnen Pfropfen hinweg jeweils ein Gasdruckgradient auf. Erreicht die vor dem Pfropf aufkommende Druckkraft dabei ein gewisses Maß, sodann schiebt diese Kraft das vor ihr liegende Gut quasi durch das Rohr. Bei der Pfropfenförderung besteht in der Tat die Gefahr, dass während des Transports mehrere solcher Pfropfen aufeinander auflaufen, mithin an Länge zunehmen, sodass unter Umständen die vorhandenen Druckkräfte schließlich nicht mehr ausreichen, um die Ladung kontinuierlich zu transportieren. Gegebenenfalls droht das Rohr dann langsam zu verstopfen, zumal wenn zwischen den Feststoffteilchen und der Rohrwandung erhöhte Reibwerte vorliegen.

2.2 Grundlegende Größen und Beziehungen

Im Folgenden sollen einige grundlegende charakteristische Größen und Beziehungen kurz angesprochen werden, die hinsichtlich der Behandlung von Fluid-Partikel-Strömungen von Bedeutung sind. Für detaillierte Ausführungen zu den nachstehenden Darstellungen wird auf die weiterführende Literatur verwiesen, siehe z. B. [39–41, 218, 223].

Die Reynoldszahl. Eine der wesentlichen Kennzahlen der Strömungsmechanik ist die Reynoldszahl. Sie stellt eine Größe zur Beurteilung der mechanischen Ähnlichkeit der Strömungen von zwei zu vergleichenden geometrisch ähnlichen Systemen dar. Die Reynoldszahl gibt das Verhältnis der Trägheitskraft zur Reibungskraft des Fluids an [218] und ist wie folgt definiert:

$$Re = \frac{vL}{\nu} \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{\mu}{\rho}.$$
 (2.1)

Hierin ist L ein charakteristisches Längenmaß des betrachteten Strömungsproblems und v bezeichnet das zugehörige Geschwindigkeitsmaß. Ferner sind ν die kinematische Fluidviskosität, ρ die Fluiddichte und μ die dynamische Fluidviskosität. Über die Ähnlichkeitsbetrachtung hinaus wird die Reynoldszahl oft auch herangezogen, um den Charakter einer Strömung – also ob dieser laminar oder turbulent ist – quantitativ abzuschätzen oder vorherzusagen. Dafür wird generell ein problemspezifischer, experimentell ermittelter kritischer Abgrenzungswert $Re_{\rm krit}$ herangezogen. Der gibt an, wann eine stabile laminare Strömung beginnt, instabil zu werden, sodass sie bei kleinster Störung in eine turbulente Strömung bei ungefähr $Re_{P,\rm krit} \approx 3.7 \cdot 10^5$ [39, 40]. Demnach wird die Grenzschichtströmung an der Partikeloberfläche instabil, evtl. turbulent, wenn für die Reynoldszahl $Re_P := v_{\infty} d/\nu$ eines ruhenden und gleichförmig angeströmten Partikels gilt: $Re_P \cong Re_{P,\rm krit}$. Hierin stellen v_{∞} und d die charakteristischen Maße der Partikel-Reynoldszahl dar, wobei ersteres die Anströmgeschwindigkeit und letzteres den Partikeldurchmesser bezeichnen.

Die Machzahl. Eine weitere wesentliche dimensionslose Kennzahl der Strömungsmechanik ist die Machzahl Ma. Sie ergibt sich aus dem Quotienten zwischen der Strömungsgeschwindigkeit v und der Schallgeschwindigkeit c, wobei diese die Geschwindigkeit darstellt, mit der sich die lokalen Druckstörungen im Fluid ausbreiten:

$$Ma = \frac{v}{c} \,. \tag{2.2}$$

Die Machzahl ist eine wichtige Größe zur Beurteilung der Kompressibilität des Fluids in einer Strömung. Mit Blick auf die Kompressibilität von Flüssigkeiten kann allgemein festgehalten werden, dass bei den meisten technischen Strömungsproblemen die Dichteänderung der Flüssigkeit in der Tat vernachlässigt werden kann – und zwar bis zu Drücken von annähernd 500 bar [223]. Demgemäß geht man bei der Modellierung von Flüssigkeiten in der Regel von einem inkompressiblen Fluid aus, also von einer Flüssigkeit mit konstanter Dichte. Indessen erfahren Gase im Vergleich zu Flüssigkeiten schon unter äußerst relativ geringen Druckstörungen wesentliche Dichteänderungen – daher werden Gase generell als kompressibel betrachtet. Trotz dieses materialspezifischen Verhaltens lassen sich Gasströmungen in guter Näherung auch als inkompressibel abbilden, wenn für die Strömung folgendes zutrifft: Ma < 0.3. Wie in Sigloch [223] gezeigt wird, ist die Dichteänderung bei Gasen in diesem Bereich der Machzahl so gering, dass die Gaskompressibilität in dem Fall zumeist vernachlässigt werden kann. Denn beispielsweise beträgt die relative Dichteänderung der Luft bei $Ma \approx 0.3$ (v = 100 m/s, c = 340 m/s) ungefähr $\Delta \rho / \rho_0 \approx 5\%$, wobei gilt: $\Delta \rho / \rho_0 \approx (1/2)(v/c)^2$ [223].

Die Widerstandskraft. Die Durchführung einer numerischen Simulation zur Berechnung der Widerstandskraft F_w eines Partikels ist mit einem sehr hohen Rechenaufwand verbunden. Alternativ zur numerischen Berechnung lässt sich F_w auch analytisch anhand der allgemeinen Widerstandsbeziehung bestimmen, und zwar vergleichsweise mit unerheblichem Aufwand. Diese Beziehung greift auf das Reynoldssche Ähnlichkeitsgesetz zurück. Grundsätzlich ist sie nur gültig, wenn das Partikel sich in einer ungestörten parallelen Fluidströmung befindet (z. B. [218, 223]). In dem Fall wird die Widerstandskraft eines ruhenden Partikels durch die folgende analytische Beziehung beschrieben:

$$F_w = \frac{1}{8} \pi \rho \, c_w \, d^2 \, v_\infty^2 \,. \tag{2.3}$$

Hierin bezeichnen v_{∞} die Anströmgeschwindigkeit, ρ die Fluiddichte, d den Partikeldurchmesser und c_w die Widerstandszahl des Partikels. Der dimensionslose Proportionalitätsfaktor c_w zeigt sich als ein von der Partikel-Reynoldszahl nichtlinear abhängiger Beiwert: $c_w = c_w(Re_P)$. Um diese nichtlineare Beziehung analytisch zu erfassen, werden in der Literatur zahlreiche auf experimentellen Ergebnissen basierende Korrelationsfunktionen $f(Re_P)$ vorgeschlagen, wo also gilt: $c_w = f(Re_P)$. Eine Vielzahl von Funktionen dieser Art sind z. B. in Brown & Lawler [28], Clift *et al.* [39] oder Cheng [33] zusammengefasst zu finden.

Die Stokeszahl. Inwieweit die in einer Mehrphasenströmung befindlichen Partikel im Stande sind, sich den Änderungen des Geschwindigkeitsfeldes des Trägerfluids anzupassen und der Fluidströmung zu folgen, hängt vom Trägheitsverhalten der Partikel in der Strömung ab. (Effekte infolge Gewichtskraft seien hier außen vor gelassen.) So treten in einem instationären Strömungsfeld generell größere Relativbewegungen zwischen einem Partikel und dem es umgebenden Fluid auf, wenn das Feststoffteilchen auf die örtlichen Geschwindigkeitsänderungen des Fluids relativ träge anspricht und insofern der Strömung verzögert folgt. Weist ein Partikel hingegen in der Strömung eine kleine Trägheit auf, sodass es relativ schnell auf die 'neuen' Strömungsverhältnisse reagiert, so ist jenes Teilchen in der Lage, der Fluidströmung mit entsprechend geringer Verzögerung bzw. mit einem gewissen kleinen Schlupf zu folgen. Die spezifische Kennzahl, die das Folgevermögen eines Partikels in der Strömung kennzeichnet, ist die Stokeszahl St [40, 41]. Berechnet wird diese Größe aus dem Quotienten der Partikelrelaxationszeit τ_P und einem für das Trägerfluid charakteristischen Zeitmaß τ_F :

$$St = \frac{\tau_P}{\tau_F}$$
, wobei gilt: $\tau_P = \frac{\rho d^2}{18 \,\mu}$ und $\tau_F = \frac{L}{v}$. (2.4)

Hierin stellt μ die dynamische Fluidviskosität dar, ρ und d bezeichnen die Partikeldichte respektive den Partikeldurchmesser, L und v sind ein kennzeichnendes Längen– bzw. Geschwindigkeitsmaß des Strömungsgebietes. Nach obiger Definition gilt somit: Je größer die Stokeszahl ist, desto träger reagiert ein Partikel auf die Geschwindigkeitsänderungen im Strömungsfeld – oder anders formuliert – je kleiner die Stokeszahl ist, umso besser kann ein Partikel der Strömung folgen.

Eine bedeutende Form von St ist die Kollisions-Stokeszahl: $St_k = \tau_P/\tau_k$. Damit lassen sich verdünnte Mehrphasenströmungen $(St_k < 1)$ von dichten $(St_k > 1)$ quantitativ differenzieren [40, 41]. In diesem Zusammenhang steht das charakteristische Zeitmaß des Fluids τ_k für eine mittlere Zeitspanne, in welcher zwei aufeinander folgende Partikel-Partikel-Kollisionen im Gemisch stattfinden. Bezeichnend ist bei Strömungen mit $St_k < 1$, dass die im Fluid befindlichen Partikel meistens genügend Zeit haben, um nach einem Stoß sich an das Strömungsfeld anzupassen und der Fluidbewegung wieder zu folgen, bevor sie erneut einen Partikelstoß eingehen. Die wesentliche Wechselwirkung oder Impulsübertragung stellt hier demnach die Fluid-Partikel-Interaktion dar. Demgegenüber zeichnen sich Strömungen mit $St_k > 1$ dadurch aus, dass bei ihnen die Bewegungen der dispersen Teilchen neben Fluidkräften auch wesentlich durch Kollisionskräfte geprägt werden. Insofern folgen die Teilchen in dem Fall nicht allein der Fluidströmung, sondern ihr Bewegungsverhalten wird ebenso maßgeblich durch die Wechselwirkung aus der Partikel-Partikel-Interaktion bestimmt.

2.3 Phasenwechselwirkung

Als von besonderer Bedeutung hinsichtlich der Modellierung von dispersen Mehrphasenströmungen erweist sich der Aspekt der Phasenkopplung. Denn in dieser Beziehung stellt sich mit Blick auf den Modellierungsaufwand in aller Regel stets die Frage, inwieweit die Anwesenheit der dispersen Phase einen Einfluss auf die Fluidströmung hat. Zumal ist die Abschätzung – ob bei einer Mehrphasenströmung sich der Impulsübertrag von der dispersen Phase auf das Fluid vernachlässigen lässt oder ob jener Impulsübertrag so ausgeprägt ist, dass er berücksichtigt werden muss – insofern von Belang, als eine in diesem Sinne unberechtigte Vereinfachung des Problems das reale Systemverhalten entweder zu ungenau oder aber auch bei einer in der Tat vorhandenen starken Phasenwechselwirkung falsch wiedergibt.

Der charakteristische Parameter, der den Grad der Phasenkopplung beschreibt und somit ein quantitatives Maß zur Beurteilung der Relevanz des von der dispersen Phase auf das Fluid übertragenen Impulses darstellt, ist der Impulskopplungsparameter [40, 41]:

$$\Pi = \frac{C}{1+St} \,. \tag{2.5}$$

Hierin ist St die Stokeszahl, ferner bezeichnet C die in der Strömung vorhandene Partikelmassenkonzentration. Zieht man also zur Beurteilung der Wichtigkeit der Phasenkopplung einer mehrphasigen Strömung den Impulskopplungsparameter heran, so kann man offenbar im Fall von $\Pi \ll 1$ davon ausgehen, dass die disperse Phase einen unerheblichen Einfluss auf die Fluidströmung hat – die Phasen unterliegen hier demnach vorwiegend einer Ein-Wege-Kopplung (siehe Abb. 2.2). Nimmt die Partikelmassenkonzentration jener Strömung allerdings zu, sodass Π größere Werte annimmt, dann ist gemäß (2.5) mit einer Zunahme der gegenseitigen Beeinflussung der Phasen zu rechnen. Numerische Studien, die dies explizit in Verbindung mit Π zeigen, finden sich in Ling *et al.* [162]. Konsequenterweise spricht man bei einem vornehmlich bidirektional ausgerichteten Im-



Abbildung 2.2: Kopplungsschema von Fluid-Partikel-Strömungen (nach Crowe [40]).

pulsaustausch der Phasen von einer Zwei-Wege-Kopplung und des Weiteren sogar von einer Drei-Wege-Kopplung, sofern die aus der Umströmung der Partikeloberflächen hervorgehenden Störungen der Strömung – wie z. B. Wirbel, Wirbelablösungen, Strömungsschatten oder dergleichen Effekte – auf die Partikelbewegungen einen merklichen Einfluss haben. Eine Drei-Wege-Kopplung liegt in der Regel vor, wenn die Mehrphasenströmung über eine relativ hohe Volumenkonzentration der dispersen Phase verfügt. Handelt es sich bei der betrachteten Strömung außerdem um eine dichte Strömung, so ist dann damit zu rechnen, dass die Partikelbewegungen nicht mehr allein durch die Fluidströmung bzw. durch die Strömungskräfte bestimmt werden, sondern dass die aus den regen Partikel-Partikel-Kollisionen hervorgehenden Stoßkräfte auch eine deutliche Wirkung in Bezug auf das Bewegungsverhalten der Partikel in der Strömung zeigen. Folgerichtig spricht man in diesem Fall von einer Vier-Wege-Kopplung der Phasen.

Bemerkungen zur Modellierung der Phasenkopplung

Zur Modellierung der Phasenwechselwirkung wird in der vorliegenden Arbeit ein auf einer Vier-Wege-Kopplung basierender Ansatz verfolgt. Numerische Verfahren für Mehrphasenströmungen, denen solch ein Ansatz zugrunde liegt, sind hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit bzw. Gültigkeit zum einen unabhängig von der vorliegenden Partikelkonzentration der zu betrachtenden Strömung und zum anderen auch unabhängig davon, ob es sich bei der Fluid-Partikel-Strömung um ein dichtes oder verdünntes System handelt. Diese beiden Aussagen treffen natürlich nicht zu, wenn bei der Modellbildung einer oder mehrere der oben beschriebenen 'Kopplungswege' ausgeklammert werden. So sind z. B. Modelle, in denen die Aspekte 'Partikelumströmung und Partikel-Partikel-Kollision' nicht berücksichtigt werden, wodurch sich die Partikel im Fluid quasi wie Massenpunkte verhalten, lediglich für verdünnte Strömungen mit niedriger Partikelvolumenkonzentration gültig. Angesichts der Betrachtung der Partikel als Massenpunkte liegt es hier zweifelsohne auf der Hand das Modell an der Längenskala des Strömungsfeldes auszurichten (Fluidskala), wobei die Elemente des Rechennetzes für das Fluidgebiet in aller Regel eine mittlere Abmessung

11

besitzen, die größer als diejenige der Stoffteilchen ist. Im Gegensatz hierzu werden die Partikel bei den im Sinne der Phasenwechselwirkung vollständig gekoppelten Verfahren als Volumenkörper behandelt bzw. abgebildet, sodass die Partikelumströmungen detailliert aufgelöst beschrieben werden. In diesem Fall wird die Längenskala des Modells durch die Partikelabmessungen bestimmt (Partikelskala). Der Ansatz auf der Partikelskala, bei dem die Fluidelemente wesentlich kleiner als die Partikel gewählt werden, erlaubt es, die auf die Stoffteilchen wirkenden Fluidkräfte direkt aus dem Strömungsfeld zu bestimmen. Dies ist zum einen auf die sehr feine Auflösung des Strömungsfeldes zurückzuführen und zum anderen natürlich auf den Umstand, dass die Partikel hier als Volumenkörper beschrieben werden, die konsequenterweise – im Gegensatz zu Massenpunkten – eine Verdrängungswirkung auf das Fluid haben und sie insofern entlang ihrer Oberfläche umströmt werden. Diesen Ausführungen zufolge verwendet man an dieser Stelle oft die Begrifflichkeit 'Direkte Numerische Simulation' (DNS), siehe z. B. [9, 60, 61, 83, 106, 195, 284]. Dass die Phasenwechselwirkung bei einer Modellierung auf der Partikelskala weitgehend genau erfasst wird, ist naheliegend. Diesbezüglich ist aber auch zu erwähnen, dass diese Genauigkeit mit einem sehr hohen numerischen Berechnungsaufwand erkauft wird. Wird eine Mehrphasenströmung hingegen auf der Fluidskala abgebildet, so führt dies prinzipiell auf ein Modell, das verglichen mit jenem entsprechenden auf der Partikelskala erheblich weniger rechenintensiv ist. Dieser Vorzug schließt allerdings den Nachteil mit ein, dass zur Erfassung der Fluid-Partikel-Interaktion diverse semiempirische Ansätze herangezogen werden müssen. Solch ein Zugang zur Fluid-Partikel-Modellierung [98, 103, 128, 130, 263] spielt in dieser Arbeit aber keine Rolle, da der Fokus der hier vorgenommenen Betrachtungen in der Aufarbeitung und Entwicklung eines sich auf einer Vier-Wege-Kopplung gründenden DNS-Ansatzes liegt.

Hinweis: An dieser Stelle soll am Rande darauf hingewiesen werden, dass der im Rahmen der Fluid-Partikel-Strömung geläufige DNS-Begriff nicht mit jener DNS-Bezeichnung verwechselt werden darf, die im Kontext der Turbulenzmodellierung von Strömungen anzutreffen ist. Denn in der Beziehung beschreibt die DNS einen Ansatz zur 'Direkten Numerischen Simulation' der Fluidturbulenz. Dieser sehr rechenaufwendige Ansatz verfolgt als Ziel, die turbulenten Effekte der Strömung – und zwar bis hin auf die kleinskaligen Turbulenzen – direkt auf Basis einer hoch aufgelösten räumlichen und zeitlichen Diskretisierung des zugrunde liegenden mechanischen Systems abzubilden, sprich ohne die Verwendung eines expliziten Turbulenzmodells.

Kapitel 3: Mechanische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die mechanischen Grundgleichungen zur Behandlung der Fluidströmung und der Partikelbewegung vorgestellt. Dafür werden zuerst die möglichen Betrachtungsweisen hinsichtlich der Beschreibung der Phasenkinematik angesprochen. Daran anschließend erfolgt eine kurze Darstellung der Theoreme, die für die Herleitung der allgemeinen Erhaltungsgleichungen dienlich sind. Unter Hinzunahme dieser Theoreme wird dann eine Ableitung der einzelnen Erhaltungsgleichungen oder Bilanzgleichungen, welche in dieser Arbeit zum Einsatz kommen, vorgenommen. Zum Abschluss des Kapitels werden schließlich die aus den hier angeführten Bilanzen hervorgehenden Grundgleichungen der Fluid- und Partikeldynamik vorgestellt. Umfassende Darstellungen zu den in diesem Kapitel wiedergegebenen Ausführungen können der speziellen Fachliteratur [12, 29, 57, 84, 174, 218, 227, 251] entnommen werden.

3.1 Betrachtungsweisen

Zur Betrachtung der Kinematik eines materiellen Körpers sind in der Mechanik drei Ansätze bekannt: Hierzu gehören zum einen die beiden klassischen Ansätze nach Euler und Lagrange und zum anderen der auf die Arbeit von Hirt *et al.* [101] zurückzuführende ALE-Ansatz ('Arbitrary-Lagrangian-Eulerian'). Die wesentlichen Grundideen dieser drei Konzepte werden im Folgenden aufgezeigt. Dafür soll hier ein sog. Beobachter eingeführt werden, der die Kinematik des zu beschreibenden kontinuierlichen Körpers betrachtet. Geht man in der Hinsicht einen Schritt weiter, und zwar so, dass der Körper in diskretisierter Form betrachtet wird, dann übernimmt das diesbezüglich generierte Rechennetz die Aufgabe des Beobachters.

Die Lagrangesche Betrachtungsweise. Der Lagrangesche Beobachter sitzt bei diesem Konzept quasi auf einem der Materiepunkte des Körpers, mit welchem er gleichzeitig fest verbunden ist, und bewegt sich mit ihm auf dessen Bahnlinie. Dabei registriert er kontinuierlich, wie sich die physikalischen Größen des Materiepunktes (substantielle Größen) derweil ändern. Da hier als Bezugssystem ein materieller Punkt zugrunde gelegt wird, wird der Lagrange-Ansatz ferner auch als 'materielle Betrachtungsweise' bezeichnet. Was das Rechennetz in diesem Zusammenhang angeht, so lässt sich hierzu anführen, dass dieses in Entsprechung zum Beobachter ebenso mit dem materiellen Körper fest verbunden ist – ergo führen Netz und Körper bei diesem Ansatz dieselben Bewegungen aus.

Die Eulersche Betrachtungsweise. Der Eulersche Beobachter bewegt sich nicht. Er ist ortsgebunden und besitzt als Bezugssystem einen festen Raumpunkt. So spricht man hier auch von einer 'räumlichen Betrachtungsweise'. Angesichts dessen, dass der Eulersche Beobachter ortsorientiert ist, interessiert sich dieser logischerweise für Orts- bzw. Feldgrößen, und nicht – wie der Lagrangesche Beobachter – für die Größen eines einzelnen Materiepunktes. Bei diesem Konzept wird an jenem festen Raumpunkt in der Tat

registriert, wie die physikalischen Größen der unmittelbar am Beobachter vorbeiziehenden materiellen Punkte sich mit der Zeit ändern. Des Weiteren soll an dieser Stelle festgehalten werden, dass das Eulersche Netz gleichermaßen wie der Beobachter von den Bewegungen des materiellen Körpers vollständig entkoppelt ist und damit völlig unbeweglich im Raum verharrt.

Die ALE-Betrachtungsweise. Bei der ALE-Betrachtungsweise sind Beobachter und Netz in kinematischer Hinsicht ungebunden. Folglich bewegen sich diese zum einen in Bezug auf den betrachteten Körper und zum anderen in Bezug auf Raumpunkte frei und können dabei unter Umständen auch die Lagrangesche oder die Eulersche Betrachtungsweise annehmen, siehe z. B. [13, 55, 267] für Details. Die ALE-Formulierung schließt demnach die beiden klassischen Ansätze mitein, wobei diese konsequenterweise die zwei entgegenliegenden Extremfälle der ALE-Formulierung darstellen. Denn der Beobachter und das Rechennetz können bei dieser Betrachtungsweise sowohl zum einen Extremum hin vollständig am materiellen Körper fest haften (Lagrange-Fall) als auch zum anderen Extremum hin von diesem vollständig losgelöst und damit im Raum quasi fest verankert vorliegen (Euler-Fall).

Allgemeines zu den einzelnen Betrachtungsweisen

Der Einsatz der Lagrangeschen Betrachtungsweise bietet sich vor allem dann an, wenn Problemstellungen aus dem Bereich der Festkörpermechanik und Partikeldynamik zu behandeln sind. Denn anhand dieser Betrachtungsweise lassen sich einerseits Deformationen von Festkörpern elegant beschreiben [13, 279] und andererseits Bewegungen von Partikeln einfach verfolgen [99, 204]. Zur Beschreibung der Deformation eines Körpers ist vorab ein Rechennetz erforderlich. Wie bereits erwähnt, zeichnet sich das Lagrange-Netz dadurch aus, dass es an den Materiepunkten des Körpers haftet und sich insofern mit diesem mitverformt. Aus der Tatsache, dass die Maschen oder Elemente des Netzes im Falle einer großen Deformation des Objektes für gewöhnlich stark verzerrt werden, ergibt sich hier die Problematik, dass im Laufe einer Berechnung unter Umständen ein allzu verzerrtes und damit unbrauchbares Netz entsteht. Es sei denn, dieses wird entsprechend oft verworfen und neu erstellt, was jedoch sehr rechenintensiv ist.

Die Eulersche Betrachtungsweise eignet sich hingegen vornehmlich zur Behandlung von strömungsmechanischen Problemstellungen [35, 100]. In diesem Fall ist man nicht wie oben an substantiellen Größen der Materiepunkte interessiert, sondern das Hauptaugenmerk liegt an dieser Stelle vielmehr auf der Betrachtung von Feldgrößen, wobei es sich in erster Linie um das Geschwindigkeitsfeld und um das Druckfeld der Strömung handelt. Angesichts dessen, dass das Netz hier im Raum fest verankert ist, besitzt der Euler-Ansatz einerseits zwar die Fähigkeit große Bewegungen von Materiepunkten zu behandeln, ist aber andererseits wegen des starren Netzes nicht in der Lage, Strömungen in zeitlich veränderlichen Gebieten zu beschreiben, wie z. B. solche mit freien Oberflächen.

Das ungebundene ALE-Netz ist indessen imstande, sowohl zeitlich veränderliche Gebiete abzubilden, als auch große Bewegungen von Materiepunkten zu beschreiben. Die ALE-Methode vereint somit die Vorzüge jener beiden klassischen Konzepte. Das Hauptanwendungsgebiet dieser Methode ist die Behandlung von Strömungssystemen, bei denen bewegliche bzw. sich bewegende Festkörper (z. B. flexible Strukturen, starre oder deformierbare Volumenkörper) im Fluid umströmt werden [75, 76]. Das adaptive ALE-Strömungsnetz ist hier an die Körper, die hingegen in Lagrangescher Betrachtungsweise beschrieben werden, angepasst und bewegt sich lokal in Anlehnung an deren Oberfläche. Sofern allerdings während einer Simulation allzu große Elementverzerrungen im diskretisierten System resultieren, muss dieses in dem Fall neu vernetzt werden. Beim ALE-Konzept ist die aufwendige Netzerneuerung, die von Zeit zu Zeit in der Hinsicht vorzunehmen ist, vor allem bei solchen Systemen die Regel, wo die in der Strömung befindlichen Körper und/oder die Strömungsberandungen sehr große Bewegungen ausführen. Hierzu gehören beispielsweise Fluid-Partikel-Strömungen, Strömungen mit freier Oberfläche sowie u. a. Fluid-Struktur-Interaktionen von Fallschirmen und Airbags [117, 215].

Einsatz der Betrachtungsweisen im Rahmen der DNS

Die Verwendung des ALE-Ansatzes zur Simulation von Fluid-Partikel-Gemischen bzw. Fluid-Partikel-Strömungen ist in der Literatur – im Speziellen in Bezug auf die Betrachtung von 3D Systemen – nicht sehr weit verbreitet. Das liegt zumal daran, dass der Einsatz der ALE für die Behandlung von partikelbeladenen Strömungen mit einem sehr großen Rechenaufwand verbunden ist. Denn angesichts dessen, dass Partikel relativ große Bewegungen ausführen, sich annähern und kollidieren, wobei die Diskretisierung in den Bereichen zwischen benachbarten Partikeloberflächen zur dortigen Abbildung der Fluidströmung lokal ständig verfeinert werden muss, ist hier insofern häufig eine rechenintensive Neuvernetzung des Strömungsgebietes erforderlich (vgl. Abb. 3.1(a)). Daher lässt sich der Simulations- oder Rechenaufwand im Falle von 3D Fluid-Partikel-Systemen mit größerer Partikelanzahl in der Regel nur allein mit paralleler Software in Verbindung mit massivparallelen Rechnern bewältigen. Die wegweisenden Arbeiten in diesem Kontext stammen von Johnson & Tezduyar $[115-118]^1$ – denn sie konnten u.a. erstmalig die Sedimentation einer größeren Anzahl von Partikeln, und zwar zuerst von 100 [116] und dann von 1000 Partikeln [117], dreidimensional vollständig aufgelöst beschreiben. Die Berechnungen dafür wurden auf Höchstleistungsrechnern durchgeführt. Weitere an dieser Stelle erwähnenswerte Beiträge liefert die Gruppe um Hu [104–106]. Hierunter soll die Veröffentlichung [105] hervorgehoben werden, da sie die erste Arbeit darstellt, bei der die ALE zur Behandlung von Fluid-Partikel-Strömungen eingesetzt wurde, was allerdings in 2D erfolgte.

Sucht man eine Alternative zu ALE, um Strömungen mit Fluid-Körper-Wechselwirkungen zu behandeln, so könnte sie in einen der zahlreichen Verfahren des 'Fictitious Domain'-Ansatzes (FD) liegen, die in der Literatur in diesem Zusammenhang gleichermaßen weit verbreitet sind. Die FD-Verfahren zeichnen sich dadurch aus, dass bei ihnen die beiden klassischen Betrachtungsweisen kombiniert werden, und zwar unter Zugrundelegung des Euler-Ansatzes für das Fluid und des Lagrange-Ansatzes für die Festkörper. Zum FD-Konzept lassen sich u. a. folgende Methoden zuordnen: die 'Immersed Boun-

¹Die Arbeiten von Johnson & Tezduyar [115–118] beruhen auf der Anwendung der 'Space-Time'-Methode, siehe auch Tezduyar *et al.* [244, 245]. Diese Methode erweist sich analog zur ALE und kann in gewissem Sinne als ein spezielles ALE-Verfahren betrachtet werden [176, 267]. In Bezug auf die Ansätze unterscheiden sich beide Methoden voneinander insofern, als bei der 'Space-Time' die Diskretisierung der räumlichen und zeitlichen Ebene anhand eines gleichzeitigen Raum-Zeit-Ansatzes erfolgt, wohingegen bei der ALE die Diskretisierung der beiden Ebenen nacheinander vorgenommen wird, siehe z. B. die Ausführungen in [17, 176, 244, 267].

dary Method' (IBM) [198, 199, 258], das 'Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain'-Konzept (DLM/FD) [81–83] sowie die 'Fictitious Boundary Method' (FBM) [187, 268, 269]. Der gemeinsame Grundgedanke dieser Methoden liegt zum einen darin, dass bei ihnen das zu betrachtende Strömungsfeld ungeachtet der im Fluid befindlichen Festkörper mit einem durchgehenden Euler-Netz diskretisiert wird. Zum anderen werden die Festkörper hier als fiktive Lagrangesche Objekte beschrieben und sind somit in der Lage, das starre Netz ungehindert zu passieren (vgl. Abb. 3.1(b)). Damit aber die Auswirkungen auf die Strömung ausgehend vom Vorhandensein der imaginären Körper im Fluid sowie von ihren Bewegungen darin erfasst werden können, sind die zugrunde liegenden Euler-Formulierungen hier diesbezüglich zu erweitern. Dieser Aspekt stellt den Kern der einzelnen FD-Methoden dar. Dabei haben die Erweiterungen im Grunde zum Ziel, das Fluid dahingehend zu beeinflussen, dass die innerhalb der Umgrenzung der fiktiven Objekte liegenden 'Fluidteilchen' die entsprechenden Geschwindigkeiten des Festkörpers annehmen, von dem sie augenblicklich quasi fiktiv überlagert werden.

Angesichts des beachtlichen Simulationsaufwandes, der bei der Verwendung der ALE zur Behandlung von Fluid-Partikel-Strömungen anfällt, wird in der vorliegenden Arbeit das FD-Konzept propagiert. Dieses Konzept erfordert für die Durchführung dreidimensionaler DNS-Simulationen von dichten Mehrphasenströmungen im Gegensatz zur ALE keinen Höchstleistungsrechner, vielmehr reicht in dem Fall bereits ein weitgehend moderner Arbeitsplatzrechner aus.



Abbildung 3.1: Illustrative Darstellung der Betrachtungsweisen für Fluid-Partikel-Strömungen im Rahmen der DNS: (a) ALE-Verfahren und (b) FD-Verfahren.

3.2 Lagrangesche und Eulersche Kinematik

Momentan- und Referenzkonfiguration

Ein materieller Körper nimmt während seines Bewegungszustandes im 3D Euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^3 als Funktion der Zeit $t \in [t_0, T]$ verschiedene Raumgebiete $\Omega(t)$ ein. In der Hinsicht ist in Abb. 3.2 ein exemplarischer Körper \mathcal{B} unter Kennzeichnung seiner Oberfläche Γ sowohl in der Ausgangslage der Bewegung (Referenzkonfiguration: $\Omega_0 = \Omega(t_0)$) als auch in der aktuellen Lage (Momentankonfiguration: $\Omega = \Omega(t)$) illustrativ dargestellt. Bezüglich der Zusammensetzung des Körpers soll davon ausgegangen werden, dass \mathcal{B} einphasig ist und vom Aggregatzustand her fest, flüssig oder gasförmig sein kann. Des Weiteren soll vorausgesetzt werden, dass der Körper aus einer kontinuierlichen Menge von Materiepunkten \mathcal{P} besteht. Es gilt also: $\mathcal{B} = \{\mathcal{P}\}$. Im Hinblick auf die Beschreibung der



Abbildung 3.2: Referenz- und Momentankonfiguration eines materiellen Körpers \mathcal{B} .

Bewegungszustände der materiellen Punkte wird hier ein kartesisches Koordinatensystem festgelegt. Bezieht man sich bei der Betrachtung eines Materiepunktes $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ auf den Ursprung \mathcal{O} dieses Systems, dann lassen sich die Ortsvektoren von \mathcal{P} zu den Zeitpunkten t_0 und t unter Hinzunahme der Einsteinschen Summenkonvention folgendermaßen angeben: $\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i$ bzw. $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$, wobei $X_{i=\{1,2,3\}}$ und $x_{i=\{1,2,3\}}$ die materiellen respektive die räumlichen Ortskoordinaten sind und $\mathbf{e}_1^T = (1,0,0)$, $\mathbf{e}_2^T = (0,1,0)$ sowie $\mathbf{e}_3^T = (0,0,1)$ die entsprechenden drei Einheitsvektoren der Koordinatenachsen im Vektorraum \mathbb{R}^3 darstellen. Es wird in Abb. 3.2 des Weiteren angedeutet, dass die Positionierung einzelner materieller Punkte von der Referenzkonfiguration in die Momentankonfiguration mittels einer Abbildungsfunktion $\boldsymbol{\phi}$ erfolgt, d. h. es gilt:

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, t) \,. \tag{3.1}$$

Damit die Abbildung des Körpers zwischen den beiden Konfigurationen und folglich auch dessen Bewegungszustand eindeutig beschrieben werden kann, ist es zwingend erforderlich, dass sämtliche Materiepunkte sowohl in Ω_0 als auch in Ω eine eindeutige Position einnehmen. Zur Umschreibung einer Konfiguration mit dieser Eigenschaft verwenden Becker & Bürger [12] den Begriff der 'Eineindeutigkeit'². Setzt man das Merkmal der Eineindeutigkeit für alle Konfigurationen voraus, die der Körper während der Bewegung einnimmt, so lässt sich für jeden Zeitpunkt t eine inverse Abbildungsfunktion ϕ^{-1} angeben, womit **X** anhand der Relation

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\phi}^{-1}(\mathbf{x}, t) \tag{3.2}$$

stets bestimmbar wird.

Definitionen: Im Hinblick auf die Darstellung materieller und räumlicher Ableitungen

²Nach Becker & Bürger [12] besagt die Eineindeutigkeit einer Konfiguration, dass jedem Materiepunkt eine einzelne Position zugewiesen wird und ferner, dass jede Position einen einzelnen materiellen Punkt aufnehmen kann (Eins-zu-eins-Abbildung).

von Größen bietet es sich an dieser Stelle an, einige Rechenoperatoren samt ihrer Definition einzuführen. Dies soll nachstehend für den Gradienten-Operator $\nabla(\cdot)$, den Divergenz-Operator $\nabla \cdot (\cdot)$ und den Laplace-Operator $\Delta(\cdot)$ erfolgen, und zwar sowohl in Bezug auf die Referenzkonfiguration als auch auf die Momentankonfiguration:

Referenzkonfiguration: $\nabla_X(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \mathbf{X}}, \quad \nabla_X \cdot (\cdot) = [\nabla_X(\cdot)] : \mathbf{1}, \quad \Delta_X(\cdot) = \nabla_X \cdot [\nabla_X(\cdot)]$

Momentankonfiguration: $\nabla_x(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \mathbf{x}}, \quad \nabla_x \cdot (\cdot) = [\nabla_x(\cdot)] : \mathbf{1}, \quad \Delta_x(\cdot) = \nabla_x \cdot [\nabla_x(\cdot)].$

Hierin ist 1 der Einheitstensor 2. Stufe. Für eine detaillierte Ausführung und Beschreibung dieser Operatoren sei auf de Boer [49] verwiesen.

Die Lagrangesche und Eulersche Beschreibung der Kinematik

Die Beschreibung des Bewegungszustandes eines materiellen Körpers \mathcal{B} kann, wie schon besprochen, entweder aus der Lagrangeschen oder aus der Eulerschen Sichtweise erfolgen, wobei die jeweilige Betrachtungsweise formal aus der Wahl der Bezugskonfiguration hinsichtlich des zu umschreibenden Körpers resultiert.

Die Lagrangesche Beschreibung. Bei der Lagrangeschen Beschreibung des Körpers \mathcal{B} wird die Referenzkonfiguration als Bezugskonfiguration herangezogen. Die kinematischen Größen der verfolgten materiellen Punkte $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ sind damit eine Funktion der materiellen Koordinaten X und der Zeit t, sodass man an dieser Stelle mit Blick auf Gleichung (3.1) die folgende Beziehung darstellen kann:

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) \,. \tag{3.3}$$

Um die Kinematik des Körpers \mathcal{B} zu umschreiben, gilt es außerdem, dessen Verschiebungsfeld zu bestimmen. Dafür liefert der Verschiebungsvektor **u**, welcher beispielhaft für einen einzelnen materiellen Punkt \mathcal{P} in Abb. 3.2 illustriert ist, die grundlegende Größe. Dieser Vektor lässt sich aus der Differenz der Ortsvektoren des Materiepunktes in Bezug auf seine Momentan- und Referenzkonfiguration berechnen:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X},t) = \mathbf{x} - \mathbf{X}$$
 mit $\mathbf{X} = \mathbf{x}(\mathbf{X},t_0)$. (3.4)

Zwei andere elementare kinematische Größen in diesem Zusammenhang sind die Geschwindigkeit \mathbf{v} und die Beschleunigung \mathbf{a} eines materiellen Punktes. Die beiden Größen folgen aus (3.4) durch eine einmalige bzw. zweimalige materielle Zeitableitung:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X},t) = \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{X},t)}{\partial t} = \dot{\mathbf{x}} =: \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t}$$
(3.5)

$$\mathbf{a}(\mathbf{X},t) = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X},t)}{\partial t} = \ddot{\mathbf{x}} =: \frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{\mathrm{d}t}.$$
(3.6)

Man spricht hier bezugnehmend auf die unabhängigen materiellen Koordinaten X von materiellen Größen, sodass $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$ und $\mathbf{a}(\mathbf{X}, t)$ dementsprechend als materielle Geschwindigkeit bzw. als materielle Beschleunigung bezeichnet werden können.

Die Eulersche Beschreibung. Wenn die Bewegung des Körpers \mathcal{B} im Rahmen der Eulerschen Betrachtung umschrieben werden soll, dann stellt die Momentankonfiguration die maßgebliche Bezugskonfiguration dar. In dem Fall erweisen sich die beobachteten kinematischen Größen als eine Funktion der räumlichen Koordinaten \mathbf{x} und der Zeit t, sodass analog zur Darstellung (3.3) unter Beachtung von (3.2) die Beziehung

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\phi}^{-1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t) \tag{3.7}$$

angegeben werden kann. Dieser Ausdruck beschreibt oder kennzeichnet jene Materiepunkte, die mit der Zeit t die räumlich feste Stelle \mathbf{x} passieren. So ist es anhand dessen möglich, die materielle Geschwindigkeit (3.5) und die materielle Beschleunigung (3.6) in die jeweils entsprechende räumliche Form zu überführen:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X},t) = \mathbf{v}(\mathbf{X}(\mathbf{x},t),t) = \mathbf{v}(\mathbf{x},t)$$
(3.8)

$$\mathbf{a}(\mathbf{X},t) = \mathbf{a}(\mathbf{X}(\mathbf{x},t),t) = \mathbf{a}(\mathbf{x},t).$$
(3.9)

Diese Größen unterscheiden sich – wie hier zu sehen ist – lediglich in Bezug auf ihre Abhängigkeiten. Die letztere der beiden eben angeführten Gleichungen kann alternativ auch wie folgt wiedergeben werden:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{v}(\mathbf{X},t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}(\mathbf{x},t)}{\mathrm{D}t},\tag{3.10}$$

worin $D(\cdot)/Dt$ den auf Feldgrößen anzuwendenden zeitlichen Ableitungsoperator bezeichnet. Die rechte Seite dieser Identitätsbeziehung, also die materielle Zeitableitung des Geschwindigkeitsfeldes Dv/Dt, lässt sich durch Hinzunahme der Kettenregel umformen, sodass folgt:

$$\mathbf{a}(\mathbf{x},t) := \frac{\mathbf{D}\mathbf{v}(\mathbf{x},t)}{\mathbf{D}t} = \frac{\partial\mathbf{v}(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{x}(\mathbf{X},t)}{\partial t}\frac{\partial\mathbf{v}(\mathbf{x},t)}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\partial\mathbf{v}(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{x}\mathbf{v}.$$
 (3.11)

Hierin beschreibt $\partial \mathbf{v} / \partial t$ die räumliche Zeitableitung der Geschwindigkeit und $\mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{v}$ ist der nichtlineare konvektive Term, der aus der Relativbewegung zwischen dem beobachteten materiellen Punkt und dem räumlich fest verankerten Ort \mathbf{x} hervorgeht.

Bemerkung: Das Überführen von Größen von der Lagrange-Darstellung in die Euler-Form und vice versa impliziert natürlich die bereits erwähnte Eins-zu-eins-Abbildung der materiellen Punkte unter den beiden verschiedenen Bezugskonfigurationen. Dabei wird die Umkehrung einer Transformation mathematisch durch die Bedingung einer nicht verschwindenden Jacobischen Funktionaldeterminante $J = \det(\partial \mathbf{x}/\partial \mathbf{X})$ abgesichert – d. h., es muss in diesem Zusammenhang gelten: $J \neq 0$.

3.3 Divergenz- und Transport-Theorem

Bei den Darstellungen im nächsten Unterkapitel wird vom Divergenz- und vom Transport-Theorem Gebrauch gemacht. Diese Theoreme sollen daher nachfolgend in Bezug auf den in Abb. 3.2 illustrierten Körper \mathcal{B} vorgestellt werden – und zwar sowohl im Zusammenhang mit einer skalaren Feldgröße ($\psi = \psi(\mathbf{x}, t)$) wie auch mit einer vektoriellen ($\psi = \psi(\mathbf{x}, t)$).

Das Divergenz-Theorem (Gauß-Theorem) besagt, dass der durch die Oberfläche Γ des Körpers \mathcal{B} stattfindende integrale Fluss einer stetig differenzierbaren Feldgröße gleich dem Volumenintegral über \mathcal{B} ist, welches hinsichtlich der Divergenz derselben Feldgröße gebildet wird:

$$\int_{\Gamma} \psi \,\mathbf{n} \,\mathrm{d}\Gamma = \int_{\Omega} \nabla_{x} \psi \,\mathrm{d}\Omega \,, \quad \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} \,\mathrm{d}\Gamma = \int_{\Omega} \nabla_{x} \cdot \boldsymbol{\psi} \,\mathrm{d}\Omega \,. \tag{3.12}$$

Darin ist **n** der nach außen gerichtete Normalene
inheitsvektor auf Γ .

Das Transport-Theorem (Reynolds-Theorem) impliziert, dass die materielle Zeitableitung des Volumenintegrals einer über den Körper \mathcal{B} ermittelten Feldgröße durch die Summe aus dem Volumenintegral der räumlichen Zeitableitung dieser Größe und deren konvektivem Transport oder Fluss durch die Körperoberfläche ersetzt werden kann:

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\Omega} \psi \,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial t} \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma} \psi \,\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \,\mathrm{d}\Gamma$$
(3.13)

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi} \,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma} (\boldsymbol{\psi} \otimes \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \,\mathrm{d}\Gamma \,.$$
(3.14)

Überführt man nun bei diesen zwei Identitäten die Oberflächenintegrale mittels des Divergenz-Theorems in Volumenintegrale, so lassen sich Gleichung (3.13) und (3.14) auch wie folgt schreiben:

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\Omega} \psi \,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\psi \,\mathbf{v}) \right) \mathrm{d}\Omega \tag{3.15}$$

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi} \,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial t} + \nabla_{x} \cdot \left(\boldsymbol{\psi} \otimes \mathbf{v} \right) \right) \mathrm{d}\Omega \,. \tag{3.16}$$

Bezüglich der Darstellungen (3.15) und (3.16) ist jeweils zu erwähnen, dass das Integrationsgebiet Ω beim erlangten Integral (rechts) gegenüber dem Ausgangsintegral (links) nunmehr von der Zeitableitung unberührt ist.

3.4 Bilanzgleichungen

Die Bilanz- oder Erhaltungsgleichungen definieren allgemeingültige Beziehungen der Mechanik, die von einem materiellen Körper stets zu erfüllen sind. Diese Gleichungen postulieren stoffunabhängige Aussagen und sind mithin nicht an die materialspezifischen Beschaffenheiten eines Körpers gebunden. Die Problemstellungen, die in dieser Arbeit betrachtet werden, erfordern die Bilanzierung der Masse, des Impulses und des Dralls. Die Erhaltungsgleichungen dieser Größen sollen daher nachstehend behandelt werden, wobei dies im Rahmen der Eulerschen Betrachtungsweise erfolgen soll. Für die Herleitung der Gleichungen ist im Allgemeinen vorauszusetzen, dass die Variablen sowohl stetig als auch genügend oft stetig differenzierbar sind. Geht man von dieser Bedingung aus und betrachtet den Umstand, dass die Bilanzen für jedes beliebige Teilgebiet des kontinuierlichen Körpers gültig angeschrieben werden können, dann gelten sie nicht nur in integraler oder globaler Form, sondern auch in differentieller oder lokaler Form (siehe Malvern [174] für Details).

Massenbilanz

Die Massenbilanz besagt, dass die Masse m eines geschlossenen Körpers \mathcal{B} zeitlich konstant ist, d. h. es gilt:

$$\frac{\mathrm{D}m}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{m} \mathrm{d}m = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\Omega} \rho \,\mathrm{d}\Omega = 0\,, \qquad (3.17)$$

worin $\rho = dm/d\Omega$ für die Massendichte des Körpers steht. Zur Auswertung von (3.17) bietet es sich an, das Transport-Theorem (3.15) heranzuziehen. Setzt man darin $\psi = \rho$, so kann die Integralform

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{3.18}$$

und im Weiteren die Differentialform

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot \left(\rho \,\mathbf{v}\right) = 0 \tag{3.19}$$

der Massenbilanz in Euler-Darstellung unschwer angegeben werden. Nach einigen Umformungen von (3.19) lässt sich die lokale Massenbilanz alternativ auch wie folgt darstellen:

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} + \rho \,\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{mit} \quad \frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x \rho \,. \tag{3.20}$$

Bemerkung: Bei Gleichung (3.19) spricht man mit Rücksicht auf den Divergenz-Term $(\nabla_x \cdot (\rho \mathbf{v}))$ üblicherweise von der Divergenz-Form der Massenbilanz und die Beziehung (3.20) wird angesichts ihres konvektiven Charakters $(\mathbf{v} \cdot \nabla_x \rho)$ für gewöhnlich als die Konvektiv-Form der Massenbilanz bezeichnet.

Sonderfall: Insofern ein Material volumenbeständig (inkompressibel) ist oder so betrachtet werden kann, d. h. wenn $\rho = \text{const gilt}$, vereinfacht sich die Konvektiv-Form der Massenbilanz durch den Wegfall der Zeitableitung der Dichte ($D\rho/Dt = 0$) allein auf die folgende Beziehung:

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0. \tag{3.21}$$

Demzufolge fordert die Massenerhaltung im Hinblick auf die Bewahrung der Volumenbeständigkeit eines Materials lediglich die Bedingung, dass dessen lokales Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei ist.

Impulsbilanz

Die Impulsbilanz postuliert, dass die zeitliche Impulsänderung eines materiellen Körpers
\mathcal{B} gleich der Resultierenden der auf ihn wirkenden Kräfte ist. Diese Aussage kommt dem zweiten Newtonschen Grundgesetz gleich und kann wie folgt angegeben werden:

$$\frac{\mathrm{D}\mathbf{I}}{\mathrm{D}t} = \mathbf{F} \,. \tag{3.22}$$

Dabei ist \mathbf{I} der Impulsvektor

$$\mathbf{I} = \int_{\Omega} \rho \, \mathbf{v} \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.23}$$

und \mathbf{F} steht für die resultierende äußere Kraft

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\Omega} + \mathbf{F}_{\Gamma} = \int_{\Omega} \rho \, \mathbf{b} \, \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma \,, \qquad (3.24)$$

welche sich aus der Summe der am Körper angreifenden Volumenkraft \mathbf{F}_{Ω} (Fernwirkung) und Oberflächenkraft \mathbf{F}_{Γ} (Nahwirkung) zusammensetzt. In (3.24) charakterisiert **b** die Volumenkraftdichte und **t** bezeichnet den auf einem infinitesimalen Oberflächenelement des Körpers stehenden Spannungsvektor, der als

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \tag{3.25}$$

definiert ist. Der Ausdruck (3.25) stellt das Cauchy-Theorem dar. Wie aus dessen Definition hervorgeht, wird bei ihm der Cauchysche Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ über den Oberflächennormalenvektor **n** mit dem Spannungsvektor **t** verknüpft. Setzt man nun die Gleichungen (3.22)-(3.25) ineinander ein und wendet anschließend auf die rechte Seite des resultierenden Ausdrucks das Divergenz-Theorem (3.12)₂ und auf die linke Seite das Transport-Theorem (3.16) an, wobei bei letzterem für $\boldsymbol{\psi}$ die folgende Beziehung zu verwenden ist: $\boldsymbol{\psi} = \rho \mathbf{v}$, so erhält man in Divergenz-Form die integrale Formulierung

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) \, \mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \left(\rho \mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \mathrm{d}\Omega \tag{3.26}$$

und im Weiteren die differentielle Form

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \rho \mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}$$
(3.27)

der Impulsbilanz in Eulerscher Betrachtung. Die konvektive Version der Impulsbilanz folgt ausgehend von (3.27) nach einigen Zwischenrechnungen unter Beachtung der Massenbilanz (3.19) zu

$$\rho \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}}{\mathrm{D}t} = \rho \,\mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad \text{mit} \quad \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{v} \,. \tag{3.28}$$

Hierin gibt der Term, welcher im ersten Ausdruck links vom Gleichheitszeichen steht, die Trägheitskraft eines materiellen Punktes an.

Drallbilanz

Die Drallbilanz fordert, dass die zeitliche Änderung des Dralls \mathbf{L} eines Körpers \mathcal{B} gleich dem Moment \mathbf{M} infolge der am Körper angreifenden Volumen- und Oberflächenkräfte ist:

$$\frac{\mathrm{D}\mathbf{L}}{\mathrm{D}t} = \mathbf{M}\,.\tag{3.29}$$

Wenn man zur Bilanzierung des Dralls beispielsweise den Ursprung des raumfesten Koordinatensystems \mathcal{O} als Bezugspunkt wählt, dann lauten die einzelnen Elemente dieser Erhaltungsgleichung folgendermaßen:

$$\mathbf{L}^{(\mathcal{O})} = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \rho \, \mathbf{v} \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.30}$$

$$\mathbf{M}^{(\mathcal{O})} = \mathbf{M}_{\Omega}^{(\mathcal{O})} + \mathbf{M}_{\Gamma}^{(\mathcal{O})} = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \rho \, \mathbf{b} \, \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{x} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma \,.$$
(3.31)

Um nun die Integral- und Differentialform der Drallbilanz zu bestimmen, sind die Gleichungen (3.29)-(3.31) zunächst zusammenzuführen. Man erhält anschließend eine Formulierung, die durch Einbeziehung des Reynolds-Theorems (3.16), des Cauchy-Theorems (3.25) und zuletzt des Divergenz-Theorems $(3.12)_2$ so umgeformt werden kann, dass im Weiteren unter Beachtung der beiden Bilanzbeziehungen (3.20) und (3.28) sich daraus jene zwei Formen der Drallbilanz gewinnen lassen, für welche gilt:

$$\int_{\Omega} \mathbf{E} : \boldsymbol{\sigma}^T \, \mathrm{d}\Omega = \mathbf{0} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{E} : \boldsymbol{\sigma}^T = \mathbf{0} \,. \tag{3.32}$$

Hierin stellt \mathbf{E} den Permutationstensor 3. Stufe dar. Damit der Integrand in (3.32) lokal an jedem Punkt im Integrationsgebiet verschwindet, sodass die differentielle Form der Drallbilanz erfüllt wird, ist im Prinzip Folgendes zu fordern:

$$\boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\sigma} \,. \tag{3.33}$$

Demnach endet die Drallbilanz (3.29) im Postulat der Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors σ .

3.5 Starrkörperdynamik

In der Festkörpermechanik bietet es sich an, einen materiellen Körper \mathcal{B} als Starrkörper zu behandeln, sofern seine Deformationen aufgrund der von außen auf ihn wirkenden Kräfte vernachlässigbar gering sind. In diesem Zusammenhang wird die Annahme getroffen, dass die Materiepunkte $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ sich infolge der Krafteinwirkung nicht gegenseitig verschieben. Unter dieser Voraussetzung kann die Bewegung eines Körpers als eine Superposition seiner Translationsbewegung sowie einer Rotationsbewegung um einen beliebig ausgewählten Körperpunkt, durch welchen dann die Rotationsachse des Körpers durchgeht, umschrieben werden. Im Folgenden sollen die wesentlichen Grundgleichungen zur Beschreibung der Starrkörperbewegung in Lagrange-Form dargestellt werden. Für detaillierte Ausführungen zur Starrkörperdynamik sei hier auf Goldstein *et al.* [84] oder Bruhns [29] verwiesen.

Kinematik der Starrkörperbewegung

Zur Beschreibung der Kinematik eines ungebundenen starren Körpers \mathcal{B} ist es zweckmäßig, seinen Massenmittelpunkt \mathcal{M} als den körperbezogenen Referenzpunkt zu wählen. Der Ortsvektor zu diesem Punkt ist im raumfesten kartesischen Koordinatensystem, wie es in Abb. 3.2 dargestellt ist, folgendermaßen zu bestimmen:

$$\mathbf{x}_{\mathrm{M}} = \frac{1}{m} \int_{\Omega} \rho \, \mathbf{x} \, \mathrm{d}\Omega = \frac{1}{m} \int_{m} \mathbf{x} \, \mathrm{d}m \,. \tag{3.34}$$

Sofern der charakteristische Punkt \mathcal{M} zur Beschreibung des Bewegungszustandes der Materiepunkte $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ in Betracht gezogen wird – und zwar mit dem Koordinatenursprung \mathcal{O} als Bezugspunkt –, dann lautet der diesfällige Gleichungssatz wie folgt:

$$\mathbf{x}(\mathbf{X},t) = \mathbf{x}_{\mathrm{M}} + \mathbf{r} \tag{3.35}$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{X},t) = \mathbf{v}_{\mathrm{M}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \tag{3.36}$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{X},t) = \mathbf{a}_{\mathrm{M}} + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}).$$
(3.37)

Dabei sind $\boldsymbol{\omega}$ und $\dot{\boldsymbol{\omega}}$ die Winkelgeschwindigkeit bzw. die Winkelbeschleunigung des Starrkörpers und $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_M$ bezeichnet jenen Vektor, der vom Massenmittelpunkt \mathcal{M} zum Materiepunkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ zeigt.

Kinetik des Starrkörpers

Für starre Körper kann sowohl die Definition für den Impuls (3.23) wie auch die für den Drall (3.30) nach Einarbeitung der eben beschriebenen kinematischen Beziehungen der Starrkörperbewegung modifiziert wiedergegeben werden. Die erstgenannte der beiden Bilanzen mündet hier nach einigen wenigen Umformungen in

$$\mathbf{I} = m \, \mathbf{v}_{\mathrm{M}} \tag{3.38}$$

und für die zweitgenannte kann bezüglich des raumfesten Punktes \mathcal{O} die Aussage

$$\mathbf{L}^{(\mathcal{O})} = \mathbf{x}_{\mathrm{M}} \times \mathbf{I} + \mathbf{\Theta} \cdot \boldsymbol{\omega} = \mathbf{x}_{\mathrm{M}} \times \mathbf{I} + \mathbf{L}^{(\mathcal{M})}$$
(3.39)

gewonnen werden, wobei folgende Definitionen gelten:

$$\boldsymbol{\Theta} = \int_{m} \left(\left(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \right) \mathbf{1} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} \right) \mathrm{d}m$$
(3.40)

$$\mathbf{L}^{(\mathcal{M})} = \boldsymbol{\Theta} \cdot \boldsymbol{\omega} \,. \tag{3.41}$$

Hierin bezeichnet Θ den Massenträgheitstensor und $\mathbf{L}^{(\mathcal{M})}$ steht für den sich auf den Massenmittelpunkt \mathcal{M} beziehenden Drall des Starrkörpers.

Wendet man nun auf einen starren Körper \mathcal{B} die Impulsbilanz (3.22) in Verbindung mit Gleichung (3.38) an und zieht ferner die Massenbilanz (3.17) hinzu, so folgt der für starre Körper gültige Massenmittelpunktsatz des Newtonschen Grundgesetzes:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{I}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\,\mathbf{v}_{\mathrm{M}}) = m\,\mathbf{a}_{\mathrm{M}} = \mathbf{F}, \quad \forall t \in (t_0, T)\,.$$
(3.42)

Darin ist der Ausdruck $m \mathbf{a}_{M}$ als die Trägheitskraft des materiellen Körpers zu interpretieren. Ein wenig umfangreicher als die Behandlung der Impulsbilanz ist die zeitliche Ableitung des Dralls, die im Folgenden in Bezug auf \mathcal{M} betrachtet werden soll. Da in dem Fall $\mathbf{x}_{M} = \mathbf{0}$ gilt, ergibt sich aus den Gleichungen (3.29) und (3.41) unmittelbar die nachstehende Beziehung:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{L}^{(\mathcal{M})}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{\Theta}\cdot\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{M}^{(\mathcal{M})}.$$
(3.43)

Zur weiteren Betrachtung der Drallbilanz bietet es sich an dieser Stelle an, im Massenmittelpunkt des Körpers ein zweites Bezugssystem einzuführen, das im Gegensatz zum bereits dort vorhandenen System die Eigenschaft besitzt, gemeinsam mit dem Objekt mitzurotieren (Index 'R'). Denn da die Einträge des Massenträgheitstensors Θ beziehentlich eines mitrotierenden Systems zeitlich konstant sind, lässt sich die Zeitableitung des Tensors durch diese Maßnahme und mit der Anwendung des nachfolgenden Ausdrucks umgehen:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{L}^{(\mathcal{M})}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{L}^{(\mathcal{M})}}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{R}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{L}^{(\mathcal{M})}.$$
(3.44)

Diese Relation besagt allgemein ausgedrückt, dass die zeitliche Änderung eines Vektors in einem körperfesten, aber räumlich orientierten System gleich der Summe der Beiträge aus der zeitlichen Ableitung des Vektors im körperfesten, mitrotierenden System und aus der Richtungsänderung des Vektors ist, siehe Goldstein *et al.* [84]. So folgt wegen (3.44) dann aus (3.43) die als Eulersche Gleichung bekannte Formulierung:

$$\boldsymbol{\Theta} \cdot \dot{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\Theta} \cdot \boldsymbol{\omega}) = \mathbf{M}^{(\mathcal{M})}, \quad \forall t \in (t_0, T).$$
(3.45)

Sie stellt die Grundgleichung zur Beschreibung der Rotationsbewegung eines Starrkörpers dar. Der Gleichungssatz, welcher im Rahmen der Starrkörperdynamik zu lösen ist, umfasst also die beiden gewöhnlichen Differentialgleichungen (3.42) und (3.45). Diese werden zusammengenommen als Newton-Euler-Gleichungen bezeichnet.

Sonderfall: Für den Fall eines sphärischen Körpers bzw. einer Kugel vereinfacht sich die Euler-Gleichung (3.45) nach Auswertung des Massenträgheitstensors, der hier die Form

$$\Theta = \Theta \mathbf{1} \quad \text{mit} \quad \Theta = \frac{2}{5} m R^2 \tag{3.46}$$

annimmt, umgehend zu

$$\Theta \dot{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{M}^{(\mathcal{M})}, \quad \forall t \in (t_0, T).$$
(3.47)

Hierbei bezeichnet $m = (4/3) \rho \pi R^3$ die Masse der Kugel und R ist der Kugelradius.

Anfangsbedingungen

Die Newton-Euler-Bewegungsgleichungen stellen, wie bereits erwähnt, einen Satz gewöhnlicher Differentialgleichungen dar. Um dieses Gleichungssystem lösen zu können, sind Angaben bezüglich der kinematischen Anfangsgrößen der Partikel erforderlich. Es handelt sich hier nämlich um ein sog. Anfangswertproblem (AWP). Im Hinblick auf die Bewältigung des Newton-Euler-AWPs werden bei den Newton-Gleichungen Aussagen zur Anfangslage und Anfangsgeschwindigkeit der Partikel,

$$\mathbf{x}_{M,0} = \mathbf{x}_{M}(t = t_{0})$$
 bzw. $\mathbf{v}_{M,0} = \mathbf{v}_{M}(t = t_{0})$, (3.48)

und bei den Euler-Gleichungen Aussagen hinsichtlich ihrer Anfangsorientierung und Anfangsrotationsgeschwindigkeit,

$$\boldsymbol{\varphi}_0 = \boldsymbol{\varphi}(t = t_0) \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\omega}_0 = \boldsymbol{\omega}(t = t_0), \quad (3.49)$$

benötigt. Die Angabe $(3.49)_1$ ist natürlich bei sphärischen Partikeln nicht erforderlich. Denn in Anbetracht dessen, dass ein sphärisches Partikel einen punktsymmetrischen Charakter besitzt, ist die Konsequenz der äußeren Oberflächenkräfte bei einem dergleichen Körper folglich unabhängig von dessen Orientierung.

3.6 Fluiddynamik

Im Folgenden werden die bereits vorgestellten stoffunabhängigen Bilanzgleichungen im Hinblick auf die Beschreibung der Fluiddynamik um eine Materialgleichung erweitert. Im Anschluss daran werden dann die Grundgleichungen zur Behandlung von inkompressiblen viskosen Strömungen in Euler-Form zusammengefasst wiedergegeben. Für eine detaillierte Abhandlung der nachstehenden Angaben sei auf die Fachliteratur [218, 251] verwiesen.

Konstitutivgleichung

Bekanntermaßen setzen sich die Cauchyschen Spannungen σ eines viskosen Fluids aus zwei Anteilen zusammen, und zwar additiv aus den Spannungen infolge des hydrostatischen Drucks p^* und aus den viskosen Spannungen τ . Es gilt hier also:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p^* \, \mathbf{1} + \boldsymbol{\tau} \,. \tag{3.50}$$

Die viskositätsbedingte Größe τ zeigt sich in dieser Beziehung als eine Variable, die von den Verzerrungsgeschwindigkeiten

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \Big(\nabla_{x} \mathbf{v} + (\nabla_{x} \mathbf{v})^{T} \Big)$$
(3.51)

des Fluids abhängt, d. h. $\tau = \tau(\varepsilon)$. Geht man hier davon aus, dass zwischen τ und ε eine lineare Abhängigkeit besteht, so handelt es sich in dem Fall ergo um ein linear-viskoses Fluid, wobei man oft auch von einem Newtonschen Fluid spricht. Der mathematische

Ansatz zur Abbildung der linear-viskosen Fluidspannungen kann unter Hinzunahme der beiden unabhängigen Lamé-Parameter λ und μ durch

$$\boldsymbol{\tau} = \lambda(\boldsymbol{\varepsilon}: \mathbf{1})\mathbf{1} + 2\,\mu\,\boldsymbol{\varepsilon} \tag{3.52}$$

angegeben werden. Beachtet man an dieser Stelle, dass $\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{1} = \nabla_x \cdot \mathbf{v}$ ist, dann lässt sich ferner auch schreiben:

$$\boldsymbol{\tau} = \lambda(\nabla_x \cdot \mathbf{v})\mathbf{1} + 2\,\mu\,\boldsymbol{\varepsilon}\,. \tag{3.53}$$

In dieser Darstellung ist unschwer zu erkennen, dass die viskosen Spannungen im linken Summenterm auf die Volumenänderung und damit auf die Dichteänderung des Fluids zurückzuführen sind – vergleiche hierfür (3.20) – und dass die Spannungen im rechten Summenterm aus der Gestaltsänderung des Fluids herrühren. Der auf die Volumenrate bezogene Term kann noch unter Hinzunahme der Relation: $\lambda = \kappa - 2 \mu / 3$, wobei κ für die Volumenviskosität steht, umgeformt werden. (Es wird hier bezüglich μ in Entsprechung zu κ auch von der Scherviskosität oder dynamischen Viskosität gesprochen.) Letztlich erhält man nach Einsetzen der erweiterten Form von (3.53) in (3.50) die nachstehenden Beziehungen:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{vol}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}} \quad \text{mit} \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_{\text{vol}} = (-p^* + \kappa (\nabla_x \cdot \mathbf{v}))\mathbf{1} \\ \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}} = 2\,\mu \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3}(\nabla_x \cdot \mathbf{v})\mathbf{1}\right). \end{cases}$$
(3.54)

Dieser Gleichungssatz stellt die Materialgleichung für ein kompressibles Newtonsches Fluid dar. Darin charakterisieren $\sigma_{\rm vol}$ und $\sigma_{\rm iso}$ den volumetrischen bzw. isochoren Anteil der Fluidspannungen. Eine Vereinfachung ergibt sich hier für σ , wenn von dem weitverbreiteten Stokesschen Ansatz: $\kappa = 0$ ausgegangen wird. In dem Fall resultieren die volumetrischen Spannungen allein aus dem hydrostatischen Druck, also ausschließlich aus $\sigma_{\rm vol} = -p^* \mathbf{1}$.

Sonderfall: Betrachtet man in diesem Zusammenhang den Sonderfall des inkompressiblen Fluids, wobei bekanntlich gilt: $\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0$, so reduziert sich die Materialgleichung (3.54) dann angesichts dieser Forderung auf die folgende Form:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p^* \, \mathbf{1} + 2\,\mu\,\boldsymbol{\varepsilon}\,. \tag{3.55}$$

Inkompressible Navier-Stokes-Gleichungen

Die Fluidströmung wird in dieser Arbeit als inkompressibel, linear-viskos und instationär vorausgesetzt. Die Grundgleichungen zur Beschreibung solch einer Strömung bestehen aus der Impulsbilanz (3.27) oder (3.28), der Massenbilanz (3.21) und der Stoffgleichung (3.55). Zusammenfassend wird dieser Gleichungssatz als inkompressible Navier-Stokes-Gleichungen bezeichnet. Wenn man nun Gleichung (3.55) in (3.27) und (3.28) einfügt und bei der daran anschließenden Umformung beachtet, dass $\rho = \text{const sowie } \mu = \text{const sind}$, so ergeben sich die folgenden beiden Sätze nichtlinearer partieller Differentialgleichungen: • Divergenz-Form der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \, \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \mu \, \nabla_x \mathbf{v}) = \rho \, \mathbf{b} - \nabla_x p^* \quad \text{in } \Omega, \, \forall t \in (t_0, T)$$
(3.56)

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0 \qquad \text{in } \Omega, \,\forall t \in (t_0, T) \qquad (3.57)$$

• Konvektiv-Form der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\rho \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}}{\mathrm{D}t} = \rho \mathbf{b} + \mu \Delta_x \mathbf{v} - \nabla_x p^* \qquad \text{in } \Omega, \,\forall t \in (t_0, T) \qquad (3.58)$$

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0 \qquad \qquad \text{in } \Omega, \, \forall \, t \in (t_0, T) \tag{3.59}$$

Es ist zu beachten, dass die beiden Formulierungen (3.56) und (3.58) nur bei Fluidströmungen mit einem divergenzfreien Geschwindigkeitsfeld zueinander äquivalent sind. Abgesehen davon unterscheiden sich diese beiden Beziehungen physikalisch gedeutet dahingehend, dass sie die Impulserhaltung auf eine durchaus verschiedene Weise implizieren. Denn was die Aussage (3.56) diesbezüglich anbelangt, so beschreibt sie in differentieller Form eine Transportformulierung, bei der lokal die räumliche Zeitableitung des Impulses $(\rho \mathbf{v})$ sowohl über einen konvektiven $(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v})$ wie auch über einen diffusiven Flussterm $(\mu \nabla_x \mathbf{v})$ sowie zuzüglich über einen Quellterm $(\rho \mathbf{b} - \nabla_x p^*)$ bilanziert wird. Hingegen lässt sich die Identitätsbeziehung (3.58) als eine lokale Kräftebilanz auffassen, worin für einen Materiepunkt ein dynamisches Kräftegleichgewicht zwischen der Trägheitskraft $(\rho \mathbf{D} \mathbf{v}/\mathbf{D}t)$ und den Kräften hervorgerufen durch die Volumenkraft $(\rho \mathbf{b})$, die viskose Kraft $(\mu \Delta_x \mathbf{v})$ sowie durch die Kraft aus dem lokalen Druckgradienten $(\nabla_x p^*)$ vorgenommen wird.

Anfangsbedingungen

Im Hinblick auf die Bestimmung der Fluidströmung erfordert die Impulsbilanz als Anfangsbedingung zum Zeitpunkt t_0 die Vorgabe eines Anfangsgeschwindigkeitsfeldes \mathbf{v}_0 , d. h.

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \quad \text{in } \Omega_0 \,. \tag{3.60}$$

Dieses muss bei inkompressiblen Fluiden zur Erfüllung der Massenbilanz natürlich divergenzfrei sein: $\nabla_x \cdot \mathbf{v}_0 = 0$. Im Gegensatz zur Geschwindigkeitsvariable besitzt die Druckvariable keine zeitliche Ableitung in den Navier-Stokes-Gleichungen und benötigt daher auch keine Anfangsbedingung. Das Druckfeld wird hier nämlich vom Geschwindigkeitsfeld reguliert, und zwar derart, dass sich der Druck unmittelbar an die zeitlichen Geschwindigkeitsänderungen anpasst, damit die Geschwindigkeiten divergenzfrei bleiben, siehe Donea & Huerta [55].

Randbedingungen

Neben der Anfangsbedingung für das Strömungsfeld sind zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen entsprechende Bedingungen auf dem Strömungsrand Γ vorzugeben. Dafür wird Γ in einen Dirichlet-Rand $\Gamma_{\rm D}$ und einen Neumann-Rand $\Gamma_{\rm N}$ unterteilt:

$$\Gamma = \Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm N} \quad \text{mit} \quad \Gamma_{\rm D} \cap \Gamma_{\rm N} = 0.$$
(3.61)

Jene Dirichlet-Randbedingungen oder – wie man auch sagt – wesentliche Randbedingungen, die in Form von Fluidgeschwindigkeiten $\overline{\mathbf{v}}$ auf Γ_{D} aufzubringen sind, sodass gilt:

$$\mathbf{v} = \overline{\mathbf{v}} \quad \text{auf } \Gamma_{\mathrm{D}}, \,\forall t \in (t_0, T) \,, \tag{3.62}$$

dienen dazu, dort u. a. Abschnitte als Einströmrand $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \overline{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n})$ oder als undurchlässige Wand mit Haftrandbedingung $(\mathbf{v} = 0)$ oder Gleitrandbedingung $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0)$ zu definieren. Auf dem Neumann-Rand, über den die natürlichen Zu- und Abflüsse des Strömungsgebietes Ω erfolgen, wird hingegen ein Spannungsvektor $\overline{\mathbf{t}^*}$ vorgeschrieben:

$$\mathbf{t} := \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \overline{\mathbf{t}^*} \quad \text{auf } \Gamma_{\mathrm{N}}, \,\forall t \in (t_0, T) \,. \tag{3.63}$$

Im mechanischen Modell ersetzt der Neumann-Rand oft einen realen Strömungsbereich, der sich in der Tat jenseits dieses Randes weiter erstreckt, und reguliert dabei zugleich die dortigen natürlichen Flüsse des betrachteten Modellgebietes Ω . Folgerichtig wird in diesem Fall neben Neumann-Randbedingungen auch von natürlichen Randbedingungen gesprochen. Sofern man hier analog zu den obigen Darstellungen bezüglich der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen wieder beachtet, dass $\rho = \text{const}$ und $\mu = \text{const}$ sind, so ergibt sich die Neumann-Randbedingung zu

$$(-p^* \mathbf{1} + \mu \nabla_x \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \overline{\mathbf{t}^*} \quad \text{auf } \Gamma_{\mathrm{N}}, \,\forall t \in (t_0, T) \,.$$

$$(3.64)$$

Der Term linksseitig der obigen Gleichung kann quasi als ein Pseudo-Spannungsvektor gedeutet werden [55], wohingegen der Spannungsvektor \mathbf{t} in (3.63) physikalisch interpretiert durchaus einen Randlastvektor beschreibt.

An dieser Stelle ist die Frage naheliegend, wie $\overline{\mathbf{t}^*}$ zu wählen ist, damit über den Neumann-Rand eine kontinuierliche, stetige Fluidströmung gewährleistet wird. Diese Problematik wird u.a. in Heywood *et al.* [97] sowie in den Beiträgen in Galdi *et al.* [76] ausführlich diskutiert. Eine weitverbreitete, gleichzeitig einfache Herangehensweise zur Behandlung der Neumann-Randbedingung ist jener Ansatz, bei dem auf Γ_N eine homogene Randbedingung, also $\overline{\mathbf{t}^*} = \mathbf{0}$, vorgesehen wird. Diese natürliche Randbedingung – sie kommt auch in der vorliegenden Arbeit zur Anwendung – wird als 'do-nothing'-Randbedingung bezeichnet und kann wie folgt angegeben werden [97]:

$$(-p^* \mathbf{1} + \mu \nabla_x \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \Gamma_{\mathrm{N}}, \,\forall t \in (t_0, T) \,.$$

$$(3.65)$$

In Bezug hierauf ist zu erwähnen, dass das Freilassen der auf dem Neumann-Rand befindlichen Randbedingungen insgeheim eine implizite Nebenbedingung mit sich bringt, durch welche der mittlere Druck auf einzelnen natürlichen Randabschnitten jeweils zu Null gebracht wird.

Kapitel 4: Finite-Elemente-Methode zur Berechnung der Fluidphase

Die Navier-Stokes-Gleichungen stellen ein gekoppeltes, nichtlineares Gleichungssystem dar, welches im Hinblick auf die Beschreibung der Fluidströmung zu lösen ist. Dies erfolgt prinzipiell mittels numerischer Berechnungsmethoden, denn für die Navier-Stokes-Gleichungen existieren in der Tat bislang noch keine allgemeingültigen analytischen Lösungsansätze. Als numerisches Berechnungsverfahren zur Lösung der besagten Strömungsgleichungen wird zumeist eine der folgenden drei angeführten Methoden herangezogen: die Finite-Volumen-Methode (FVM) [67, 100], die Finite-Differenzen-Methode (FDM) [35, 238] oder die Finite-Elemente-Methode (FEM) [55, 255]. Diese Methoden haben sich im Rahmen der 'Computational Fluid Dynamics' (CFD) bereits erfolgreich etabliert. Sie zeichnen sich dadurch aus, dass bei ihnen das für das Strömungsgebiet formulierte algebraisch kontinuierliche Problem, welches aus unendlich vielen Freiheitsgraden besteht, zur Berechnung räumlich wie auch zeitlich diskretisiert und damit in ein Problem mit endlich vielen Freiheitsgraden überführt wird. So betrachtet, ist hier letztlich eine endlichdimensionale Aufgabenstellung zu lösen. Dergleichen Verfahren, bei denen die Erhaltungsgleichungen auf der Grundlage ihrer diskreten Formulierung berechnet werden, gehören zu der Kategorie der Diskretisierungsverfahren. Zur diskreten Abbildung eines Strömungsproblems kann sowohl die Divergenz-Form als auch die Konvektiv-Form der kontinuierlichen Impulsgleichung – natürlich mitsamt der Massenerhaltung – als Ausgangspunkt dienen, wobei die erstere und die letztere Form der Impulsgleichung sich bei der FVM bzw. bei den anderen beiden Methoden jeweils als Ausgangsgleichung eignen.

Bei dem in dieser Arbeit entwickelten Modellansatz für Fluid-Partikel-Strömungen wird zur Behandlung der Fluidphase die FEM herangezogen. Dabei soll hinsichtlich der Lösung der diskretisierten Erhaltungsgleichungen (3.58) und (3.59) die Open-Source-Forschungssoftware FEATFLOW [256] zum Einsatz kommen. Dieses Programmpaket stellt einen geometrischen FEM-Mehrgitterlöser zur Simulation inkompressibler Fluide dar. Der Quelltext von FEATFLOW ist frei zugänglich – insofern hat man hier als Programmanwender oder Programmentwickler die Möglichkeit, den Navier-Stokes-Löser hinsichtlich der Erfordernisse der zu betrachtenden Problemfälle zu modifizieren. In dem Sinne soll FEAT-FLOW im Rahmen der vorliegenden Dissertation dahingehend erweitert werden, dass damit die kontinuierliche Phase von partikelbeladenen Strömungen behandelt werden kann. Da Abhandlungen der theoretischen Grundlagen, auf denen dieses FEM-Programm basiert, bereits in Turek [255], Schreiber [219] und Rannacher [209] ausführlich gegeben sind, soll daher im Folgenden – mit Verweis auf diese drei umfangreichen Arbeiten – lediglich eine kurze Ausführung über die hier zur Berechnung der Fluidphase zum Einsatz kommenden Verfahren gegeben werden. Für allgemeine Abhandlungen zur FEM im Kontext der Strömungsmechanik, die als weitere Ergänzung zu den nachstehenden Darstellungen herangezogen werden können, sei an dieser Stelle auf [55, 86, 87, 163, 267] verwiesen.

4.1 Das Anfangs-Randwertproblem der Navier-Stokes-Gleichungen

Starke Form des Anfangs-Randwertproblems

Im vorhergehenden Kapitel wurde das mechanische Problem der inkompressiblen viskosen Strömungen in differentieller Form vorgestellt. Dabei wurden auch die Aspekte in Bezug auf die Wahl der Anfangs- und Randbedingungen abgedeckt. Man bezeichnet das hier im Fokus stehende Gesamtproblem als die starke Form des Anfangs-Randwertproblems (ARWP) der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen. Sie soll nun nachstehend zusammengefasst wiedergegeben werden:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nu \,\Delta \mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{b} \quad \text{in} \quad \Omega, \ \forall t \in (t_0, T)$$
(4.1)

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{in} \quad \Omega, \quad \forall t \in (t_0, T)$$

$$(-p \mathbf{1} + \nu \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \overline{\mathbf{t}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_{\mathrm{N}}, \quad \forall t \in (t_0, T)$$

$$(4.3)$$

$$p\mathbf{I} + \nu \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{auf} \quad \Gamma_{\mathbf{N}}, \forall t \in (t_0, T)$$

$$(4.3)$$

$$\mathbf{v} = \overline{\mathbf{v}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_{\mathrm{D}}, \, \forall t \in (t_0, T)$$

$$(4.4)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \quad \text{in} \quad \Omega_0 \quad \text{mit} \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_0 = 0.$$
 (4.5)

Darin sind $\nu = \mu/\rho$ die kinematische Viskosität, $p = p^*/\rho$ der kinematische Druck und $\overline{\mathbf{t}} = \overline{\mathbf{t}^*}/\rho$ der spezifische Pseudo-Spannungsvektor. Wie zu erkennen ist, beziehen diese Größen die Fluiddichte ρ als Normierungsgröße ein.

Mit Blick auf den obigen Gleichungssatz kann die vorliegende Aufgabenstellung wie folgt festgehalten werden:

<u>Gegeben</u> sind für $t \in (t_0, T)$ das Gravitationsfeld **b**, die Fluiddichte ρ , die kinematische Viskosität ν , die Randlasten $\overline{\mathbf{t}}$ auf Γ_{N} , die Randbedingungen $\overline{\mathbf{v}}$ auf Γ_{D} und die Anfangsbedingung \mathbf{v}_0 in Ω_0 . <u>Finde</u> in Abhängigkeit der Zeit t die hierzu entsprechenden Felder $p(\mathbf{x}, t)$ und

 $\mathbf{v}(\mathbf{x},t)$ unter Erfüllung der Bilanzen (4.1) und (4.2).

Bemerkung: In Anbetracht dessen, dass in den eben aufgeführten Formulierungen sich alle Rechenoperatoren durchgehend auf Euler-Koordinaten beziehen, wurde bei jenen Ausdrücken der Operatorindex einfachheitshalber weggelassen. Diese Darstellungsweise soll in den nachfolgenden fluidbezogenen Abhandlungen beibehalten werden.

Schwache Form des Anfangs-Randwertproblems

Das Navier-Stokes-Problem stellt hinsichtlich der beiden unbekannten Feldvariablen $\{\mathbf{v}, p\}$ ein gemischtes Problem dar. Die Grundidee der FEM zur Lösung solch eines ARWPs beruht darin, die Erhaltungsgleichungen der zu bilanzierenden Größen nicht lokal zu erfüllen, sondern diesen im integralen Sinne zu genügen – und zwar in diskreter Form. Dafür ist die kontinuierliche starke Form des ARWPs allerdings zuerst in die kontinuierliche schwache zu überführen. Man spricht an der Stelle deshalb von der schwachen Form des ARWPs, weil zum einen die Gleichungen bei ihr nicht lokal, vielmehr global erfüllt werden und weil zum anderen sie im Vergleich zur starken Form an die Variablen in puncto Differenzierbarkeit eine geringere Anforderung stellt. Dieser Punkt wird anhand der hieran anschließenden Ausführungen deutlich.

Die schwache Form des ARWPs erhält man, indem man das Residuum der Impulsbilanz (4.1) und die Inkompressibilitätsbedingung (4.2) zuerst mit einer Geschwindigkeitstestfunktion $\mathbf{w} = \mathbf{w}(\mathbf{x})$ im anderen Fall mit einer Drucktestfunktion $q = q(\mathbf{x})$ wichtet, dann die resultierenden Ausdrücke über Ω integriert, sodass folgt:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nu \,\Delta \mathbf{v} + \nabla p - \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{w} \,\mathrm{d}\Omega = 0 \tag{4.6}$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v}) q \,\mathrm{d}\Omega = 0, \qquad (4.7)$$

und letztlich die beiden Volumenintegrale $\int_{\Omega} (-\nu \Delta \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w} \, d\Omega$ und $\int_{\Omega} (\nabla p) \cdot \mathbf{w} \, d\Omega$ in (4.6) unter Hinzunahme des Divergenz-Theorems (3.12) umformt. Schlussendlich mündet das gewichtete Residuum des Impulses (4.6) in

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} + (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w} + \nu \,\nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{w} - p \,\nabla \cdot \mathbf{w} \right) \mathrm{d}\Omega =$$

$$= \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{w} \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \overline{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{w} \,\mathrm{d}\Gamma \,.$$
(4.8)

Führt man an dieser Stelle für die Beziehungen (4.6) und (4.8) einen Vergleich an, so lässt sich festhalten, dass die Geschwindigkeitsvariable nicht mehr zweimal, sondern lediglich einmal ableitbar sein muss und dass der druckbezogene Ableitungsoperator ganz verschwindet. Ferner ist hier festzustellen, dass die natürlichen Randbedingungen bei dieser Umformung unmittelbar aus der starken Form der Impulsgleichung hervorgehen. Im Hinblick auf die nachfolgenden Darstellungen ist es an dieser Stelle zweckmäßig, die schwache Form der Navier-Stokes-Gleichungen in kompakter algebraischer Schreibweise anzugeben:

$$(\dot{\mathbf{v}}, \mathbf{w}) + \nu \, a(\mathbf{v}, \mathbf{w}) + c(\mathbf{v}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) + b(p, \mathbf{w}) = (\mathbf{b}, \mathbf{w}) + (\overline{\mathbf{t}}, \mathbf{w})_{\Gamma_{\mathrm{N}}}$$
(4.9)

$$b(q, \mathbf{v}) = 0, \qquad (4.10)$$

wobei folgende Definitionen für die Bildung von bi- und trilinearer Formen gelten sollen:

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{w} \, \mathrm{d}\Omega \qquad , \quad b(p, \mathbf{w}) = -\int_{\Omega} p \, \nabla \cdot \mathbf{w} \, \mathrm{d}\Omega \qquad (4.11)$$

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w} \, \mathrm{d}\Omega \quad , \quad (\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \, \mathrm{d}\Omega \,. \tag{4.12}$$

Bevor jedoch die schwache Form der inkompressiblen Navier-Stokes-Formulierung, die hier noch in kontinuierlicher Darstellung vorliegt, numerisch gelöst werden kann, ist sie in eine diskrete Form zu überführen. Dafür sind die Gleichungen auf räumlicher und auf zeitlicher Ebene zu diskretisieren. Die Ansätze, die diesbezüglich in der vorliegenden Arbeit zum Tragen kommen, sollen im nächsten Teilkapitel vorgestellt werden.

4.2 Diskretisierung

4.2.1 Räumliche Diskretisierung

Bei der räumlichen Diskretisierung wird das zu beschreibende kontinuierliche Gebiet $\Omega \in \mathbb{R}^3$ in einzelne finite Gebiete bzw. Elemente Ω_e unterteilt, wobei je nach Feinheitsgrad der Diskretisierung ein geometrischer Abbildungsfehler entsteht. Die Gesamtheit der Elemente bildet das diskretisierte Strömungsgebiet Ω_h , das entsprechend dem zugrunde liegenden Diskretisierungsfehler das Ausgangsgebiet Ω mehr oder weniger gut wiedergibt:

$$\Omega \approx \Omega_h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e \,. \tag{4.13}$$

Hierin bezeichnen e und n_e die Elementnummer bzw. die Gesamtanzahl der Elemente. Bezieht man nun die schwache Form der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen auf das diskretisierte Gebiet Ω_h , so erhält man die zugehörige gemischte FEM-Formulierung dieses Problems, die folgendermaßen lautet:

$$(\dot{\mathbf{v}}_h, \mathbf{w}_h) + \nu \, a_h(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) + c_h(\mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) + b_h(p_h, \mathbf{w}_h) = (\mathbf{b}_h, \mathbf{w}_h) + (\overline{\mathbf{t}}_h, \mathbf{w}_h)_{\Gamma_{\mathrm{N}}}$$
(4.14)

$$b_h(q_h, \mathbf{v}_h) = 0, \qquad (4.15)$$

wobei gilt: $\mathbf{v} \approx \mathbf{v}_h$, $p \approx p_h$, $\mathbf{w} \approx \mathbf{w}_h$ und $q \approx q_h$. Zudem gelten die folgenden Beziehungen:

$$a_h(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) = \sum_{\Omega_e \in \Omega_h} \int_{\Omega_e} \nabla \mathbf{v}_{h,e} : \nabla \mathbf{w}_{h,e} \,\mathrm{d}\Omega_e \tag{4.16}$$

$$b_h(p_h, \mathbf{w}_h) = -\sum_{\Omega_e \in \Omega_h} \int_{\Omega_e} p_{h,e} \nabla \cdot \mathbf{w}_{h,e} \,\mathrm{d}\Omega_e$$
(4.17)

$$c_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) = \sum_{\Omega_e \in \Omega_h} \int_{\Omega_e} (\mathbf{u}_{h,e} \cdot \nabla \mathbf{v}_{h,e}) \cdot \mathbf{w}_{h,e} \,\mathrm{d}\Omega_e$$
(4.18)

$$(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) = \sum_{\Omega_e \in \Omega_h} \int_{\Omega_e} \mathbf{v}_{h,e} \cdot \mathbf{w}_{h,e} \,\mathrm{d}\Omega_e \,. \tag{4.19}$$

Darin bezeichnen $\mathbf{v}_{h,e}$ und $p_{h,e}$ das auf Elementebene approximierte Geschwindigkeitsbzw. Druckfeld. Die elementbezogene Approximation eines Feldes erfolgt prinzipiell derart, dass der Verlauf des Feldes innerhalb von $\Omega_e \in \Omega_h$ gemäß der für die Variable gewählten Approximationsordnung interpoliert wird, wobei die Variablenwerte an den Elementknoten als entsprechende Stützstellen dienen. Hiernach können $\mathbf{v}_{h,e}$ und $p_{h,e}$ wie folgt dargestellt werden:

$$\mathbf{v}_{h,e}(\mathbf{x},t) = \sum_{i=1}^{3} v_{h,i}(\mathbf{x},t) \,\mathbf{e}_{i} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{k_{v}=1}^{n_{v}} N^{k_{v}}(\mathbf{x}) \,v_{i}^{k_{v}}(t) \,\mathbf{e}_{i}$$
(4.20)

$$p_{h,e}(\mathbf{x},t) = \sum_{k_p=1}^{n_p} N^{k_p}(\mathbf{x}) p^{k_p}(t) .$$
(4.21)

Dabei sind N^{k_v} und N^{k_p} die Ansatzfunktionen bezüglich der Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{h,e}$ respektive des Drucks $p_{h,e}$; n_v und n_p geben die Anzahl der Geschwindigkeits- bzw. der Druckknoten im Element Ω_e an. Des Weiteren bezeichnet $v_i^{k_v}$ den Wert am Geschwindigkeitsknoten k_v in Richtung \mathbf{e}_i und p^{k_p} charakterisiert den Druck am Knoten k_p . Zusätzlich zur Interpolation der beiden Felder $\{\mathbf{v}_{h,e}, p_{h,e}\}$ müssen natürlich auch ihre zugehörigen Testfunktionen $\{\mathbf{w}_{h,e}, q_{h,e}\}$ innerhalb von Ω_e interpoliert werden. Eine der zwei dafür gängigen Vorgehensweisen besteht darin, die Ansatzfunktionen für die Unbekannten und denen zugeordneten Testfunktionen jeweils zueinander konform zu wählen, sodass gilt:

$$\mathbf{w}_{h,e}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{3} w_{h,i}(\mathbf{x}) \, \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^{3} \sum_{k_v=1}^{n_v} N^{k_v}(\mathbf{x}) \, w_i^{k_v} \, \mathbf{e}_i$$
(4.22)

$$q_{h,e}(\mathbf{x}) = \sum_{k_p=1}^{n_p} N^{k_p}(\mathbf{x}) q^{k_p}.$$
(4.23)

Man spricht hier von der Standard-Galerkin- oder Bubnov-Galerkin-Formulierung. Die andere Vorgehensweise – sie wird als Petrov-Galerkin-Formulierung bezeichnet – basiert auf der unterschiedlichen Wahl der Ansätze für die Approximation der Feldgleichungen und Testfunktionen.

Damit bei einer gemischten FEM-Formulierung ein stabiles algebraisches System erwartet werden kann, müssen die Komponenten des zu approximierenden Variablensatzes hinsichtlich ihrer Interpolationsordnung zueinander in einem bestimmten Verhältnis stehen. Andernfalls führt dies in der Regel zu einem singulären Gleichungssystem, das prinzipiell als Ergebnis – und zwar unabhängig von der Stömungs-Reynoldszahl – ein instabiles, oszillierendes Druckfeld liefert, sofern natürlich das System noch gelöst werden kann. Wie beispielsweise in Donea & Huerta [55] gezeigt wird, lautet die notwendige Bedingung für eine eindeutige Lösung der obigen gemischten FEM-Formulierung, dass die Interpolationsordnung für die Geschwindigkeitsapproximation mindestens gleicher Ordnung wie für die Druckapproximation sein muss. Die hinreichende Bedingung für die Existenz einer Lösung wird hier durch die sog. LBB-Bedingung (Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi-Bedingung) bereitgestellt. Durch die Erfüllung dieser Bedingung wird sichergestellt, dass die jeweiligen Interpolationsansätze bezüglich der Felder $\{\mathbf{v}_h, p_h\}$ in einem zueinander kompatiblen Verhältnis stehen. Für mathematische Ausführungen zur LBB-Bedingung sei auf Donea & Huerta [55] und Turek [255] sowie auf die in diesen beiden Fachbüchern zitierten Arbeiten verwiesen.

Das Rannacher-Turek \tilde{Q}_1/Q_0 -Element

Ein gemischtes Element, das sowohl der notwendigen als auch der hinreichenden Bedingung für die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung genügt und damit auf einem Satz kompatibler Ansätze für das Variablenpaar $\{\mathbf{v}_h, p_h\}$ basiert, ist das nicht-konforme Rannacher-Turek \tilde{Q}_1/Q_0 -Element [210]. (Für ausführliche Darstellungen zu diesem Element siehe auch [138, 255].) Es handelt sich beim \tilde{Q}_1/Q_0 -Element im 2D-Fall um ein bilineares Viereckselement und im 3D-Fall um ein trilineares Hexaederelement. Dabei kommen bei beiden Formen zur Approximation der Geschwindigkeitsverteilung 'rotierte', stückweise lineare Ansätze zum Einsatz und im Weiteren wird hinsichtlich der Druckapproximation jeweils ein konstanter Ansatz gewählt. Der eben erwähnte Terminus 'rotiert' ist hier in dem Sinne zu verstehen, dass die Geschwindigkeitsknoten $\mathbf{v}^{k_v} \{k_v = 1, \ldots, n_v\}$ nicht wie bei einem gewöhnlichen bi- oder trilinearen Element auf den Elementecken liegen, sondern sie sind – je nachdem, ob es sich um ein 2D-Element oder 3D-Element handelt – auf den Seitenmitten bzw. auf den Mittelpunkten der Seitenflächen der Elemente positioniert. Insoweit kann die Anordnung der Geschwindigkeitsknoten in der Hinsicht als 'rotiert' betrachtet werden. Im 3D-Fall reduziert sich die Anzahl n_v der Geschwindigkeitsknoten konsequenterweise gegenüber einem gewöhnlichen trilinearen Ansatz von $n_v = 8$ auf $n_v = 6$. In Bezug auf den als elementweise konstant approximierten Druck lässt sich hier festhalten, dass $n_p = 1$ ist und dass sich der Druckknoten k_p als die einzige Informationsquelle für p_h in der Mitte des Elementes Ω_e befindet. Der stückweise konstante Druckansatz impliziert natürlich, dass das Druckfeld in Ω_h an den Elementgrenzen diskontinuierlich verläuft.



Abbildung 4.1: Darstellung des \tilde{Q}_1/Q_0 -Referenzelementes $\hat{\Omega}_e$ mit den sechs Geschwindigkeitsknoten und dem Druckknoten.

Eine Darstellung des \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementes ist in Abb. 4.1 als Referenzelement $\hat{\Omega}_e$ im Parameterraum $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ angeführt, wobei gilt: $\hat{\Omega}_e = \{(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \in \mathbb{R}^3 : -1 \leq \hat{x}, \hat{y}, \hat{z} \leq 1\}$. Das zugehörige Koordinatensystem befindet sich, wie der Abbildung zu entnehmen ist, im Elementmittelpunkt $\hat{\mathbf{x}}_M = \hat{\mathbf{x}}(0, 0, 0)$. Ferner sind darin sowohl die Positionen der Geschwindigkeitsknoten $\mathbf{v}^{k_v} \{k_v = 1, \dots, 6\}$ als auch die Position des Druckknotens p illustriert. Die Interpolationsfunktionen, auf denen dieses Element basiert, nehmen folgende Gestalt an:

$$Q_0(\hat{\Omega}_e) = \operatorname{span}\{1\} \quad \text{und} \quad \tilde{Q}_1(\hat{\Omega}_e) = \operatorname{span}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2, \hat{y}^2 - \hat{z}^2\}.$$
(4.24)

Für die weiteren Darstellungen bezüglich dieses Elementes bietet es sich hier an, die Menge der Linearkombinationen der Geschwindigkeitsapproximation hinsichtlich $(4.24)_2$ wie folgt anzugeben:

$$N(\hat{\mathbf{x}}) = a_1 + a_2 \hat{x} + a_3 \hat{y} + a_4 \hat{z} + a_5 (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) + a_6 (\hat{x}^2 - \hat{z}^2), \qquad (4.25)$$

wobei $a_k \{k = 1, ..., 6\}$ die Koeffizienten der Ansatzfunktion N bezeichnen. Legt man zur Bestimmung der Koeffizienten der einzelnen Ansatzfunktionen $N^{k_v} \{k_v = 1, ..., 6\}$

die folgende Interpolationsbedingung zugrunde:

$$N^{k_v}(\hat{\mathbf{x}}(\Gamma_j^m)) = \delta_j^{k_v} \quad \text{mit} \begin{cases} \delta_j^{k_v} = 1 & \text{für} \quad k_v = j \\ \delta_j^{k_v} = 0 & \text{für} \quad k_v \neq j \end{cases},$$
(4.26)

worin $\hat{\mathbf{x}}(\Gamma_j^m)$ die Koordinaten des Mittelpunktes der Elementfläche $\Gamma_j \{j = 1, \ldots, 6\}$ von $\hat{\Omega}_e$ sind, d. h. also: $\hat{\mathbf{x}}(\Gamma_j^m) = \hat{\mathbf{x}}_{v^j}$ (siehe Abb. 4.1), so erhält man die nachstehenden Ansatzfunktionen für die Geschwindigkeitsinterpolation:

$$\begin{split} N^1 &= \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{z} + \frac{1}{6}(\hat{x}^2 - y^2) - \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad N^2 = \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{y} - \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \\ N^3 &= \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{6}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad N^4 = \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{y} - \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \\ N^5 &= \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{6}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad N^6 = \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{z} + \frac{1}{6}(\hat{x}^2 - y^2) - \frac{1}{3}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \end{split}$$

Wenn man sich hierbei jedoch statt auf die in Gleichung (4.26) dargestellte knotenbezogene Interpolationsbedingung auf eine integralgemittelte elementflächenbezogene Bedingung bezieht, die dergestalt ist, dass damit die Geschwindigkeitsknoten im Element nicht wie oben jeweils eine rein lokale Interpolationsstützstelle repräsentieren, sondern dass der einzelne Knoten k_v einen über die Elementseitenfläche Γ_j gemittelten Stützstellenwert liefert: $v_{\Gamma_j}^{k_v} = \Gamma_j^{-1} \int_{\Gamma_j} v \, d\Gamma$, wobei es gelten muss:

$$\frac{1}{\Gamma_j} \int_{\Gamma_j} \tilde{N}^{k_v} \,\mathrm{d}\Gamma = \delta_j^{k_v} \quad \text{mit} \begin{cases} \delta_j^{k_v} = 1 & \text{für} \quad k_v = j \\ \delta_j^{k_v} = 0 & \text{für} \quad k_v \neq j \end{cases}$$
(4.27)

dann ergeben sich die entsprechenden Ansatzfunktionen zu

$$\begin{split} \tilde{N}^1 &= \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{z} + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - y^2) - \frac{1}{2}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad \tilde{N}^2 = \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{y} - \frac{1}{2}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \\ \tilde{N}^3 &= \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad \tilde{N}^4 = \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{y} - \frac{1}{2}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \\ \tilde{N}^5 &= \frac{1}{6} - \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - y^2) + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \,, \quad \tilde{N}^6 = \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\hat{z} + \frac{1}{4}(\hat{x}^2 - y^2) - \frac{1}{2}(\hat{x}^2 - \hat{z}^2) \end{split}$$

Elementstabilisierung

Die Standard-Galerkin-FEM ist im Rahmen der CFD eng mit der Problematik der Elementstabilisierung verbunden. Dies liegt zumal daran, dass der Methode eine große Stabilitätsschwäche inhärent ist, wenn zum einen bei ihr das finite Element der zugrunde liegenden Formulierung die LBB-Bedingung verletzt und/oder zum anderen mit ihr solche Strömungen betrachtet werden, die durch höhere Reynoldszahlen charakterisiert sind. Das Instabilitätsverhalten drückt sich im ersten Fall in einem oszillierenden Druckfeld aus, das die Form eines Schachbrettmusters annimmt ('checkerboard modes'), und liefert im zweiten Fall hingegen ein Geschwindigkeitsfeld mit unphysikalischen Oszillationen ('wiggles'). Jener Problematik kann durch die Verwendung einer Petrov-Galerkin-Formulierung begegnet werden – denn bei ihr lässt sich eine feldbezogene Testfunktion explizit so wählen, dass sie für das betreffende Feld eine stabilisierende Wirkung erzielt, siehe hierzu die Arbeiten von Hughes *et al.* [27, 108–110]. Der Aspekt der Elementstabilisierung soll in den nächsten beiden Abschnitten nur kurz – also lediglich so weit, wie sie in der vorliegenden Arbeit zum Tragen kommt – angesprochen werden. Für weiterführende ausführliche Darstellungen zur Sache der stabilisierten FEM sei an dieser Stelle auf [71, 72, 243, 267] verwiesen.

Druckstabilisierung. Gemischte Elemente, die die LBB-Bedingung nicht erfüllen, sind in aller Regel in Bezug auf das Druckfeld instabil und liefern generell ein singuläres Gleichungssystem. Dieser Fall liegt insbesondere dann vor, wenn für $\{\mathbf{v}_h, p_h\}$ Ansätze gleicher Ordnung gewählt werden. Eine Abhilfe gegenüber der Instabilität – oder anders gesagt – die Umgehung der LBB-Bedingung kann durch eine explizite Druckstabilisierung erfolgen [109]. In Anbetracht dessen, dass das \tilde{Q}_1/Q_0 -Element die LBB-Bedingung per se erfüllt [255], ist dies bei dem Element nicht erforderlich.

Konvektionsstabilisierung. Ein weiteres wesentliches Merkmal der Standard-Galerkin-FEM ist, dass sie bei Strömungen, in denen die konvektiven Flüsse die diffusiven (viskosen) überwiegen, mit Instabilitäten hinsichtlich des Geschwindigkeitsfeldes – sprich mit Geschwindigkeitsoszillationen – konfrontiert wird. Die Kennzahl, die in diesem Zusammenhang von besonderer Bedeutung ist, ist die Element-Pécletzahl: $Pe = ||\mathbf{v}||\Delta x/(2\nu)$. Diese Größe beschreibt auf der Elementebene das Verhältnis vom konvektiven Impulstransport zum diffusiven Impulsaustausch, wobei Δx als ein Maß für die Elementlänge in Strömungsrichtung steht. Wenn das Strömungsfeld konvektionsdominant ist, sodass die Element-Pécletzahlen bei $Pe \geq 1$ liegen, erhält man im Prinzip ein Gleichungssystem mit einer nicht mehr unbedingt positiv diagonaldominant besetzten Koeffizientenmatrix. Folglich kann nicht mehr zwangsläufig mit einer stabilen Lösung für das Geschwindigkeitsfeld gerechnet werden. Der Ursprung dieser Problematik liegt, wie in Brooks & Hughes [27] gezeigt wird (siehe auch [55]), in dem Umstand, dass der Galerkin-FEM eine von der Element-Pécletzahl abhängige negative künstliche numerische Diffusion inhärent ist, die bei höheren Reynoldszahlen, wo prinzipiell gilt: Pe > 1, das Instabil-Werden des Gleichungssystems erwirkt. Die Stabilität der Standard-Galerkin-FEM hinsichtlich des Geschwindigkeitsfeldes kann beispielsweise dadurch abgesichert werden, indem ein in Strömungsrichtung agierender bzw. gerichteter Diffusionstensor eingeführt wird, der die negative Diffusion ausbalanciert. Dieser Ansatz ist auf Brooks & Hughes [27, 108] zurückzuführen und wird als 'Streamline Upwind'-Verfahren (SU) bezeichnet – denn der konvektive Impulstransport der Strömung in benachbarten Elementen wird durch die Einführung einer balancierenden künstlichen Diffusion im stromaufwärts gelegenen Element stärker als im stromabwärtsgelegenen gewichtet, sodass bei konvektionsdominanten Strömungen sich in Bezug auf den konvektiven Transport ein sog. 'Upwind'-Effekt einstellt [55]. Dieser Effekt wird beim SU-Verfahren auf die Weise erreicht, dass der Konvektivterm (4.18) durch eine elementweise Auswertung des folgenden Stabilisierungsterms erweitert

wird:

$$\sum_{\Omega_e \in \Omega_h} au \left(\mathbf{v}_h \cdot
abla \mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h \cdot
abla \mathbf{w}_h
ight)_{\mid \Omega_e}.$$

Damit lässt sich der neue, stabilisierte Konvektionsoperator $\tilde{c}_h(\cdot, \cdot, \cdot)$, welcher den alten $c_h(\cdot, \cdot, \cdot)$ in Gleichung (4.14) sozusagen erweiternd ersetzt, als

$$\tilde{c}_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) := c_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) + \sum_{\Omega_e \in \Omega_h} \tau \left(\mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{v}_h, \mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{w}_h \right)_{|\Omega_e}$$
(4.28)

schreiben, wobei τ einen Stabilisierungsparameter darstellt. Es finden sich in der Literatur eine Vielzahl von sehr unterschiedlich definierten Stabilisierungsparametern, siehe Wall [267] für eine zusammenfassende Darstellung der Definitionen von τ . Bei den in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen kommt dieser Parameter in Verbindung mit (4.28) entsprechend Turek [255] zum Einsatz und lautet wie folgt:

$$\tau = \tau^* \frac{h_e}{||\mathbf{v}||_{\Omega_h}} \frac{2 \, R e_{\Omega_e}}{1 + R e_{\Omega_e}} \quad \text{mit} \quad R e_{\Omega_e} = \frac{||\mathbf{v}||_{\Omega_e} h_e}{\nu} \,. \tag{4.29}$$

Hierin sind Re_{Ω_e} die elementbezogene Reynoldszahl, h_e ein Maß für die lokale Elementgröße und τ^* ein frei wählbarer Parameter. Im Weiteren bezeichnen $||\mathbf{v}||_{\Omega_e}$ und $||\mathbf{v}||_{\Omega_h}$ die Norm der mittleren Geschwindigkeit über Ω_e und im anderen Fall die Norm der maximalen Strömungsgeschwindigkeit in Ω_h .

Matrixdarstellung

Setzt man nun unter Beachtung von (4.28) die Interpolationen (4.20)-(4.23) in (4.14) und (4.15) ein, so erhält man die SU-stabilisierte Galerkin-Formulierung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in diskreter Form als Matrixdarstellung, welche wie folgt lautet:

$$\mathbf{w}^{T} \left(\mathbf{M} \, \dot{\mathbf{v}} + \mathbf{N}(\mathbf{v}) \, \mathbf{v} + \mathbf{B} \, \mathbf{p} \right) = \mathbf{w}^{T} \mathbf{f}$$
(4.30)

$$\mathbf{q}^T \mathbf{B}^T \mathbf{v} = 0, \qquad (4.31)$$

wobei gilt:

$$\mathbf{w}^{T} \mathbf{N}(\mathbf{v}) \mathbf{v} = \mathbf{w}^{T} [\mathbf{V} + \mathbf{K}(\mathbf{v})] \mathbf{v} = \nu a_{h}(\mathbf{v}_{h}, \mathbf{w}_{h}) + \tilde{c}_{h}(\mathbf{v}_{h}, \mathbf{v}_{h}, \mathbf{w}_{h})$$
$$\mathbf{w}^{T} \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}} = (\dot{\mathbf{v}}_{h}, \mathbf{w}_{h}) , \qquad \mathbf{w}^{T} \mathbf{f} = (\mathbf{b}_{h}, \mathbf{w}_{h}) + (\mathbf{\overline{t}}_{h}, \mathbf{w}_{h})_{\Gamma_{N}}$$
$$\mathbf{w}^{T} \mathbf{B} \mathbf{p} = b_{h}(p_{h}, \mathbf{w}_{h}) , \qquad \mathbf{q}^{T} (-\mathbf{B}^{T}) \mathbf{v} = b_{h}(q_{h}, \mathbf{v}_{h}) .$$

Dabei gibt **M** die Massenmatrix an, $\mathbf{N}(\mathbf{v})$ enthält sowohl den viskosen als auch den konvektiven Term, **V** bzw. $\mathbf{K}(\mathbf{v})$, wobei der zuletzt genannte Term auch die Beiträge zur Konvektionsstabilisierung mit einschließt, **B** und $-\mathbf{B}^T$ bezeichnen den diskreten Gradientenbzw. den diskreten Divergenzoperator und **f** berücksichtigt zugleich die Volumenkräfte und die auf Γ_N wirkenden Randlasten. Angesichts der Beliebigkeit der Knotenwerte der Wichtungsfunktionen kann mit Blick auf (4.30) und (4.31) letztendlich genauso gut folgendes geschrieben werden:

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{v}} + \mathbf{N}(\mathbf{v}) \mathbf{v} + \mathbf{B} \mathbf{p} = \mathbf{f}$$

$$\mathbf{B}^T \mathbf{v} = \mathbf{0}.$$
(4.32)
(4.33)

Zur Lösung dieses Gleichungssatzes ist im Falle der oberen Gleichung, welche eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung darstellt, noch eine Diskretisierung auf der Zeitebene erforderlich. Dementsprechend spricht man hier von der semidiskreten Formulierung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen. Die Überführung der Beziehung (4.32) in eine diskrete Form wird im folgenden Teilkapitel separat behandelt.

4.2.2 Zeitliche Diskretisierung

Die zeitliche Diskretisierung soll hier zuerst illustrativ anhand der unteren gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung betrachtet werden:

$$\dot{v} = \mathcal{L}(v, t) \,. \tag{4.34}$$

Hierin ist \mathcal{L} eine nichtlineare Funktion der Geschwindigkeit v und der Zeit t. Wie in Hirsch [100] dargestellt, lassen sich eine Reihe von Zeitintegrationsverfahren im Hinblick auf die Behandlung der Beziehung (4.34) zusammenfassend durch

$$(1+\xi)v^{n+1} - (1+2\xi)v^n = \Delta t[\theta \mathcal{L}^{n+1} + (1-\theta)\mathcal{L}^n] - \xi v^{n-1}$$
(4.35)

wiedergeben. Dabei bezeichnen v^n und v^{n-1} die bekannte Geschwindigkeit aus dem aktuellen Zeitpunkt t^n bzw. aus dem vorhergehenden Zeitpunkt t^{n-1} . Des Weiteren steht v^{n+1} für die Geschwindigkeit, die im folgenden Zeitpunkt t^{n+1} zu bestimmen ist, und $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ gibt die dafür zugrunde liegende Größe des Zeitschrittes an. Charakterisiert man das festzulegende Parameterpaar als $\{\theta, \xi\}$, dann ergibt sich aus (4.35) mit der Kombination $\{0, 0\}$ das explizite Euler-Verfahren, mit $\{1, 0\}$ das implizite Euler-Verfahren, mit $\{1/2, 0\}$ das Crank-Nicolson-Verfahren und mit $\{1, 1/2\}$ das Rückwärts-Euler-Verfahren. Ausführliche Darstellungen zu diesen und anderen gängigen Verfahren zur numerischen Behandlung von gewöhnlichen Differentialgleichungen finden sich u. a. in [100, 147, 188].

Crank-Nicolson-Verfahren

Hinsichtlich der Zeitdiskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen wird in dieser Arbeit durchgehend auf das Crank-Nicolson-Verfahren zurückgegriffen. Es stellt ein implizites Zeitintegrationsverfahren dar und besitzt eine Genauigkeit von zweiter Ordnung. Dieses Verfahren zeichnet sich ferner durch eine nicht unbedingt strenge Stabilität und eine geringe numerische Dämpfungseigenschaft aus. Daher treten bei dieser Methode für zu groß gewählte Zeitschritte generell unphysikalische Oszillationen auf, die obendrein aufgrund der letzteren Verfahrenseigenschaft im Laufe der Simulation nicht abklingen. Die Folge ist, dass die Crank-Nicolson-Methode unter diesen Umständen instabil werden kann, siehe hierzu die Berechnungsstudien in Turek [253, 255]. Diese Methode wird in der vorliegenden Dissertation insofern dennoch verwendet, als die numerischen Modelle zur Behandlung von Fluid-Partikel-Strömungen – sowohl bedingt durch die disperse Phase wie auch durch die stark instationäre Fluidströmung – in der Tat sehr kleine Zeitschritte Δt erfordern, für die das Crank-Nicolson-Verfahren in aller Regel stabil ist und gute Ergebnisse liefert.

Die zeitlich diskretisierte Form der Gleichung (4.32) kann hier in Anlehnung an (4.35) mit $\{1/2, 0\}$ folgendermaßen dargestellt werden:

$$\mathbf{M} \mathbf{v}^{n+1} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{N}(\mathbf{v}^{n+1}) \, \mathbf{v}^{n+1} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{B} \, \mathbf{p}^{n+1} =$$

$$= \mathbf{M} \, \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{N}(\mathbf{v}^n) \, \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{B} \, \mathbf{p}^n + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{f}^n \,.$$

$$(4.36)$$

Approximiert man in dieser Gleichung den druckbezogenen Term $\Delta t [\mathbf{B} \mathbf{p}^{n+1} + \mathbf{B} \mathbf{p}^n]/2$ durch $\Delta t \mathbf{B} \mathbf{p}^{n+1}$, so lässt sich die diskrete Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen entsprechend der Notation in Turek [255] letztendlich wie folgt ausdrücken:

$$\mathbf{S} \mathbf{v}^{n+1} + \Delta t \mathbf{B} \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{g}$$

$$\mathbf{B}^T \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{0},$$
(4.37)
(4.38)

wobei gilt:

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{N}(\mathbf{v}^{n+1}) \tag{4.39}$$

$$\mathbf{g} = \left[\mathbf{M} - \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{N}(\mathbf{v}^n) \right] \mathbf{v}^n + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{f}^n \,. \tag{4.40}$$

Diese gekoppelte, nichtlineare algebraische Problemstellung ist zu jedem diskreten Zeitpunkt $t \in (t_0, T)$ unter Beachtung der Randbedingungen auf Γ_D (4.4) sowie mit Rücksicht auf die Anfangsbedingungen in Ω_0 (4.5) zu lösen.

4.3 Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen

Auf der Grundlage der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}(\mathbf{v}) & \Delta t \, \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$
(4.41)

soll nun die Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes ($\mathbf{v} := \mathbf{v}^{n+1}$) und des Druckfeldes ($\mathbf{p} := \mathbf{p}^{n+1}$) näher betrachtet werden. Die Berechnung der beiden Felder kann im Prinzip auf zwei unterschiedliche Herangehensweisen erfolgen. Da ist auf der einen Seite der monolithische Lösungsansatz zu erwähnen, welcher auf der Idee basiert, das stark gekoppelte, nichtlineare System im Ganzen zu betrachten und die Unbekannten \mathbf{v} und \mathbf{p} simultan zu lösen. Auf der anderen Seite steht der partitionierte Lösungsansatz. Dieser Ansatz beruht indessen auf dem Grundgedanken, im ersten Schritt das große gekoppelte Problem in zwei einzelne, 'kleine' Subprobleme zu separieren – und zwar eins in Bezug auf das Geschwindigkeitsfeld und eins in Bezug auf das Druckfeld –, sodass dann im zweiten Schritt die beiden Felder sequenziell gelöst werden können. Hierfür stellen Projektionsmethoden einen adäquaten, gängigen Ansatz dar. Sie werden u. a. im Übersichtsartikel und im Fachbuch von Guermond *et al.* [92] bzw. von Prohl [205] umfassend dargestellt und diskutiert. Eine rigorose, ausgiebige numerische Vergleichsstudie zwischen den beiden Herangehensweisen zur Lösung von (4.41) wird in Turek [254] vorgenommen. Darin zeigt sich, dass die diskrete Projektionsmethode bei hoch instationären Strömungen, welche sehr kleine Zeitschritte Δt erfordern, zu einer vergleichsweise stabileren und effizienteren Methode führen kann – und das bei relativ gleicher Genauigkeit. Diese Faktoren waren entscheidend dafür, dass in der vorliegenden Arbeit die Wahl im Hinblick auf das Lösen der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen auf einen partitionierten Ansatz fiel. Das von Turek [254, 255] propagierte diskrete Projektionsschema, welches hier zum Tragen kommt, soll im Folgenden kurz beschrieben werden.

Diskrete Projektionsmethode

Wenn man vorerst voraussetzt, dass die beiden Bilanzgleichungen in (4.41) voneinander entkoppelt sind, so lassen sich die Grundgleichungen der besagten zwei 'kleinen' Subprobleme wie folgt angeben:

• Geschwindigkeitsproblem:

$$\mathbf{S}(\mathbf{v})\,\mathbf{v} = \mathbf{g} - \Delta t\,\mathbf{B}\,\mathbf{p} \tag{4.42}$$

• Druckproblem:

$$\mathbf{L}\mathbf{p} = \overline{\mathbf{f}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{L} = \mathbf{B}^T \,\mathbf{S}^{-1} \,\mathbf{B} \ , \ \overline{\mathbf{f}} = \frac{1}{\Delta t} \,\mathbf{B}^T \,\mathbf{S}^{-1} \,\mathbf{g} \,.$$
 (4.43)

Bei der Gleichung (4.42) handelt es sich um eine quasi erweiterte nichtlineare Burgers-Gleichung¹, die ein gegebenes Druckfeld einbezieht. Was den Ausdruck (4.43) betrifft, so spricht man von der Druck-Schur-Kompliment-Gleichung (DSK-Gleichung). Dabei stellt L den Schur-Kompliment-Operator dar. Die DSK-Gleichung wird gewonnen, indem (4.42) nach v aufgelöst und in die Inkompressibilitätsbedingung eingesetzt wird. Auf der Grundlage dieser beiden Basisgleichungen kann der Lösungsalgorithmus für das System (4.41) auf folgende Weise skizziert werden:

¹Die Burgers-Gleichung stellt eine Vereinfachung der Navier-Stokes-Gleichungen dar, und zwar insofern, als bei der erstgenannten im Gegensatz zur zweitgenannten der Druckterm keine Beachtung findet.

Diskrete Projektionsmethode:

Gegeben: $\mathbf{v}^n = \mathbf{v}(t^n)$, $\mathbf{p}^n = \mathbf{p}(t^n)$ Bestimme: $\mathbf{v} = \mathbf{v}(t^{n+1})$, $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t^{n+1})$ Es gilt: $\Delta t = t^{n+1} - t^n$

(i) Löse für die Zwischengeschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}$ die nichtline
are Burgers-Gleichung:

$$\mathbf{S}\,\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{g} - \Delta t\,\mathbf{B}\,\mathbf{p}^n\,.\tag{4.44}$$

In aller Regel ist $\mathbf{B}^T \tilde{\mathbf{v}} \neq \mathbf{0}$. Insofern erfordern die einzelnen Felder eine Korrektur $\delta(\tilde{\cdot})$. Im Hinblick darauf kann folgendes festgehalten werden:

$$\mathbf{0} \equiv \mathbf{B}^T (\tilde{\mathbf{v}} + \delta \tilde{\mathbf{v}}) \tag{4.45}$$

$$= \mathbf{B}^{T}(\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{g} - \Delta t \, \mathbf{B} \, \mathbf{p}^{n}) + \delta \tilde{\mathbf{v}})$$
(4.46)

$$\stackrel{!}{=} \mathbf{B}^{T}(\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{g} - \Delta t \, \mathbf{B} \, (\mathbf{p}^{n} + \delta \tilde{\mathbf{p}}))) \tag{4.47}$$

$$\stackrel{!}{=} \mathbf{B}^T \, \tilde{\mathbf{v}} - \Delta t \underbrace{\mathbf{B}^T \, \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}}_{\mathbf{C}} \delta \tilde{\mathbf{p}} \,. \tag{4.48}$$

Für ausreichend kleine Δt gilt: $\mathbf{S} \approx \mathbf{M} + \mathcal{O}(\Delta t)$ [257]. Hinsichtlich der Invertierung der Massenmatrix \mathbf{M} bietet es sich an dieser Stelle an, sie durch eine diagonal besetzte 'lumped' Massenmatrix \mathbf{M}_l zu ersetzen, sodass gilt: $\mathbf{C} = \mathbf{B}^T \mathbf{M}_l^{-1} \mathbf{B}$.

(ii) Löse für $\delta \tilde{\mathbf{p}}$ das lineare Druck-Poisson-Problem (4.48), das sich auch wie folgt darstellen lässt:

$$\mathbf{C}\,\delta\tilde{\mathbf{p}} = \frac{1}{\Delta t}\,\mathbf{B}^{T}\,\tilde{\mathbf{v}} = -(\mathbf{L}\,\mathbf{p}^{n} - \overline{\mathbf{f}})\,. \tag{4.49}$$

(iii) Korrigiere das Druckfeld:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^n + \delta \tilde{\mathbf{p}} \,. \tag{4.50}$$

(iv) Bilde $\tilde{\mathbf{v}}$ auf \mathbf{v} ab, sodass (4.38) bzw. (4.45) erfüllt wird:

$$\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} + \delta \tilde{\mathbf{v}} = \tilde{\mathbf{v}} - \Delta t \,\mathbf{M}_l^{-1} \,\mathbf{B} \,\delta \tilde{\mathbf{p}} \,. \tag{4.51}$$

Bemerkung: Die Schritte (ii) und (iii) stellen im Grunde das Lösungskonzept für die DSK-Gleichung (4.43) dar. Setzt man (4.49) in (4.50) ein, so folgt der untere Ausdruck:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^{n} - \mathbf{C}^{-1} \left(\underbrace{\mathbf{L} \, \mathbf{p}^{n} - \overline{\mathbf{f}}}_{=:\mathcal{R}(\mathbf{p}^{n})} \right) \quad \text{mit} \quad \mathcal{R}(\mathbf{p}^{n}) \stackrel{\circ}{=} \text{Druck-Residuum} \,. \tag{4.52}$$

Diese Beziehung erweist sich als eine einmal durchlaufene Richardson-Iteration mit \mathbf{C}^{-1} als den Vorkonditionierer für den Schur-Kompliment-Operator \mathbf{L} .

Iterative Verfahren zur Lösung der nichtlinearen Burgers-Gleichung

Die im Schritt (i) der diskreten Projektionsmethode zu lösende Burgers-Gleichung weist eine nichtlineare Eigenschaft auf, die aus dem Konvektiv-Term und aus den Beiträgen hinsichtlich der Konvektionsstabilisierung des Systems herrühren. Diese Eigenschaft führt dazu, dass der Operator $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{v}})$ von der Lösung des Problems abhängt. Insofern kann das Geschwindigkeitsfeld $\tilde{\mathbf{v}}$ nicht direkt bestimmt werden, sondern das Lösen der Gleichungen muss in dem Fall iterativ erfolgen. Iterative Lösungsverfahren zeichnen sich dadurch aus, dass sie die Lösung des nichtlinearen Problems $\tilde{\mathbf{v}}$ sukzessive durch Berechnen und Aufsummieren von Lösungsinkrementen $\Delta \tilde{\mathbf{v}}$ bestimmen bzw. annähern, wobei von einem Startwert $\tilde{\mathbf{v}}_0$ ausgegangen wird. Sobald das Residuum der Burgers-Gleichung

$$\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}) = \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{v}})\,\tilde{\mathbf{v}} - \mathbf{r}_{\rm hs} \quad \text{mit} \quad \mathbf{r}_{\rm hs} = \mathbf{g} - \Delta t\,\mathbf{B}\,\mathbf{p}^n$$

$$(4.53)$$

im Laufe der Iteration eine vorgegebene Toleranz TOL erreicht, d. h. also wenn $||\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}})|| \leq TOL$ ist, gilt dieser Lösungsprozess als abgeschlossen und es kann mit Schritt (ii) der Projektionsmethode fortgefahren werden.

Liegt nun mit $\tilde{\mathbf{v}}_i$ eine bereits im *i*-ten Iterationsschritt ermittelte Näherungslösung vor und soll diese außerdem in einem weiteren Iterationsschritt i + 1 durch das Lösungsinkrement $\Delta \tilde{\mathbf{v}}_i$ verbessert werden:

$$\tilde{\mathbf{v}}_{i+1} = \tilde{\mathbf{v}}_i + \Delta \tilde{\mathbf{v}}_i \,, \tag{4.54}$$

dann ist es zweckmäßig, das Residuum um $\tilde{\mathbf{v}}_i$ durch eine Taylor-Reihenentwicklung auszudrücken, welche bei Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung $\mathcal{O}(\Delta \tilde{\mathbf{v}}_i^2)$ wie folgt lautet:

$$\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_{i+1}) = \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_i) + \left. \frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial \tilde{\mathbf{v}}} \right|_{\tilde{\mathbf{v}}_i} \Delta \tilde{\mathbf{v}}_i + \mathcal{O}(\Delta \tilde{\mathbf{v}}_i^2) = \mathbf{0}.$$
(4.55)

Hierin gilt die partielle Ableitung als die Fréchet-Ableitung des Residuums und der gesamte mittlere Summenterm stellt die Richtungsableitung oder Gâteaux-Ableitung am Fixpunkt $\tilde{\mathbf{v}}_i$ in Richtung des Lösungsinkrements $\Delta \tilde{\mathbf{v}}_i$ dar. Für diese Ableitung gilt ferner die nachstehende Darstellung:

$$\frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial \tilde{\mathbf{v}}} \bigg|_{\tilde{\mathbf{v}}_{i}} \Delta \tilde{\mathbf{v}}_{i} = \frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_{i} + \varepsilon \Delta \tilde{\mathbf{v}}_{i})}{\partial \varepsilon} \bigg|_{\varepsilon = 0}$$
(4.56)

Um die Nichtlinearität der Konvektionsstabilisierung bei der Bestimmung der Gâteaux-Ableitung so zu umgehen, dass die entsprechenden Beiträge nicht linearisiert werden müssen, bietet es sich an, im aktuellen Iterationsschritt die Stabilitätsterme jeweils mit den Lösungen aus der vorhergehenden Iteration zu bestimmen [267]. In dem Fall resultiert (4.56) in

$$\frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial \tilde{\mathbf{v}}} \bigg|_{\tilde{\mathbf{v}}_{i}} \Delta \tilde{\mathbf{v}}_{i} = \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{v}}_{i}) \Delta \tilde{\mathbf{v}}_{i} + \frac{1}{2} \Delta t \, \mathbf{K}(\Delta \tilde{\mathbf{v}}_{i}) \, \tilde{\mathbf{v}}_{i} \,.$$

$$(4.57)$$

Für eine inkrementweise Minimierung des Residuums (4.53) muss also gemäß (4.55) in jedem Iterationsschritt eine lineare Gleichung der Form

$$\mathbf{C} \Delta \tilde{\mathbf{v}}_i = -\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_i) \quad \text{mit} \quad \mathbf{C} = \left. \frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial \tilde{\mathbf{v}}} \right|_{\tilde{\mathbf{V}}_i}$$
(4.58)

gelöst werden. Wenn man zugrunde legt, dass die Inverse \mathbf{C}^{-1} existiert, so kann das Iterationskonzept für diese Problemformulierung unter Beachtung von (4.54) und (4.58) folgendermaßen angegeben werden:

Lösungsverfahren für die nichtlineare Burgers-Gleichung: Gegeben: $\tilde{\mathbf{v}}_0 = \mathbf{v}^n$ Bestimme: $\tilde{\mathbf{v}}_i$ für $i = 0, \dots, i_{\max}$, wobei die Iteration abzubrechen ist, wenn gilt: $||\mathcal{R}|| \leq TOL$. $\tilde{\mathbf{v}}_{i+1} = \tilde{\mathbf{v}}_i + \alpha_i \Delta \tilde{\mathbf{v}}_i$ $= \tilde{\mathbf{v}}_i - \alpha_i [\mathbf{C}(\tilde{\mathbf{v}}_i)]^{-1} \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_i)$ (4.59) $= \tilde{\mathbf{v}}_i - \alpha_i [\mathbf{C}(\tilde{\mathbf{v}}_i)]^{-1} (\mathbf{S}(\tilde{\mathbf{v}}_i) \tilde{\mathbf{v}}_i - \mathbf{r}_{hs})$.

Bemerkung: Der hier eingebrachte Parameter α_i stellt einen skalaren Dämpfungsparameter für die Lösungskorrektur dar.

Vergleicht man an dieser Stelle die beiden Iterationsvorschriften (4.52) und (4.59), so lässt sich festhalten, dass die Letztere einer vorkonditionierten Richardson-Iteration entspricht, und zwar einer mit einem veränderlichen Vorkonditionierer C. Ist die Vorkonditionierung in jedem Iterationsschritt gleich der Fréchet-Ableitung des Residuums, dann erhält man mit $\alpha_i = 1$ das klassische Newton-Verfahren; wird hingegen die Fréchet-Ableitung lediglich angenähert, so ergibt sich ein Fixpunktverfahren (Quasi-Newton-Verfahren). In der vorliegenden Arbeit wird zur Behandlung der Burgers-Gleichung das in Turek [255] vorgeschlagene Fixpunktverfahren eingesetzt. Die Approximation der Fréchet-Ableitung erfolgt in dem Fall durch die Vernachlässigung des rechten Summenterms in (4.57). Demnach lautet das lineare Gleichungssystem, das im *i*-ten Iterationsschritt zu lösen ist, wie folgt:

$$\mathbf{C}\Delta\tilde{\mathbf{v}}_i = -\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_i) \quad \text{mit} \quad \mathbf{C} = \mathbf{S}(\tilde{\mathbf{v}}_i).$$
 (4.60)

Bemerkung: Das klassische Newton-Verfahren zeichnet sich in Lösungsnähe durch eine quadratische Konvergenz aus. Dahingegen weisen Fixpunktverfahren in der Regel eine lineare Konvergenzordnung auf. Diese brauchen zwar zur Lösung des Gleichungssystems konsequenterweise mehr Iterationsschritte als das konsistente Newton-Verfahren, aber haben dafür den Vorteil, dass bei ihnen der Vorkonditionierer – sofern er angemessen gewählt wird – in numerischer Hinsicht wesentlich kostengünstiger aufgebaut und invertiert werden kann. Im Endeffekt kann auf diese Weise das Lösungsinkrement bzw. die Lösung des linearen Teilproblems effizienter bestimmt werden, siehe Turek [255] für Details.

Lösung der linearisierten Burgers-Gleichungen und des linearen Druck-Poisson-Problems

Die diskrete Projektionsmethode erfordert hinsichtlich der Ausführung eines Makroschrittes die Lösung der linearen Gleichungssysteme (4.49) und (4.60),

$$\mathbf{C}_{p}\,\delta\mathbf{p} = -\mathcal{R}(\mathbf{p}) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{C}_{\tilde{v}}\,\Delta\tilde{\mathbf{v}}_{i} = -\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{v}}_{i})\,, \tag{4.61}$$

mit $C_{(\cdot)}$ als die entsprechende Koeffizientenmatrix, wobei $(4.61)_2$ innerhalb des nichtlinearen Lösungsverfahrens bis zur Konvergenz generell öfter gelöst werden muss. Die Bewältigung der Aufgabenstellungen in (4.61) erfolgt in dieser Arbeit mittels iterativer Löser, da die hier behandelten Systeme zu groß sind, als dass sie durch direkte Löser, die einen sehr hohen Speicherbedarf aufweisen, berechnet werden können. Eine Eigenschaft, die den iterativen Gleichungslösern innewohnt und in Bezug auf ihren effizienten Einsatz von zentraler Bedeutung ist, ist die Tatsache, dass diese mit zunehmendem Feinheitsgrad des Netzes eine stark abnehmende Konvergenzrate besitzen, siehe z.B. die Darstellungen in Ferziger & Peric [67] oder Versteeg & Malalasekra [262]. Eine Strategie, mit der dieser Problematik entgegengewirkt werden kann, ist die Verwendung einer geometrischen oder algebraischen Mehrgittermethode. In FEATFLOW[256] ist die erstere dieser Methoden implementiert und wird in dieser Arbeit zur Berechnung der Fluidphase eingesetzt. Eine ausführliche Darstellung ihrer algorithmischen Details findet sich in Turek [255]. So soll im Folgenden auf eine genaue Darstellung dieser Herangehensweise zur Lösung von linearen Gleichungssystemen verzichtet werden. Für allgemeine Abhandlungen zur geometrischen Mehrgittermethode sei auf das Buch von Hackbusch [93] sowie auf die im überblicksartigen Artikel von Wesseling & Oosterlee [275] zusammengestellten Arbeiten verwiesen. Nachstehend soll daher lediglich die Grundidee dieser Methode skizziert werden.

Das geometrische Mehrgitterverfahren. Wie die Bezeichnung für das Verfahren vermuten lässt, wird hier zur Behandlung einer Problemformulierung nicht ein einzelnes Netz, sondern mehrere geometrische Diskretisierungen zu Grunde gelegt, wobei diese in Bezug auf den Diskretisierungsgrad gemeinsam in einer Rangfolge stehen. Die Netze besitzen also sozusagen einen hierarchischen Charakter und decken im Idealfall die Diskretisierungsspanne von relativ grob bis relativ fein ab. Bei strukturierten Netzen, die aus Hexaederelementen bestehen (vgl. Fig. 4.1), bietet es sich an, von einem groben Netz auszugehen und auf rekursive Art die jeweils nächst feinere Diskretisierungsebene konsequent aus der aktuellen abzuleiten. Dafür wird jedes einzelne Element des aktuellen groben Netzes durch Verbinden der Mittelpunkte seiner gegenüberliegenden Seitenflächen in acht kleinere Elemente unterteilt. Damit erhält man bei jeder Rekursion ein entsprechend 8-fach feineres Element bzw. Netz. Wenn die Netze so unmittelbar voneinander abgeleitet werden, dann lassen sich im Hinblick auf die Übertragung von Korrekturgrößen und Residuen zwischen den Ebenen einfache Transferbeziehungen bzw. Transferoperatoren aufstellen, siehe Turek [255]. Im Gegensatz hierzu wird die Hierarchie der Diskretisierungsebenen beim algebraischen Mehrgitterverfahren nicht durch eine geometrische Netzverfeinerung erzeugt, sondern die in der Regel vorgegebene Feingitterkoeffizientenmatrix wird hier mittels Interpolation stufenweise, also von Ebene zu Ebene, auf die gröbste

Ebene überführt, siehe McCormick [179].

Um auf die Grundidee des Mehrgitterverfahrens zurückzukommen, so lässt sich festhalten, dass dieses Verfahren beabsichtigt, die Konvergenzrate iterativer Löser, die bei feiner werdenden Netzen drastisch abnimmt, durch Betrachtung des jeweiligen diskreten Problems auf unterschiedlichen Vernetzungsebenen zu verbessern. Dafür sind Zwischenergebnisse und Residuen, die auf einzelnen Ebenen gewonnen werden, zur Weiterverarbeitung auf höhere oder tiefere Ebenen zu transferieren, wobei man hier im ersten Fall von Prolongation und im zweiten Fall von Restriktion spricht (siehe Abb. 4.2).



Abbildung 4.2: Schemenhafte Darstellung von gängigen Mehrgitter-Zyklus-Strategien (nach Struckmeier [231]).

Das Verhalten und die räumliche Verteilung des Iterationsfehlers auf einer Diskretisierungsebene hängen von den betragsmäßig maximalen Eigenwerten der Koeffizientenmatrix bzw. von den diesen Eigenwerten zugeordneten Eigenvektoren ab [67]. Nun ist es so, dass auf der einen Seite jene Komponenten des Iterationsfehlers mit einer Wellenlänge in der Größenordnung der Elementgröße (kurzwellige oder hoch-frequente Fehlerkomponenten) schnell reduziert oder geglättet werden und dass auf der anderen Seite jene Fehler mit einer wesentlich größeren Wellenlänge als die Maschenweiten des Netzes (langwellige oder nieder-frequente Fehlerkomponenten) indessen äußerst viele Iterationen hinsichtlich ihrer Glättung benötigen. Demnach bietet es sich hier konsequenterweise an, die Fehler auf dem jeweiligen Netz zu glätten, auf dem sie am Besten erfasst werden können. D. h., es ist vorteilhaft, die kurzwelligen Fehlerkomponenten auf dem feinen Netz zu glätten und die verbleibenden langwelligen Fehler auf die nächst gröbere Diskretisierungsebene zu verschieben und dort zu behandeln. Denn hier sind diese Komponenten in Bezug auf die Gitterweite des Netzes teilweise wieder kurzwellig und lassen sich somit ebenso sehr schnell hinreichend glätten, wobei in der Regel 2-3 Iterationsschritte bereits schon ausreichen. Wird dieser Vorgang rekursiv fortgeführt, so mündet das Mehrgitterverfahren letzten Endes – im Idealfall – in einem Lösungsprozess mit optimalem, netzunabhängigem Konvergenzverhalten [255].

In der Literatur finden sich natürlich mehrere Strategien zum Durchlaufen der einzelnen Diskretisierungsebenen, siehe z. B. [93, 262]. Die gängigsten Strategien sind der V-Zyklus, der W-Zyklus und der F-Zyklus. Sie sind in Abb. 4.2 illustrativ dargestellt. Die Strategien, die in dieser Arbeit hauptsächlich benutzt werden, sind der V- und F-Zyklus. Beim Durchwandern dieser Zyklen werden für das Burgers-Problem das SOR-Verfahren als Glätter und die BiCGSTAB-Methode als Löser verwendet. Im Falle des Druck-Poisson-Problems wird das ILU-Verfahren als Glätter eingesetzt und als Löser kommt in dem Zusammenhang das CG-Verfahren mit dem ILU-Verfahren als Vorkonditionierer zum Tragen. Eine ausführliche Beschreibung dieser iterativen Glätter/Löser kann z. B. Saad [213] oder Ferziger [66] entnommen werden. Exemplarisch sollen im Folgenden die Iterationsschritte des Mehrgitterverfahrens anhand der Zweigitteriteration zusammengefasst wiedergegeben werden. Denn die Zweigitteriteration lässt sich auf die in Abb. 4.2 dargestellten Zyklen einfach erweitern und kann insofern hier gewissermaßen als eine Basisiteration betrachtet werden.

Algorithm	nus für das Zweigitterverfahren:	
Gegeben: Bestimme:	$\mathbf{L}_{e} \mathbf{p}_{e} = \overline{\mathbf{f}}_{e}$ für $e = \{1, 2\}$ und $\mathbf{p}_{2}^{n} = \mathbf{p}_{2}(t^{n})$, wobei $e = 1$ als Index für die grob und $e = 2$ für die fein vernetzte El $\mathbf{p}_{e} = \mathbf{p}_{e}(t^{n+1})$	bene steht.
Es sind:	$\mathcal{F}_2^2 = \mathcal{F}_2(t^{-1})$ $\mathcal{G}^{(i,j)} := \text{Glättungsoperator}, \ \mathcal{L}_2^1 := \text{Restriktionsoperator},$ $\mathcal{L}_1^2 := \text{Prolongationsoperator}$	
(i) Gl (<i>i</i> -	ätte das Feingitterproblem im Hinblick auf die erste Näherun malige Vorglättungsiteration) und berechne anschließend das	gslösung $\tilde{\mathbf{p}}_2^i$ Residuum:
	$ ilde{\mathbf{p}}_2^i = \mathcal{G}^i(\mathbf{p}_2^n) ext{bzw.} \qquad \mathcal{R}_2 = \mathbf{L}_2 ilde{\mathbf{p}}_2^i - \overline{\mathbf{f}}_2 .$	(4.62)
(ii) Ve	rschiebe das Residuum auf die grobe Ebene:	
	$\mathcal{R}_1 = \mathcal{L}_2^1 \mathcal{R}_2 .$	(4.63)
(iii) Lö Gi	se das Grobgitterproblem und interpoliere dann die Lösung a tter:	uf das feine
	$\mathbf{L}_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 = -\mathcal{R}_1 ext{bzw.} \Delta \tilde{\mathbf{p}}_2 = \mathcal{L}_1^2 \tilde{\mathbf{p}}_1 .$	(4.64)
(iv) Fü ble	thre ein Update durch und glätte in Anschluss daran das Fe em $(j$ -malige Nachglättungsiteration):	ingitterpro-
	$\tilde{\mathbf{p}}_2^{i+1} = \tilde{\mathbf{p}}_2^i + \alpha \Delta \tilde{\mathbf{p}}_2 \text{bzw.} \mathbf{p}_2 = \tilde{\mathbf{p}}_2^{i+1+j} = \mathcal{G}^j\left(\tilde{\mathbf{p}}_2^{i+1}\right),$	(4.65)
WO	bei α ein Dämpfungsparameter ist.	
Bemerkur von (4.62) -	ng: Wählt man hier $i = 0$ und $j = 0$, so ergibt sich nach E (4.64) in (4.65) die folgende Beziehung:	linsetzen
$\mathbf{p}_2=\mathbf{p}_2^n$	$- \alpha \mathbf{C}^{-1} \Big(\mathbf{L}_2 \mathbf{p}_2^n - \overline{\mathbf{f}}_2 \Big) ,$	(4.66)
die in der $\mathcal{L}_1^2 \mathbf{L}_1^{-1} \mathcal{L}_2^1$ a stellt (vgl.	Tat eine einmal durchlaufene Richardson-Iteration mit ls den speziellen Vorkonditionierer für die Koeffizientenmatrix (4.52)).	$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{L}_2 \text{ dar-}$

Kapitel 5: Diskrete-Elemente-Methode zur Berechnung der dispersen Phase

Im Hinblick auf die Behandlung der inneren Phase von Dispersionen und Mehrphasenströmungen wurde im Laufe der Anfertigung dieser Arbeit eigens ein 3D Partikelprogramm entwickelt. Es wurde in der Programmiersprache FORTRAN geschrieben und ist OpenMP [31] parallelisiert. Im Folgenden soll der Kern dieser Software dargestellt werden, der zum einen aus Materialmodellen und zum anderen aus Algorithmen zur Kontaktsuche und Zeitintegration besteht. Für weiterführende Ausführungen, die sich mit der Problematik der Modellierung und Simulation von Partikelsystemen befassen und hier als Ergänzung herangezogen werden können, sei auf [4, 30, 73, 89, 99, 171, 186, 204, 211] verwiesen.

5.1 Allgemeines

Die erste Arbeit im Zusammenhang mit der numerischen Simulation von Partikelsystemen ist auf die Veröffentlichung von Alder & Wainwright [3] zurückzuführen. Diese aus den 1950er Jahren stammende Arbeit ist in das Gebiet der Molekulardynamik einzuordnen. Mithin wird das in dem Aufsatz erstmals vorgestellte Simulationsverfahren entsprechend als 'Molekulardynamik' (MD) bezeichnet – obgleich es heutzutage nicht nur auf dem Gebiet der Molekulardynamik anzutreffen ist, sondern auch gleichermaßen im Kontext der Granulardynamik zum Einsatz kommt, z. B. [203, 204]. Eine mit dem MD-Verfahren quasi konkurrierende Methode, die in gewissem Sinne ähnlich zur MD ist, stellt die 'Diskrete-Elemente-Methode' (DEM) dar. Sie wurde nach Cundall & Strack [44] erstmals in Cundall [43] vorgestellt, und zwar ursprünglich im Hinblick auf die Behandlung geomechanischer Problemstellungen. Die Berührungspunkte der beiden Verfahren zeigen sich darin, dass sowohl bei der MD als auch bei der DEM der Bewegungszustand jedes einzelnen Partikels im Rahmen der Lagrangeschen Betrachtungsweise unter Berücksichtigung des Aspektes der Partikel-Partikel-Interaktion individuell beschrieben wird. Gleichwohl dieser gewichtigen Gemeinsamkeit unterscheiden sich die beiden Methoden vom Gesamtkonzept her wesentlich voneinander. Auf die in der Hinsicht bedeutenden Punkte soll in den nachstehenden Ausführungen kurz näher eingegangen werden.

Molekulardynamik vs. Diskrete-Elemente-Methode

Die beiden besagten Verfahren scheinen zwar auf den ersten Blick sehr ähnlich zu sein, aber sie unterscheiden sich in zwei grundlegenden Punkten absolut voneinander: Diese Punkte beziehen sich zum einen auf die Berechnung der Partikelbewegungen und zum anderen auf die Behandlung der Kollisionsereignisse zwischen den jeweiligen Stoßpartnern. Was den ersten dieser Aspekte angeht, so lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass bei der MD die Partikel zwischen zwei im Gesamtsystem auftretenden Ereignissen bzw. Kollisionen ihrer ballistischen Flugbahn folgen, wohingegen bei der DEM die Bewegungsgleichungen der Objekte zur Bestimmung ihrer Trajektorien in diskreten Zeitschritten zu lösen sind. In Anbetracht dessen, dass der Algorithmus zur Beschreibung der Fortbewegung der Partikel im ersten Fall einen ereignisgesteuerten Charakter besitzt und im zweiten Fall einen zeitgesteuerten, spricht man diesbezüglich oft auch von der 'Event-Driven Method' (EDM) bzw. 'Time-Driven Method' (TDM).

Der andere bedeutende Wesensunterschied dieser Methoden ist, wie bereits erwähnt, unmittelbar mit der Problematik der Kollision verbunden. Denn während bei der MD die Partikel als starr ('hart') und damit undeformierbar angesehen werden, werden sie bei der DEM als quasi-starr ('weich') beschrieben, sodass in dem Fall diese bei Kontakt sich lokal reversibel deformieren können. Der Ansatz des harten Kontakts basiert auf einer Herangehensweise, bei der eine Partikelkollision lediglich anhand der Betrachtung der Objekte vor und nach dem Stoß definiert wird. Es wird dabei zugrunde gelegt, dass die Partikel bei Berührung unmittelbar einen Impulsaustausch erfahren und sich infolgedessen voneinander sofort wieder trennen. Die Stoßdauer einer Kollision ist hier dementsprechend null. Um bei solch einem Stoß die Materialeigenschaften der Kontaktpartner einbeziehen zu können, wird dafür als charakteristische Größe eine gemeinsame Stoßzahl eingeführt, die das Stoßverhalten der Partikel vorgibt. Die Post-Kollisionsgeschwindigkeiten lassen sich bei diesem Ansatz folgerichtig als eine Funktion der Stoßzahl und der relativen Annäherungsgeschwindigkeit der Partikel interpretieren. Indessen ergibt sich die Kollisionsdauer beim weichen Kontaktansatz angesichts der repulsiven Kräfte – diese bauen sich während der Kompressions- und der Restitutionsphase des Stoßes analog zur Partikeldeformation allmählich auf bzw. ab – unmittelbar aus dem Verformungsverhalten der Stoßpartner. Diese Kräfte sind dafür verantwortlich, dass sich die Partikel wieder abstoßen. Deswegen ist es hier unweigerlich erforderlich, die Evolution der Kontaktkräfte während eines Stoßes detailliert zu erfassen – denn diese dirigieren schließlich das Kollisionsverhalten der Partikel.

Diese essentiellen Unterschiede zwischen der DEM und der MD bringen logischerweise den Umstand mit sich, dass beide Verfahren unterschiedliche Voraussetzungen hinsichtlich der Anwendung auf verschieden geartete Partikelsysteme genießen. Dass die ereignisgesteuerte MD bei Systemen mit niedriger Teilchendichte, wo die Frequenzen zwischen zwei im System aufeinanderfolgenden Ereignissen klein sind, eine sehr effiziente Methode darstellt, liegt auf der Hand – und zwar aus dem Grund, weil das Voranschreiten der Berechnung auf der Zeitachse hier durch die systembezogene Kollisionsabfolge gesteuert wird. Bei der DEM wird die Zeitsteuerung dahingegen durch die Vorgabe von diskreten Zeitschritten reguliert, in denen die Newton-Euler-Gleichungen jeweils für alle Partikel gelöst werden. Im Übrigen müssen die gewählten Zeitschritte im Hinblick auf eine möglichst genaue Bestimmung der Kontaktkräfte relativ klein sein, was die DEM in der Tat zu einem sehr rechenintensiven Simulationsverfahren macht.

Wenn aber die Teilchendichte und mithin die Kollisionsfrequenzen eines Systems hoch sind, dann verliert das MD-Verfahren an ihrer allgemeinen Effizienz und kommt darüber hinaus in puncto Anwendbarkeit eventuell an die Grenzen ihrer Gültigkeit. Das liegt daran, dass der harte Partikelkontakt – im Unterschied zum weichen Partikelkontakt – im Grunde auf einer Formulierung basiert, die an und für sich nur zur Beschreibung von Binärkollisionen, also von Zweipartikelkontakten, geeignet ist, siehe z. B. die Ausführungen in [184, 203]. Die MD-Methode kann insofern bei dichten Systemen mit ausgeprägtem Vielpartikelkontakt, wo also die einzelnen Kollisionen in aller Regel nicht mehr voneinander unabhängig sind, ungültig werden. Dies trifft vor allem für solche Systeme zu, die durch lang andauernde Vielpartikelkontakte gekennzeichnet sind, wie z. B. quasi-statische Systeme oder Systeme mit Partikelagglomeraten bzw. -aggregation. Da für die vorliegende Arbeit, die im Kontext der Mehrphasenströmung steht, zum einen die Betrachtung der Partikelagglomeration von besonderem Interesse ist und da zum anderen die instationären Fluidkräfte, die kontinuierlich auf die Partikel wirken, entsprechend fortlaufende Ereignisse darstellen, sodass die MD folglich vollständig an ihrer numerischen Effizienz verliert, wird hier zur Modellierung der dispersen Phase die DEM bevorzugt. Es bleibt an dieser Stelle noch zu resümieren, dass die Anwendungsbreite der DEM im Gegensatz zur MD unabhängig von der Beladungsdichte des Systems ist. Der Vollständigkeit halber soll des Weiteren erwähnt werden, dass in der Literatur in den letzten Jahren interessante Verfahren propagiert werden, die auf eine Kombination der MD und DEM ausgerichtet sind, um auf diese Weise die Vorteile der einzelnen Methoden miteinander zu vereinen, sodass diese umfassend zum Tragen kommen, siehe z. B. [107, 259].

Bemerkungen zur Diskrete-Elemente-Methode

Weiterentwicklung. Die Diskrete-Elemente-Methode hat sich seit ihrer Einführung, also innerhalb weniger Jahrzehnte, sehr rasch weiterentwickelt und zählt mittlerweile zu den fest etablierten numerischen Simulationsmethoden, und das sowohl in der universitären Forschung als auch in der industriellen Anwendung. Dass die Fortentwicklung der DEM noch nicht zum Erliegen gekommen ist und dass sie von der Forschung kontinuierlich vorangetrieben wird, zeigen die zahlreichen mit der DEM in Verbindung stehenden Artikel in den Tagungsbänden der alle zwei Jahre stattfindenden Konferenz 'Particles' [192, 193]. Ferner ist in diesem Kontext hervorzuheben, dass die Fachzeitschrift 'Engineering Computations' für die DEM innerhalb von fünf Jahren zwei Sonderausgaben [225, 226] reserviert hat. Eine grafische Darstellung der Anzahl der Veröffentlichungen, die im Zeitraum 1988-2005 im Zusammenhang mit der DEM herausgebracht wurden, findet sich in Zhu et al. [284]. Aus jener Darstellung kann die stark ansteigende Forschungsintensität in diesem Bereich abgelesen werden. Der Entwicklungsstand dieses Simulationsverfahrens hat darüber hinaus derweil auch schon so ein hohes Niveau erreicht, dass das Verfahren bereits in der Industrie eine wesentliche Stellung einnimmt, was sich durch die zahlreichen, leistungsfähigen kommerziellen DEM-Programme [224, 240, 241] abzeichnet, die von Softwareunternehmen auf dem Markt angeboten werden. Der Vormarsch der DEM ist natürlich nicht nur allein auf neue Materialmodelle und verbesserte numerische Algorithmen zurückzuführen, sondern insbesondere auch auf die immens steigende Leistungsfähigkeit der Computer innerhalb der letzten Jahre. Dabei ermöglichen schnelle Multiprozessor-Rechner in Kombination mit effizienten, parallelen Algorithmen dem Anwender und Entwickler heutzutage große, dreidimensionale, womöglich gekoppelte Problemstellungen mit der DEM zu betrachten. Sehr ausführliche überblicksartige Darstellungen zu den Entwicklungen der DEM mit einer umfassenden Referenzliste finden sich in den Arbeiten von Zhu et al. [284] und Li *et al.* [158].

Anwendungsbereiche. Besonders vorteilhaft lassen sich mit der DEM solche Medien beschreiben, die einen granularartigen Charakter besitzen. Dies gilt sowohl für granulare

kohäsive Stoffe als auch für granulare kohäsionslose. Die zuletzt genannten sind Materialien, bei denen die granularen Teilchen prinzipiell in loser Form vorkommen, wie dies z.B. bei Sand, Kies und Staub; Gemüse, Getreide, Kaffeebohnen und Reis; Tabletten, Pillen und Pulver der Fall ist. Dahingegen bestehen die zuerst erwähnten Medien aus einem mehr oder weniger festen, generell heterogenen Gefüge, das aus einer Menge von gleichen und/oder unterschiedlichen granularen Bestandteilen zusammengesetzt ist, wobei diese durch adhäsive und/oder kohäsive Kräfte zusammengehalten werden. Hierzu zählen z.B. Beton, Keramik, Marmor und Böden. So geartete Stoffe werden im Kontext der DEM z.B. in [5, 46, 239] beschrieben. Das Hauptanwendungsgebiet der DEM ist zweifelsohne die Beschreibung des Fließverhaltens von kohäsionslosen granularen Stoffen in mechanischen Systemen, wie u.a. in Silos, Trommelmühlen, Trommelmischern, Schneckenförderern, Wirbelschichtentrocknern, pneumatischen Förderanlagen, siehe z. B. [36, 48, 62, 65, 98, 130, 134, 180, 237]. Diese Aufzählung stellt lediglich nur einen kleinen Ausschnitt der Anwendungsbereiche der DEM dar und kann überdies ohne Weiteres durch Hinzunahme der überblicksartigen Arbeiten von Cleary [37, 38] und Zhu et al. [285] zu DEM-Applikationen fortgeführt werden.

Partikelgeometrien. Es wurde bereits erwähnt, dass sich die DEM als eine sehr rechenintensive Methode auszeichnet. Die Gründe dafür liegen einerseits in der Zeitdiskretisierung, die für eine detaillierte Beschreibung der auftretenden Kontaktvorgänge sehr fein zu wählen ist, und andererseits in der Kontaktbestimmung selbst – also in der algorithmischen Ermittlung, ob und wie Partikel miteinander in einer Kontaktbeziehung stehen. Dieser Punkt ist natürlich mit jener Partikelgeometrie eng verbunden, die hinsichtlich der Idealisierung der Stoffteilchen zugrunde gelegt wird. Ein häufig gewählter Modellansatz, wie auch in der vorliegenden Arbeit, besteht darin, die Partikel als Kugeln zu approximieren (siehe die Beiträge in [192, 193]). Das liegt zumal daran, dass sich die Kontaktermittlung bei sphärischen Partikeln im Vergleich zu jenen Kontaktbestimmungsverfahren, die bei elliptischen, superelliptschen oder polygonalen Teilchengeometrien zum Tragen kommen (z. B. [125, 246, 247, 274, 276]), durch einen bedeutend geringeren algorithmischen Aufwand und Komplexität auszeichnet. Eine Möglichkeit, die in der Literatur auch oft verfolgt wird, um komplexere Geometrien auf der Grundlage von sphärischen Partikeln zu beschreiben, stellt der Ansatz dar, mehrere Kugeln überlappend zu einer aufwendigen, irregulären Partikelgesamtform anzuordnen, wobei im Allgemeinen festgelegt wird, dass die einzelnen Bestandteile der zusammengesetzten Form sich nicht relativ zueinander bewegen können, siehe z. B. [15, 136].

5.2 Kinematik und Kontakt

Im 3D Euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^3 hat ein freies, ungebundenes Partikel bezogen auf ein kartesisches Koordinatensystem 6 Bewegungsfreiheitsgrade, wovon 3 translatorischer und 3 rotatorischer Art sind. Ebenfalls sechs an der Anzahl sind die Kontaktfreiheitsgrade zweier sich stoßender Partikel (siehe Abb. 5.1), und zwar sind davon wiederum 3 translatorisch und 3 rotatorisch. Sie lauten im Einzelnen folgendermaßen:

* Translatorisch:

- Normalverschiebung: Die Partikel bewegen sich entlang der gemeinsamen Verbindungsachse ihrer Massenmittelpunkte (1 Freiheitsgrad).
- Gleiten: Die beiden Kontaktflächen rutschen aufeinander (2 Freiheitsgrade).

* Rotatorisch:

- Rollen: Die zwei Partikel rollen übereinander hinweg (2 Freiheitsgrade).
- Spinrotation: Die Kontaktflächen rotieren mit unterschiedlicher Geschwindigkeit um die gemeinsame Verbindungsachse (1 Freiheitsgrad).

Es soll an dieser Stelle zum einen festgelegt werden, dass im Folgenden die Ortsbestimmung eines Partikels \mathcal{P}_i anhand des auf seinen Massenmittelpunkt ($M_i = \mathcal{M}$) bezogenen Ortsvektors erfolgt, d. h. es gilt: $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{M_i}$. Zum anderen soll in dieser Arbeit stets von solchen Partikeln ausgegangen werden, die eine homogene Dichteverteilung besitzen. In dem Fall fällt der Massenmittelpunkt des Partikels \mathcal{P}_i mit seinem geometrischen Mittelpunkt zusammen.

Die Menge aller Partikel, die zum Zeitpunkt t miteinander in Kontakt stehen, wobei jeweils ein sich berührendes Partikelpaar einen gemeinsamen Kontaktpunkt k besitzt, soll durch den Satz

$$\mathcal{S}(t) := \{k | (k \in \mathcal{P}_i) \land (k \in \mathcal{P}_j)\}$$

$$(5.1)$$

beschrieben werden. Dabei ist das entsprechende Kriterium für eine eventuelle Aufnahme der Partikel \mathcal{P}_i und \mathcal{P}_j in den Satz $\mathcal{S}(t)$ wie folgt definiert:

$$g^{n} = g^{n}(\mathbf{x}, t) = R_{i} + R_{j} - (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}) \cdot \mathbf{n} \qquad \begin{cases} < 0 \text{ kein Kontakt} \\ = 0 \text{ Kontakt} \end{cases}$$
(5.2)

Darin gibt g^n einen Abstandsmaß für den minimalen Abstand der Partikeloberflächen an,



Abbildung 5.1: Illustrative Darstellung eines Zweipartikelkontaktes.

 R_i und R_j stehen für den Radius von \mathcal{P}_i bzw. \mathcal{P}_j und **n** ist der von M_j aus in Richtung M_i gerichtete Einheitsvektor, der wie folgt definiert ist:

$$\mathbf{n} := \mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||} \,. \tag{5.3}$$

Eine illustrative Darstellung des Zweipartikelkontakts ist in Abb. 5.1 gegeben. In dieser Abbildung beschreiben $d\mathbf{X}_i, d\mathbf{X}_j$ und $d\Psi_i, d\Psi_j$ die inkrementellen Verschiebungen bzw. Rotationen, welche die in Kontakt kommenden/stehenden Partikel \mathcal{P}_i und \mathcal{P}_j innerhalb eines infinitesimalen Zeitinkrements dt jeweils ausführen. Im Falle des Partikels \mathcal{P}_i lauten der Positions- und Orientierungsvektor zum Zeitpunkt $\hat{t} = t_0 + dt$ folgendermaßen:

$$\mathbf{x}_i(t=\hat{t}) = \mathbf{X}_i + \mathrm{d}\mathbf{X}_i \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\psi}_i(t=\hat{t}) = \boldsymbol{\Psi}_i + \mathrm{d}\boldsymbol{\Psi}_i \,, \tag{5.4}$$

und was seine Translations- und Rotationsgeschwindigkeit anbetrifft, so gelten dafür die beiden nachstehenden Beziehungen:

$$\mathbf{v}_i(t=\hat{t}) = \mathbf{V}_i + \mathrm{d}\mathbf{V}_i$$
 bzw. $\boldsymbol{\omega}_i(t=\hat{t}) = \boldsymbol{\Omega}_i + \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}_i$. (5.5)

Des Weiteren soll hier die inkrementelle Relativverschiebung der beiden Partikel erwähnt werden. Sie folgt aus

$$\mathrm{d}\mathbf{X}_{ij} = \mathrm{d}\mathbf{X}_i - \mathrm{d}\mathbf{X}_j \,. \tag{5.6}$$

Wenn nun Gleichung (5.6) nach der Zeit differenziert wird, dann gilt der Zusammenhang:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{X}_{ij}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j =: \mathbf{V}_{ij} \tag{5.7}$$

und man erhält letztlich die Relativgeschwindigkeit der Partikelmittelpunkte \mathbf{V}_{ij} . Im Folgenden sollen noch zwei weitere Formen der Relativgeschwindigkeit, die für die Formulierung von Konstitutivbeziehungen zur Beschreibung der Kontaktkinematik wichtig sind, vorgestellt werden.

Eine der beiden steht für die Relativgeschwindigkeit der Partikel am Kontaktpunkt k. Diese Geschwindigkeit lässt sich für den Zeitpunkt des Aufpralls unter Hinzunahme der entsprechenden Winkelgeschwindigkeiten durch

$$\mathbf{V}^{k} := \mathbf{V}_{ij}^{k} = (\mathbf{V}_{i} + \mathbf{\Omega}_{i} \times \mathbf{r}_{i}^{k}) - (\mathbf{V}_{j} + \mathbf{\Omega}_{j} \times \mathbf{r}_{j}^{k}) \quad \text{mit} \begin{cases} \mathbf{r}_{i}^{k} = R_{i}(-\mathbf{n}) \\ \mathbf{r}_{j}^{k} = R_{j}(\mathbf{n}) \end{cases}$$
(5.8)

bestimmen, wobei \mathbf{r}_i^k und \mathbf{r}_j^k jene Vektoren sind, die ausgehend von den Partikelmittelpunkten M_i^p bzw. M_j^p auf den gemeinsamen Kontaktpunkt k führen. Für die Behandlung eines Stoßproblems bietet es sich zumeist an, die Relativgeschwindigkeit \mathbf{V}^k in eine normale Komponente $\mathbf{V}^{k,n}$ und eine tangentiale Komponente $\mathbf{V}^{k,t}$ aufzuteilen. Dabei folgt die erstere aus einer Projektionsbeziehung und lautet

$$\mathbf{V}^{k,n} := \mathbf{V}_{ij}^{k,n} = (\mathbf{V}_{ij}^k \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \,, \tag{5.9}$$

die letztere wird hingegen auf folgende Weise ermittelt:

$$\mathbf{V}^{k,t} := \mathbf{V}_{ij}^{k,t} = \mathbf{V}_{ij}^{k} - \mathbf{V}_{ij}^{k,n} \,. \tag{5.10}$$

Die andere Form der Relativgeschwindigkeit, die hier eingeführt werden soll, bezieht sich auf den Rotationsfreiheitsgrad der beiden Partikel um ihre gemeinsame Normalenachse **n**. Die unten angeführte Relativbeziehung für Ω^n dient dazu, die relative Rotationsgeschwindigkeit der Partikel um diese charakteristische Rotationsachse **n** zu erfassen. Sie berechnet sich zu

$$\mathbf{\Omega}^n = (\mathbf{\Omega}^r \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad \text{mit} \quad \mathbf{\Omega}^r := \mathbf{\Omega}_{ij} = \mathbf{\Omega}_i - \mathbf{\Omega}_j \,. \tag{5.11}$$

Dabei ist Ω^r die ungerichtete relative Rotationsgeschwindigkeit des Kontaktpaares $\{\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_i\}$.

Bestimmung des Abstandsmaßes beim Partikel-Wand-Kontaktproblem

Anhand der in Gleichung (5.2) dargestellten Beziehung kann die Kontaktüberprüfung zwischen zwei sphärischen Partikeln relativ einfach vorgenommen werden. Im Vergleich dazu ist die Bestimmung des Abstandsmaßes bzw. die Detektierung des Kontakts zwischen einem Partikel und einem zur Systemberandung gehörenden Wandelement¹ wesentlich aufwendiger. Diese Problemstellung wird in Kremmer & Favier [139, 140] anhand einer darin vorgestellten Lösungsstrategie in ausführlicher Weise betrachtet, und zwar sowohl für stationäre als auch für dynamische ebene Wände. In der vorliegenden Arbeit wird auf die dort gezeigte Strategie zurückgegriffen. Sie wurde in das im Rahmen dieser Dissertation entwickelte DEM-Programm implementiert und kommt bei den Simulationen zur Behandlung des besagten Problems zum Einsatz. Die detaillierten Ausführungen zu diesem Thema finden sich im Anhang A. Sie wurden hierhin ausgelagert, damit der Rahmen dieses Kapitels bewahrt bleibt.

5.3 Kontaktbedingungen und ihre Regularisierung

Die Wechselwirkung zwischen aufeinandertreffenden Partikeln wird in dieser Arbeit im Rahmen des weichen Partikelkontakts beschrieben. Bevor aber die entsprechenden Formulierungen zur Kontaktbehandlung betrachtet werden, sollen die analogen Beziehungen für den harten Partikelkontakt in knapper Form angeführt werden, zumal auf diesen Ansatz in der vorliegenden Arbeit stellenweise Bezug genommen wird. Es sei an der Stelle erwähnt, dass die folgenden Darstellungen in Bezug auf die zuletzt genannte Methode sich vorzugsweise an die Ausführungen in Luding [166, 168] anlehnen.

Harter Partikelkontakt in der MD

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel angeschnitten wurde, wird der Kontaktvorgang bei harten Partikeln in eine pre- und postkollisionale Phase aufgeteilt, wobei die Phasen durch eine gemeinsame Stoßzahl (Restitutionskoeffizient) der jeweiligen Kontakt-

 $^{^{1}}$ Die Begrifflichkeit 'Wand' wird in der vorliegenden Arbeit gleichermaßen für eine vertikal, horizontal oder schräg ausgerichtete Ebene verwendet.
partner – diese Größe umschreibt den Elastizitätsgrad eines Stoßes – verknüpft werden:

$$\mathbf{v}_{ij} = -e \, \mathbf{V}_{ij} \,. \tag{5.12}$$

Hierin ist \mathbf{V}_{ij} die Relativgeschwindigkeit der Massenmittelpunkte vor dem Stoß und \mathbf{v}_{ij} die entsprechende Geschwindigkeit der Partikel nach dem Stoß. Wenn man nun Gleichung (5.12) in Bezug auf den charakteristischen Kontaktpunkt k betrachtet und dabei den Stoß in einen normalen und einen tangentialen Anteil unter Einführung der Stoßzahlen e^n und e^t separiert², sodann lässt sich im Einzelnen schreiben:

$$\mathbf{v}^{k,n} = -e^n \mathbf{V}^{k,n} \quad \text{mit} \qquad 0 \le e^n \le 1 \tag{5.13}$$

$$\mathbf{v}^{k,t} = -e^t \mathbf{V}^{k,t} \quad \text{mit} \quad -1 \le e^t \le 1 \tag{5.14}$$

und zusammengenommen gilt:

$$\mathbf{v}^{k} = -e^{n} \mathbf{V}^{k,n} - e^{t} \mathbf{V}^{k,t} \,. \tag{5.15}$$

Bei einer Partikelsimulation sind natürlich nicht die Relativgeschwindigkeiten der Teilchen in erster Linie von Interesse, sondern deren individuelle postkollisionale Geschwindigkeiten: $\{\mathcal{P}_i | (\mathbf{v}_i, \boldsymbol{\omega}_i); \mathcal{P}_j | (\mathbf{v}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \}$. Diese können aus einer Impuls- und Drallerhaltungsbetrachtung abgeleitet werden, wobei dafür die Impuls- und Drallbilanz, (3.22) bzw. (3.29), zeitlich über die Stoßperiode zu integrieren ist. Letztlich erhält man hier folgende Beziehungen:

• Translationsgeschwindigkeiten:
$$\begin{cases} \mathbf{v}_{i} = \mathbf{V}_{i} + \frac{1}{m_{i}} \Delta \mathbf{I} \\ \mathbf{v}_{j} = \mathbf{V}_{j} - \frac{1}{m_{j}} \Delta \mathbf{I} \end{cases}$$
(5.16)
• Rotationsgschwindigkeiten:
$$\begin{cases} \boldsymbol{\omega}_{i} = \boldsymbol{\Omega}_{i} + \frac{1}{\Theta_{i}} \mathbf{r}_{i}^{k} \times \Delta \mathbf{I} \\ \boldsymbol{\omega}_{j} = \boldsymbol{\Omega}_{j} - \frac{1}{\Theta_{j}} \mathbf{r}_{j}^{k} \times \Delta \mathbf{I} . \end{cases}$$
(5.17)

Dabei steht ΔI für die aus dem Stoßvorgang resultierende Impulsänderung und entspricht dem Zeitintegral der Stoßkraft über die Stoßperiode. Sie kann – analog zum Restitutionskoeffizienten – in eine Normal- und eine Tangentialkomponente aufgeteilt werden:

$$\Delta \mathbf{I} = \Delta \mathbf{I}^n + \Delta \mathbf{I}^t \,. \tag{5.18}$$

²Die tangentialen Kontaktkräfte haben prinzipiell einen vernachlässigbar geringen Einfluss auf die Kontaktspannungen in Normalenrichtung [120], sodass der Kontakt ohne Weiteres in einen Normal- und Tangentialanteil aufgeteilt und voneinander getrennt betrachtet werden kann. Dabei ist lediglich die Kopplung der Tangentialkräfte mit den resultierenden Normalkräften zu berücksichtigen. Insofern können die Modelle zur Beschreibung des Normal- und Tangentialkontakts individuell gewählt werden.

Die Impulsänderung für den Normalenanteil lässt sich direkt aus den Identitäten (5.13) und (5.16) bestimmen und folgt zu

$$\Delta \mathbf{I}^{n} = -m^{*}(1+e^{n})\mathbf{V}^{k,n} \quad \text{mit} \quad m^{*} = \frac{m_{i} m_{j}}{m_{i} + m_{j}}.$$
(5.19)

Hierin bezeichnet m^* die effektive Masse der beiden Stoßpartner. Zur Bestimmung der tangentialen Impulsänderung $\Delta \mathbf{I}^t$ bietet es sich hier an, das Coulombsche Reibgesetz (siehe Kapitel 5.3.1) hinzuzuziehen. Unter Beachtung dieses Reibgesetzes lässt sich schreiben:

$$||\Delta \mathbf{I}^t|| \le \mu \, ||\Delta \mathbf{I}^n||\,,\tag{5.20}$$

worin μ für den Reibkoeffizienten steht, der für die Partikelpaarung $\{\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j\}$ charakteristisch ist. Wenn man nun als zusätzliche Beziehung den Stoßwinkel $\gamma = \triangleleft (\mathbf{V}^k, \mathbf{n})$ einführt, so kann der Tangentialanteil der Impulsänderung im Falle eines Stoßes zwischen zwei Kugeln nach einigen Zwischenschritten (siehe Luding [166, 168]) in der Form

$$\Delta \mathbf{I}^{t} = m^{*} \mu (1 + e^{n}) \cot(\gamma) \mathbf{V}^{k,t} = -\frac{2 m^{*}}{7} (1 + e^{t}) \mathbf{V}^{k,t}$$
(5.21)

angegeben werden. Die tangentiale Stoßzahl e^t ist dabei wie folgt definiert:

$$e^{t} = -1 - \frac{7\mu}{2}(1+e^{n})\cot(\gamma) \quad \text{mit} \quad -1 \le e^{t} \le 1.$$
 (5.22)

Bemerkung: Zum Abschluss des harten Partikelkontakts soll hier noch am Rande erwähnt werden, dass reale Materialpaarungen in der Regel keine konstante Stoßzahl besitzen. Diese charakteristische Größe ist im Prinzip vielmehr eine nichtlineare Funktion, die überwiegend von der relativen Kollisionsgeschwindigkeit der Partikel abhängt, siehe dazu die Stoßexperimente in [19, 95, 146, 207, 228]. Bei der Simulation eines Partikelsystems muss also jede einzelne Stoßzahl entsprechend der jeweiligen Geschwindigkeitskonstellation der Stoßpaarung im Einzelnen bestimmt bzw. angepasst werden, z. B. durch Verwendung einer explizit geschwindigkeitsabhängigen Stoßzahlfunktion, siehe Ramirez *et al.* [208].

Weicher Partikelkontakt in der DEM

Während beim weichen Kontakt ein Partikelpaar einen Stoß ausführt, entsteht zwischen den beiden Teilchen, und zwar um deren gemeinsamen Kontaktpunkt k herum, eine sog. Kontaktfläche. Die Größe dieser Fläche hängt von der Deformation der Partikel ab und ist insofern proportional zur vorhandenen Kontaktkraft. Die Modellierung der Kontaktkräfte erfolgt bei weichen Partikeln auf der Grundlage von Konstitutivgleichungen. Sie werden in der Regel – wie im Falle der eben dargestellten Impulsformulierungen – für den Normal- und Tangentialkontakt gesondert festgelegt. So kann man hier, analog zur Beziehung (5.18), den für die Kontaktbeschreibung maßgeblichen Kraftvektor \mathbf{F}^k (siehe Abb. 5.2) folgendermaßen angeben:

$$\mathbf{F}^k = \mathbf{F}^n + \mathbf{F}^t \,. \tag{5.23}$$

Hierin sind \mathbf{F}^n und \mathbf{F}^t die Normalkraftkomponente bzw. die Tangentialkraftkomponente von \mathbf{F}^k , wobei die letztere stets entgegen der entsprechenden Relativgeschwindigkeit des Kontaktpunktes wirkt.

Im Folgenden sollen hinsichtlich der Behandlung des weichen Partikelstoßes die erforderlichen Kontaktbedingungen besprochen werden. Im Anschluss wird dann auf deren Regularisierung eingegangen.



Abbildung 5.2: Schematische Darstellung der Zerlegung der resultierenden Kontaktkraft F^k am Kontaktpunkt k. Hier wirkt die Normalkraft F^n als Druckkraft in Richtung des Partikelmittelpunktes und die Tangentialkraft F^t ist entgegen der Relativgeschwindigkeit des Kontaktpunktes gerichtet.

5.3.1 Kontaktbedingungen

Normalkontakt

Die für den Normalkontakt zu fordernde Bedingung muss den Umstand erfüllen, dass zum einen die Partikel sich nicht durchdringen $(g^n \leq 0)$ und dass zum anderen zwischen ihnen nur Druckkräfte übertragen werden $(F^n \geq 0)$. Beachtet man noch den Punkt, dass Kräfte nur dann auftreten, wenn die Teilchen in der Tat in Kontakt sind, so lassen sich die Restriktionen für den Normalkontakt zusammenfassend in Form der Hertz-Signorini-Moreau-Bedingung (HSM-Bedingung) wie folgt angeben:

$$g^n \le 0, \quad F^n \ge 0, \quad g^n F^n = 0.$$
 (5.24)

In Abb. 5.3(a) ist die HSM-Bedingung mit ihren zulässigen Bereichen graphisch darge-



Abbildung 5.3: Graphische Darstellung der HSM-Bedingungen: (a) Normalkraft ohne Adhäsion und (b) Normalkraft mit Adhäsion.

stellt. Eine Erweiterung der obigen Beziehungen auf den adhäsiven Kontakt ist hier dadurch gegeben, wenn zwischen den Partikeloberflächen auch Zugkräfte zugelassen werden. Bezeichnet man, wie in Abb. 5.3(b) illustriert, mit $F_{a,c}$ die betragsmäßig maximal übertragbare Kontaktzugkraft, dann lautet die modifizierte HSM-Bedingung folgendermaßen [45]:

$$g^n \le 0, \quad F^n \ge -F_{a,c}, \quad g^n F^n = 0.$$
 (5.25)

Tangentialkontakt

Reale Partikel besitzen in aller Regel eine rauhe Oberfläche. Sofern dergleichen Teilchen kollidieren, wobei zumeist ein schiefer Stoß stattfindet, werden während der Kollisionsphase neben Normalkräften auch senkrecht dazu wirkende Kräfte (Reibkräfte) übertragen (z. B. [91, 94]). Um die in der Kontaktfläche der beiden Stoßpartner agierenden Reibkräfte abzubilden, bietet sich das klassische Coulombsche Gesetz an (siehe z. B. Wriggers [278]), das hier mit der Einführung der folgenden Bezeichnung für den Relativgeschwindigkeitsvektor $\dot{\mathbf{g}}^t = \mathbf{v}^{k,t}$ in der Form

$$\mathbf{F}^{t} = -\mu \left| F^{n} \right| \frac{\dot{\mathbf{g}}^{t}}{\left| \left| \dot{\mathbf{g}}^{t} \right| \right|} \quad \text{für} \quad \left| \left| \mathbf{F}^{t} \right| \right| > \mu \left| F^{n} \right|$$
(5.26)

angegeben werden kann. Bei Vorhandensein von Adhäsion ist in (5.26) natürlich auch jener Beitrag zur Kontaktkraft F^n , der aus der Partikelanziehung stammt, miteinzubeziehen (siehe Kendall [133]). Wie aus der obigen Definition zu entnehmen ist, ist die in der Tangentialebene übertragene oder übertragbare Gleitreibungskraft proportional zum Reibungskoeffizienten μ . Dieser erfasst die Oberflächenrauhigkeit des Kontaktpaares und stellt beim klassischen Coulombschen Gesetz einen konstanten Parameter dar. Eine graphische Darstellung dieses Reibgesetzes ist in Abb. 5.4(a) gezeigt, worin die Tangentialkraft F^t über die Relativgeschwindigkeit \dot{g}^t aufgetragen ist. In der Regel ist der Rei-



Abbildung 5.4: Schematische Darstellung von Reibgesetzen.

bungskoeffizient u. a. eine nichtlineare Funktion der Normalkraft F^n und der Schlupfrate \dot{g}^t der Kontaktflächen, siehe Persson [197] oder Wriggers [278]. Dazu wird in Abb. 5.4(b) eine illustrative Darstellung gegeben. Ein demgegenüber vereinfachtes, weitverbreitetes Modell ist in Abb. 5.4(c) zu sehen. In dem Fall kommen anstatt einer relativ aufwendig zu bestimmenden Reibfunktion lediglich zwei konstante Koeffizienten zur Behandlung

der Reibung zum Tragen, und zwar der Haftreibungskoeffizient μ_H im Hinblick auf die Abbildung des Haftfalls und der Gleitreibungskoeffizient μ_G bezüglich des Gleitfalls. Es gilt generell: $\mu_H \ge \mu_G$. Somit ergibt sich die in der Kontaktfuge maximal übertragbare Tangentialkraft zu

$$|F^t| \le \mu_H |F^n|, \qquad (5.27)$$

wobei $\dot{g}^t = 0$ ist. Ist allerdings F^t so groß, dass die Haftbedingung verletzt wird, dann tritt zwischen den Partikeln eine Relativbewegung auf, sodass gilt: $\dot{g}^t \neq 0$. Die unterdessen resultierende Gleitkraft ist entsprechend Gleichung (5.26) als

$$\mathbf{F}^{t} = -\mu_{G} \left| F^{n} \right| \frac{\dot{\mathbf{g}}^{t}}{\left| \left| \dot{\mathbf{g}}^{t} \right| \right|} \tag{5.28}$$

definiert. Um den Gültigkeitsbereich der Tangentialkräfte festzulegen, soll an dieser Stelle eine sog. Gleitfunktion eingeführt werden:

$$f_s(\mathbf{F}^t, F^n, \mu) = ||\mathbf{F}^t|| - \mu ||\mathbf{F}^n|| \le 0 \quad \text{mit} \quad \mu = \mu_{(H,G)}.$$
 (5.29)

Auf sie wird in den späteren Ausführungen wiederholt zurückgegriffen.

Roll- und Torsionswiderstand

In der Kontaktfläche zweier Partikel können zuzüglich zu den Kräften aus dem Normalund Tangentialkontakt auch weitere mechanische Kräfte entstehen, die vornehmlich auf Torsions- und Rollreibung zurückzuführen sind. Kräfte aus Torsionsreibung resultieren daraus, wenn die beiden rauhen Partikel mit unterschiedlichen Rotationsgeschwindigkeiten um die gemeinsame Normalenachse rotieren. Hingegen liegt die Quelle jener Kräfte aus Rollreibung hauptsächlich in der Rollbehinderung der Partikel durch die Präsenz der Adhäsion in der Kontaktebene, aber auch im Deformationsverhalten der Partikel hinsichtlich des Rollvorgangs selbst (Energiedissipation beim Rollen), siehe z. B. [58, 74, 132, 233]. Das eben Gesagte und die folgenden Ausführungen gelten natürlich entsprechend auch für die Partikel-Wand-Wechselwirkung.

Ein in der DEM weitverbreiteter Ansatz, um die Widerstandskräfte aus Roll- und Torsionsreibung abzubilden, liegt in der Verwendung eines Roll- und Torsionswiderstandsdrehmomentes, M^r bzw. M^n , z. B. [1, 113, 175]. Es wird hier in der Regel so verfahren, dass die jeweiligen ermittelten Widerstandmomente $M^{(r,n)}$ jeweils auf das einzelne Partikel des Stoßpaares explizit aufgebracht werden, und zwar stets entgegen die Bewegungsrichtung des betreffenden Partikels, wobei beim Rollwiderstand die gemeinsame Rollrichtung und beim Torsionswiderstand die Rotation um die Normalenachse des Paares die maßgeblichen Richtungen sind. Führt man nun – in Entsprechung zur Coulombschen Darstellung in Abb.5.4(a) – hier ein kritisches Moment $M_c^{(r,n)}$ ein, sodass auf der einen Seite bis zum Einstellen dieser Größe verhindert wird, dass sich die Partikel entgegen der Wirkung des Widerstandsmomentes bewegen, aber auf der anderen Seite erlaubt, dass bei Erreichen dieses Momentes die entsprechende Relativbewegung einsetzt, so lässt sich schreiben:

• Rollwiderstand:
$$\begin{cases} v^r = 0 & \text{für} \quad M^r < M_c^r \\ v^r \neq 0 & \text{für} \quad M^r = M_c^r \end{cases}$$
(5.30)

• Torsionswiderstand:
$$\begin{cases} \omega^n = 0 & \text{für} \quad M^n < M_c^n \\ \omega^n \neq 0 & \text{für} \quad M^n = M_c^n . \end{cases}$$
(5.31)

Dabei sind ω^n und v^r die relative Rotationsgeschwindigkeit der Normalenachse (5.11) bzw. die gemeinsame Rollgeschwindigkeit des Kontaktpaares (5.97). Da sowohl für (5.30) als auch für (5.31) der Verlauf des gültigen Wertebereiches analog zu Abb.5.4(a) ist, sollen an dieser Stelle die entsprechenden graphischen Abbildungen ausgelassen werden. Im Folgenden soll auch auf eine explizite Darstellung der allgemeinen Regularisierung in Bezug auf den Roll- und Torsionswiderstand verzichtet werden. Dieser Punkt wird im nachstehenden Teilkapitel allein im Rahmen des Normal- und Tangentialkontakts exemplarisch angesprochen.

5.3.2 Regularisierung

Regularisierung der Normalkontaktbedingungen

Angesichts dessen, dass der Abstandsmaß g^n für Nullwerte mehrdeutig ist, kann die Kontaktkraft F^n nicht unmittelbar aus den Kontaktbedingungen (5.24) berechnet werden. Eine Methode, die im Kontext der DEM zur Regularisierung der Normalkontaktbeziehungen hauptsächlich zum Einsatz kommt – wie auch in der vorliegenden Arbeit –, ist die Penalty-Methode. Bei dieser Methode wird die Bedingung (5.24)₁ abgeschwächt, und zwar so, dass zwischen den Partikeln kleine unphysikalische Durchdringungen zugelassen werden. Es wird dabei angenommen, dass zum einen die Penetration der Partikel g^n konform zur resultierenden Partikeldeformation δ ist, d. h. es gilt:

$$\delta = g^n \,, \tag{5.32}$$

und dass zum anderen die Normalkraft und die Überlappung der Partikel proportional zueinander sind. Dieser Ansatz liefert aber nur dann annehmbare Ergebnisse, wenn die Durchdringung der Partikel im Vergleich zum Radius der zugehörigen Kontaktfläche klein ist [120]. Die Regularisierung der Kontaktbedingungen (5.24) kann beispielsweise dadurch erfolgen, indem man zur Bestimmung von F^n einen linearen Penalty-Parameter c^n einführt, der die Eigenschaft eines Federelements hat ('Normalsteifigkeit'), siehe Abb. 5.5(a). Dementsprechend gilt:

$$F^n = 0$$
 falls $g^n < 0$ und $F^n = c^n g^n$ falls $g^n \ge 0$. (5.33)

Der Penalty-Parameter kann gemäß der Materialeigenschaft der Partikel gewählt werden. Da bei der Penalty-Methode die Teilchen sich teilweise überlappen müssen, damit zwischen ihnen Kontaktkräfte entstehen, dient der Abstandsmaß g^n folglich nicht nur zur Kontaktüberprüfung, sondern diese Variable stellt auch für die Stoffgleichung des Nor-



malkontakts eine bedeutende kinematische Größe dar.

Abbildung 5.5: Graphische Darstellungen der regularisierten Kontaktbedingungen: (a) Normalkontakt und (b) Tangentialkontakt mit $\mu = \mu(\mu_H, \mu_G)$.

Regularisierung der Tangentialkontaktbedingungen

Die Regularisierung des Tangentialkontakts wird generell in Analogie zum Normalkontakt vorgenommen, wobei in dem Fall eine Relativverschiebung des Kontaktpunktes in Tangentialrichtung zugelassen wird. Jener charakteristische Penalty-Parameter, der hier zur Bestimmung der in der Kontaktebene vorhandenen Reibkraft dient, soll mit c^t gekennzeichnet werden. Sie entspricht der 'Tangentialsteifigkeit'. Wie der Abb. 5.5(b) zu entnehmen ist, kann die Evolution dieser Kraft bezüglich der Tangentialverschiebung in zwei Bereiche unterteilt werden. Der erste Bereich erstreckt sich vom Beginn der Relativverschiebung bis zum Erreichen der Haftgrenze, die durch $F^t = \mu_H F^n$ gegeben ist. Dieser Abschnitt, der den regularisierten Haftfall darstellt, kann bei einem linearen Ansatz wie folgt erfasst werden:

$$F^{t} = -c^{t} g^{t}$$
 für $f_{s}(F^{t}, F^{n}, \mu_{H}) \leq 0.$ (5.34)

Somit sind hier – entsprechend der Wahl der Steifigkeit c^t – relativ kleine reversible Tangentialverschiebungen zugelassen. Sie sind als das Pendant zur Durchdringung der Partikel beim Normalkontakt zu deuten. Der zweite Bereich setzt nun an dem Punkt an, wo die Tangentialkraft die Haftgrenze erreicht und der Haftfall folgerichtig in den Gleitfall übergeht. Im Gleitfall berechnet sich die Tangentialkraft nach Coulomb zu

$$F^{t} = \mu_{G}F^{n}$$
 für $f_{s}(F^{t}, F^{n}, \mu_{G}) = 0.$ (5.35)

Zwar ist der Übergangspunkt von der Haftreibung zur Gleitreibung noch mehrdeutig, aber er stellt im Hinblick auf die numerische Verwirklichung der Regularisierung keine Schwierigkeit dar.

5.4 Konstitutivbeziehungen

Ein besonderes Augenmerk gilt in der DEM der Modellierung und Berechnung der Kontaktkräfte, die bei Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Interaktionen auftreten. Diesbezüglich werden in der Regel zwar einfache Kraft-Verschiebungs-Modelle herangezogen – wie u. a. dergleichen Ansätze, die bereits exemplarisch hinsichtlich der Regularisierung des Normal- und Tangentialkontakts in (5.33) bzw. (5.34) angeführt wurden –, aber dennoch sind die meisten dieser Modelle in der Lage, die zwischen den jeweiligen Objekten auftretenden Interaktionskräfte mit ausreichender Genauigkeit zu beschreiben, siehe z. B. [52, 142, 228]. Als wesentliche Krafttypen, die die Wechselwirkungen prägen, können folgende genannt werden: repulsive Kraft, Dämpfungskraft, Adhäsionskraft, Reibungskraft und Rollwiderstand. Die Konstitutivmodelle zur Abbildung dieser unterschiedlichen Kraftformen, wie sie in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommen, sollen unten betrachtet werden.

5.4.1 Normalkontakt

Wenn Partikel aufeinander auftreffen oder sie mit einer Wand kollidieren, dann verformen sich die Kontaktpartner in Abhängigkeit ihrer Materialeigenschaften und ihrer relativen Auftreffgeschwindigkeit.³ Um das Verformungs- und Stoßverhalten von Partikeln abzubilden, werden in der DEM rheologische Modelle herangezogen. Diesbezüglich wird in der Literatur eine Vielzahl von Modellen vorgeschlagen – zumeist elastische, viskoelastische und plastische Modelle, wobei diese jeweils einen linearen oder nichtlinearen Charakter haben können. Derlei Modelle werden u.a. in [143, 168, 217, 248, 249] ausführlich diskutiert. In der vorliegenden Arbeit wird zunächst vorausgesetzt, dass die Partikel ein viskoelastisches Stoßverhalten besitzen. Der Fokus der späteren Ausführungen liegt dann in der Erweiterung dieses Ansatzes auf Adhäsion.

Das viskoelastische Kontaktverhalten von Partikeln kann durch ein paralleles Feder-Dämpfer-Element (Kelvin-Voigt-Element) beschrieben werden, siehe Abb. 5.6. Bei diesem Ansatz setzt sich die Kontaktkraft F^n additiv aus einem reversiblen elastischen Anteil F_e^n und einem dissipativen viskosen Anteil F_d^n zusammen, d. h. es gilt:

$$F^n = F^n_e + F^n_d \,. \tag{5.36}$$

Dabei ist der elastische Anteil der Kontaktkraft eine Funktion der Materialsteifigkeit und der Partikeldeformation. In Bezug auf den zuletzt genannten Punkt, der durch die Verkürzung des Abstandes der Partikelmittelpunkte umschrieben wird, lässt sich hier mit Blick auf (5.2) und (5.32) die folgende Formulierung angeben:

$$\delta = \delta_i + \delta_j = R_i + R_j - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{n} \,. \tag{5.37}$$

Dagegen ist der dissipative Anteil der Kraft eine Funktion der Materialviskosität und der Deformationsrate. Bezieht man nun die Kontaktkraft (5.36) auf das Stoßpaar \mathcal{P}_i und \mathcal{P}_j , so kann deren Normalkraftvektor mit der in (5.3) dargestellten Definition für **n** wie folgt

³Es wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass die Deformation der Wände infolge der Interaktion mit Partikeln vernachlässigbar gering ist. Insofern werden die Wände hier als starre, undeformierbare Objekte beschrieben. Für Arbeiten, in denen sie als flexibel behandelt werden, sei auf Jonsen *et al.* [127] oder Wellmann [273] verwiesen.

bestimmt werden:

$$\mathbf{F}_{i}^{n} = F^{n}\mathbf{n}$$
 bzw. $\mathbf{F}_{j}^{n} = -\mathbf{F}_{i}^{n} = F^{n}\left(-\mathbf{n}\right).$ (5.38)

Bemerkung: Anbetracht dessen, dass infolge starker Dämpfung unphysikalische Zugkräfte während der Trennungsphase der kollidierenden Teilchen auftreten können, wird u. a. in Pöschel & Schwager [204] und Luding [168] vorgeschlagen, bei Abwesenheit von Adhäsion die untere Bedingung für die Normalkraft festzulegen:

$$F^n = \operatorname{Max}\left[0, F^n\right]. \tag{5.39}$$



Abbildung 5.6: Feder-Dämpfer-Modell (Kelvin-Voigt-Element) zur Abbildung des viskoelastischen Partikelverhaltens: (a) Kontakt von zwei Partikeln und (b) Kontakt von einem Partikel mit einer starren Wand.

Linear-viskoelastisches Normalkontaktmodell

Einen recht einfachen Ansatz zur Approximation der Normalkraft F^n stellt das lineare viskoelastische Kontaktmodell dar. Wenn auch das Modell einen rein formalen Charakter besitzt, findet es in DEM-Simulationen dennoch oft Anwendung, siehe z. B. [149, 160, 167]. Es besteht aus einer Hookeschen Feder c^n und einem linearen Dämpfer d^n . Die abstoßende oder repulsive Kraft lautet hier wie folgt:

$$F^n = c^n \,\delta + d^n \,\delta \,. \tag{5.40}$$

Beachtet man, dass die zeitliche Änderung der Penetrationsgeschwindigkeit zweier Partikel unter Hinzunahme von (3.42) durch $\ddot{\delta} = -\dot{\mathbf{v}}^k \cdot \mathbf{n} = -F^n/m^*$ ausgedrückt werden kann [168], dann lässt sich (5.40) samt Anfangsbedingungen ebenso in Form der Differentialgleichung eines gedämpften harmonischen Schwingers darstellen (siehe auch [217, 220]):

$$\ddot{\delta} + 2\eta \dot{\delta} + \varpi_0^2 \delta = 0, \ \dot{\delta}(0) = V^{k,n}, \ \delta(0) = 0.$$
(5.41)

Als analytische Lösung dieser Gleichung erhält man die nachstehende Relation:

$$\delta(t) = \frac{V^{k,n}}{\varpi} \exp(-\eta t) \sin(\varpi t) \quad \text{mit} \quad \varpi = \sqrt{\varpi_0^2 - \eta^2}.$$
(5.42)

Darin bezeichnet $\varpi_0 = \sqrt{c^n/m^*}$ die Kreisfrequenz des ungedämpften Systems, $\eta = d^n/(2m^*)$ stellt den Abklingkoeffizienten dar und ϖ ist die Kreisfrequenz des gedämpften Systems. Um nun aus den obigen Beziehungen die Kontaktdauer eines Stoßes bestimmen zu können, gilt es zunächst die Bedingung für das Kollisionsende zu definieren [168, 220]. Dies kann zum einen durch $\delta(t_k) = 0$ erfolgen, wobei man davon ausgeht, dass die Kollision abgeschlossen ist, wenn die Partikel sich nicht mehr überlappen. Zum anderen kann jene Bedingung auch gemäß der Forderung (5.39) aufgestellt werden, d. h., der Stoßvorgang ist in dem Fall dann zu Ende, wenn $F^n(\delta, \delta, t_k) = 0$ ist. Hierdurch werden Zugkräfte, die während der Trennungsphase der Partikel evtl. auftreten können, implizit ausgeschlossen. Eine Auswertung der beiden Forderungen liefert die Aussagen:

$$\delta(t_k) \stackrel{!}{=} 0 \qquad \rightarrow t_k = \frac{\pi}{\varpi} \qquad \qquad \text{für} \quad t_k > 0 \qquad (5.43)$$

$$F^{n}(\delta, \dot{\delta}, t_{k}) \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow t_{k} = \frac{1}{\varpi} \left(\pi - \arctan \frac{2 \eta \, \varpi}{\varpi^{2} - \eta^{2}} \right) \quad \text{für} \quad t_{k} > 0.$$

$$(5.44)$$

Es fällt bei Betrachtung dieser zwei Ausdrücke auf, dass beim linear-viskoelastischen Modell allgemein die Stoßdauer konstant ist und nicht von der relativen Auftreffgeschwindigkeit der Partikel abhängt. Zudem erweist sich die Stoßzahl e^n hier ebenso als eine konstante Größe. Denn geht man beispielsweise bei der Bestimmung der Stoßzahl von $t_k = \pi/\varpi$ aus, so erhält man unter Hinzunahme der zeitlichen Ableitung der analytischen Lösung und der Definition (5.13) lediglich den folgenden festen Ausdruck:

$$e^{n} = -\frac{\delta(t_{k})}{\dot{\delta}(0)} = \exp\left(-\pi \frac{\eta}{\varpi}\right).$$
(5.45)

Wie schon bereits erwähnt wurde, zeigen die in den Arbeiten [19, 95, 146, 207, 228] durchgeführten experimentellen Untersuchungen für Partikelstöße allerdings eine von der Kollisionsgeschwindigkeit abhängige Stoßzahl und Stoßdauer, die nämlich mit zunehmender Relativgeschwindigkeit der Teilchen abnehmen. Es kann hier also allgemein festgehalten werden, dass mit diesem Modell die viskose Energiedissipation eines Partikelsystems in der Tat nicht befriedigend wiedergegeben werden kann.

Nichtlinear-viskoelastisches Normalkontaktmodell

Auf der Grundlage der Elastizitätstheorie leitete Hertz [96] eine nichtlineare Kraft-Verschiebungs-Beziehung her, anhand welcher sich der elastische Kontakt zwischen zwei kontinuierlichen nicht-konformen Körpern betrachten lässt. Eine erwähnenswerte Monografie über den Hertzschen Kontakt liefert der Aufsatz von Johnson [119]. Für eine detaillierte Abhandlung zu diesem Kontaktmodell siehe Landau & Lifschitz [148], Popov [201] oder Johnson [120]. Im Folgenden sollen nach einer einleitenden Bemerkung zur Anwendung des Hertzschen Ansatzes in dynamischen Systemen die Kernaussagen dieser Theorie, die in der vorliegenden Arbeit zum Tragen kommen, betrachtet werden. Im Anschluss an diese Ausführungen soll dann eine Erweiterung des Hertz-Kontaktes um den Aspekt der Viskosität erfolgen.

Bemerkung: Hertz [96] ging bei der Ableitung seiner Kontaktformulierung von einer

quasi-statischen Belastung der Körper aus. Dabei nahm er an, dass zum einen die Kontaktkörper sich vollkommen reversibel deformieren und dass zum anderen die äußere Last mählich auf diese aufgebracht wird. Stoßprobleme sind aber prinzipiell dynamischer Natur und zumeist mit Energiedissipation verbunden. Damit der auf einem quasi-statischen Ansatz beruhende Hertzsche Kontakt sich auch auf dynamische Stoßprobleme anwenden lässt, ist nach Love [165] erforderlich, dass die Stoßdauer zwischen den Partikeln ein Vielfaches der Zeit betragen muss, welche die Stoßwellen benötigen, um sie zu durchlaufen, siehe auch Chokshi et al. [34]. Dieser Umstand liegt generell dann vor, wenn die relative Auftreffgeschwindigkeit der Partikel wesentlich geringer als die Geschwindigkeit ist, mit der sich die Stoßwellen in den Kontaktpartnern fortpflanzen [25]. Dies ist in der Tat bei den meisten natürlichen Systemen gegeben. Andernfalls kommt bei der Partikelabstoßung ein Teil der Kollisionsenergie nicht zur Geltung und verbleit, nachdem sich die Stoßpartner getrennt haben, als Schwingungsenergie in den Partikeln zurück. Dann gilt natürlich für die Stoßzahl: $e^n < 1$, und das trotz eines in materieller Hinsicht elastischen Stoßes. Diese Form der Energiedissipation spielt in der vorliegenden Arbeit wegen den geringen Auftreffgeschwindigkeiten der Teilchen keine Rolle und wird hier daher nicht weiter betrachtet.

In der DEM wird die Hertz-Formulierung bei vielen nichtlinear-viskoelastischen Normalkontaktmodellen oft zur Erfassung des elastischen Anteils einer Stoßkraft herangezogen, siehe z. B. [25, 146, 155, 252]. Diesbezüglich soll im Folgenden wieder das Kontaktpaar $\{\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j\}$ betrachtet werden. Wenn nun diese beiden Partikel – wie in Abb. 5.7(a) dargestellt – mit einer Kraft F^n gegeneinander gepresst werden, so bildet sich gemäß dem Hertz-Kontakt um den Kontaktpunkt k herum eine kreisförmige Kontaktfläche, die den Radius (Kontaktradius)

$$a = \left(\frac{3F_e^n R^*}{4E^*}\right)^{1/3} \quad \text{mit} \quad F_e^n = F^n$$
 (5.46)

besitzt. Darin bezeichnen $R^* = (1/R_i + 1/R_j)^{-1}$ den effektiven Radius der Partikel, $E^* = [(1-\nu_i^2)/E_i + (1-\nu_j^2)/E_j]^{-1}$ deren effektive Materialsteifigkeit mit den Elastizitätsmoduli $\{E_i, E_j\}$ und den Querkontraktionszahlen $\{\nu_i, \nu_j\}$. Eine wesentliche Identitätsbeziehung, auf der dieses Modell beruht, ist die Umschreibung der Abhängigkeit der gegenseitigen Verschiebung δ der Partikelmittelpunkte von der Größe des Kontaktradiusses *a*. Diese Relation ist beim Hertz-Kontakt wie folgt gegeben:

$$\delta = \delta_i + \delta_j = \frac{a^2}{R^*},\tag{5.47}$$

wobei allerdings die nachstehende Restriktion zu beachten ist: $a \ll R^*$. Zwischen den beiden besagten Variablen besteht also ein nichtlinearer Zusammenhang. Letztlich kann die Kraft-Verschiebungs-Beziehung des Hertzschen Kontakts aus den Gleichungen (5.46)

und (5.47) abgeleitet werden und nimmt folgende Form an:

$$F_e^n = c^n(\delta)\,\delta = K\,\delta^{1/2}\,\delta = \frac{4}{3}\,E^*\sqrt{R^*}\,\delta^{3/2} \quad \text{mit} \quad c^n(\delta) = \underbrace{\frac{4}{3}\,E^*\sqrt{R^*}}_{=:K}\,\delta^{1/2}\,. \tag{5.48}$$

Hierin kann $c^n(\delta)$ als die nichtlineare, deformationsabhängige Federkonstante nach Hertz gedeutet werden. Eine exemplarische Kraft-Verschiebungs-Kurve, die auf solch einer Feder beruht, ist illustrativ in Abb. 5.7(b) abgebildet. Was die Spannungsverteilung in der



Abbildung 5.7: Elastischer Kontakt nach Hertz: (a) Kontaktdeformation von zwei Partikeln, (b) Kraft-Verschiebungs-Kurve und (c) Normalspannungsverteilung in der Kontaktfläche.

Kontaktfläche angeht, liefert die Hertz-Theorie die untere Formulierung:

$$\sigma(r) = \sigma_m \sqrt{1 - \left(\frac{r}{a}\right)^2} \quad \text{mit} \quad \sigma_m = \frac{2 \, a \, E^*}{\pi \, R^*} \,, \tag{5.49}$$

wobei σ_m die Spannung im Kontaktpunkt k und r den Abstand von diesem charakteristischen Punkt zum jeweiligen betrachteten materiellen Punkt in der Kontaktebene bezeichnen. Der Verlauf der Normalspannungsverteilung über den Kontaktradius ist in Abb. 5.7(c) dargestellt. Betrachtet man beim Hertzschen Kontakt die Stoßdauer einer Binärkollision, die sich aus

$$t_k = 2.94 \left(\frac{25 \, m^{*2}}{16 \, K^2}\right)^{1/5} (V^{k,n})^{-1/5} \tag{5.50}$$

berechnet [96, 148], so lässt sich festhalten, dass sie – im Gegensatz zur Stoßdauer beim linearen Feder-Dämpfer-Modell – eine Funktion der relativen Stoßgeschwindigkeit der Partikel ist und mit zunehmender Kollisionsgeschwindigkeit abnimmt. Wie in Stevens & Hrenya [228] anhand einer Reihe von Partikel-Partikel-Stoßversuchen u. a. gezeigt wird, werden die experimentell gemessenen Kollisionsdauern vom Hertzschen Kontakt sehr gut wiedergegeben.

Bemerkung: Der Fall einer Partikelkollision mit einer Wand kann analog den obigen

Ausführungen für den Zwei-Partikel-Kontakt behandelt werden, wobei bei der Bestimmung des effektiven Radiusses R^* lediglich der entsprechende Partikelradius durch den Krümmungsradius der Wand zu ersetzen ist. Handelt es sich dabei um eine ebene, starre Wand, so gilt: $R_W = \infty$ und $E_W = \infty$.

Bemerkung: Die Beziehung (5.48) unterliegt der Annahme, dass die in Kontakt stehenden Partikel eine glatte Oberfläche besitzen. Für den Fall rauher Partikel impliziert dies konsequenterweise, dass die Reibkraft, die in der Kontaktfläche bei unterschiedlicher Querdehnung der gestauchten Partikel entsteht, vernachlässigt wird. Die Tragweite dieser Annahme auf die Hertzsche Last-Verschiebungs-Beziehung (5.48) wird anhand von FEM-Studien in Dintwa *et al.* [52] untersucht. Als numerisches Basismodell dient dafür ein System, bei dem zwei Partikel mit unterschiedlicher Materialeigenschaft gegeneinander gepresst werden. Der Grundgedanke der Studien in dieser Arbeit besteht darin, den Einfluss des Reibkoeffizienten auf die Last-Verschiebungs-Beziehung der Partikel numerisch zu untersuchen. Die Ergebnisse in Dintwa *et al.* [52] zeigen, dass die Wechselwirkung zwischen den Tangentialkräften infolge Querdehnung und der Relation (5.48) unerheblich ist. Wie des Weiteren ausführlich in Johnson [120] diskutiert wird, ist die Beeinflussung der normalen Kräfte durch die tangentialen allgemein zweitrangig und generell vernachlässigbar.

Es werden in der Literatur verschiedene Ansätze verfolgt, um das Hertz-Modell in Bezug auf eine viskose Komponente zu erweitern. Da sind in der Hinsicht einerseits solche Herangehensweisen zu finden, die das nichtlineare elastische Hertz-Modell anhand eines linearen Dämpfermodells erweitern [154, 202], und andererseits solche, die auf ein nichtlineares viskoses Modell zurückgreifen [25, 146, 194, 252]. Entsprechend liegt im zweiten Fall ein vollständig nichtlinearer Ansatz vor. Das nichtlineare Viskositätsmodell von Kuwabara & Kono [146] und das von Brilliantov *et al.* [25] erweisen sich als besonders interessant, da sie beide den gleichen Proportionalitätsfaktor für die viskose Kraft besitzen, welcher wie folgt lautet: $F_d^n \propto \sqrt{\delta} \dot{\delta}$. Die Evidenz dieser Proportionalität wurde ebenso von Morgado & Oppenheim [183] aus Betrachtungen auf atomarer Ebene erbracht. Im Grunde unterscheiden sich die beiden besagten Modelle lediglich in Bezug auf die Definition des Parameters für die Materialviskosität. In der vorliegenden Arbeit wird zur Abbildung der viskosen Stoßkräfte speziell der Ansatz nach Brilliantov *et al.* [25] verfolgt (siehe auch [24]).

Brilliantov *et al.* [25] zeigen im Rahmen der Hertzschen Theorie, dass zwischen der elastischen und viskosen Kontaktkraft folgende Beziehung besteht:

$$F_d^n = A^* \dot{\delta} \frac{\partial}{\partial \delta} F_e^n(\delta) \,. \tag{5.51}$$

Damit folgt die dissipative Kraft unter Hinzunahme von (5.48) zu

$$F_d^n = 2 E^* A^* \sqrt{R^*} \sqrt{\delta} \dot{\delta} \,. \tag{5.52}$$

Hierin beschreibt $A^* = (A_i + A_j)/2$ die mittlere Materialviskosität der beiden in Kontakt

stehenden Partikel [204], wobei beispielsweise bezüglich \mathcal{P}_i gilt:

$$A_{i} = \frac{1}{3} \frac{(3\eta_{2} - \eta_{1})^{2}}{(3\eta_{2} + 2\eta_{1})} \left(\frac{(1 - \nu_{i}^{2})(1 - 2\nu_{i})}{E_{i}\nu_{i}^{2}} \right).$$
(5.53)

Darin stehen η_1 und η_2 für die Scher- bzw. Volumenviskosität des Partikelstoffes. Das nichtlineare Stoßmodell von Brilliantov *et al.* [25] kann nun an dieser Stelle zusammenfassend mit dem Hertzschen Modell folgendermaßen angegeben werden:

$$F^{n} = K\left(\delta^{3/2} + \frac{3}{2}A^{*}\sqrt{\delta}\dot{\delta}\right)$$
(5.54)

und in Analogie zur Differentialgleichung (5.41) ergibt sich hier die nachstehende Form:

$$\ddot{\delta} + \frac{K}{m^*} \left(\frac{3}{2} A^* \sqrt{\delta} \, \dot{\delta} + \delta^{3/2} \right) = 0 \,, \ \dot{\delta}(0) = V^{k,n} \,, \ \delta(0) = 0 \,.$$
(5.55)

Diese nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichung ist allerdings analytisch nicht lösbar, sodass die Stoßzahl e^n in dem Fall nicht so einfach wie im zuvor beschriebenen linearen Modell ermittelt werden kann. So wurde in der Hinsicht auf der Grundlage von (5.55) in Ramirez *et al.* [208] der folgende explizite Ausdruck abgeleitet:

$$e^{n} = \frac{1 + d_{1} \left(\frac{V^{k,n}}{S}\right)^{1/5}}{1 + d_{2} \left(\frac{V^{k,n}}{S}\right)^{1/5} + d_{3} \left(\frac{V^{k,n}}{S}\right)^{2/5} + d_{4} \left(\frac{V^{k,n}}{S}\right)^{3/5} + d_{5} \left(\frac{V^{k,n}}{S}\right)^{4/5}}, \qquad (5.56)$$

womit sich die wesentliche Größe e^n relativ bequem approximativ bestimmen lässt. Dabei sind $d_1 = 2.5839$, $d_2 = 3.5839$, $d_3 = 2.9839$, $d_4 = 1.1487$, $d_5 = 0.3265$ und $S^{-1/5} = 1.15344(3A^*/2)(K/m^*)^{2/5}$.

Bemerkung: Der Zusammenhang (5.56) liefert in Bezug auf die 'Event-Driven Method' einen möglichen Ansatz, um den für diese Methode charakteristischen harten Partikelkontakt unter Zuhilfenahme einer geschwindigkeitsabhängigen Stoßzahlfunktion abzubilden.

5.4.2 Adhäsion

Allgemeines

Ein Aspekt, der unter gewissen Umständen bedeutend sein kann und der im Hertzschen Modell keine Beachtung findet, ist jener Punkt, dass zwei sich berührende Körper infolge ihrer Oberflächenenergie über van der Waals-Kräfte miteinander in Wechselwirkung stehen. Infolge dieser Wechselwirkung ziehen sich die Oberflächen gegenseitig an (siehe z. B. die experimentellen Untersuchungen in [16, 124]). Die daraus hervorgehenden Zugkräfte oder adhäsiven Kräfte sind natürlich bei hohen Lasten gegenüber den elastischen Kräften unbedeutend und können daher durchaus vernachlässigt werden, siehe [7, 123]. Wenn das Lastniveau aber abnimmt und damit die Effekte aus der Adhäsionswirkung immer weiter in den Mittelpunkt des Kontaktvorganges rücken, ist eine solche Vereinfachung jedoch nicht mehr zulässig.

In den 1970er Jahren wurden zwei Modelle vorgestellt, die den elastischen Kontakt unter Berücksichtigung der adhäsiven Wechselwirkung zwischen den Kontaktpartnern mathematisch beschreiben. Es handelt sich dabei um das Johnson-Kendall-Roberts-Modell (JKR-Modell) [124] und um das wenige Jahre später eingeführte Derjaguin-Muller-Toporov-Modell (DMT-Modell) [50]. Sie beide basieren auf dem Hertzschen Ansatz und erweitern diesen um eine adhäsive Komponente. In der Literatur finden sich zahlreiche Arbeiten, in denen die genannten Modelle intensiv diskutiert und miteinander verglichen werden, siehe hierzu z. B. [7, 85, 123, 177, 178, 185, 234]. Es stellte sich heraus, was vor allem auf den Aufsatz von Tabor [234] zurückzuführen ist, dass die beiden Modelle quasi keine 'Rivalen' sind, sondern sich vielmehr gegenseitig ergänzen. Das ist in Bezug auf deren Gültigkeitsbereich in dem Sinne zu verstehen, dass das DMT-Modell überwiegend dann einzusetzen ist, wenn die Partikel klein, hart sowie gering adhäsiv sind, und dass das JKR-Modell vornehmlich in dem Falle zum Tragen kommt, sofern die Partikel gedrungen und weich sind und zudem eine höhere Adhäsion besitzen. Der unterschiedliche Gültigkeitsbereich der beiden Modelle ist im Wesentlichen auf die folgenden Grundannahmen zurückzuführen: Beim DMT-Modell wird die adhäsive Kraft lediglich in einem unmittelbar an die Kontaktfläche anschließenden äußeren Ringbereich angesetzt, wobei davon ausgegangen wird, dass sie keine Deformation hervorruft – dahingegen wird beim JKR-Modell zum einen der Interaktionsbereich der adhäsiven Kraft allein auf die Kontaktfläche begrenzt und zum anderen wird hier davon ausgegangen, dass die Adhäsion in der Lage ist, Einfluss auf die Verformung der Partikel und damit auf die Hertzsche Last-Verschiebungs-Beziehung zu nehmen.

Das JKR-Modell erfreut sich gegenüber dem DMT-Modell über eine breitere Anwendungsfront, was nach Popov [201] möglicherweise daran liegt, dass das JKR-Modell selbst im Gültigkeitsbereich des DMT-Modells recht gute Ergebnisse liefert. Da das JKR-Modell ferner imstande ist, die Adhäsionswirkung zwischen elastischen Körpern auch in einer Flüssigkeitsumgebung zu beschreiben (siehe z. B. [32, 164]), wird dieses Modell in der vorliegenden Arbeit dem anderen vorgezogen, um die durch Adhäsion bewirkte Partikelaggregation in Mehrphasenströmungen zu beschreiben. Im Folgenden soll das JKR-Modell zuerst mit den grundlegenden Gleichungen kurz vorgestellt und dann zur Betrachtung der Adhäsion im Falle von viskosen Partikeln erweitert werden.

JKR-Modell

Der Kontaktradius, der sich ergibt, wenn zwei Partikel mit einer äußeren Last F^n gegeneinander gepresst werden (wobei gilt: $F_e^n = F^n$), ist nach der Hertzschen Theorie durch Gleichung (5.46) gegeben. Zieht man aber in Betracht, dass zwischen den Partikeln neben der elastischen Druckkraft F_e^n ebenso eine adhäsive Anziehungskraft F_a^n wirkt, so ist zu erwarten, dass die Zugkraft eine Vergrößerung des Kontaktradiusses bewirkt, was auch in Johnson *et al.* [124] experimentell belegt wird. Man erhält also den durch Gleichung (5.46) bestimmten Kontaktradius in der Tat schon bei einer geringeren äußeren Kraft F^n als gemäß der Hertzschen Theorie. Insofern muss es hier im Grunde heißen: $F_e^n > F^n$, um genauer zu sein, kann an dieser Stelle aus Gleichgewichtsbetrachtung auch $F_e^n = F^n + F_a^n$ stehen.

Die Wechselbeziehung zwischen der Adhäsion und der Partikeldeformation hat natürlich einen entsprechenden Einfluss auf die Energie des Systems. Dies berücksichtigend formulieren Johnson *et al.* [124] für das in Abb. 5.7(a) illustrierte Zwei-Partikel-System die Gesamtenergie, welche zum einen aus der gespeicherten inneren Energie und der äußeren potentiellen Energie des Systems besteht und zum anderen einen Anteil besitzt, der auf die Oberflächenenergie der Partikel zurückzuführen ist. Sie gehen hierbei allerdings davon aus, dass die Oberflächen nur im unmittelbaren Kontaktgebiet über van der Waals-Kräfte miteinander interagieren. Johnson *et al.* [124] gewinnen nach anschließender Minimierung ihrer Energieformulierung den folgenden Ausdruck hinsichtlich der Gleichgewichtslage des Systems unter Beachtung von Adhäsion:

$$F_e^n = F^n + F_a^n = F^n + 3W\pi R^* + \sqrt{6W\pi R^* F^n + (3W\pi R^*)^2}, \qquad (5.57)$$

wobei der Term F_a^n , wie gesagt, aus der Adhäsionswirkung der Partikeloberflächen folgt.⁴ Des Weiteren gibt W die Adhäsionsenergie der beiden Kontaktpartner pro Flächeneinheit an und erfasst die Arbeit, die in Bezug auf das Kontaktgebiet je Flächeneinheit aufzubringen ist, um die beiden Partikel voneinander reversibel zu trennen, siehe Israelachvili [112].⁵ Die Gleichgewichtsbeziehung (5.57) zeigt, dass durch Adhäsion die Normalkraft in der Kontaktfläche zunimmt, was folgerichtig mit einer entsprechenden Vergrößerung dieser Fläche verbunden ist, siehe diesbezüglich Abb. 5.8(a) für eine schemenhafte Darstellung. Der JKR-Kontaktradius ergibt sich schließlich nach Einsetzen von (5.57) in (5.46) zu

$$a^{3} = \frac{3R^{*}}{4E^{*}} \left(F^{n} + 3W\pi R^{*} + \sqrt{6W\pi R^{*}F^{n} + (3W\pi R^{*})^{2}} \right).$$
(5.58)

Aus dieser Beziehung lassen sich zwei wesentliche Größen ableiten. Eine hiervon ist der Gleichgewichts-Kontaktradius

$$a_0 = \left(\frac{9\pi W R^{*2}}{2E^*}\right)^{1/3},\tag{5.59}$$

der bei Abwesenheit von äußeren Lasten allein aus der Adhäsionswirkung folgt. Ent-

$$W = \gamma_{iF} + \gamma_{jF} - \gamma_{ij} ,$$

⁴Es wird hier – wie beim elastischen/viskoelastischen Normalkontakt – davon ausgegangen, dass Reibung keinen Einfluss auf das Normalkraftmodell hat. Für detaillierte, zum Teil kontroverse Ausführungen über den Aspekt der Adhäsion im Beisein von Reibung siehe [121, 122, 216].

⁵Die Adhäsionsenergie W zwischen zwei Partikeln, die innerhalb der Grenzen einer sie umgebenden Fluidphase F vorliegt, kann durch die Dupré-Gleichung bestimmt werden. Sie ist wie folgt definiert:

wobei γ_{iF} und γ_{jF} die Oberflächenenergie des Partikels \mathcal{P}_i bzw. \mathcal{P}_j im Umgebungsmedium F bezeichnen. Des Weiteren steht γ_{ij} für die unmittelbare Grenzflächenenergie zwischen den beiden Partikeln selbst. Ausführliche Darstellungen in Bezug auf die Bestimmung von W finden sich u. a. bei Israelachvili [112], Popov [201] und Loskofsky *et al.* [164].

sprechend besteht in dem Fall ein Gleichgewicht zwischen der Adhäsionskraft und der elastischen Kontaktkraft. Die zweite Größe, die aus (5.58) im Hinblick auf eine reelle Lösung der Gleichung gewonnen werden kann, ist die charakteristische Zugkraft \tilde{F}_c , wobei gilt:

$$F^n \ge \tilde{F}_c := -F_c \quad \text{mit} \quad F_c = \frac{3}{2} \pi R^* W.$$
 (5.60)

Darin wird F_c als kritische Abrisskraft bezeichnet. Sie stellt jene Kraft dar, bei der sich die berührenden Partikeloberflächen voneinander lösen. Es soll an dieser Stelle aber bemerkt werden, dass Partikel in der Realität rauhe Oberflächen haben und dass die Rauheit, wie in Tabor [234] gezeigt wird, einen wesentlichen Einfluss auf die Abrisskraft hat.

Im Folgenden soll die Last-Verschiebungs-Beziehung dieses Modells betrachtet werden. Denn die entsprechende Beziehung wird hier benötigt, um im Rahmen der Penalty-Methode die in DEM-Simulationen auftretenden Kontakt- oder Stoßkräfte sowohl zwischen Partikeln als auch zwischen Partikeln und Systemwänden zu bestimmen.

Wie beispielsweise in Johnson [119] dargestellt wird, werden die Hertzschen Verformungsbedingungen im Kontaktgebiet ebenso erfüllt, wenn die Hertz-Spannungen $\sigma^{\rm H}$ (5.49) mit den Spannungen des Boussinesq-Problems

$$\sigma^{\rm B} = \sigma_m^{\rm B} \left(1 - \left(\frac{r}{a}\right)^2 \right)^{-1/2} \tag{5.61}$$

überlagert werden.

Bemerkung: Das Boussinesq-Problem beschreibt die Indentation eines steifen Zylinderstempels, der mit der Kraft F^n auf einen elastischen Halbraum aufgebracht wird. Der Betrag der gleichmäßigen Eindrückung des Stempels ist dabei durch

$$\delta = \frac{F^n}{2 \, E^* \, a} \tag{5.62}$$

gegeben, siehe z. B. Maugis [177]. Hierin stellt a den Radius des Zylinders dar.

Im Falle einer subtraktiven Überlagerung von σ^H und σ^B ergibt sich jener Spannungsausdruck, der die Gesamtspannungen erfasst, zu

$$\sigma = \sigma^{\mathrm{H}} - \sigma^{\mathrm{B}} = \sigma_{m}^{\mathrm{H}} \left(1 - \left(\frac{r}{a}\right)^{2} \right)^{1/2} - \sigma_{m}^{\mathrm{B}} \left(1 - \left(\frac{r}{a}\right)^{2} \right)^{-1/2} , \qquad (5.63)$$

wobe
i $\sigma_m^{\rm B}$ in diesem Zusammenhang wie folgt lautet (siehe Johnson [119, 120]):

$$\sigma_m^{\rm B} = \sqrt{\frac{2WE^*}{\pi a}} \,. \tag{5.64}$$

Wenn nun die Hertz- und Boussinesq-Spannungen über das Kontaktgebiet integriert werden, dann lassen sich die unteren Beziehungen gewinnen:

$$F^{n} = \int_{0}^{a} 2\pi \sigma(r) r \, dr = \int_{0}^{a} 2\pi \left(\sigma^{H}(r) - \sigma^{B}(r)\right) r \, dr$$

$$= \frac{4 E^{*} a^{3}}{3 R^{*}} - 2\pi a^{2} \sqrt{\frac{2 W E^{*}}{\pi a}} =: F_{e}^{n} - F_{a}^{n}.$$
 (5.65)

Diese Aussage ist zu der in Gleichung (5.57) angegebenen Formulierung äquivalent. Setzt man hier anschließend F_a^n in (5.62) ein und zieht für die elastische Kraft F_e^n die Relation in Gleichung (5.47) heran, so folgt

$$\delta = \delta_e - \delta_a = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{\frac{2\pi a W}{E^*}} = \frac{a^2}{R^*} \left(1 - \frac{2}{3} \left(\frac{a_0}{a}\right)^{3/2} \right) \,. \tag{5.66}$$

Dieser Zusammenhang stellt die für die JKR-Formulierung charakteristische Deformationsbeziehung der Partikel dar. Wie zu erkennen ist, ist sie eine vom Kontaktradius abhängige Funktion und somit unmittelbar mit (5.65) verknüpft. Die Partikeldeformation, die dem Gleichgewichts-Kontaktradius a_0 entspricht, soll hier mit δ_0 bezeichnet werden. Sie kann aus der in (5.66) ganz rechts stehenden Beziehung mit $a = a_0$ leicht ermittelt werden und lautet:

$$\delta_0 = \left(\frac{3}{4} R^* \left(\frac{\pi W}{E^*}\right)^2\right)^{1/3}.$$
(5.67)

Eine schemenhafte Darstellung der JKR-Kontaktverformung ist in Abb. 5.8 sowohl für



Abbildung 5.8: Schematische Darstellung der Kontaktverformungen der Partikel im Rahmen des JKR-Modells: (a) Druckbelastung und (b) Zugbelastung. Zu Vergleichszwecken wird in (c) das Spannungsprofil des Hertz- und JKR-Modells im Kontaktgebiet anschaulich skizziert [124]. Beim JKR-Modell gehen die Druckspannungen zum Rand des Kontaktgebietes hin in Zugspannungen über und werden schließlich im unimittelbaren Randbereich singulär.

eine Druck- als auch für eine Zugbelastung gegeben. Wie aus der Skizze für die Zugbelastung entnommen werden kann, verformen sich die Partikel dank der adhäsiven Zugkräfte in 'negativer' Richtung. Es bildet sich dabei ein sog. 'Hals' aus, über den die beiden Stoffteilchen noch miteinander in Verbindung stehen. Wenn allerdings die Partikeloberflächen sich unter statischer/dynamischer Last so weit voneinander entfernen, sodass die Oberflächenkräfte nicht mehr in der Lage sind, die Verbindung aufrecht zu erhalten, so reißt der 'Hals' folglich auf und die Partikel trennen sich voneinander. Man spricht hier analog zur kritischen Kraft F_c von der kritischen Entfernung δ_c in Bezug auf die Oberflächen und entsprechend vom kritischen Kontaktradius a_c , wobei gilt [34, 177]:

$$\delta_c = \frac{a_0^2}{48^{1/3} R^*} \quad \text{bzw.} \quad a_c = \frac{a_0}{6^{2/3}}.$$
(5.68)

Unter Hinzunahme der kritischen Größen F_c und δ_c können die Beziehungen (5.65) und (5.66) entsprechend Chokshi *et al.* [34] in dimensionsloser Form wie folgt wiedergegeben werden:

$$\frac{F^n}{F_c} = 4\left(\frac{a}{a_0}\right)^3 - 4\left(\frac{a}{a_0}\right)^{3/2}$$
(5.69)

$$\frac{\delta}{\delta_c} = 6^{1/3} \left[2 \left(\frac{a}{a_0} \right)^2 - \frac{4}{3} \left(\frac{a}{a_0} \right)^{1/2} \right].$$
(5.70)

Um nun die Kontaktkraft aus der Partikeldeformation gewinnen zu können, bietet sich folgende Vorgehensweise an: Löse im ersten Schritt für eine bekannte Partikelpenetration δ iterativ die nichtlineare Beziehung (5.70) für den Kontaktradius *a* mittels einer Fixpunktiteration und berechne dann anschließend im zweiten Schritt die JKR-Kontaktkraft aus (5.69).⁶ In der vorliegenden Arbeit erfolgt die Lösung der Gleichung (5.70) durch die Anwendung der Sekantenmethode, siehe z. B. [221, 230]. In Abb. 5.9 sind die dimensionslosen Beziehungen F^n/F_c und a/a_0 gemäß (5.69) und (5.70) über das Verhältnis δ/δ_c graphisch dargestellt.

Viskoadhäsives JKR-Modell

Eine konsistente Erweiterung des JKR-Modells um die viskose Komponente F_d^n liefern die Arbeiten von Brilliantov *et al.* [21, 23]. Darin wird die von ihnen bereits in [25] präsentierte viskose Kraftbeziehung (siehe hier Gleichung (5.51)) im Rahmen der JKR-Formulierung in Bezug auf Adhäsion ausgebaut, sodass letztlich gilt:

$$F^{n} = F^{n}_{e} - F^{n}_{a} + F^{n}_{d} \,. \tag{5.71}$$

Dabei ist die viskose Kraft F_d^n nicht eine reine formale Erweiterung des JKR-Ansatzes, sondern eine Funktion von dessen Kraftbeziehungen selbst und lautet wie folgt:

⁶Eine identische Vorgehensweise zur Bestimmung der Kräfte aus dem adhäsiven JKR-Normalkontakt wird auch in dem von den Sandia National Laboratories entwickelten DEM-Programm 'LAMMPS' verfolgt, siehe [152, 153].



Abbildung 5.9: Graphische Darstellung von F^n/F_c und a/a_0 über die Relation δ/δ_c auf Basis der Gleichungen (5.69) und (5.70). (Zum Vergleich ist ebenfalls das Verhältnis F^n/F_c entsprechend der Hertzschen Theorie angeführt.) In der Tabelle findet sich eine Zusammenstellung von wesentlichen charakteristischen Werten des JKR-Modells [34].

$$F_d^n = A^* \dot{a} \frac{\partial}{\partial a} \left(F_e^n(a) - F_a^n(a) \right)$$

= $A^* \dot{a} \left(\frac{4 E^* a^2}{R^*} - \frac{3}{2} \sqrt{8 \pi W E^* a} \right).$ (5.72)

Hierin steht \dot{a} für die zeitliche Änderung des Kontaktradiusses. Der Vollständigkeit halber soll hier analog zu den Gleichungen (5.41) und (5.55) die Bewegungsgleichung zur Beschreibung der Binärkollision von adhäsiven viskoelastischen Partikeln angegeben werden. Da die Kraftbeziehungen im Rahmen des JKR-Modells aber in Abhängigkeit vom Kontaktradius *a* formuliert sind – und nicht als Funktion der Deformation δ –, bietet es sich hier daher an, auch die entsprechende gewöhnliche Differentialgleichung als Funktion vom Radius *a* anzugeben [21]. Beachtet man, dass mittels der Kettenregel folgende Beziehungen gewonnen werden können: $\dot{\delta}(t) = \delta'(a) \dot{a}$ und $\ddot{\delta}(t) = \delta''(a) \dot{a}^2 + \delta'(a) \ddot{a}$, wobei gilt: $(\cdot)' = d(\cdot)/da$, dann folgt die Differentialgleichung zu

$$\ddot{a} + \frac{\delta''(a)}{\delta'(a)} \dot{a}^2 + \frac{1}{m^*} \frac{1}{\delta'(a)} \left[\frac{4 E^* a^3}{3 R^*} - 2 \pi a^2 \sqrt{\frac{2 W E^*}{\pi a}} + A^* \dot{a} \left(\frac{4 E^* a^2}{R^*} - \frac{3}{2} \sqrt{8 \pi W E^* a} \right) \right] = 0.$$
(5.73)

Die hierzu entsprechenden Anfangsbedingungen lauten folgendermaßen:

$$a(0) = \tilde{a} = a_0 \left(\frac{2}{3}\right)^{2/3}$$
, $\dot{a}(0) = V^{k,n} \frac{1}{\delta'(\tilde{a})}$,

worin \tilde{a} der Kontaktradius ist, der sich augenblicklich als Folge der van der Waals-Kräfte

einstellt, sobald die Partikel in Kontakt treten (siehe Tabelle in Abb. 5.9).

Bemerkung: In Anbetracht dessen, dass die elastischen Verformungen bei schwacher bis relativ mäßig starker Adhäsion [23] und/oder bei größeren Partikeln (> mm) [2] gegenüber den adhäsiven Verformungen stark dominieren, d. h. also: $\delta_e \gg \delta_a$, wird beim JKR-Modell die Verformung δ oft auch allein durch die Hertzsche Beziehung (5.47) approximiert, sodass gilt: $\delta \approx \delta_e = a^2/R^*$, siehe z. B. auch [14, 15, 135, 248]. Damit resultiert die Gleichung (5.65) in

$$F^{n}(\delta) \approx \frac{4}{3} E^{*} \sqrt{R^{*}} \,\delta^{3/2} - 2 \,R^{*3/4} \sqrt{2 \,\pi W E^{*}} \,\delta^{3/4}$$
(5.74)

und die viskose Kraft (5.72) ist in dem Fall wie folgt gegeben:

$$F_d^n(\delta) \approx 2 E^* A^* \sqrt{R^*} \sqrt{\delta} \,\dot{\delta} - 3 A^* R^{*3/4} \sqrt{\frac{1}{2} \pi W E^*} \,\dot{\delta} \,\delta^{-1/4} \,. \tag{5.75}$$

5.4.3 Reibung

Tangentialkontakt

Für die numerische Behandlung des Tangentialkontakts wird in dieser Arbeit das linearregularisierte Coulombsche Reibgesetz gemäß Abb. 5.5(b) zugrunde gelegt. Das entsprechende mechanische Modell ist in Abb. 5.10 dargestellt. Wie zu erkennen ist, besteht das Modell aus einer Reihenschaltung, die aus einem Kelvin-Voigt-Element und einem daran anschließenden Reibelement zusammengesetzt ist. Dieser Ansatz kommt in vielen Arbeiten zur Anwendung, wie u. a. in [113, 155, 169], und kann als eine Erweiterung der rein linear-elastischen Regularisierung des Tangentialkontakts von Cundall & Strack [44] angesehen werden. Es finden sich in der DEM-Literatur in der Tat zahlreiche Modelle zur Beschreibung des Tangentialkontakts. Dafür sei an dieser Stelle auf die übersichtsartigen Arbeiten von Kruggel-Emden *et al.* [142, 143] und Schäfer *et al.* [217] zu Kraftbeziehungen beim weichen Partikelkontakt verwiesen, worin zahlreiche Tangentialkontaktmodelle angeführt und ausführlich diskutiert werden.

Das in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommende Kontaktmodell wurde im Sinne von Luding [169] implementiert und soll im Folgenden betrachtet werden. Dabei handelt es sich um einen Rückprojektionsalgorithmus. Hier soll erwähnt sein, dass Rückprojektionsalgorithmen ihren Ursprung in der Festkörpermechanik haben. Sie werden dort vor allem zur numerischen Behandlung von Plastizitätsmodellen und Reibkontaktproblemen eingesetzt, siehe z. B. [78, 277, 278].

Bei einem schiefen Stoß mit rauhen Stoßpartnern werden in der Kontaktfläche generell Reibkräfte übertragen. Zur Abbildung dieser Kräfte wird hier am Anfang eines Kontaktes im besagten charakteristischen Punkt k ein Feder-Dämpfer-Element generiert (siehe Abb. 5.10), wobei für die Federverlängerung zu Beginn gilt: $||\mathbf{g}^t|| = 0$. Um im Laufe einer Simulation an den diskreten Zeitpunkten zu überprüfen, ob die jeweilige für ein Stoßpaar berechnete Tangentialkraft im Sinne des Coulombschen Reibgesetzes gültig ist, ist es zweckmäßig an dieser Stelle eine auf das Feder-Dämpfer-Element bezogene tangentiale



Abbildung 5.10: Feder-Dämpfer-Element zur Modellierung des Tangentialkontakts: (a) Kontakt von zwei rauhen Partikeln und (b) Kontakt von einem rauhen Partikel mit einer rauhen Wand.

Testkraft einzuführen, die wie folgt definiert ist:

$$\mathbf{F}_{o}^{t} = -(c^{t} \mathbf{g}^{t} + d^{t} \dot{\mathbf{g}}^{t}) \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{g}}^{t} = \mathbf{v}^{k,t} \,.$$
(5.76)

Darin ist c^t der Penalty-Parameter für die tangentiale Federsteifigkeit und d^t steht für die entsprechende Dämpfungskonstante. Die zu dieser Kraft korrespondierende Gleit- bzw. Testfunktion f_s^{tr} , welche für den bezeichnenden Kontaktpunkt k den Haft- und Gleitbereich wiedergibt, lautet gemäß (5.29) wie folgt:

$$f_s^{\rm tr} = ||\mathbf{F}_o^t|| - \mu ||\mathbf{F}^n|| \Rightarrow \begin{cases} \le 0 : \text{ Haften} \\ = 0 : \text{ Gleiten} \end{cases}$$
(5.77)

Bei der Initiierung des Kontaktelements wird der Reibkoeffizient als $\mu = \mu_H$ deklariert und ist in Gleichung (5.77) für den Haftbereich zuständig. Sofern das Element den Gleitbereich erreicht, d. h. wenn $|F_o^t| > \mu_H |F^n|$ gegeben ist, dann gilt die Beziehung $\mu = \mu_G$ und das Reibelement beginnt sich in Bewegung zu setzen. Falls allerdings im anschließenden Gleitprozess die Beziehung $|F_o^t| < \mu_G |F^n|$ erfüllt wird, so tritt wieder der Haftfall in Kraft und es folgt erneut: $\mu = \mu_H$.

Ein wesentlicher Punkt bei diesem Modell ist die Regulierung der Federverlängerung. Liegt die Situation vor, dass zum aktuellen Zeitschritt sich der Kontaktpunkt k im Haftfall befindet, d. h. wenn gilt: $f_s^{tr} < 0$, so wird die Feder für den nächsten Zeitschritt um $\Delta \mathbf{g}^t$ verlängert. Die neue Federlänge $\mathbf{\overline{g}}^t$ lautet dann:

$$\overline{\mathbf{g}}^t = \mathbf{g}^t + \Delta \mathbf{g}^t \quad \text{mit} \quad \Delta \mathbf{g}^t = \mathbf{v}^{k,t} \Delta t \,.$$
(5.78)

Sofern aber der Kontaktpunkt im Gleitfall vorliegt und darüber hinaus $f_s^{tr} > 0$ ist, dann muss die Federdehnung gemäß dem Coulombschen Reibgesetz entsprechend zurückprojiziert werden, sodass für die Gleitfunktion gilt: $f_s^{tr} = 0$. Dies kann durch die folgende Beziehung vorgenommen werden:

$$\overline{\mathbf{g}}^{t} = -\frac{1}{c^{t}} (\mu_{G} F^{n} \mathbf{t}^{t} + d^{t} \mathbf{v}^{k,t}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{t}^{t} = \frac{\mathbf{F}_{o}^{t}}{||\mathbf{F}_{o}^{t}||}.$$
(5.79)

Hierin ist \mathbf{t}^t die Richtung der Testkraft. Angesichts dessen, dass die Kontaktfläche in zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten leicht rotieren kann, wird in Luding [169] vorgeschlagen, die Feder jeweils zu Beginn eines Zeitschrittes in die aktuelle Kontaktebene abzubilden:

$$\mathbf{g}^t = \overline{\mathbf{g}}^t - (\overline{\mathbf{g}}^t \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \,. \tag{5.80}$$

Mit den obigen Ausführungen kann die tangentiale Kontaktkraft F^t wie folgt angegeben werden:

$$f_s^{\rm tr} = \begin{cases} \leq 0 : \text{ Haften } \Rightarrow F^t = ||\mathbf{F}_o^t|| \\ = 0 : \text{ Gleiten } \Rightarrow F^t = \mu_G F^n \end{cases}$$
(5.81)

Letztendlich lassen sich die Tangentialkraftvektoren \mathbf{F}_{i}^{t} und \mathbf{F}_{j}^{t} in Bezug auf das Kontaktpaar $\{\mathcal{P}_{i}, \mathcal{P}_{j}\}$ als

$$\mathbf{F}_{i}^{t} = F^{t} \mathbf{t}^{t} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{F}_{j}^{t} = -F^{t} \mathbf{t}^{t}$$
(5.82)

schreiben und die beiden entsprechenden Momentenvektoren sind damit als

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^t$$
 bzw. $\mathbf{M}_j = \mathbf{r}_j \times \mathbf{F}_j^t$ (5.83)

definiert.

Torsionswiderstand

Wie bereits in Kapitel 5.2 angeführt, stellt die Spinrotation einen der sechs Kontaktfreiheitsgrade dar. Dieser Freiheitsgrad ist unmittelbar mit dem Phänomen der Torsionsreibung verbunden, wenn die Kontaktpartner eine Relativdrehung um die gemeinsame Normalenachse ausführen. Bei dieser Relativdrehung wird in der Kontaktfläche stets ein gewisses Maß an Rotationsenergie freigesetzt. Um diese Energiedissipation abzubilden, bietet es sich an, ein entgegen der entsprechenden Partikelrotation wirkendes Reibmoment M^n anzusetzen, siehe z. B. [170, 175]. Eine schematische Darstellung hierzu bieten Abb. 5.11(a) und Abb. 5.11(b). Das Augenmerk der folgenden Ausführungen sei auf die Bestimmung dieses Torsionsreibwiderstandes gerichtet.

Das rheologische Modell, das in der vorliegenden Arbeit zur Berechnung von M^n zum Einsatz kommt, ist dem Tangentialkontaktmodell relativ ähnlich, vergleiche Abb. 5.10 mit Abb. 5.11(c); denn hier sind lediglich die Elemente (c^t, d^t, μ) durch entsprechende Torsionselemente $(c^\vartheta, d^\vartheta, \mu^\vartheta)$ zu ersetzen. Das Testmoment lautet in dem Fall in Entsprechung zu (5.76) wie folgt:

$$\mathbf{M}_{o}^{n} = -(c^{\vartheta} \,\boldsymbol{\vartheta} + d^{\vartheta} \,\dot{\boldsymbol{\vartheta}}) \quad \text{mit} \quad \dot{\boldsymbol{\vartheta}} = \boldsymbol{\omega}^{n} \,, \tag{5.84}$$

wobei ϑ die Verdrehung der Feder infolge der Relativrotation der Partikel um ihre Normalenachse ist und $\dot{\vartheta}$ deren diesbezügliche relative Rotationsgeschwindigkeit bezeichnet (vgl. Gleichung (5.11)). Um den zulässigen Bereich für das aufnehmbare Widerstandsmoment numerisch zu erfassen, wird hier analog zum Tangentialkontakt eine Gleitfunktion



Abbildung 5.11: Schematische Darstellung des Torsionsreibwiderstandes M^n : (a) Partikel-Partikel-Interaktion und (b) Partikel-Wand-Interaktion. (c) Rheologisches Modell zur Abbildung von M^n .

eingeführt, die wie folgt definiert ist:

$$f_t^{\rm tr} = ||\mathbf{M}_o^n|| - M_c^n \le 0.$$
(5.85)

Darin ist M_c^n das vom Reibelement maximal übertragbare Moment.

Marshall [175] schlägt in diesem Zusammenhang hinsichtlich der Wahl der Modellparameter vor, sich auf die in der Kontaktfläche übertragbaren bzw. gegenwärtigen Reibspannungen aus dem Tangentialkontakt zu beziehen, damit die Spannungen infolge Tangentialund Torsionsreibung bei betragsmäßig ähnlicher Relativbewegung etwa von gleicher Größenordnung sind. So erhält man für den kritischen Torsionswiderstand M_c^n die folgende Aussage [175]:

$$M_c^n = \int_A \tilde{\sigma} \, r \, \mathrm{d}A = \int_0^{2\pi} \int_0^a \tilde{\sigma} \, r^2 \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}\alpha = \frac{2}{3} \, \mu \, a \, F^n \quad \text{mit} \quad \tilde{\sigma} = \frac{\mu \, F^n}{\pi \, a^2} \,. \tag{5.86}$$

Geht man in dem Kontext ferner davon aus, dass im Kontaktgebiet die tangentialen Relativgeschwindigkeiten infolge Relativdrehung hier vereinfacht durch $v^t(r) = r \omega^n$ gegeben sind, so erhält man nach einigen Zwischenschritten für $g^t = \Delta g^t$ und $\vartheta = \Delta \vartheta$ den nachstehenden Ausdruck:

$$M^{n} = \int_{A} \tilde{\sigma} r \, \mathrm{d}A = -\left(\frac{a^{2}}{2} c^{t} \vartheta + \frac{a^{2}}{2} d^{t} \dot{\vartheta}\right) \quad \text{mit} \quad \tilde{\sigma} = \frac{F^{t}}{\pi a^{2}}.$$
(5.87)

Ein Vergleich dieser Beziehung mit der Gleichung (5.84) liefert die Modellparameter des Torsionswiderstandes [175]:

$$c^{\vartheta} = \frac{a^2}{2} c^t \quad \text{und} \quad d^{\vartheta} = \frac{a^2}{2} d^t \,. \tag{5.88}$$

Ein zentraler Punkt bei der Bestimmung des Torsionswiderstandes ist die Auswertung der Gleitfunktion, denn deren Prüfung muss – wie beim Tangentialkontakt – in Bezug auf die Berührungsphase des jeweiligen Kontaktpaares in jedem diskreten Zeitschritt erfolgen. Man kann hier die Gleitfunktion betreffend in Entsprechung zu (5.81) folgendes schreiben:

$$f_t^{\rm tr} = \begin{cases} \leq 0 : \text{ Haften } \Rightarrow M^n = ||\mathbf{M}_o^n|| \\ = 0 : \text{ Gleiten } \Rightarrow M^n = M_c^n \end{cases}$$
(5.89)

Wenn diese Funktion nach ihrer Auswertung den Haftfall liefert, so ist die Feder im Hinblick auf den nächsten Zeitschritt weiter zu verdrillen:

$$\overline{\vartheta} = \vartheta + \Delta \vartheta \quad \text{mit} \quad \Delta \vartheta = \omega^n \,\Delta t \,. \tag{5.90}$$

Im anderen Fall, also im Gleitfall, ist das Federelement bei einer Verletzung des Gültigkeitsbereichs der Testfunktion ($f_t^{\text{tr}} > 0$) entsprechend anzupassen, sodass gilt: $f_t^{\text{tr}} = 0$. Dabei kann analog zu Gleichung (5.79) vorgegangen werden und man erhält:

$$\overline{\boldsymbol{\vartheta}} = -\frac{1}{c^{\vartheta}} \left(M^n \, \mathbf{t}^n + d^{\vartheta} \, \boldsymbol{\omega}^n \right) \quad \text{mit} \quad \mathbf{t}^n = \frac{\mathbf{M}_o^n}{||\mathbf{M}_o^n||} \,. \tag{5.91}$$

Ausgehend davon, dass die räumliche Orientierung der hier maßgeblichen Rotationsachse zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten eine kleine Änderung erfahren kann, ist die Feder insofern immer zu Beginn eines Zeitschrittes an die aktuelle Referenzrichtung anzupassen. Die entsprechende Projektion wird in dem Fall folgendermaßen vorgenommen:

$$\boldsymbol{\vartheta} = (\overline{\boldsymbol{\vartheta}} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \,. \tag{5.92}$$

Was die Beziehungen zur Bestimmung der auf das Kontaktpaar $\{\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j\}$ wirkenden Rotationswiderstände \mathbf{M}_i^n und \mathbf{M}_j^n angeht, so kann man unter Beachtung, dass diese zueinander antiparallel orientiert sind [170], gemäß der obigen Notation schreiben:

$$\mathbf{M}_{i}^{n} = -\mathbf{M}_{i}^{n} =: \mathbf{M}^{n} \quad \text{mit} \quad \mathbf{M}^{n} = M^{n} \mathbf{t}^{n} \,.$$
(5.93)

5.4.4 Rollwiderstand

Der Widerstand, den ein Partikel beim Rollen über eine Fläche erfährt, wobei es sich sowohl um die Oberfläche eines anderen Partikels als auch um eine Wandfläche handeln kann, wird in der Literatur als Rollwiderstand oder Rollreibung bezeichnet. Die jeweilige Rollreibung eines Partikels kann ihren Ursprung in vielen Bereichen haben. Dazu zählen u. a. folgende Ursachen/Phänomene: Strömungswiderstand, viskoelastisches Materialverhalten, plastische Verformungen des Partikels im Kontaktgebiet, asymmetrische Verteilung der Kontaktspannungen und/oder adhäsive Anziehung der Kontaktoberflächen, siehe [53, 54, 58, 74, 132, 233].

Betrachtet man beispielsweise wie die Kontaktfläche eines frei über eine Ebene rollenden Partikels in Rollrichtung voranschreitet, so ist zunächst in makroskopischer Hinsicht festzuhalten, dass am vorderen Kontaktrand des Partikels – und zwar in Rollrichtung gesehen – neuer Kontakt generiert wird und dass am hinteren Rand sich das Partikel von der Ebene loslöst. Aus den experimentellen Untersuchungen in Kendall [132] lässt sich in Bezug auf das Rollverhalten eines Partikels ableiten, dass der Energieaufwand, der am hinteren Kontaktrand zur Trennung der Oberflächen erforderlich ist, wesentlich größer als die Energie ist, die durch einen neu entstehenden Kontakt gespeichert wird. (Diese Differenz wird im Übrigen mit zunehmender Rate der beiden Vorgänge größer.) Kendall [132] spricht an dieser Stelle von der adhäsiven Hysterese. In den Aufsätzen von Dominik & Tielens [53, 54] wird hingegen die Problematik des Rollwiderstandes eines Partikels auf mikroskopischer Ebene betrachtet. Sie gehen davon aus, dass infolge Adhäsion das Generieren und Ablösen des Kontaktes an den entsprechenden Rändern zum einen nicht kontinuierlich und zum anderen nicht synchron verlaufen, sodass beim Rollen in der folglich zumeist unsymmetrischen Kontaktfläche eine ebenso betragsmäßig unsymmetrische Spannungsverteilung vorliegt und ferner der charakteristische Kontaktpunkt dieser Fläche sich mithin zeitweise nicht mehr auf der Normalenachse befindet. Diese Exzentrizität resultiert letztendlich in einem Widerstandsmoment der Kräfte, das der Rollbewegung des Partikels entgegen wirkt.

Der numerisch berechnete Rollwiderstand M^r wird entgegen der Rollrichtung eines Partikels aufgetragen (siehe die Darstellung in Abb. 5.12(a) und Abb. 5.12(b)). Modelle zur Bestimmung von M^r finden sich u. a. in [22, 113, 114]. Eine überblicksartige Arbeit, in der eine Reihe von Rollwiderstandsmodellen diskutiert und anhand von 2D Simulationen getestet werden, liefert der Beitrag von Ai *et al.* [1]. Das klassische Modell von Iwashita & Oda [113], das in der vorliegenden Arbeit die Basis zur Behandlung der Rollreibung bildet, ist in Abb. 5.12(c) dargestellt. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, setzt sich dieses rheologische Modell aus Drehelementen zusammen, nämlich aus einer Drehfeder, einem Drehdämpfer und einem entsprechenden Reibelement. Die algorithmische Behandlung



Abbildung 5.12: Schematische Darstellung des Rollwiderstandes M^r : (a) Partikel-Partikel-Interaktion und (b) Partikel-Wand-Interaktion. (c) Rheologisches Modell zur Abbildung von M^r .

dieses Systems erfolgt wie bei den anderen beiden eben betrachteten Systemen durch das

Rückprojektionsverfahren. Das entsprechende Testmoment kann dafür wie folgt formuliert werden:

$$\mathbf{M}_{o}^{r} = -(c^{\varphi} \,\boldsymbol{\varphi} + d^{\varphi} \,\dot{\boldsymbol{\varphi}})\,. \tag{5.94}$$

Hierin ist φ die Verdrehung der Feder infolge der Relativrotation der Partikel um ihre Rollachse und $\dot{\varphi}$ ist deren diesbezügliche relative Rotationsgeschwindigkeit, wobei hier noch zu erwähnen ist, dass die besagte Rollachse senkrecht zur gemeinsamen Verbindungslinie steht. Es wird in Luding [170] vorgeschlagen, die numerische Berechnung von \mathbf{M}_{o}^{r} auf Basis einer Pseudo-Kraft \mathbf{F}_{o}^{r} , die ein zur Gleichung (5.94) äquivalentes Widerstandsmoment erzeugt, durchzuführen:

$$\mathbf{M}_{o}^{r} = R^{*}\mathbf{n} \times \mathbf{F}_{o}^{r}. \tag{5.95}$$

Dieser Ansatz hat natürlich den Vorteil, ein Teil der beim Tangentialkontakt zur Berechnung von \mathbf{F}_{o}^{t} implementierten Algorithmen auch zur Bestimmung von \mathbf{F}_{o}^{r} heranziehen zu können [170]. Die entsprechende Formulierung für diese Testkraft ist durch

$$\mathbf{F}_{o}^{r} = -(c^{\xi} \,\mathbf{g}^{r} + d^{\xi} \,\dot{\mathbf{g}}^{r}) \tag{5.96}$$

gegeben. Dabei ist \mathbf{g}^r die Verlängerung der Feder, die aus der relativen Rollbewegung der Partikel hervorgeht, und $\dot{\mathbf{g}}^r$ steht für die gemeinsame Rollgeschwindigkeit des Kontaktpaares. Diese kann für ein Paar mit u. a. unterschiedlichen Partikelradien nach den Ausführungen in Kuhn & Bagi [144] folgendermaßen bestimmt werden:

$$\dot{\mathbf{g}}^{r} := \mathbf{v}^{r} = -R^{*} \left[(\boldsymbol{\omega}_{i} - \boldsymbol{\omega}_{j}) \times \mathbf{n} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{j}} - \frac{1}{R_{i}} \right) \mathbf{v}^{k,t} \right].$$
(5.97)

Führt man unter Hinzunahme der Beziehung (5.96) eine Äquivalenzbetrachtung zwischen (5.94) und (5.95) durch, so lassen sich für die obigen Modellparameter folgende Relationen gewinnen: $c^{\varphi} = c^{\xi} R^{*2}$ und $d^{\varphi} = d^{\xi} R^{*2}$. In dem Zusammenhang schlagen Iwashita & Oda [113] vor, die Regularisierung der Rollreibung an die der Tangentialreibung anzulehnen, wobei dann gilt: $c^{\varphi} = c^{t} R^{*2}$. Einen weiteren Ansatz betreffend der Wahl von c^{φ} findet sich in der Arbeit von Dominik & Tielens [53]. In dieser Veröffentlichung leiten die Autoren im Rahmen der JKR-Theorie für die Drehfedersteifigkeit den folgenden Ausdruck her: $c^{\varphi} = 4 F_c^n R^* (a/a_0)^{3/2}$.

Es bietet sich an dieser Stelle an, das kritische Widerstandsmoment M_c^r einzuführen. Diese Größe steht für das betragsmäßig maximale Moment, das vom Reibelement übertragen werden kann. Unter Zuhilfenahme von M_c^r können die Gleitfunktion und die zugehörigen Beziehungen für die Rollreibung zusammenfassend wie folgt dargestellt werden:

$$f_r^{\rm tr} = ||\mathbf{F}_o^r|| - \frac{M_c^r}{R^*} \Rightarrow \begin{cases} \leq 0 : \text{ Haften } \Rightarrow F^r = ||\mathbf{F}_o^r|| \\ = 0 : \text{ Gleiten } \Rightarrow F^r = M_c^r/R^* \end{cases}$$
(5.98)

Wie gesagt, entspricht der Algorithmus zur Berechnung der Rollreibung weitestgehend dem der Tangentialreibung. So gilt hier analog zur Tangentialreibung, dass im aktuellen Zeitschritt die Feder gemäß der Auswertung der Gleitfunktion, bei der man in aller Regel erhält: $f_r^{\rm tr} < 0$ oder $f_r^{\rm tr} > 0$, im Hinblick auf den nächsten Zeitschritt entweder in Abhängigkeit von \mathbf{v}^r zu verlängern oder bezüglich M_c^r konsistent anzupassen ist. Dafür lassen sich folgende Beziehungen formulieren:

$$f_r^{\rm tr} = \begin{cases} <0 \Rightarrow \overline{\mathbf{g}}^r = \mathbf{g}^r + \Delta \mathbf{g}^r \,, & \Delta \mathbf{g}^r = \mathbf{v}^r \Delta t \\ >0 \Rightarrow \overline{\mathbf{g}}^r = -\frac{1}{c^{\xi}} \Big[F_c^r \, \mathbf{t}^r + d^{\xi} \, \mathbf{v}^r \Big] \,, & \mathbf{t}^r = \frac{\mathbf{F}_o^r}{||\mathbf{F}_o^r||} \,, F_c^r = \frac{M_c^r}{R^*} \,. \end{cases}$$
(5.99)

Was die maßgebliche Projektionsrichtung der Feder bei der Rollreibung angeht, so ist diese durch die aktuelle Rollrichtung gegeben. Damit kann eine angemessene Projektion der Feder anhand der nachstehenden Relation vorgenommen werden:

$$\mathbf{g}^{r} = (\overline{\mathbf{g}}^{r} \cdot \tilde{\mathbf{t}}) \tilde{\mathbf{t}} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{t}} = \frac{\mathbf{v}^{r}}{||\mathbf{v}^{r}||}.$$
 (5.100)

Zum Abschluss der Betrachtung der Rollreibung sollen die Rollwiderstandsgrößen \mathbf{M}_{i}^{r} und \mathbf{M}_{j}^{r} in Bezug auf das Kontaktpaar $\{\mathcal{P}_{i}, \mathcal{P}_{j}\}$ angeführt werden. Diese sind in der Form

$$\mathbf{M}_{i}^{r} = -\mathbf{M}_{i}^{r} =: \mathbf{M}^{r} \quad \text{mit} \quad \mathbf{M}^{r} = R^{*}\mathbf{n} \times \mathbf{F}^{r}$$
(5.101)

definiert. Dabei ist $\mathbf{F}^r = F^r \mathbf{t}^r$ der als Hilfsgröße dienende Pseudo-Widerstandskraftvektor. Des Weiteren ist hier zu erwähnen, dass \mathbf{M}_i^r und \mathbf{M}_j^r zueinander antiparallel orientiert sind [170].

5.5 Zeitintegration

In Anbetracht dessen, dass DEM-Simulationen sehr kleine Berechnungszeitschritte Δt erfordern, sodass die Beschreibung von größeren Partikelsystemen prinzipiell einen relativ hohen Berechnungsaufwand erfordert, kommt hier dem Zeitintegrationsverfahren eine besondere Tragweite zu. So sollte das zur Lösung der Newton-Euler-Gleichungen eingesetzte Verfahren vor allem ein schneller, möglichst einfacher Algorithmus sein, der aber dennoch genau und stabil ist. Einen Überblick über die im Kontext der DEM gängigen Zeitdiskretisierungsverfahren bieten Rougier *et al.* [212] und Kruggel-Emden *et al.* [141].

Ein weitverbreiteter Algorithmus zur Lösung der besagten Bewegungsgleichungen ist das explizite Prädiktor-Korrektor-Verfahren nach Gear, wobei man im Allgemeinen von einem Gear-Verfahren n-ter Ordnung spricht. Die Ordnung dieses Verfahrens bezieht sich auf die Anzahl n der berücksichtigten Taylor-Polynome, die bei der Extrapolation der aktuellen Lösung hinsichtlich der Bestimmung der neuen einbezogen werden. In der vorliegenden Arbeit wird zur Berechnung der Newton-Gleichung das Gear-Verfahren 3-ter Ordnung eingesetzt und im Falle der Euler-Gleichung kommt das Gear-Verfahren 4-ter Ordnung zum Tragen. Der hier speziell in Bezug auf sphärische Partikel implementierte Gear-Algorithmus ist in Abb. 5.13 skizziert. Für ausführliche Darstellungen zum Gear-Algorithmus sei auf die Fachbücher [4, 204] verwiesen.

Translation	Prädiktorschritt	Rotation		
$\mathbf{x}^{\mathrm{P}}(t+\Delta t) = \mathbf{X}(t) + \dot{\mathbf{X}}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{X}}(t)\Delta t^{2} + \frac{1}{6}\ddot{\mathbf{X}}$	(t) Δt^{3} $\omega^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) = \Omega(t) + \frac{1}{24} \frac{\Omega(t)}{\Omega}$	$\frac{\dot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t^{2} + \frac{1}{6}\ddot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t^{3}}{t)\Delta t^{4}}$		
$\dot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) = \dot{\mathbf{X}}(t) + \ddot{\mathbf{X}}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{X}}(t)\Delta t^{2}$	$\dot{\omega}^{\mathrm{P}}(t+\Delta t) = \dot{\Omega}(t) +$	$\ddot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t^{2} + \frac{1}{6}\overset{(\mathrm{iv})}{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t^{3}$		
$\ddot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) = \ddot{\mathbf{X}}(t) + \ddot{\mathbf{X}}(t)\Delta t$	$\ddot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) = \ddot{\boldsymbol{\Omega}}(t) +$	$\ddot{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t + \frac{1}{2} \frac{(\mathrm{iv})}{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t^2$		
$\ddot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) = \ddot{\mathbf{X}}(t)$	$\ddot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{P}}(t+\Delta t) = \overleftrightarrow{\boldsymbol{\Omega}}(t) +$	$\cdot \stackrel{(\mathrm{iv})}{\mathbf{\Omega}}(t)\Delta t$		
	$\overset{(\mathrm{iv})_{\mathrm{P}}}{\boldsymbol{\omega}}(t + \Delta t) = \overset{(\mathrm{iv})}{\boldsymbol{\Omega}}(t)$)		
Berechnungsschritt				
 (i) Bestimme auf der Grundlage der vorhergesagten Variablen die Kraft F^P(x^P, x^P) und das Moment M^P(x^P, ω^P), welche beide am Partikel angreifen. (ii) Berechne aus (3.42) und (3.47) die auf den Beschleunigungen des Partikels basierenden Fehlerkriterien a[*] = F^P/m und ώ[*] = M^P/Θ. (iii) Ermittle für den Korrektorschritt die Differenzen Δ x = a[*] - x ^P und Δ ω = ω[*] - ω^P. 				
Translation	Korrektorschritt	Rotation		
$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) + c_0^t \mathbf{s}^t$ $\dot{\mathbf{x}}(t + \Delta t) = \dot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) + c_1^t \mathbf{s}^t \frac{1}{\Delta t}$ $\ddot{\mathbf{x}}(t + \Delta t) = \ddot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) + c_2^t \mathbf{s}^t \frac{2}{\Delta t^2}$ $\dddot{\mathbf{x}}(t + \Delta t) = \dddot{\mathbf{x}}^{\mathrm{P}}(t + \Delta t) + c_3^t \mathbf{s}^t \frac{6}{\Delta t^3}$	$\omega(t + \Delta t) = \omega^{P}(t + \Delta t)$ $\dot{\omega}(t + \Delta t) = \dot{\omega}^{P}(t + \Delta t)$ $\ddot{\omega}(t + \Delta t) = \ddot{\omega}^{P}(t + \Delta t)$ $\ddot{\omega}(t + \Delta t) = \ddot{\omega}^{P}(t + \Delta t)$ $\overset{(iv)}{\omega}(t + \Delta t) = \overset{(iv)P}{\omega}(t + \Delta t)$	$\begin{aligned} \Delta t) &+ c_0^r \mathbf{s}^r \\ \Delta t) &+ c_1^r \mathbf{s}^r \frac{1}{\Delta t} \\ \Delta t) &+ c_2^r \mathbf{s}^r \frac{2}{\Delta t^2} \\ \Delta t) &+ c_3^r \mathbf{s}^r \frac{6}{\Delta t^3} \\ &+ \Delta t) &+ c_4^r \mathbf{s}^r \frac{24}{\Delta t^4} \end{aligned}$		
$\mathbf{s}^t = \frac{\Delta t^2}{2} \Delta \ddot{\mathbf{x}} , c_0^t = \frac{1}{6} , c_1^t = \frac{5}{6} , c_2^t = 1 , c_3^t = \frac{1}{3}$	$\mathbf{s}^r = \Delta t \Delta \dot{\boldsymbol{\omega}} , c_0^r = rac{251}{720}$	$\frac{1}{2}, c_1^r = 1, c_2^r = \frac{11}{12}, c_3^r = \frac{1}{3}, c_4^r = \frac{1}{24}$		

Abbildung 5.13: Gear-Verfahren (Prädiktor-Korrektor-Algorithmus).

Wie aus der Darstellung in Abb. 5.13 hervorgeht, ist das Gear-Verfahren ein Mehrschrittverfahren und besteht im Wesentlichen aus drei Makroschritten, und zwar aus einem Prädiktorschritt, einem Berechnungsschritt und aus einem Korrektorschritt. Im ersten Schritt werden alle Variablen auf der Grundlage ihrer aktuellen Werte anhand einer Taylor-Reihenentwicklung extrapoliert. Auf der Basis der vorgenommenen Extrapolation werden dann im Berechnungsschritt zuerst die auf die Partikel wirkenden Kräfte aus Nah- und Fernwirkung bestimmt und im Anschluss daran werden mithilfe dieser Kräfte die Partikelbeschleunigungen aus den entsprechenden Bilanzbeziehungen ermittelt. Berechnet man nun die Differenz zwischen diesen Beschleunigungen und jenen aus der Extrapolation, so lassen sich die im ersten Schritt vorhergesagten Werte mit Rücksicht auf die berechnete Diskrepanz der Beschleunigungen in einem Korrektorschritt verbessern. Jene Vorfaktoren, die hierbei für die einzelnen Korrekturen erforderlich sind, sind für eine gewöhnliche Differentialgleichung erster und zweiter Ordnung bezüglich des Gear-Verfahrens vierter bzw. dritter Ordnung in Abb. 5.13 angeführt.

5.6 Standardtests

Die Beispiele in diesem Kapitel sollen dazu dienen, die Implementierung der hier vorgestellten Materialmodelle und des eben beschriebenen Zeitintegrationsalgorithmus in das neu entwickelte DEM-Programmsystem zu überprüfen. Dies wird im Folgenden mittels 'kleiner' Testbeispiele vorgenommen.

Normalkontakt

Der Normalkontakt soll anhand einer umfangreichen Betrachtung von geraden Binärkollisionen zwischen gleichen sphärischen Partikeln getestet werden. Dabei werden die entsprechenden Tests für verschiedene Auftreffgeschwindigkeiten der Teilchen durchgeführt. Jene charakteristische Kenngröße, mittels der ein Normalstoß makroskopisch beschrieben werden kann, ist die Stoßzahl e^n . Diese Größe soll hinsichtlich der Verifikation des implementierten Normalkontakts im nachstehenden Testbeispiel, welches sich an die Arbeit von Brilliantov *et al.* [21] anlehnt, als Bezugsgröße dienen. Des Weiteren werden im folgenden Beispiel neben den in Brilliantov *et al.* [21] dargestellten Ergebnissen auch die darin referierten Berechnungsergebnisse aus den Veröffentlichungen [2, 25] zu Vergleichszwecken herangezogen. Es sei ferner angemerkt, dass in allen drei Arbeiten die in Bridges *et al.* [19] experimentell ermittelten Stoßzahlen von sphärischen Eispartikeln als Referenzbasis für die Berechnungswerte benutzt werden.

Bemerkung: In Bezug auf die Arbeiten [2, 21, 25] ist zu erwähnen, dass hier jeweils zur Berechnung der Stoßzahlen die gewöhnliche Bewegungsdifferentialgleichung der jeweiligen zugrunde liegenden Stoßformulierung herangezogen wird. Im Einzelnen ist dies die Bewegungsgleichung (5.55) in [25], die Beziehung (5.73) in [21] und eine quasi approximierte Form von (5.73) in [2].

Bei diesem Testbeispiel werden die Partikelparameter gemäß Brilliantov *et al.* [21] wie folgt festgelegt: $R = 0.02 \text{ m}, \rho = 1000 \text{ kg/m}^3, E = 7 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2, \nu = 0.25, A = 10^{-4} \text{ s},$ und was die Adhäsionsenergie W zwischen den Stoßpartnern betrifft, so wird sie mit W = 0.74 N/m angenommen. Die von Bridges *et al.* [19] ermittelten experimentellen Stoßzahlen sind in Abb. 5.14 durch die Kurve (d) in Abhängigkeit der Auftreffgeschwindigkeit der Partikel dargestellt. Die anderen Stoßzahlkurven in Abb. 5.14 hingegen stammen aus numerischen Berechnungen, genauer gesagt aus viskoelastischen (Kurven: a, e, f) und adhäsiv-viskoelastischen (Kurven: b, c, g-i).

Der gerade Stoß von viskoelastischen Partikeln zeichnet sich durch zwei Besonderheiten aus: zum einen dadurch, dass die Stoßzahl eines viskoelastischen Stoßpaares mit steigender Kollisionsgeschwindigkeit infolge der Zunahme der energiedissipierenden Kontaktkraft kontinuierlich abnimmt, und zwar mit einem gewissen asymptotischen Charakter, und dass zum anderen der viskoelastische Stoß bei sehr geringen Relativgeschwindigkeiten als Extremum eine beinahe rein elastische Eigenschaft annimmt. Wie der Kurve (a) in Abb. 5.14 zu entnehmen ist, gibt das viskoelastische Modell von Brilliantov *et al.* [25] das makroskopische Stoßverhalten der Eispartikel über den gesamten Bereich der Stoßgeschwindigkeiten sehr gut wieder. Die Testrechnungen, die mit dem in dieser Dissertation entwickelten DEM-Programm durchgeführt wurden, liefern dafür die Kurve (e), welche mit der in Brilliantov *et al.* [25] dargestellten Kurve (a) deckungsgleich ist. Der Ansatz von Ramirez *et al.* [208], der eine direkte analytische Approximation dieses Modells zur Berechnung von Stoßzahlen darstellt, liefert hier ebenfalls gute Werte. Sie werden in Abb. 5.14 durch die Kurve (f) repräsentiert.



Abbildung 5.14: Vergleich der berechneten Stoßzahlen mit Angaben aus der Literatur.

In einer weiterführenden Arbeit untersuchen Bridges *et al.* [20] experimentell das Haftverhalten von Eispartikeln, welche für die Tests eigens mit einer Frostschicht überzogen werden. Aus den Versuchen leiten die Autoren u. a. eine kritische Relativgeschwindigkeit $V_{\text{krit}}^{k,n}$ ab, die besagt, dass bei einem Stoß mit $V^{k,n} < V_{\text{krit}}^{k,n}$ die Teilchen angesichts der durch die Frostschicht zusätzlich hervorgerufenen Energiedissipation aneinander haften bleiben. Bridges *et al.* [20] geben die beobachtete Haftgrenze wie folgt an: $V_{\text{krit}}^{k,n} \approx 0.003 - 0.004 \text{ m/s}$. Diese kritische Relativgeschwindigkeit wird, wie der Abb. 5.14 zu entnehmen ist, durch die adhäsiven viskoelastischen Kurven (b, g, h) relativ gut wiedergegeben. Ferner ist hier in Bezug auf den Bereich jenseits von $V_{\text{krit}}^{k,n}$ festzuhalten, dass diese Kurven aufgrund der ihnen innewohnenden adhäsiven Energiedissipation erwartungsgemäß stets kleinere Stoßzahlen als die jeweils entsprechende viskoelastische Kurve liefern.

Es ist allerdings zu bemerken, dass im Gegensatz zum viskoelastischen Fall, wo die Kurven (a) und (e) identisch sind, die Kurve (b) und die zu ihr korrespondierende Kurve (g) in diesem Fall eine kleine Differenz aufweisen – sie verlaufen aber dennoch sehr ähnlich. Wie bei einem genaueren Blick auf Abb. 5.14 festgestellt werden kann, nähert sich die in der vorliegenden Arbeit berechnete Kurve (g) mit zunehmender Kollisionsgeschwindigkeit immer mehr an die ihr zugeordnete viskoelastische Kurve (e) an, wohingegen der Abstand zwischen den Kurven (a) und (b) aus den Arbeiten von Brilliantov *et al.* [21, 25] bei höheren Kollisionsgeschwindigkeiten sich nicht sonderlich ändert. In Anbetracht der besagten Differenz wurde hier noch ein weiterer Satz von Testrechnungen durchgeführt, und zwar auf der Basis des quasi 'vereinfachten' adhäsiv-viskoelastischen JKR-Modells, das durch die Hertzsche Verformungsbeziehung approximiert wird ((5.74),(5.75)). Die für diesen Fall gewonnenen Ergebnisse werden durch die Kurve (h) wiedergegeben. Diese weist gegenüber der Kurve (g) einen sehr ähnlichen Verlauf mit gleichen Eigenschaften auf. Wenn man nun im Hinblick auf eine weitere Verifizierung der Implementierung dieselben Berechnungen erneut durchführt und dabei den adhäsivviskosen Kopplungsterm in (5.75) vernachlässigt, dann liefert das hier entwickelte DEM-Programmsystem den Verlauf (i). Das Analogon zu diesen Ergebnissen ist die von Albers & Spahn [2] ermittelte Kurve (c). Es bleibt festzuhalten, dass die Stoßzahlen in dem Fall wieder ausgesprochen gut miteinander übereinstimmen.

Tangentialkontakt

Erstes Testbeispiel. Dieses Testbeispiel, das zur Überprüfung des Tangentialkontakts dienen soll, besteht darin, den Rollvorgang eines rauhen Partikels auf einer rauhen, horizontalen Ebene numerisch zu beschreiben. Hierfür wird das Partikel mit einer Anfangsgeschwindigkeit v_0 auf die Ebene abgesetzt, und zwar ohne zu rotieren (siehe Abb. 5.15). Nachdem das Partikel darauf aufliegt, führt es infolge der tangentialen Reibkraft aus der Relativbewegung der beiden Kontaktflächen zueinander eine kombinierte Roll-/Gleitbewegung aus und geht allmählich mit einem abnehmenden Gleitanteil in eine reine Rollbewegung über. In dieser Phase verschwindet die relative Tangentialgeschwindigkeit am Kontaktpunkt, d. h. hier gilt: $v^{k,t} = 0$. Diese Beziehung stellt die Rollbedingung dar. Die



Abbildung 5.15: Betrachtung eines auf einer Ebene rollenden Partikels.

Zeit, in der sie nach Aufbringen des Partikels auf die Ebene erfüllt wird, soll als Rollzeit t_R bezeichnet werden und entsprechend dazu sollen des Weiteren folgende Kennzeichnungen gebraucht werden: $x_R = x(t_R)$ für die Rollstrecke, $v_R = v(t_R)$ und $\omega_R = \omega(t_R)$ für die Translations- bzw. Rotationsgeschwindigkeit des Partikels bei Erreichen der Rollbedingung. Auf die Herleitung der analytischen Lösungsgleichungen der genannten Größen wird an dieser Stelle verzichtet und auf die Lehrbücher von Gross *et al.* [90, 91] verwiesen.⁷ Als eine weitere Referenzquelle für die hier berechneten Ergebnisse sollen die numerischen Resultate aus der Dissertation von Lillie [160] dienen.

$$t_R = \frac{2 v_0}{7 \,\mu b} \,, \ x_R = \frac{12 \, v_0^2}{49 \,\mu b} \,, \ \omega_R = \frac{5 \,\mu b}{2 \,R} \,t_R \,, \ v_R = v_0 - \mu \,b \,t_R \,.$$

⁷Die analytischen Lösungen dieser Problemstellung lauten wie folgt:

Bemerkung: Bei diesem Testbeispiel wird die Anfangsgeschwindigkeit v_0 nicht unmittelbar nach Absetzen des Partikels aufgebracht, sondern – analog zu Lillie [160] – erst dann, sobald das Teilchen seine statische Ruhelage erreicht. Diese Situation liegt vor, wenn die folgende Gleichgewichtsbeziehung erfüllt wird: $F^n = mb = 41.89$ N. Der zeitliche Verlauf von F^n ist in Abb. 5.16(a) dargestellt, wonach die Zeit zur Erreichung der Ruhelage im Folgenden zu $t_{\text{stat.}} = 0.02$ s gewählt wird.

Für die Behandlung dieses Beispiels wurden hier unter Variation der Dämpferkonstante d^t fünf Berechnungen durchgeführt, wobei galt: $d^t = 500 - 2500 \text{ Ns/m}$. Der bei diesen Berechnungen jeweils gewonnene zeitliche Verlauf der Tangentialkraft F^t ist in Abb. 5.16(b) illustriert. Wie darin unschwer zu erkennen ist, ist die Tangentialkraft im Übergangs-



Abbildung 5.16: (a) Zeitlicher Verlauf der Normalkraft. (b) Zeitliche Entwicklung der Tangentialkraft und Vergleich mit den Ergebnissen aus Lillie [160].

bereich von der Gleit-/Rollphase ($F^t \neq 0$) zur reinen Rollphase ($F^t = 0$) mit gewissen Oszillationen behaftet. Man kann feststellen, dass sich die Schwingungsamplituden nennenswert bemerkbar machen, sofern der Dämpfer relativ gesehen schwach ausgelegt ist, wohingegen die Oszillationen in der Tangentialkraft bei einer angemessenen Wahl von d^t schon bereits nach einigen wenigen Perioden herausgedämpft werden. Jene Ausschläge, die die Kraft F^t verzeichnet, sind im Grunde auf die von der Tangentialfeder gespeicherte Energie zurückzuführen. Denn diese wird angesichts der Relaxation der Feder bei Erreichen der Rollbedingung frei und muss dann insofern mittels eines entsprechend ausgelegten Dämpfers dissipiert werden. Die hier für die relative Tangentialgeschwindigkeit ermittelten zeitlichen Verläufe sind in Abb. 5.17(a) dargestellt. Dazu ist zu bemerken, dass der Richtungswechsel der Tangentialkraft F^t bei größeren Amplituden zu einer Umkehr der Richtung der relativen Tangentialgeschwindigkeit bzw. der Rotationsrichtung des Partikels führen kann, was beispielsweise in Abb. 5.17(b) besonders gut im Fall der schwachen Dämpfung $d^t = 500$ zu sehen ist.

In Tab. 5.1 wird für dieses Beispiel eine Gegenüberstellung der analytischen und der hier numerisch bestimmten Werte der wesentlichen Größen, die den Rollbeginn des Partikels charakterisieren, präsentiert. Es lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass in Bezug auf die Geschwindigkeiten ω_R und v_R die numerischen Ergebnisse kaum von den analyti-



Abbildung 5.17: Zeitliche Entwicklung der relativen Tangentialgeschwindigkeit und Vergleich mit Ergebnissen aus Lillie [160].

	$t_R[s]$	$x_R [\mathrm{m}]$	$\omega_R [\mathrm{rad/s}]$	$v_R [\mathrm{m/s}]$
$d^t = 500$	0.0570	0.0490	0.7142	0.7143
$d^t = 1000$	0.0610	0.0517	0.7143	0.7143
$d^t = 1500$	0.0578	0.0494	0.7143	0.7143
$d^t = 2000$	0.0608	0.0516	0.7142	0.7143
$d^{t} = 2500$	0.0662	0.0555	0.7142	0.7143
Analytisch	0.0571	0.0490	0.7143	0.7143

Tabelle 5.1: Numerische Ergebnisse der wesentlichen Größen, die für den Rollbeginn des Partikels charakteristisch sind. Die entsprechenden Werte aus analytischer Berechnung sind zum Vergleich ebenfalls dargestellt.

schen abweichen. Was die Resultate hinsichtlich der Größen t_R und x_R angeht, so kann man in dem Fall einen lediglich sehr kleinen Fehler wahrnehmen, der aus der Penalty-Regularisierung des Modells herrührt.

Zweites Testbeispiel. In diesem Testbeispiel soll überprüft werden, ob das Tangentialkontaktmodell in der Lage ist, das in Abb. 5.18 dargestellte flummi-ähnliche Rückprallverhalten eines Partikels von einer horizontalen Ebene wiederzugeben. Dafür wird das Partikel, wie der Abbildung entnommen werden kann, mit den Anfangsgeschwindigkeiten v_0 und ω_0 von der Bodenebene aus in die Höhe abgeworfen, und zwar mit einem rückwärts gerichteten Drall (Rückwärtsdrall). Bevor im Folgenden die anhand der DEM-Simulation gewonnenen Ergebnisse betrachtet werden sollen, wird an dieser Stelle auf den ausführlichen Aufsatz von Walker [266] verwiesen, worin sich der Autor anschaulich mit dem Rückprallverhalten von Flummis beschäftigt, die unter verschiedenen Anfangs- und Randbedingungen auf eine ebene Fläche auftreffen.

Die zeitliche Entwicklung der numerisch berechneten Koordinaten des Partikelmittelpunktes ist in Abb. 5.19(a) angeführt und in Abb. 5.19(b) sind dessen Koordinaten explizit in \mathbf{e}_3 -Richtung über diejenigen in \mathbf{e}_1 -Richtung aufgetragen. In Bezug auf die erste Flugphase des Partikels lässt sich aus diesen beiden Diagrammen ablesen, dass das Partikel



Abbildung 5.18: Flummi-ähnliches Rückprallverhalten eines Partikels mit einem rückwärtsgerichteten Drall. (Hinsichtlich der Größen E, ν, R, b und Δt wird auf die Angaben in Abb. 5.15 verwiesen.)



Abbildung 5.19: (a) Zeitlicher Verlauf der Koordinaten des Partikelmittelpunktes. (b) Darstellung der Partikelflughöhe über die Flugweite (Wurfparabeln).

nach Erreichen seiner maximalen Flughöhe von $x_{3,\max} = 5.00 \text{ m}$ anfängt zu sinken und dann zum Zeitpunkt $t_k = 2.00 \text{ s}$ an der Stelle $x_{1,k} = 20.00 \text{ m}$ auf die Ebene auftrifft (diese Angaben entsprechen den analytischen Lösungen der Wurfparabel⁸). Beim Aufprall des Partikels entsteht angesichts der Relativbewegung am Kontaktpunkt eine tangentiale Reibkraft, die der dortigen Relativgeschwindigkeit entgegen gerichtet ist. Diese Kraft reduziert folglich die Translationsgeschwindigkeit des Partikels und kann bei einem gewissen Betrag in der Tat sowohl dessen Rotations- als auch Bewegungsrichtung umkehren (siehe Abb. 5.20(a)), sodass das Partikel nach dem Aufprall zurückspringt (siehe Abb. 5.19(b)) – durch die beim Stoß dissipierte Energie jedoch nicht wieder auf seine Ausgangsposition. Die numerisch berechnete kinetische Energie des Partikels ist in Abb. 5.20(b) über die Zeit angeführt. Nach einem weiteren Blick auf Abb. 5.19(b) kann man zusammenfassend festhalten, dass das Teilchen wie ein Flummi abwechselnd hin und her hüpft, und das solange bis seine gesamte kinetische Energie dissipiert.

⁸Die analytischen Lösungen der Wurfparabel lauten wie folgt [91]:

$$\tilde{x}_{3,\max} = \frac{(v_0 \sin \alpha)^2}{2b}, \quad \tilde{x}_{1,k} = \frac{v_0^2 \sin(2\alpha)}{b}, \quad \tilde{t}_k = \frac{2v_0 \sin \alpha}{b}.$$



Abbildung 5.20: (a) Zeitlicher Verlauf der Translations- und Rotationsgeschwindigkeit des Partikels in \mathbf{e}_1 -Richtung bzw. um die \mathbf{e}_2 -Achse und (b) zeitliche Entwicklung seiner kinetischen Energie.

Drittes Testbeispiel. Nach dem die Implementierung des Modells zur Behandlung der Tangentialreibung zwischen einem Partikel und einer Wand getestet wurde, soll die Simulationsreihe nun hinsichtlich der Reibung zwischen zwei Partikeln erweitert werden. Dafür wird ein System herangezogen, für das analytische Lösungen angegeben werden können. Diese sollen für die numerisch gewonnenen Resultate als Referenzlösung dienen. Das hierfür gewählte System, das den 3D Fall der 2D Konfiguration darstellt, die in Gross *et al.* [90] analytisch betrachtet wird, ist in Abb. 5.21 illustriert. Es besteht aus den zwei



Abbildung 5.21: Zwei aufeinander abrollende Partikel.

übereinander angeordneten Partikeln \mathcal{P}_u und \mathcal{P}_o . Diese werden rotierend aufeinander abgesetzt, wobei sie sich jeweils um die durch den eigenen Partikelmittelpunkt gehende \mathbf{e}_2 -Achse drehen. Dabei soll gelten, dass zum einen das untere Partikel translatorisch fest gelagert ist und zum anderen das obere sich nur in vertikaler Richtung bewegen kann, sodass es mit seiner Gewichtskraft auf \mathcal{P}_u aufliegt. Entsprechend der Rotation der Partikel ist die in der Kontaktebene entstehende Reibkraft hier in \mathbf{e}_1 -Richtung orientiert. Die
		$t_R[\mathbf{s}]$	$\omega_{2,u,R} [\mathrm{rad/s}]$	$\omega_{2,o,R} [\mathrm{rad/s}]$
	Numerisch	0.2890	-1.5405	3.0811
ган А	Analytisch	0.2768	-1.5405	3.0811
Eall D	Numerisch	0.9312	2.1154	-4.2308
ган р	Analytisch	0.9231	2.1154	-4.2308

Tabelle 5.2: Gegenüberstellung der numerischen und analytischen Ergebnisse in Bezug auf den Rollbeginn der Partikel.

Reibung bewirkt, dass die Partikel, die zunächst mit einem gewissen Schlupf aufeinander rollen, allmählich – wie in diesem Zusammenhang im ersten Testbeispiel beschrieben – in eine reine Rollbewegung übergehen. Analog zum ersten Beispiel sollen nun die analytisch bestimmte charakteristische Rollzeit t_R sowie die zugehörigen Rotationsgeschwindigkeiten $\omega_{2,o,R}$ und $\omega_{2,u,R}$ mit den numerisch ermittelten Lösungen verglichen werden.⁹ Eine



Abbildung 5.22: Zeitlichen Verläufe der (a) Rotationsgeschwindigkeiten und (b) der Tangentialkräfte.

Gegenüberstellung der numerischen und analytischen Ergebnisse für die beiden Fälle A und B findet in Tab. 5.2 statt. Für die zeitlichen Entwicklungen der bei den Simulationen gewonnenen Partikelwinkelgeschwindigkeiten siehe Abb. 5.22(a). Es lässt sich festhalten, dass die analytischen und numerischen Lösungen der besagten charakteristischen Größen sehr gut miteinander übereinstimmen. In Abb. 5.22(b) werden hier der Vollständigkeit halber noch die entsprechenden Verläufe der Tangentialkräfte angeführt.

Roll- und Torsionswiderstand¹⁰

Erstes Testbeispiel. Zur Überprüfung der Roll- und Torsionsreibung bietet es sich hier an, auf das erste Testbeispiel des Tangentialkontakts zurückzugreifen und dieses entsprechend dafür zu erweitern. Das in dem Fall zugrunde liegende System ist in Abb. 5.23 links

$$t_{R} = \frac{1}{m_{o} \mu b} z , \quad \omega_{2,u,R} = -\frac{R_{u}}{\Theta_{u}} z + \omega_{2,u,0} , \quad \omega_{2,o,R} = -\frac{R_{o}}{\Theta_{o}} z + \omega_{2,o,0} \quad \text{mit} \quad z = \frac{R_{u} \omega_{2,u,0} + R_{o} \omega_{2,o,0}}{R_{u}^{2} / \Theta_{u} + R_{o}^{2} / \Theta_{o}}$$

⁹Die analytischen Lösungen dieser Größen lassen sich aus den folgenden Beziehungen gewinnen:

¹⁰Die Beispiele, die hier in Bezug auf den Rollwiderstand betrachtet werden, sind bei Ai et al. [1] in ähnlicher Form als 2D Beispiele zu finden.

dargestellt. Wie darin zu erkennen ist, wird das Partikel nun sowohl mit einer Translationsgeschwindigkeit v_0 wie auch mit einer Rotationsgeschwindigkeit ω_0 auf die horizontale Wand abgesetzt.

Geht man bei diesem Beispiel von der Situation aus, dass das Partikel nur Kräfte aus dem Tangential- und dem Normalkontakt übertragen kann, dann weist das Teilchen in Bezug auf seine Kinematik die Eigenschaft auf, dass es zum einen nach Erreichen der Rollbedingung durchgehend mit konstanter Geschwindigkeit auf der Ebene rollt und zum anderen unvermindert mit der anfangs aufgebrachten Rotationsgeschwindigkeit ω_0 um die Normalenachse rotiert. Das Partikel kommt hier nicht zur Ruhe, denn seine kinetische Energie bleibt – sobald das Teilchen in die reine Rollphase übergeht – auf einem gewissen Niveau konstant erhalten. Für eine Darstellung der zeitlichen Entwicklung der aus der Simulation gewonnen Rolldistanz des Partikels ohne Rollreibung siehe Abb. 5.24(a). Hierin finden sich auch die Verläufe der Weg-Zeit-Kurven des Partikels, die unter Hinzunahme der Rollreibung aus weiteren Berechnungen für verschiedene kritische Rollwiderstandsmomente M_c^r gewonnen wurden.¹¹ Aus den Verläufen ist zu entnehmen, dass das Partikel entsprechend der Größe des beim Rollen bestehenden Widerstandsmomentes M^r nun nach einer gewissen Rolldistanz zum Stehen kommt – und zwar umso schneller je größer die maximal übertragbare Rollreibung M_c^r ist. Exemplarisch werden hier im Falle von



Abbildung 5.23: Testbeispiele zur Roll- und Torsionsreibung.

 $M_c^r = 0.4$ Nm auch die zeitlichen Verläufe der Geschwindigkeiten und Widerstände des Partikels sowie der Verlauf von dessen kinetischer Energie in Diagrammform wiedergegeben, siehe Abb. 5.24 und Abb. 5.25. Man kann aus diesen Diagrammen ersehen, dass die gesamte Energie des Partikels nach einer zurückgelegten Strecke von 3.75 m zum Zeitpunkt

¹¹Diese Verläufe haben, visuell betrachtet, eine sehr ähnliche Entwicklung wie jene in Ai $et \ al. [1]$, die aus einem entsprechenden 2D Beispiel gewonnen wurden.

t = 10.5 s vollständig dissipiert. Zum anderen kann aus dem Verlauf der Torsionsreibung in Abb. 5.25 abgeleitet werden, dass die Rotationsgeschwindigkeit des Partikels um seine Normalenachse bereits zum Zeitpunkt t = 8.4 s verschwindet.



Abbildung 5.24: (a) Zurückgelegte Distanz des Partikels in Abhängigkeit der Zeit für $M_c^r = 0.0 - 0.5$ Nm. (b) Zeitlicher Verlauf der Translations- und Rotationsgeschwindigkeit des Partikels im Falle von $M_c^r = 0.4$ Nm.



Abbildung 5.25: (a) Roll- und Torsionsreibung und (b) kinetische Energie des Partikels aufgetragen über die Zeit für $M_c^r = 0.4$ Nm.

Zweites Testbeispiel. In diesem Fall soll betrachtet werden, wie das Partikel eine schräge Ebene hinaufrollt, die zur horizontalen um den Winkel α geneigt ist. Das entsprechende System ist in Abb. 5.23 rechts illustriert. Was die Wahl des kritischen Rollwiderstandes bei diesem Testbeispiel anbelangt, so wird sein Wertebereich wie folgt festgelegt: $M_c^r = 0.00 - 0.65 \,\mathrm{Nm}.$

In Abb. 5.26(a) sind die berechneten zeitlichen Distanzverläufe des Partikelmittelpunktes bezüglich seiner Ausgangslage für die verschiedenen Werte von M_c^r gegeben. Zu erkennen ist in diesem Diagramm, dass das Partikel – außer im Falle von $M_c^r = 0.65$ Nm – nach Erreichen der jeweiligen maximalen Distanz mehr oder weniger verzögert zurückzurollen beginnt (man betrachte hierzu auch Abb. 5.26(b) und Abb. 5.27(a)). Das Reibelement mit



Abbildung 5.26: (a) Zurückgelegte Distanz des Partikels in Abhängigkeit der Zeit sowie (b) zeitlicher Verlauf seiner Translationsgeschwindigkeit in e₁-Richtung.

 $M_c^r = 0.65$ Nm ist hingegen in der Lage, das Moment M_2 um die \mathbf{e}_2 -Achse des Partikels aufzunehmen, welches auf der Schräge in Bezug auf den Rollpunkt aus seiner Gewichtskraft resultiert. Dieses Moment berechnet sich analytisch zu: $M_2 = -mbR \sin \alpha = -0.616$ Nm. Das Widerstandsmoment M_2^r , das bei der Simulation hier aufgebaut wird, entspricht betragsmäßig M_2 und ist diesem entgegen gerichtet, siehe Abb. 5.27(b). So rollt das Partikel durch die Erfüllung dieses Gleichgewichts nicht wie im Falle der anderen beiden betrachteten Reibelemente zurück. Denn diese sind nicht imstande das Moment M_2 aufzunehmen, da für sie nämlich gilt: $M_c^r < M_2$.



Abbildung 5.27: (a) Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie des Partikels und (b) der Rollreibung um die e_2 -Achse.

5.7 Kontaktsuche

Kontaktsuche für den Partikel-Partikel-Kontakt

Der Aufbau und die Aktualisierung des in Gleichung (5.1) eingeführten Satzes $\mathcal{S}(t)$ stellt in der Tat den wesentlichen Kern eines MD- oder DEM-Programms dar. Denn der zugehörige Algorithmus zur Bestimmung der Kontaktpartner der einzelnen Partikel im System ist entscheidend für die Effizienz einer Simulation. Angenommen, ein Partikelsystem bestehe aus N Partikeln, so sind zur Erstellung von $\mathcal{S}(t)$ bei einer unbedachtsamen Implementierung der Kontaktüberprüfung, bei der man alle möglichen Partikelpaarungen durchgeht, die folgende Anzahl von Tests vorzunehmen: $\sum_{i=1}^{N-1} (N-i) = N(N-1)/2$. Solch ein Algorithmus besitzt demnach die Komplexität von $O(N^2)$ und erlaubt insofern lediglich die Simulation von Systemen mit einigen wenigen tausend Partikeln. Aber zur Behandlung von größeren Partikelsystemen wie in Abb. A.4 oder A.5 bedarf es Algorithmen, die die Kontaktüberprüfung im Sinne von O(N) minimieren. Dabei besteht die Herausforderung darin, auf eine möglichst effiziente Weise die unmittelbaren Nachbarn eines Partikels zu ermitteln, sodass die entsprechenden Untersuchungen lediglich auf diese potentiellen Kontaktpartner beschränkt werden können. Die Kontakttests sind nämlich für jene Partikelpaarungen, die nicht als Nachbar einzuordnen sind, nicht nur überflüssig, sondern sie bringen bei größeren Systemen auch noch einen beachtlichen Rechenaufwand mit sich. Es gilt hier die Nachbarn der einzelnen Partikel anhand von schnellen Suchalgorithmen zu bestimmen und sie im Laufe der Simulation aktuell zu halten, sodass die Ausführungen zur Kontaktdetektion sich schlussendlich nur auf diese Teilchen reduzieren lassen.

Zwei sehr weit verbreitete Kontaktsuchalgorithmen, die aus dem Bereich der Molekulardynamik stammen, sind die Verlet-Listen-Methode (VL-Methode) [261] und das Linked-Cell-Verfahren (LC-Verfahren) [206]. Diese werden u. a. in Frenkel & Smit [73], Pöschel & Schwager [204] und Allen & Tildesley [4] ausführlich beschrieben. Ein Ansatz, der in der Literatur in diesem Kontext auch häufig verfolgt wird [88, 200, 281], ist die Kombination dieser beiden Verfahren, wobei die VL-Methode durch Aspekte des LC-Verfahrens erweitert wird. So ein kombinierter Ansatz wird in der vorliegenden Arbeit zur Handhabung der Kontaktsuche eingesetzt. Er soll im Folgenden näher betrachtet werden.

Die Verlet-Listen-Methode beruht auf der Idee, für jedes einzelne Partikel \mathcal{P}_i $\{i = 1, \ldots, N\}$ eine Liste zu generieren, in der jeweils die Nachbarn des betreffenden Partikels bzw. seine potentiellen Kontaktpartner registriert sind. So können die Kontakttests für ein Teilchen allein auf die in seiner Liste stehenden eventuellen Stoßpartner eingegrenzt werden. Da die Topologie der Partikelanordnung und folglich die Partikelnachbarschaften in einem System sich über mehrere Zeitschritte hinweg zumeist allmählich ändern, so ist auch eine Aktualisierung der Verlet-Liste nur von Zeit zu Zeit erforderlich. Hier ist allerdings zu beachten, dass sich im Laufe einer Simulation kein Kontaktpaar bildet, ohne zuvor als Nachbar registriert worden zu sein. Denn solch ein Ereignis würde dann vom Algorithmus angesichts des fehlenden Eintrags in der Liste des entsprechenden Partikels nicht erkannt werden. Dementsprechend muss der Nachbarschaftsbereich der einzelnen Partikel ausreichend groß bemessen werden und das zeitliche Intervall für die Listenaufbereitung gewissen Kriterien unterliegen, damit dieser Fall nicht eintritt.

Das Maß, welches die Ausdehnung des für die Nachbarschaftsbetrachtung relevanten Bereichs um eine Partikeloberfläche repräsentiert, ist die Verlet-Distanz l_v . Wie in Abb. 5.28 exemplarisch für \mathcal{P}_i dargestellt, wird der äußere und innere Rand des Verlet-Bereichs quasi durch eine Hülle mit dem Radius $R_i + l_v$ bzw. durch die Partikeloberfläche $\partial \mathcal{P}_i$ gebildet. Diese Verlet-Hülle stellt die Basis zur Detektierung der Nachbarn von \mathcal{P}_i dar. Denn jene Partikel im System, die diese Hülle penetrieren, sind in die entsprechende Liste aufzunehmen. Dabei wird – um Doppeleinträge zu vermeiden – die Zuordnung nur in eine der Listen der beiden als Nachbar identifizierten Partikel aufgenommen, und zwar in die



Abbildung 5.28: Verlet-Distanz um ein Partikel.

Liste des Partikels mit dem höheren Teilchenindex. So kann man analog zu Gleichung (5.2) als Bedingung zur Aufnahme eines Teilchens in die Verlet-Liste schreiben:

$$g_{\text{Verlet}}^{n} = (R_{i} + l_{v}) + R_{j} - (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}) \cdot \mathbf{n} \quad \begin{cases} \leq 0 & \text{kein Nachbar} \\ > 0 & \text{Nachbar} \end{cases} \begin{cases} j < i & \text{Liste von } \mathcal{P}_{i} \\ j > i & \text{Liste von } \mathcal{P}_{j} \end{cases}$$
(5.102)

Was die Definition des Verlet-Abstands angeht, so bietet es sich an, diese Größe in Abhängigkeit des mittleren Partikelradiusses, der sich aus dem maximalen und minimalen Radius der im System befindlichen Teilchen ergibt, festzulegen [273]:

$$l_{v} = \frac{1}{2} \left(\operatorname{Max} \left[R_{i} \right]_{i=1}^{N} + \operatorname{Min} \left[R_{i} \right]_{i=1}^{N} \right) \alpha_{v} \,.$$
(5.103)

Hierin ist α_v eine frei zu bestimmende Konstante. Sie wird in der vorliegenden Arbeit im Bereich von $\approx 0.05 - 0.10$ gewählt.

Ein weiterer Aspekt, der bei der VL-Methode von Bedeutung ist, ist das Kriterium hinsichtlich der Aktualisierung der Verlet-Liste. Denn es muss hier entsprechend der Änderung der Topologie der Partikelanordnung in gewissen Abständen ein Update der Nachbarschaftszuordnungen vorgenommen werden. Dafür schlagen z. B. Pöschel & Schwager [204] vor, die Liste dann neu aufzubauen, sobald seit ihrer letzten Bestimmung einer der Partikel einen gewissen Anteil der Verlet-Distanz zurückgelegt hat, d. h. wenn gilt:

$$\operatorname{Max}\left[\left|\left|\mathbf{x}_{i}-\mathbf{x}_{i}'\right|\right|\right]_{i=1}^{N} > \beta_{v} l_{v} \,. \tag{5.104}$$

Hierin steht \mathbf{x}'_i für den Ortsvektor eines Partikels, der zum Zeitpunkt der letztmals erstellten Verlet-Liste gespeichert wurde. Der Faktor β_v in (5.104) kann generell zwischen 0.5 - 0.6 gewählt werden, ohne dass ein Partikel als 'Nicht-Nachbar' den Verlet-Bereich eines anderen Partikels vollständig durchdringt. Bei der VL-Methode lassen sich die Kontaktkräfte auf Basis einer bereits erstellten Liste sehr effizient bestimmen. Diesbezüglich weist der Verlet-Algorithmus eine Komplexität von O(N) auf – aber gesamtheitlich betrachtet hat dieser einen entscheidenden Engpass, welcher auf den Aufbau der Liste zurückzuführen ist. Denn die 'jedes-gegen-alle' Nachbarschaftsüberprüfung der Partikel zeichnet sich durch $O(N^2)$ aus. Diese Engstelle reduziert die Effizienz der VL-Methode entscheidend und macht deren Einsatz für größere dynamische Systeme, bei denen die Liste häufig neu erstellt werden muss, unwirtschaftlich. Man kann sagen, dass der gesamte Algorithmus hier letztendlich doch einen Aufwand von $\approx O(N^2)$ besitzt. Um den besagten Nachteil dieser Methode zu kompensieren, wird sie in Bezug auf die Erstellung der Liste oft durch das Grundkonzept des LC-Verfahrens erweitert, zumal der Gesamtalgorithmus in der Kombination theoretisch eine Komplexität von O(N) aufweist, siehe Pöschel & Schwager [204].

Die Grundidee, auf der das LC-Verfahren fundiert, besteht darin, das System anhand eines gleichmäßigen Netzes in $\overline{z}_1 \times \overline{z}_2 \times \overline{z}_3$ Zellen zu unterteilen und in diese dann die Partikel zu sortieren. Damit wird erreicht, dass die entsprechenden Tests zum Aufbau der Nachbarschaftsliste eines Partikels auf jene Teilchen reduziert werden können, die sich in den jeweiligen 26 Nachbarzellen des betrachteten Partikels und in dessen eigener Zelle befinden. In Anbetracht, dass die Zuordnung der Partikel in die Zellen mit einem Aufwand von O(N) verbunden ist, kann die Verlet-Liste auf diese Weise auch bei größeren Systemen effizient erstellt werden. Abb. 5.29(a) zeigt eine Darstellung eines 3D LC-Gitters,



Abbildung 5.29: Linked-Cell-Verfahren: (a) Indizierung und (b) ein Querschnitt des Gitters.

das aus $10 \times 5 \times 4$ gleichen kubischen Zellen besteht. Im Hinblick auf die Festlegung der Kantenlänge d_{Δ} der Basiszelle ist zu beachten, dass sie größer als das größte Partikel im System ist (siehe Abb. 5.29(b)), sodass die Partikel immer nur maximal in eine Reihe von Nachbarzellen hineinreichen können. In der vorliegenden Arbeit wird die Kantenlänge der Zellen wie folgt festgelegt: $d_{\Delta} = 2 \operatorname{Max} [R_i]_{i=1}^N + l_v$.



Abbildung 5.30: Datenstruktur des Linked-Cell-Verfahrens an einem 2D Beispiel.

Ein explizit zu erwähnender Aspekt ist in diesem Zusammenhang die Indizierung der Zellen. Sie muss strukturiert erfolgen, da auf die Zellen bzw. auf deren Partikel im Laufe einer Simulation wegen des regelmäßigen Updates der Verlet-Liste oft Bezug zu nehmen ist. Wie in Abb. 5.29(a) angedeutet, werden die LC-Zellen des Gitters hier in Fortran-Manier indiziert. In dem Fall kann die Zellennummer Z für ein gegebenes Trippel (z_1, z_2, z_3) durch die nachstehende Beziehung ermittelt werden:

$$Z = Z_{(z_1, z_2, z_3)} = z_1 + \overline{z}_1(z_2 - 1) + \overline{z}_1 \overline{z}_2(z_3 - 1).$$
(5.105)

Beispielhaft soll im Folgenden die in Abb. 5.29(b) zu sehende Zelle $Z_{(5,3,2)} = 75$ näher betrachtet werden. Wenn nun die Nachbarn eines Partikels dieser Zelle zu ermitteln sind, so kann die entsprechende Suche auf die in den Zellen: 14, 24, 34, 64, 74, 84, 114, 124, 134, 15, 25, 35, 65, 75, 85, 115, 125, 135, 16, 26, 36, 66, 76, 86, 116, 126 und 136 enthaltenen Partikel beschränkt werden. Als Kriterium hinsichtlich der Sortierung von $\mathcal{P}_i \{i = 1, \ldots, N\}$ in eine Zelle dient die Position seines Massenmittelpunktes $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i(x_1, x_2, x_3)$. Das entsprechende Zuordnungskriterium lautet wie folgt:

$$z_{1} = 1 + \operatorname{int}\left(\frac{x_{1} - x_{1,\min}^{\mathrm{LC}}}{d_{\Delta}}\right), \ z_{2} = 1 + \operatorname{int}\left(\frac{x_{2} - x_{2,\min}^{\mathrm{LC}}}{d_{\Delta}}\right), \ z_{3} = 1 + \operatorname{int}\left(\frac{x_{3} - x_{3,\min}^{\mathrm{LC}}}{d_{\Delta}}\right),$$

wobei $x_{i,\min}^{\text{LC}}$ {i = 1, 2, 3} die Koordinaten des Referenzpunktes des LC-Gitters in Bezug auf



Abbildung 5.31: LC-Methode beim Partikel-Wand-Kontakt.

den Koordinatenursprung \mathcal{O} sind. Des Weiteren stellt $int(\cdot)$ den Integer-Operator dar. Die Zellzuordnungen werden vor der Aktualisierung der Verlet-Liste mit den entsprechenden Zeigervektoren berechnet und im Hauptspeicher des Rechners abgelegt bzw. für die Verlet-Routine zur Verfügung gestellt. Die in dieser Arbeit dafür verwendete Datenstruktur der Speichervektoren wird in Abb. 5.30 an einem 2D Beispiel illustriert. Mit dieser Datenstruktur können die Indizes der potentiellen Nachbarpartikel eines betrachteten Teilchens zum Aufbau seiner Liste relativ einfach bestimmt werden.

Kontaktsuche für den Partikel-Wand-Kontakt

Im Hinblick auf die Behandlung von größeren Partikelsystemen ist es erforderlich, dass nicht nur der Aufwand für die Kontaktsuche bezüglich der Partikel-Partikel-Interaktion mit der Anzahl der Partikel linear einhergeht, sondern dass eine lineare Beziehung auch in Bezug auf die Partikel-Wand-Interaktion gegeben ist. Der Lösungsansatz, der für die Handhabung dieser Problematik in der vorliegenden Arbeit gewählt wird, entspricht im Großen und Ganzen dem Ansatz, der bei der Partikel-Partikel-Kontaktsuche zum Einsatz kommt. Analog zur VL-Methode wird in dem nun betrachteten Fall eine Hülle um die einzelnen Wandelemente des Partikelsystems gebildet. Genauer gesagt, wird hier zu beiden Seiten eines Elements \mathcal{T} mit dem senkrechten Abstand l_w ein Bereich aufgespannt, der zur Erstellung seiner Nachbarschaftsliste maßgeblich ist. Jene Partikel, die in diesen Bereich eindringen, stellen etwaige Kontaktpartner der Wand dar und werden in einer wandspezifischen Liste gespeichert. Das Kriterium zur Aufnahme eines Partikels in die Liste von \mathcal{T} kann auf Grundlage der Beziehung in (A.1) wie folgt angegeben werden:

$$g_{\text{Verlet},w}^{n} = R_{i} + l_{w} - |h| = R_{i} + l_{w} - |\mathbf{r}_{p} \cdot \mathbf{n}| \quad \begin{cases} \leq 0 \text{ kein Nachbar} \\ > 0 \text{ Nachbar} \Rightarrow \text{Liste von } \mathcal{T}. \end{cases}$$
(5.106)

Um den Aufwand für den Aufbau der Liste des Wandelements zu reduzieren, bietet es sich hier wiederum an, auf die LC-Methode zurückzugreifen, sodass nur jene Partikel auf Nachbarschaft überprüft werden müssen, die sich in der Nähe von \mathcal{T} befinden. Eine illustrative Darstellung hierzu findet sich in Abb. 5.31. Die maßgeblichen Zellen für das auf der linken Seite dieser Abbildung angeführte Wandelement \mathcal{T} sind rechts dunkel unterlegt angedeutet. Diese bilden um die Wandeckpunkte k_1, k_2 und k_3 einen um eine Gitterreihe erweiterten Quader.

Kapitel 6: FEM-DEM-Kopplung für die Fluid-Partikel-Wechselwirkung

Nachdem in den beiden vorangegangenen Kapiteln die FEM und DEM zur Behandlung der Fluidphase bzw. der dispersen Phase vorgestellt wurden, soll in diesem Kapitel die Konzentration der Ausführungen auf die Problematik der Kopplung dieser beiden numerischen Verfahren gerichtet sein. Die Kopplung erfolgt hier im Kontext der Direkten Numerischen Simulation (DNS) bzw. des 'Fictitious Domain'-Ansatzes (FD), wobei die Fluid-Partikel-Wechselwirkung auf Basis einer Vier-Wege-Kopplung auf der Partikelskala beschrieben wird.

Es werden in der Literatur eine Reihe von Ansätzen vorgeschlagen, um die Fluid-Partikel-Interaktion im Rahmen der FD-Methode wiederzugeben. Im Folgenden wird diesbezüglich ein kurzer Überblick gegeben. Nach dem Überblick soll dann das Augenmerk auf die in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Verfahren zur Handhabung der Fluid-Partikel-Wechselwirkung gelenkt werden. Die Verifikation der nachstehenden Ausführungen erfolgt hier anhand einer Reihe von Testsimulationen. Diese werden am Ende des Kapitels angeführt.

6.1 Allgemeines

Das Charakteristische bei FD-Verfahren ist, dass bei ihnen das gesamte Strömungsgebiet durchgehend – also einschließlich der Festkörpergebiete – mit einem Eulerschen Netz diskretisiert wird. Dabei werden die Körper als fiktive Objekte betrachtet, die mit Fluid gefüllt sind. Da diese mit dem im Raum fest positionierten Netz nicht verbunden sind, können sie gewissermaßen durch das Netz hindurch gleiten. Was deren Einfluss auf das Fluidfeld angeht, so wird anhand von Restriktionen (Haft- oder 'no-slip' Randbedingungen) in den Strömungsgleichungen sichergestellt, dass das Fluid an der Körperoberfläche – je nach FD-Methode auch im Inneren des Körpers – die entsprechenden Geschwindigkeiten des Objekts annimmt. Man erspart sich bei diesem Ansatz die Problematik der Neuvernetzung des Systems, wie sie der in Kapitel 3.1 angesprochenen ALE-Methode inhärent ist.

Bei den FD-Verfahren bildet die 'Immersed Boundary Method' (IBM) mit ihren Varianten eine der Hauptgruppen. Diese Methode geht auf die Veröffentlichung von Peskin [198] zurück, in der damit die Fluid-Struktur-Interaktion von elastisch verformbaren Herzklappen beschrieben wird. Um den Einfluss der Struktur auf das Fluid abzubilden, erweitert Peskin [198] die Impulsgleichung des Fluids um einen Quellterm. Dieser besteht aus einer Kraftfunktion und beschreibt an expliziten Lagrangeschen Markerpunkten auf der Struktur die auf das Fluid wirkende Volumenkraft durch die Herzklappen. Angesichts dessen, dass die Markerpunkte und Netzknoten bei der IBM nicht konform sind, wird in dieser Arbeit zur Überführung der an jedem charakteristischen Punkt der Struktur berechneten Volumenkraft auf die entsprechenden Knoten des Eulerschen Netzes eine regularisierte Dirac-Funktion eingesetzt. Für eine detaillierte Abhandlung der IBM sei an dieser Stelle auf Mittal & Iaccarino [181] und Peskin [199] verwiesen.

Eine grundlegende Erweiterung dieser Methode ist die 'IBM-Direct Forcing Approach' (IBM-DFA) [59]. Hier wird die über den Quellterm vorgenommene Restriktion auf die Impulsgleichung der Strömung nicht über eine explizit formulierte Kraftfunktion vorgenommen, sondern es werden die Fluidgeschwindigkeiten an den betreffenden Netzknoten über einen konsistent ermittelten Quellterm direkt angesprochen – und zwar so, dass die entsprechenden Fluidteilchen die gewünschte bzw. die lokale Geschwindigkeit des Körpers annehmen. Anwendungen des IBM-DFA zur Beschreibung von partikelbehafteten Strömungen finden sich u.a. in [18, 64, 172, 258, 271]. Ausgehend von der Grundidee der IBM entwickelte die Gruppe um W. K. Liu die 'Immersed Finite Element Method' (IFEM) [156, 283]. Bei diesem Modellansatz werden sowohl das Strömungsfeld als auch die Partikel im Rahmen der FEM beschrieben. So erlaubt dieser Zugang, neben starren auch deformierbare Partikel in der Fluidströmung zu beschreiben. Zum Abschluss sei hier angemerkt, dass bei der IBM und ihren Varianten die explizit gekoppelten Impulsgleichungen der Phasen nacheinander – also sequentiell – gelöst werden.

Eine andere Möglichkeit zur Beschreibung von beweglichen Körpern in einer Strömung bietet die 'Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain' Methode (DLM/FD). Die Nebenbedingung dafür, dass das von einem Körper umrandete Fluid den Bewegungen dieses Objekts folgt, wird bei der DLM/FD-Methode durch Lagrange-Multiplikatoren erwirkt. Dabei werden die Phasenbewegungen anhand einer vollständig implizit gekoppelten Impulsgleichung beschrieben. Entsprechend stellen die Kräfte aus der Phasenwechselwirkung hier innere Kräfte dar und können letztlich aus der resultierenden Impulsformulierung eliminiert werden, sodass die Berechnung der auf die umströmten Körper wirkenden Strömungskräfte entfällt. Die ersten Anwendungen der DLM/FD-Methode hinsichtlich der Simulation von Fluid-Partikel-Problemstellungen – aber auch Aufgabenstellungen mit Starrkörpern, die anderweitig geformt sind – gehen auf die Arbeiten von Glowinski et al. [81, 82, 83] zurück. Die DLM/FD erfordert die Lösung eines phasenübergreifenden impliziten Gleichungssystems, das sowohl stark gekoppelt als auch nichtlinear ist. Mithin erhält man hier für Mehrphasenströmungen mit einer relativ hohen Partikelanzahl konsequenterweise große gekoppelte Gleichungssysteme, die sehr aufwendig und schwierig zu lösen sind. Weiterentwicklungen der ursprünglichen DLM/FD finden sich u. a. in [51, 195, 196, 264]. Eine Erweiterung der DLM/FD zur Beschreibung der Umströmung von flexiblen Strukturen bieten Yu [282] und Baaijens [10].

Eine weitere Methode, die neben der IBM und DLM/FD in diesem Zusammenhang zu erwähnen ist, wird in Duchanoy & Jongen [56] präsentiert. Der in dieser Veröffentlichung vorgeschlagene Ansatz bildet den Ausgangspunkt der Arbeiten von Münster *et al.* [187], Wan & Turek [268, 269] und Avci & Wriggers [9]. Das Verfahren soll hier entsprechend Wan & Turek [268] als 'Fictitious Boundary Method' (FBM) bezeichnet werden. Bei der FBM sind die Erhaltungsgleichungen der beiden Phasen explizit gekoppelt und werden sequentiell gelöst – wie bei der IBM. Aber in diesem Fall wird die Phasenkopplung in Bezug auf das Strömungsfeld in der Form vorgenommen, dass die Geschwindigkeiten der Festkörper als zusätzliche 'no-slip' Dirichlet-Randbedingungen in die Systemgleichungen des Fluids eingebracht werden. Diese Randbedingungen werden z.B. in Wan & Turek [268] jeweils nur am Rand des einzelnen Körpers und in Duchanoy & Jongen [56] über dessen gesamtes Gebiet angesetzt.

In der vorliegenden Arbeit wird zur Kopplung der Phasen ein expliziter Ansatz vorgezogen. Denn die Prämisse liegt hier in der Betrachtung von größeren Partikelsystemen und bei einer sequentiellen Lösung der Impulsformulierungen ist die Komplexität des Gesamtgleichungssystems nahezu unabhängig von der Anzahl der in der Strömung befindlichen Partikel. Im Folgenden soll die in dieser Dissertation zum Einsatz kommende Vier-Wege-Kopplung, die im Rahmen der FBM erfolgt, beschrieben werden.

6.2 Fictitious Boundary Method

Die Grundidee der FBM besteht darin, die Navier-Stokes-Gleichungen (4.1)-(4.5) durch Hinzunahme von fiktiven partikelbezogenen 'no-slip' Dirichlet-Randbedingungen zu erweitern und damit den Einfluss der Partikel auf das Fluid zu erfassen. Dabei kann die entsprechende Randbedingung, die für ein Partikel \mathcal{P}_i durch

$$\mathbf{v}_F(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_{P_i} + \boldsymbol{\omega}_{P_i} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{P_i})$$
(6.1)

gegeben ist, entweder für den gesamten Körper $\mathbf{x} \in \Omega_{P_i}$ oder nur für dessen Oberfläche $\mathbf{x} \in \Omega_{\partial P_i}$ formuliert werden – und zwar jeweils explizit oder implizit. Eine explizite Version dieser Methode findet sich z. B. in Takiguchi *et al.* [235] und Kajishima *et al.* [129], wo die Fluidgeschwindigkeiten innerhalb der Partikel nach jedem Zeitschritt nachträglich an die Partikelgeschwindigkeiten angepasst werden. Bei einem impliziten Ansatz werden die 'no-slip' Randbedingungen indessen direkt in die diskretisierten Strömungsgleichungen eingebracht und gehen daher unmittelbar in die Lösung der Strömungsgeschwindigkeiten mit ein. Solch ein impliziter Ansatz wird beispielsweise von Duchanoy & Jongen [56] für $\mathbf{x} \in \Omega_{P_i}$ und von Wan & Turek [268] für $\mathbf{x} \in \Omega_{\partial P_i}$ verwendet. In der vorliegenden Arbeit wird mit einer kleinen Abweichung im Grunde der Ansatz entsprechend Wan & Turek [268] verfolgt. Die Abweichung ist dadurch gekennzeichnet, dass im Gegensatz zu Wan & Turek [268] hier noch die Fluidgeschwindigkeiten im Inneren der Partikel explizit aktualisiert werden.

Bevor die algorithmischen Details der FBM näher betrachtet werden, sollen im Folgenden zuerst die Grundgleichungen, die im Rahmen dieser Methode zur Behandlung von Fluid-Partikel-Strömungen zum Einsatz kommen, der übersichtlichkeitshalber phasenspezifisch zusammengefasst angeführt werden:

Partikelphase

Schwerpunktsatz:	$m_i \left(1 - \frac{\rho_F}{\rho_i} \right) \mathbf{b} + \mathbf{F}_i = m_i \frac{\mathrm{d} \mathbf{v}_i}{\mathrm{d} t}$	für	${\cal P}_i$
Momentensatz:	$oldsymbol{\Theta}_i\cdot\dot{oldsymbol{\omega}}_i+oldsymbol{\omega}_i imes(oldsymbol{\Theta}_i\cdotoldsymbol{\omega}_i)=\mathbf{M}_i^{(\mathcal{M})}$	für	${\cal P}_i$
Anfangsbed.:	$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i,0},\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_{i,0},oldsymbol{\omega}_i = oldsymbol{\omega}_{i,0}$	für	${\cal P}_i$

Fluidphase

Impulssatz:	$\frac{\partial \mathbf{v}_F}{\partial t} + \mathbf{v}_F \cdot \nabla \mathbf{v}_F - \nu \Delta \mathbf{v}_F + \nabla p = \mathbf{b}$	in	Ω		
Massenerhaltung:	$\nabla \cdot \mathbf{v}_F = 0$	in	Ω		
Anfangsbed.:	$\mathbf{v}_F = \mathbf{v}_{F,0}$	in	Ω_0		
Neumann-R.B.:	$(-p 1 + \nu \nabla \mathbf{v}_F) \cdot \mathbf{n} = \overline{\mathbf{t}}$	auf	$\Gamma_{\rm N}$		
Dirichlet-R.B.:	$\mathbf{v}_F = \overline{\mathbf{v}}_F$	auf	$\Gamma_{\rm D}$		
	$\mathbf{v}_F = \mathbf{v}_i +$	$oldsymbol{\omega}_i imes 0$	$(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$	in Ω_{δ}	∂P_i

Das charakteristische und vorteilhafte an der FBM ist, dass bei ihr die diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen der Einphasenströmung (4.41) ihre Struktur beibehalten. Denn in dieses Gleichungssystem müssen – zusätzlich zu den standardmäßigen Dirichlet-Randbedingungen des Modells auf $\Gamma_{\rm D}$ (4.4) – lediglich nur die fiktiven Partikelrandbedingungen in $\Omega_{\partial P_i}$ eingebracht werden.

Der Algorithmus, welcher zur Lösung der Grundgleichungen der hier betrachteten Fluid-Partikel-Problemstellungen zum Einsatz kommt, besteht aus folgenden Schritten:

FBM-Algorithmus

- (i) Gegeben sind die Positionen \mathbf{x}_i^n und die Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i^n und $\boldsymbol{\omega}_i^n$ der Partikel $\mathcal{P}_i \{i = 1, \dots, N\}$ zum Zeitpunkt t^n .
- (ii) Setze in Ω_h die 'no-slip' Randbedingungen für $\Omega_{\partial P_i}$.
- (iii) Löse für den Zeitpunkt t^{n+1} die Navier-Stokes-Gleichungen in Ω_h .
- (iv) Berechne die Strömungskräfte der Partikel.
- (v) Berechne die Kontaktkräfte der Partikel.
- (vi) Löse für den Zeitpunkt t^{n+1} die Newton-Euler-Gleichungen der Partikel und erhalte die Positionen \mathbf{x}_i^{n+1} und die Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i^{n+1} und $\boldsymbol{\omega}_i^{n+1}$.
- (vii) Aktualisiere die Strömungsgeschwindigkeiten in $\Omega_{P_i} \setminus \Omega_{\partial P_i}$ und gehe zu Schritt (i) über.

6.3 Algorithmische Details

Elementzugehörigkeit eines Punktes

Eine der zentralen Aufgaben der Fluid-Partikel-Kopplung besteht darin, für partikelspezifische Punkte jene Fluidelemente zu bestimmen, in denen sie sich zum aktuellen Zeitpunkt befinden. Ein spezifischer Punkt P^* kann z. B. der Massenmittelpunkt eines Partikels oder ein Lagrangescher Markerpunkt auf einer Partikeloberfläche sein. Das Element, das einen aktuell betrachteten Punkt P^* enthält, soll im Folgenden als dessen Masterelement bezeichnet werden. Die Ermittlung eines Masterelements erfolgt im Grunde in drei Schritten:

- (i) Elementeinteilung. Jedes Element des Strömungsgebietes $\Omega_h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e$ wird anhand der geometrischen Lage seines Mittelpunkts einer LC-Zelle des DEM-Systems zugeordnet. Für die Handhabung der dabei resultierenden Daten bietet sich die entsprechende Übernahme der in Abb. 5.30 skizzierten Datenstruktur an. Bei Verwendung eines Eulerschen Strömungsnetzes braucht diese Elementzuweisung nur zu Beginn der Simulation durchgeführt zu werden. An dieser Stelle soll noch explizit erwähnt werden wenngleich der folgende Aspekt durch die Modellierung der Fluid-Partikel-Interaktion auf der Partikelskala unmittelbar erfüllt wird –, dass die Zellen wesentlich größer als die Fluidelemente sein müssen. Wenn man nun das Masterelement eines Punktes $P^* \in \mathcal{P}_i$ sucht, so brauchen nur die Elemente näher betrachtet zu werden, die den für die Nachbarschaftssuche des Partikels \mathcal{P}_i relevanten 27 LC-Zellen zuvor zugewiesen wurden.
- (ii) **Bounding-Box-Test.** Zur Bestimmung des Masterelements von P^* ist es sinnvoll, vor dem aufwendigen, genauen Skalarprodukt-Test an einem Element Ω_e – dieser Test wird unten in Punkt (iii) gezeigt – noch einen entsprechend einfachen, groben Zwischentest auszuführen. Und zwar soll mit solch einem Vorabtest nur schnell überprüft werden, ob das betrachtete Element überhaupt als potentielles Masterelement für P^* infrage kommt, ohne es detailliert zu untersuchen. Als Vorabtest eignet sich der Bounding-Box-Test. Er ist in Abb. 6.1(a) aus Darstellungsgründen nur für den 2D Fall illustriert. Bei diesem Test erstellt man um das jeweilige Element Ω_e unter Hinzunahme seiner minimalen und maximalen Eckpunktkoordinaten einen Hüllquader bzw. eine Hüllbox. Anschließend wird dann eine Überprüfung vorgenommen, ob der Punkt P^* mit seinem Ortsvektor $\mathbf{x}_{P^*} = \mathbf{x}_{P^*}(x_1, x_2, x_3)$ sich innerhalb oder außerhalb der Box befindet. Wenn die Koordinaten von P^* die folgenden Bedingungen nicht erfüllen:

$$x_{1,\min} \le x_1 \le x_{1,\max}, \quad x_{2,\min} \le x_2 \le x_{2,\max}, \quad x_{3,\min} \le x_3 \le x_{3,\max}, \quad (6.2)$$

so liegt dieser Punkt außerhalb der Box und Ω_e kann als Masterelement von P^* ausgeschlossen werden. Für den Fall, dass diese drei Forderungen gültig sind, ist dann anhand eines genaueren, aufwendigeren Skalarprodukt-Tests zu überprüfen, ob die Zugehörigkeit $P^* \in \Omega_e$ gegeben ist. Dieser Test ist insofern erforderlich, als die Elementränder zumeist nicht konform mit den Rändern der Box sind (siehe Abb. 6.1(a)).

(iii) Skalarprodukt-Test. Ob letztlich Ω_e das Masterelement von P^* ist oder nicht $(P^* \in \Omega_e \text{ bzw. } P^* \notin \Omega_e)$, lässt sich mittels eines Skalarprodukt-Tests ermitteln. In Abb. 6.1(b) ist dieser Test für das 2D Beispielelement skizziert. Die dabei angedeuteten Seitenmitten entsprechen bei einem 3D Element folgerichtig den Mittelpunkten der Elementseitenflächen Γ_j^m , wobei im Falle des \tilde{Q}_1/Q_0 -Elements gilt: $\Gamma_j^m \{j = 1, \ldots, 6\}$. Zur Durchführung der Untersuchung sind hier im ersten Schritt die nach außen orientierten Normaleneinheitsvektoren \mathbf{n}_{Γ_j} der Seitenflächen Γ_j und die von P^* aus auf Γ_j^m zeigenden Vektoren \mathbf{r}_{Γ_j} für $j = 1, \ldots, 6$ zu bestimmen (siehe

Abb. 6.1(b)):

$$\mathbf{r}_{\Gamma_i} = \mathbf{x}_{\Gamma_i^m} - \mathbf{x}_{P^*} \,. \tag{6.3}$$

Führt man nun im zweiten Schritt über alle Elementflächen von Ω_e eine Schleife aus und berechnet dabei das Skalarprodukt $\mathbf{r}_{\Gamma_j} \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_j}$, so liegt der Punkt P^* im Element, wenn keiner der Ergebnisse einen negativen Wert besitzt:

 $\mathbf{r}_{\Gamma_i} \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_i} \ge 0 \quad \text{für} \quad j = 1, \dots, 6 \quad \Rightarrow \quad P^* \in \Omega_e \,. \tag{6.4}$

Ist dies nicht der Fall, dann kann man daraus schließen, dass Ω_e nicht das Masterelement von P^* ist.



Abbildung 6.1: Illustrative Darstellung des (a) Bounding-Box-Tests und (b) Skalarprodukt-Tests für den 2D Fall.

Elementklassifizierung

Im aktuellen Zeitschritt ist zur Festlegung der fiktiven Randbedingungen und zur Berechnung der Strömungskräfte auf die Partikel zum einen die Kenntnis davon erforderlich, welche Elemente von welchen Partikeln überlagert werden, und zum anderen benötigt man hier die Information, welche dieser Elemente sich am Rand des zugehörigen Partikels befinden. Insofern ist bei der FBM eine dementsprechende Klassifizierung für alle Elemente des Strömungsgebiets $\Omega_h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e$ vorzunehmen. Dafür wird in dieser Arbeit ein Ansatz verfolgt, bei dem ein Element Ω_e gemäß der Phasenzugehörigkeit seines geometrischen Mittelpunkts \mathcal{M}_e einer Klasse zugewiesen wird. Hinsichtlich der besagten Klassifizierung sämtlicher Elemente in Ω_h ist zu erwähnen, dass der entsprechende Prozess hier in zwei algorithmischen Makroschritten vorgenommen wird.

Im ersten Schritt werden all die Elemente, deren Mittelpunkt \mathcal{M}_e sich innerhalb eines Partikels \mathcal{P}_i befindet, mit dem jeweiligen Teilchenindex 'i' versehen. Ein so gekennzeichnetes Element stellt im gewissen Sinne ein Partikelelement Ω_{P_i} dar. Analog dazu kann man von einem Fluidelement Ω_{F_e} sprechen, wenn \mathcal{M}_e dem Fluidgebiet $\Omega_F := \Omega_h \backslash \Omega_{P_i} \{i =$ $1, \ldots, N$ angehört. Diese Elemente erhalten dann den neutralen Index '0'. Es gilt somit:

$$||\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{M_{e}}|| - R_{i} \begin{cases} \leq 0 \implies \text{Index } i \text{ für } \mathbf{x}_{M_{e}} \in \Omega_{P_{i}} \\ > 0 \implies \text{Index } 0 \text{ für } \mathbf{x}_{M_{e}} \in \Omega_{F}. \end{cases}$$
(6.5)

Dabei ist \mathbf{x}_{M_e} der Ortsvektor zum Mittelpunkt \mathcal{M}_e des Elements Ω_e . Um Rechenkosten zu senken, bietet es sich an, zu Beginn der Klassifizierung den Index für alle Elemente vorweg mit '0' zu besetzen, sodass das Kriterium (6.5) nur für die Elemente ausgewertet werden muss, die sich in den für das Partikel \mathcal{P}_i relevanten 27 LC-Zellen befinden.

Im zweiten Schritt wird dann eine Differenzierung zwischen den einzelnen Elementen einer Elementgruppe 'i' vorgenommen. Dabei wird in Bezug auf \mathcal{P}_i unter Randele-



Abbildung 6.2: Elementklassifizierung

menten und inneren Elementen unterschieden. Hierfür wird in einer Schleife überprüft, ob ein Element dieser Gruppe einen Nachbar besitzt, der einer anderen als der momentan betrachteten Gruppe zugeordnet ist – also der Fluidgruppe oder der Elementgruppe eines anderen Partikels. Liegt dieser Fall vor, so erhält das jeweilige Element den Randelementindex '-i', siehe Abb. 6.2. Man kann an dieser Stelle zusammenfassend Folgendes festhalten:

Elementindex
$$\begin{cases} i & \text{für } \mathbf{x}_{M_e} \in \Omega_{P_i} \\ -i & \text{für } \mathbf{x}_{M_e} \in \Omega_{P_i} \lor \mathbf{x}_{M_e} \in \Omega_{\partial P_i} \\ 0 & \text{für } \mathbf{x}_{M_e} \in \Omega_F. \end{cases}$$
(6.6)

Strömungskräfte

In Entsprechung zur Definition der Oberflächenkraft (3.24) und des Moments (3.31) aus Nahwirkung kann man in diesem Zusammenhang für die auf ein Partikel \mathcal{P}_i wirkenden Fluidkräfte die beiden folgenden Beziehungen angeben:

$$\mathbf{F}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma \quad \mathrm{und} \quad \mathbf{M}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{r} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma \,, \tag{6.7}$$

wobei **r** der Positionsvektor eines Punkts auf der Partikeloberfläche $\partial \mathcal{P}_i$ in Bezug auf den Massenmittelpunkt \mathcal{M}_i ist. Bei der DNS werden diese Kräfte ohne Zuhilfenahme von semiempirischen Beiwerten direkt aus dem Strömungsfeld um die Partikeloberfläche ermittelt. In der vorliegenden Arbeit wurden zu ihrer Berechnung zwei unterschiedliche Herangehensweisen implementiert und getestet. Die dafür zugrunde gelegten Ansätze sollen nachstehend erläutert werden.

Erster Ansatz. Um in einem Zeitschritt die auf das Partikel \mathcal{P}_i wirkende Fluidkraft

zu bestimmen, werden beim ersten Konzept sogenannte Lagrangesche Punkte oder Kraftpunkte auf der Oberfläche $\partial \mathcal{P}_i$ generiert, wenn Schritt (iv) im FBM-Algorithmus erreicht wird.¹ Die Idee besteht bei diesem Ansatz darin, an jedem Kraftpunkt die gemäß dessen Einzugsbereich gewichtete Fluidkraft zu berechnen und die einzelnen Kraftbeiträge über $\partial \mathcal{P}_i$ aufzusummieren. Hinsichtlich der Konstruktion dieser Quasi-Integrationspunkte ist es wünschenswert, dass sie möglichst einheitlich auf der Partikeloberfläche verteilt sind, sodass die Fluidspannungen über $\partial \mathcal{P}_i$ gleichmäßig erfasst werden können. Für Arbeiten, in denen man sich intensiv damit auseinandersetzt, auf einer Partikeloberfläche möglichst äquidistante Punkte und Teilflächen zu konstruieren, siehe die Beiträge von Saff & Kuijlaars [214] und Leopardi [157] (siehe diesbezüglich auch Uhlmann [258]).

Zur Berechnung der Fluidkräfte wird in der vorliegenden Arbeit die Lebedev-Integration [151] als LP-Ansatz verwendet. Diese Integrationsmethode ist ein numerisches Verfahren, anhand dessen das Integral einer Funktion über die Partikeloberfläche $\partial \mathcal{P}_i$ bestimmt werden kann. Dabei hat man die Möglichkeit unter verschiedenen Integrationsordnungen auszuwählen. Die Verteilung der Lebedevschen Integrationspunkte N_L bzw. der Lagrangeschen Kraftpunkte auf $\partial \mathcal{P}_i$ ist beispielshalber für $N_L = 302$ in Abb. 6.3(a) dargestellt. Die Auswertung der Integrale in (6.7) wird hier wie folgt vorgenommen:

$$\mathbf{F}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma = \sum_{k=1}^{N_{L}} (\mathrm{d}\mathbf{F})_{k} = J \sum_{k=1}^{N_{L}} w_{k} \mathbf{t}_{k}$$
(6.8)

$$\mathbf{M}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{r} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma = \sum_{k=1}^{N_{L}} \mathbf{r}_{k} \times (\mathrm{d}\mathbf{F})_{k} = J \sum_{k=1}^{N_{L}} \mathbf{r}_{k} \times w_{k} \mathbf{t}_{k} \,, \tag{6.9}$$

wobei gilt: $J = 4\pi R_i^2$ und $\sum_{k=1}^{N_L} w_k = 1$. Darin sind \mathbf{r}_k der Ortsvektor von \mathcal{M}_i zum k-ten Lebedev-Punkt auf der Partikeloberfläche, w_k die Integrationswichtung an diesem Punkt und $\mathbf{t}_k = (\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{n})_k$ der entsprechende Spannungsvektor. Ferner ist $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = (1/\Omega_e) \int \boldsymbol{\sigma} d\Omega_e$ der volumengemittelte Fluidspannungstensor des Elements, in dem sich der besagte Punkt k befindet.

Zweiter Ansatz. Vom eben betrachteten LP-Ansatz unterscheidet sich das Konzept des zweiten Ansatzes dadurch, dass in dem Fall die Partikeloberfläche zur Berechnung der in (6.7) definierten Fluidkräfte durch die äußeren Elementflächen der Partikelelemente $\Omega_{\partial P_i}$ approximiert wird.² D. h., die Partikeloberfläche wird hier diesbezüglich gemäß dem Feinheitsgrad der FEM-Diskretisierung stufenweise abgebildet, siehe Abb. 6.3(b) für eine illustrative Darstellung. Bei dieser Strategie werden die auf ein Partikel wirkenden Fluidkräfte sozusagen über die Stufenflächen ermittelt und dann jeweils am Mittelpunkt der entsprechenden Elementseitenfläche aufgebracht. Die Summation der Kräfte über die

 $^{^{1}}$ Dieser auf <u>L</u>agrangeschen <u>P</u>unkten fundierende Ansatz wird im Folgenden als LP-Ansatz bezeichnet.

²Da bei diesem Konzept die Berechnung der Fluidkräfte über <u>E</u>lement<u>f</u>lächen erfolgt, soll der Ansatz hier die Bezeichnung EF-Ansatz erhalten.



Abbildung 6.3: (a) Verteilung der Lebedevschen Integrationspunkte für $N_L = 302$ (LP-Ansatz) und (b) illustrative Darstellung der zur Berechnung der Fluidkräfte eines Partikels zugrunde liegenden Diskretisierung (EF-Ansatz).

betreffenden Elementflächen $\overline{\Gamma}_j \{ j = 1, \dots, N_{\Gamma} \}$ liefert letztlich \mathbf{F}_i^f und \mathbf{M}_i^f , sodass gilt:

$$\mathbf{F}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma = \sum_{j=1}^{N_{\Gamma}} (\mathrm{d}\mathbf{F})_{j} = \sum_{j=1}^{N_{\Gamma}} \mathbf{t}_{j}\overline{\Gamma}_{j}$$
(6.10)

$$\mathbf{M}_{i}^{f} = \int_{\partial \mathcal{P}_{i}} \mathbf{r} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}\Gamma = \sum_{j=1}^{N_{\Gamma}} \mathbf{r}_{\Gamma_{j}} \times (\mathrm{d}\mathbf{F})_{j} = \sum_{j=1}^{N_{\Gamma}} \mathbf{r}_{\Gamma_{j}} \times \mathbf{t}_{j} \overline{\Gamma}_{j} \,. \tag{6.11}$$

Dabei ist \mathbf{r}_{Γ_j} der Positionsvektor von \mathcal{M}_i auf $\overline{\Gamma}_j^m$ und \mathbf{t}_j steht für den gemittelten Spannungsvektor des Fluidelements Ω_e , das mit dem Partikelrandelement $\Omega_{\partial P_i}$ die gemeinsame Elementfläche $\overline{\Gamma}_j$ besitzt.

Kopplungsbedingung

Für das Strömungsfeld wurde die Starrkörperbewegung des Partikels bereits mit Gleichung (6.1) als Kopplungsbedingung eingeführt. Bezogen auf das diskretisierte Strömungsgebiet soll nun auf die Umsetzung dieser Relation näher eingegangen werden. Dies ist nämlich erforderlich, da hier bei der Anwendung der 'no-slip' Bedingung für die Partikelrandelemente $\Omega_{\partial P_i}$ eine Differenzierung der Geschwindigkeitsknoten $v_F^{k_v}$ vorgenommen wird [9]. Und zwar wird dabei unter Hinzunahme der kontinuierlichen Partikelgeometrie zwischen innerhalb und außerhalb des Partikels liegenden Knoten unterschieden, also zwischen $k_v \in \mathcal{P}_i$ bzw. $k_v \notin \mathcal{P}_i$.

Wenn für den Knoten k_v von $\Omega_{\partial P_i}$ die Zugehörigkeit $k_v \in \mathcal{P}_i$ vorliegt, so erhält dieser die folgende gewichtete Interpolation zwischen dem Fluid und dem Partikel:

$$\mathbf{v}_{F}^{k_{v}} = (1 - \phi_{\Gamma}) \, \mathbf{v}_{F}^{k_{v}} + \phi_{\Gamma} \left(\mathbf{v}_{P_{i}} + \boldsymbol{\omega}_{P_{i}} \times \mathbf{r}_{k_{v}} \right). \tag{6.12}$$

Dabei ist \mathbf{r}_{k_v} der Vektor von \mathcal{M}_i nach k_v und ϕ_{Γ} stellt den Wichtungsfaktor dar. Dieser Faktor gibt den im Partikel liegenden Flächenanteil derjenigen Elementseite wieder, die dem Knoten k_v zugeordnet ist. Man kann ihn näherungsweise dadurch bestimmen, in dem man zuerst die entsprechende Seitenfläche in Teilflächen unterteilt und anschließend deren Phasenzugehörigkeit ermittelt. Sind die Teilflächen den beiden Phasen zugewiesen, so lässt sich der gesuchte Flächenanteil dann relativ einfach berechnen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die Geschwindigkeitsknoten des hier zum Einsatz kommenden Q_1/Q_0 -Fluidelements einen über die Elementfläche gemittelten Knotenwert besitzen.

Liegt hingegen die Situation mit $k_v \notin \mathcal{P}_i$ vor, dann wird hier auf das in Luo *et al.* [172] vorgeschlagene Konzept zurückgegriffen. Der in dieser Arbeit empfohlene nichtlineare Wichtungsfaktor ϕ_{Re} ist eine Funktion der relativen Partikel-Reynoldszahl Re_P und lautet:

$$\phi_{Re} = \exp\left(-\frac{s}{d_i}Re_P\right) \quad \text{mit} \quad Re_P = \frac{||\mathbf{v}_{P_i} - \mathbf{v}_F^{k_v}|| d_i}{\nu_F}.$$
(6.13)

Darin steht s für den Abstand vom Knoten k_v zur Partikeloberfläche $\partial \mathcal{P}_i$ und $d_i = 2R_i$ bezeichnet den Partikeldurchmesser. Der entsprechende Interpolationsausdruck ist in dem Fall als

$$\mathbf{v}_{F}^{k_{v}} = (1 - \phi_{Re}) \, \mathbf{v}_{F}^{k_{v}} + \phi_{Re} \left(\mathbf{v}_{P_{i}} + \boldsymbol{\omega}_{P_{i}} \times \mathbf{r}_{k_{v}} \right) \tag{6.14}$$

definiert. Wenn man nun die zwei Grenzwerte $Re_P \to \infty$ und $Re_P \to 0$ betrachtet, so ergeben sich aus (6.14) folgende Zusammenhänge:

(i) $Re_P \to \infty \Rightarrow \phi_{Re} = 0 \Rightarrow \mathbf{v}_F^{k_v} = \mathbf{v}_F^{k_v}$ (ii) $Re_P \to 0 \Rightarrow \phi_{Re} = 1 \Rightarrow \mathbf{v}_F^{k_v} = \mathbf{v}_{P_i} + \boldsymbol{\omega}_{P_i} \times \mathbf{r}_{k_v}$.

Es bleibt festzuhalten, dass bei dieser gewichteten Interpolation für $Re_P \rightarrow 0$ die Relativgeschwindigkeit der beiden Phasen zum Knoten k_v hin verschwindet und für $Re_P \rightarrow \infty$ die Fluidgeschwindigkeit an diesem Knoten unberührt bleibt.

Verknüpfung der Zeitskalen

Ein weiterer algorithmischer Aspekt, der bei der DEM-FEM-Kopplung zu beachten ist, ist die Verknüpfung der beiden numerischen Methoden auf der Zeitskala. Denn die DEM erfordert sowohl angesichts ihres rein expliziten Charakters als auch wegen der Penalty-Methode im Zusammenhang mit der Berechnung der Kontaktkräfte einen Zeitschritt, der im Vergleich zum Zeitschritt der FEM-Strömungssimulation wesentlich kleiner ist, d. h. es gilt: $\Delta t_{\text{DEM}} \ll \Delta t_{\text{FEM}}$. Zur Handhabung dieser Problematik wird in der Arbeit von Feng *et al.* [63] eine einfache Strategie eingesetzt. Die Autoren schlagen zur Überbrückung der beiden Zeitskalen vor, den DEM-Algorithmus bzw. die Schritte (v) und (vi) des FBM-Algorithmus entsprechend dem Verhältnis der beiden Zeitschritte mehrere Zyklen zu durchlaufen und dabei die in Schritt (iv) berechneten Strömungskräfte \mathbf{F}_{i}^{f} und \mathbf{M}_{i}^{f} der Partikel $\mathcal{P}_{i} \{i = 1, \ldots, N\}$ als konstant anzunehmen. Da das Verhältnis der beiden Zeitschritte generell keine natürliche Zahl darstellt, gilt es Δt_{DEM} in der Hinsicht anzupassen [63]:

$$\Delta \tilde{t}_{\text{DEM}} = \frac{\Delta t_{\text{FEM}}}{n} \quad \text{mit} \quad n = 1 + \text{int} \left(\frac{\Delta t_{\text{FEM}}}{\Delta t_{\text{DEM}}}\right) \,. \tag{6.15}$$

Hierin ist n eine Integerzahl und steht für die Anzahl der DEM-Zyklen, die bezogen auf ein FEM-Zeitschritt Δt_{FEM} zu absolvieren sind.

6.4 Standardtests

Zur Verifikation der in diesem Kapitel behandelten Fluid-Partikel-Kopplung werden drei klassische Standardtests betrachtet. Um die dabei erzielten Simulationsergebnisse abzusichern, sollen diese mit den in der Literatur publizierten Daten verglichen werden. Beim ersten Testbeispiel handelt es sich um das Problem der freien Umströmung eines fixierten Partikels. Im zweiten Beispiel wird dann die Sedimentation von einem Partikel in einer Box betrachtet und im dritten das Absinkverhalten von zwei hintereinander positionierten Partikeln. Diese Beispiele werden sowohl unter Hinzunahme des LP-Ansatzes als auch des EF-Ansatzes zur Berechnung der Fluidkräfte simuliert.

Umströmung eines fixierten Partikels

Für den Verifikationsprozess der Kopplung soll zuerst die ungestörte Umströmung eines fest positionierten Partikels für verschiedene Partikel-Reynoldszahlen Re_P simuliert werden. Die charakteristischen Größen, die bei dieser Aufgabenstellung als Funktion von Re_P jeweils als Vergleichsgröße dienen können, sind die Widerstandszahl des Partikels sowie der Ablösewinkel und die Nachlauflänge des bei seiner Umströmung entstehenden Wirbels. Die diesbezüglich hier gewonnenen Simulationsergebnisse sollen im Folgenden sowohl experimentellen als auch numerischen Ergebnissen aus der Literatur gegenübergestellt werden.

Vor der Beschreibung des Systems, das diesem Beispiel zugrunde liegt, bietet es sich an, die Klassifizierung der kennzeichnenden Strömungsbereiche dieser Problemstellung anzuführen [191]:

•	keine Wirbelablösung:	$Re_P < 20$
•	stationäre Wirbelablösung:	$20 \le Re_P < 130$
•	periodischer Nachlauf:	$130 \le Re_P < 300$
•	periodische Wirbelablösung:	$300 \le Re_P < 800$
•	turbulenter Nachlauf:	$800 \le Re_P < 3000$
•	rotierende turbulente Ablösung:	$3000 \le Re_P < 4 \times 10^5$
•	haarnadelförmiger Nachlauf:	$4 \times 10^5 \le Re_P < 10^6$.

Für jede Strömungsform ist auf der rechten Seite der Auflistung der entsprechende charakteristische Bereich für die Partikel-Reynoldszahl $Re_P := v_{\infty}d/\nu_F$ angeführt. In diesem Zusammenhang wird in der Literatur u. a. oft angemerkt (z. B. [11, 126]), dass Systeme, die dem Bereich $20 \leq Re_P \leq 210$ zuzuordnen sind, sich durch eine achsensymmetrische Strömungsform auszeichnen, und ferner, dass diese Form sich innerhalb der besagten Re_P -Spanne lediglich in Bezug auf den Ablösewinkel des Wirbels und dessen Nachlauflänge ändert (siehe hierzu auch die photographischen Aufnahmen zur experimentellen Partikelumströmung in Taneda [236]). Bei den im Folgenden betrachteten Strömungen soll es sich um solche handeln, die in diesen Re_P -Bereich fallen.

Die Geometrie sowie die Randbedingungen des Systems sind in Abb. 6.4 gegeben. Zur Diskretisierung des Strömungsgebietes werden bei diesem Beispiel drei Gitterebenen verwen-



Abbildung 6.4: Umströmung eines räumlich fest positionierten Partikels: Geometrie und Randbedingungen.

det, wobei die feinste Ebene mit 544.000 \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen abgebildet wird. In Abb. 6.5(a) ist auf der dritten Ebene ein Ausschnitt des Netzes bezüglich einer durch den Partikelmittelpunkt gehenden mittleren Symmetrieachse dargestellt. Bei allen zu dieser Aufgabenstellung durchgeführten Simulationen wird die kinematische Viskosität zu $\nu_F = 0.01 \text{ cm}^2/\text{s}$ gewählt, sodass die Einströmgeschwindigkeit \bar{v} für die zu betrachtende Re_P entsprechend zu setzen ist. Die Umströmung des Partikels wird in dieser Testreihe für folgende Partikel-Reynoldszahlen berechnet: $Re_P = 50, 100, 150, 200$. In Abb. 6.5(b) wird exemplarisch für $Re_P = 150$ eine isometrische Schnittansicht des simulierten Geschwindigkeitsfeldes gezeigt. Weitere anschauliche Darstellungen zu den Lösungen, die für diesen Fall gewonnen wurden, bietet Abb. 6.6. Es gilt an dieser Stelle festzuhalten, dass alle durchgeführten Simulationen, wie die hier für $Re_P = 150$ bildlich dargestellte Berechnung, eine axialsymmetrische Strömungsstruktur liefern.

Die erste Größe, die hier betrachtet werden soll, ist die Widerstandszahl c_w . Diese Kennzahl wurde bereits in Gleichung (2.3) eingeführt. Man kann durch Umformulieren von (2.3) für sie die folgende Beziehung gewinnen:

$$c_w = \frac{8 F_w}{\pi \rho_F \, d^2 \, \overline{v}^2} \,, \tag{6.16}$$

wobei F_w die Widerstandskraft des Partikels in Strömungsrichtung ist. In Abb. 6.7 sind die Auswertungen der Fluidkräfte bzw. der Widerstandszahlen für die auf Basis des LP- und EF-Ansatzes durchgeführten Simulationen jeweils über Re_P aufgetragen. Die aus diesen beiden Herangehensweisen gewonnenen c_w -Beiwerte weichen voneinander lediglich maximal 4% ab und zeigen mit den in der Literatur publizierten Daten aus numerischen und experimentellen Untersuchungen sowie Ergebnissen, die aus veröffentlichten Korrelations-



Abbildung 6.5: (a) Ausschnitt der Diskretisierung des Systems auf der dritten Ebene (Längsschnitt durch den Partikelmittelpunkt) und (b) isometrische Schnittansicht des berechneten Geschwindigkeitsfeldes bei $Re_P = 150$.



Abbildung 6.6: Lösungen auf einer durch den Partikelmittelpunkt gehenden mittleren Symmetrieachse bei $Re_P = 150$. (Beide Symmetrieachsen liefern identische Darstellungen.)

gleichungen stammen, eine durchgehend befriedigende Übereinstimmung. Der Auftriebsbeiwert ist bei den hier vorliegenden axialsymmetrischen Strömungen konsequenterweise stets null.

Bei der Berechnung des c_w -Beiwerts stehen hauptsächlich die Strömungskräfte im Mittelpunkt der Betrachtung. Die Gewichtung der Verifikationsaussage einer Testsimulation zur Partikelumströmung bezieht sich bei der Überprüfung des Ablösewinkels und der Nachlauflänge des Wirbels hingegen verstärkt auf die Kopplungsrandbedingungen des Fluidgebiets an der Partikeloberfläche. Dies zeigt sich darin, dass die hier für den LPund EF-Ansatz gewonnenen Simulationsergebnisse bezüglich der beiden eben genannten wesentlichen Größen übereinstimmend sind. Die erzielten Resultate sind in Abb. 6.8 den aus der Literatur bezogenen Daten gegenübergestellt und liefern zufriedenstellende Vorhersagen. Wie man aus den dortigen Diagrammen erkennen kann, nimmt die Nach-



Abbildung 6.7: Umströmung eines Partikels: Widerstandszahl c_w in Abhängigkeit der Partikel-Reynoldszahl Re_P .

lauflänge des Wirbels mit zunehmender Re_P -Zahl zu und der Ablösewinkel ab. In Bezug auf den zweiten Punkt heißt das, dass sich die Strömung dabei stromauf gesehen schneller von der Partikeloberfläche ablöst (vergleiche diesbezüglich die zahlreichen experimentellen Bilder zur Partikelumströmung in Taneda [236]).



Abbildung 6.8: Umströmung eines Partikels: (a) Ablösewinkel γ und (b) Nachlauflänge L_w/d in Abhängigkeit der Partikel-Reynoldszahl Re_P .

Sedimentation eines Partikels

Im Gegensatz zum Fall der Umströmung eines fixierten Partikels finden sich in der Literatur nur wenige quantitative experimentelle Arbeiten, die dem Kontext der Partikelsedimentation zuzuordnen sind. Zu erwähnen sind in der Hinsicht vor allem die Beiträge von Mordant & Pinton [182] und ten Cate *et al.* [242]. Im Folgenden soll die zuletzt genannte Arbeit zur Fortführung der Verifikation der hier vorgestellten Methode zur FEM-DEM-Kopplung und ihrer Implementierung herangezogen werden. Denn die in [242] aufgeführten Ergebnisse dienten in zahlreichen publizierten Beiträgen zu Fluid-Partikel-Methoden bereits erfolgreich als Referenzlösung, siehe z. B. [6, 64, 79, 111, 131, 159, 161, 260, 265]

In der Arbeit von ten Cate *et al.* [242] wird das Sedimentieren eines ausgewiesenen Partikels in vier unterschiedlichen Fluiden – aber sonst gleichen Bedingungen – betrachtet. Die partikelbezogenen Größen, die Stoffeigenschaften der Fluide sowie die geometrischen Abmessungen der Box, in der das Partikel sedimentiert, können Abb. 6.9 entnommen werden. Dieses System wird auf dem feinsten Gitter der hier verwendeten vier Diskretisierungshierarchien mit 819.200 \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen abgebildet (80 × 80 × 128 Elemente). An allen Systemberandungen werden 'no-slip' Randbedingungen festgelegt. Was die Wahl der Zeitschritte betrifft, so gilt: $\Delta t_{\rm FEM} = 2.5 \times 10^{-4}$ s und $\Delta t_{\rm DEM} = 10^{-6}$ s.



Abbildung 6.9: Sedimentation eines Partikels in einer Box: Angaben zur Boxgeometrie, zum Partikel und zu den Fluiden.

Nachdem das im Fluid befindliche Partikel dem Schwerefeld ausgesetzt wird, beginnt es bekanntlich als Folge des Dichteunterschiedes der Phasen ($\rho_P > \rho_F$) in Gravitationsrichtung zu sedimentieren. Durch die beschleunigende Gravitationskraft gewinnt das Teilchen kontinuierlich an Sinkgeschwindigkeit. Damit ist u. a. verbunden, dass durch die einhergehende Zunahme der Relativgeschwindigkeit zwischen dem Partikel und dem Fluid um dessen Oberfläche es zu einer entsprechenden Erhöhung der Widerstandskraft des Sinkkörpers kommt. Diese Kraft reduziert die besagte Beschleunigung – und zwar bis sie ganz verschwindet. Mithin besteht ein Gleichgewicht zwischen der um den Auftrieb reduzierten Gewichtskraft des Partikels und seiner Widerstandskraft, sodass dieses Teilchen von da an nur noch mit konstanter Geschwindigkeit weiter sedimentiert.

In den Diagrammen der Abb. 6.10 und Abb. 6.11 sind die gewonnenen numerischen Ergebnisse bezüglich der zeitlichen Evolution der Sinkgeschwindigkeit des Partikels für

die Fälle F1 und F2 bzw. F3 und F4 dargestellt. Man kann hier festhalten, dass die unter Zugrundelegung des LP- und EF-Ansatzes erzielten Ergebnisse mit einer relativen Abweichung in den Endsinkgeschwindigkeiten von 2-3% sehr gut miteinander übereinstimmen. Die Diagramme zeigen ferner die experimentellen Verläufe von ten Cate *et al.* [242] sowie die aus DNS-Simulationen herrührenden Ergebnisse von Veeramani *et al.* [260] und Feng & Michaelides [64]. Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Verfahren liefert Resultate,



Abbildung 6.10: Darstellung der Ergebnisse für die Partikelsinkgeschwindigkeit im (a) Fall F1 und (b) Fall F2.



Abbildung 6.11: Darstellung der Ergebnisse für die Partikelsinkgeschwindigkeit im (a) Fall F3 und (b) Fall F4.

die sich, wie zu erkennen ist, mit denjenigen aus ten Cate *et al.* [242] und Veeramani *et al.* [260] durchaus vergleichen lassen. Ein weiterer vergleichender Blick lässt allerdings das Bestehen einer leicht größeren Abweichung zu den numerischen Ergebnissen aus der Studie von Feng & Michaelides [64] erkennen. Im Hinblick auf eine ergänzende Absicherung der hier erzielten Resultate wurden in jedes Diagramm zusätzlich diejenigen Werte bezüglich der Endsinkgeschwindigkeit des Partikels eingezeichnet, welche die Korrelationsgleichungen in [28, 33, 39] liefern. Selbst wenn diese Gleichungen die Endgeschwindigkeit eines sedimentierenden Partikels in einem quasi unendlich ausgedehnten System wiedergeben – bei dem also die Begrenzungswände keinen Einfluss auf die Entwicklung der Partikelgeschwindigkeit ausüben –, liefern sie bei einem ausreichend großen Abstand des Sinkkörpers zu den Wänden dennoch annehmbare Referenzwerte. Wie zu erkennen ist, decken sich die auf diesen Gleichungen basierenden Ergebnisse gut mit denen aus dieser Dissertation.

In Abb. 6.12 sind für die Fälle F1 (Bilder (a)-(e)) und F4 (Bilder (f)-(j)) die Konturplots der Fluidgeschwindigkeiten auf der \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_3 -Symmetrieebene gegenübergestellt. Stellvertretend sind darin nur die mittels des EF-Ansatzes gewonnenen Plots angeführt. Zur Veranschaulichung der Ergebnisse werden hier die Fluidgeschwindigkeiten mit der für den jeweiligen Fall erzielten Endsinkgeschwindigkeit des Partikels normiert ($||\mathbf{v}||/v_{\infty}$) [242]. Folglich decken die Konturlinien der Geschwindigkeiten bei beiden Bilderreihen den Wertebereich [0-1] ab. Für Abb. 6.12 wurde hinsichtlich der Auswahl der Momentaufnahmen



Zeit t [s], Partikelpos. x_3 [cm]			
(a) $t = 0.4$, $x_3 = 11.65$ (b) $t = 1.3$, $x_3 = 8.23$	(c) $t = 1.9, x_3 = 5.91$	(d) $t = 2.6, x_3 = 3.20$	(e) $t = 3.7, x_3 = 0.75$
(f) $t = 0.2, x_3 = 11.69$ (g) $t = 0.5, x_3 = 8.37$	(h) $t = 0.7, x_3 = 5.84$	(i) $t = 0.9, x_3 = 3.25$	(j) $t = 1.2, x_3 = 0.75$

Abbildung 6.12: Darstellung der Konturlinien der normalisierten Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich [0-1] (der Wertebereich hat eine konstante Schrittweite von 0.1).

versucht, jene Ergebnisausgaben aus der F1- und F4-Simulation herauszugreifen, bei denen die x_3 -Positionen des Partikels in den entsprechend in Beziehung zu bringenden Plots der beiden Berechnungen so nah wie möglich beieinanderliegen. Dabei wurde ferner darauf geachtet, dass die Partikelpositionen über die Sedimentationsstrecke möglichst gleichmäßig verteilt sind. Die resultierende Gegenüberstellung erlaubt, den Einfluss der Viskosität auf die Entwicklung des Fluidgeschwindigkeitsprofils anschaulich zu vergleichen. Betrachtet man beispielsweise Bild (c) und (h), so ist angesichts $Re_P^{F1} \ll Re_P^{F4}$ festzustellen, dass im erstgenannten Bild im Gegensatz zum anderen der Bereich des Nachlaufs wesentlich gedrungener ist. Des Weiteren fällt beim Vergleichen der Bilder (d) und (i) auf, dass im zweitgenannten Bild im Unterschied zu Bild (d) die untere Berandung der Box noch keinen Einfluss auf das besagte Geschwindigkeitsprofil hat. Man kann hier zusammenfassend konstatieren: Die in Abb. 6.12 dargestellten Konturverläufe entsprechen denjenigen in [6, 79, 242] qualitativ sehr gut.

Bemerkung: Für dieses Beispiel soll die Konvergenzstudie bezüglich der Findung der angemessenen Diskretisierungsfeinheit des Systems exemplarisch dargestellt werden. Die hierzu durchgeführte Studie, bei der drei unterschiedlich feine Diskretisierungen betrachtet wurden, basiert auf den beiden Fällen F3 und F4. Die gewählten Diskretisierungsfeinheitsgrade sollen im Folgenden als grob, mittel und fein bezeichnet werden. Das grobe Netz besteht aus 345.600 ($60 \times 60 \times 96$ Elemente), das mittlere aus 548.800 ($70 \times 70 \times 112$ Elemente) und das feine wie gesagt aus 819.200 ($80 \times 80 \times 128$ Elemente) \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen. In Abb. 6.13 sind die ermittelten zeitlichen Verläufe zur Partikelsinkgeschwindigkeit dargestellt. Man kann von den einzelnen Testreihen ableiten, dass die Ergebnisse eine Konvergenzeigenschaft in Richtung der experimentellen Verläufe besitzen – und zwar sowohl die Lösungen des LP-Ansatzes als auch diejenigen des EF-Ansatzes. Denn die Diskrepanz zwischen den entsprechenden zeitlichen Entwicklungen der Sedimentationsgeschwindigkeit nimmt mit zunehmendem Feinheitsgrad des Netzes in der Hinsicht stetig ab bzw. verschwindet ganz, wie bei den Entwicklungen in Abb. 6.13(b).



Abbildung 6.13: Konvergenzstudie in Bezug auf die Diskretisierungsfeinheit des Systems: (a) mit Anwendung des LP-Ansatzes und (b) mit Anwendung des EF-Ansatzes jeweils zur Berechnung der Strömungskräfte. Die Sinkgeschwindigkeiten werden je für F3 und F4 betrachtet.

Sedimentation von zwei Partikeln

Aus Experimenten ist bekannt [51, 70], dass zwei in einem gewissen Abstand hinterein-

ander angeordnete Partikel sich während des Sedimentierens einander annähern, danach in Kontakt treten und letztlich sich überschlagen. Der Terminus, der in der Literatur zur Benennung dieses Phänomens gebräuchlich ist, stammt aus dem englischen und lautet: 'drafting, kissing and tumbling'. Er soll hier die Abkürzung 'DKT' erhalten. Im Fachschrifttum finden sich zu dieser Problematik bislang leider keine Arbeiten mit dokumentierten quantitativen Experimenten, sondern nur auf numerischen Simulationen basierende Veröffentlichungen. Die ersten Arbeiten, die das DKT-Phänomen numerisch wiedergeben, stammen von Johnson & Tezduyar [115] und Hu *et al.* [105, 106]. Des Weiteren ist in diesem Zusammenhang noch die Veröffentlichung von Glowinski *et al.* [83] zu erwähnen. Das darin untersuchte System wird u. a. auch in Apte *et al.* [6] und Breugem [18] numerisch studiert. Unter Hinzunahme der letztgenannten beiden Arbeiten soll im Folgenden das in Glowinski *et al.* [83] beschriebene DKT-Problem zur Fortführung der Verifikation des Fluid-Partikel-Lösers betrachtet werden.

Abb. 6.14 zeigt mit den entsprechenden Angaben die Konfiguration dieses Beispiels. Die Diskretisierung des Systems erfolgt hier auf der feinsten der vier verwendeten Ebenen mit 1.048.576 \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen (64 × 64 × 256 Elemente). Was die Wahl der Zeitschrittweite und Randbedingungen bei diesem Testbeispiel angeht, so stimmen diese mit denen des vorhergehenden Tests überein und können dort entnommen werden. Die Positionen der



Abbildung 6.14: Sedimentation von zwei Partikeln in einer Box: Geometrie sowie Angaben zum Fluid und zu den Partikeln.

Partikel werden in dieser Arbeit im Gegensatz zu Glowinski *et al.* [83] zueinander leicht versetzt angeordnet [18, 258], und zwar soll das Partikel \mathcal{P}_1 zu Beginn der Simulation die nachstehenden Positionskoordinaten annehmen: (0.5075/0.5075/3.5) cm. Denn aus vorhergehenden Testsimulationen, die ohne Vorgabe einer kleinen anfänglichen Außermitte zwischen den Partikeln durchgeführt wurden, geht hervor, dass bei dem hier verwendeten symmetrischen Netz die durch numerische Rundungsfehler hervorgerufene Störung der Symmetrie der Systemantwort für das im Nachlauf befindliche Partikel \mathcal{P}_1 nicht ausreicht, um das vordere Partikel \mathcal{P}_2 beim aufeinander Auftreffen seitlich abzulenken. In dem Fall bleiben beide Partikel folglich bis zum Aufsetzen auf den Boden hintereinander positioniert.

Zu Beginn der Sedimentation sinken die gleichgearteten Partikel \mathcal{P}_1 und \mathcal{P}_2 infolge ihrer aus der Gravitationskraft resultierenden Beschleunigung synchron in Gravitationsrichtung. Hinter den Partikeln bildet sich dabei jeweils eine Nachlaufströmung aus. Wenn der Nachlaufbereich des vorderen Partikels \mathcal{P}_2 mit zunehmender Partikel-Reynoldszahl auf eine Länge anwächst, bei der das hintere Partikel \mathcal{P}_1 durch diesen Bereich erfasst wird und sich somit im Fluidschatten bzw. im Sogbereich des vorderen Partikels \mathcal{P}_2 befindet, dann sinkt \mathcal{P}_1 infolge seines geringeren Strömungswiderstandes entsprechend schneller als \mathcal{P}_2 ('drafting'). Konsequenterweise holt das zurückliegende Partikel den führenden mit der Zeit ein und prallt auf diesen auf ('kissing'). Die nun bestehende neue Konfiguration, bei der die Partikel im Verbund sedimentieren, ist aber instabil. Denn bei einer ausreichend geringen Exzentrizität der Partikel zueinander wird das vordere Teilchen vom hinteren zur Seite abgelenkt, mit dem Ergebnis, dass diese sich daraufhin zunächst überschlagen, um sich dann voneinander zu trennen ('tumbling'). In Abb. 6.15 sind einige Momentaufnahmen zu den Geschwindigkeiten der Phasen aus den in dieser Arbeit erzielten Lösungen für einzelne Zeitpunkte dargestellt. Anhand dieser Bilderreihe kann man das eben beschriebene DKT-Phänomen leicht nachvollziehen. Die entsprechenden Momentaufnahmen zum Druckfeld werden in Abb. 6.16 gezeigt.



Abbildung 6.15: Sedimentation von zwei Partikeln: Momentaufnahmen des Strömungsgeschwindigkeitsfeldes und der Partikelgeschwindigkeiten zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Simulation. (Ergebnisse auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene, vgl. Abb. 6.14.)

Die Zeitverläufe der Partikelgeschwindigkeiten, die unter Hinzunahme des LP-Ansatzes zur Berechnung der Strömungskräfte und in einer weiteren Simulation analog unter Hinzunahme des EF-Ansatzes je erzielt wurden, sind in Abb. 6.17(a) in Diagrammform angeführt. Zu Vergleichszwecken ist in dieses Diagramm ebenso der ermittelte Verlauf der Absinkgeschwindigkeit von Partikel \mathcal{P}_2 aufgenommen, wenn dieses Teilchen in Abwesenheit von \mathcal{P}_1 in der Box sedimentiert. Die entsprechende Simulation wurde auf Basis des



Abbildung 6.16: Sedimentation von zwei Partikeln: Momentaufnahmen des Druckfeldes und der Partikelpositionen zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Simulation. (Ergebnisse auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene, vgl. Abb. 6.14.)

EF-Ansatzes durchgeführt. In Abb. 6.18 werden die hierzu gehörenden Konturplots zur Verfügung gestellt. Erwähnt sei noch, dass die für diesen Fall aus Korrelationsgleichungen abgeleiteten Endsinkgeschwindigkeiten zusätzlich in Abb. 6.17(a) eingefügt sind.



Abbildung 6.17: Zeitliche Verläufe der Partikelgeschwindigkeiten für das DKT-Beispiel: (a) Ergebnisse der vorliegenden Arbeit und (b) Ergebnisvergleich mit Arbeiten aus der Literatur.

Zunächst kann man nach einem vergleichenden Blick auf Abb. 6.17(a) hervorheben, dass die Endabsinkgeschwindigkeit des allein sedimentierenden Partikels \mathcal{P}_2 mit den Größen korrespondiert, die die Korrelationsgleichungen in [28, 33, 39] liefern. Darüber hinaus ist die relativ geringe Diskrepanz zwischen den anhand der beiden Ansätze ermittelten Zeitverläufen der Partikelgeschwindigkeiten anzumerken. Wie im besagten Diagramm noch zu erkennen ist, haben die Partikel des Paares { $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2$ } und das allein sedimentierende Teilchen \mathcal{P}_2 in der Anfangsphase des Sinkvorgangs allesamt den gleichen Geschwin-



Abbildung 6.18: Momentaufnahmen zur Sedimentation von einem Partikel zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Simulation: (a) Strömungs- und Partikelgeschwindigkeiten und (b) Druckfeld. (Ergebnisse auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene, vgl. Abb. 6.14.)

digkeitsverlauf. Sobald das Partikelpaar $\{\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2\}$ miteinander über die Nachlaufströmung des führenden Teilchens zu interagieren beginnt, gehen die einzelnen Kurven mit zunehmender Zeit natürlich allmählich immer mehr auseinander. Eine Gegenüberstellung der anhand des EF-Ansatzes gewonnenen Zeitverläufe mit den Verläufen aus [6, 18, 83] findet in Abb. 6.17(b) statt. Es lässt sich hier festhalten, dass die Ergebnisse insgesamt qualitativ gut vergleichbar sind. Die Verläufe weisen jedoch in quantitativer Hinsicht untereinander zwar eine geringe aber dennoch erwähnenswerte Abweichung auf. Grundsätzlich besteht hier der Ruf nach gut dokumentierten quantitativen Experimenten, die für eine weitere zuverlässige Verifikation des Fluid-Partikel-Lösers herangezogen werden können.

Kapitel 7: Numerische Beispiele

Eine wesentliche Problematik, mit der man bei der Entwicklung einer DNS-Methode konfrontiert wird, ist die Tatsache, dass in der Literatur keine dokumentierten experimentellen Arbeiten über Vielpartikelsysteme existieren, anhand derer eine weitergehende quantitative Verifikation der entsprechenden Implementierung vorgenommen werden kann. Denn es finden sich, wie schon gesagt, bis zu diesem Zeitpunkt im Fachschrifttum nicht einmal Arbeiten, die das numerisch oft betrachtete 'DKT'-Problem beispielsweise durch Messungen der Sedimentationsgeschwindigkeiten der Partikel wiedergeben. Von daher müssen die in diesem Kapitel angeführten Beispiele auf der Grundlage von einfachen Glaubwürdigkeitsbetrachtungen qualitativ diskutiert werden. Dass das Ziel dieser Beispiele angesichts der noch anstehenden quantitativen Verifikation des Fluid-Partikel-Lösers mit Blick auf Vielpartikelsysteme nicht darin liegt, Referenzlösungen zu erzielen, sondern die Einsatzmöglichkeit des hier entwickelten Verfahrens zunächst zur qualitativen Beschreibung von dichten Mehrphasenströmungen zu zeigen, sei hier betont.

Im Folgenden werden beispielhaft drei verschiedene Fluid-Partikel-Systeme mit einer größeren Anzahl von Teilchen betrachtet. Das erste Beispiel handelt von der Sedimentation einer anfangs kompakt angeordneten Partikelgruppe in einer Box. Im nächsten Beispiel wird dann ein bidisperses System mit – relativ gesehen – leichten und schweren Partikeln betrachtet und die dritte Aufgabenstellung widmet sich der Simulation einer partikelbeladenen Strömung durch ein sich lokal verjüngendes Rohr. An dieser Stelle ist zu den nachstehenden Beispielen allgemein zu erwähnen, dass bei ihrer Simulation die Berechnung der Partikelströmungskräfte anhand der im vorhergehenden Kapitel als LP-Ansatz bezeichneten Methode erfolgt.

7.1 Sedimentation von 125 Partikeln

Das erste Beispiel zeigt die Sedimentation von 125 identischen Partikeln in einer geschlossenen Box. Die gewählten Abmessungen der Box können Abb. 7.1 entnommen werden. Des Weiteren finden sich darin Angaben zu den Materialparametern der Phasen, zum Partikelradius und zur Anordnung der Partikel zum Zeitpunkt t = 0. Der Aspekt der Adhäsion soll bei diesem Beispiel noch keine Rolle spielen. Zur Berechnung des Strömungsfeldes werden hier drei Mehrgitterebenen verwendet, wobei die feinste Ebene anhand von 2.654.208 \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen (96 × 96 × 288 Elemente) abgebildet wird. Die Diskretisierung auf dieser Ebene liefert 2.654.208 Druckknoten mit jeweils einem und 8.027.136 Geschwindigkeitsknoten mit jeweils drei Freiheitsgraden. Was den Feinheitsgrad der Diskretisierung auf der Zeitachse angeht, so werden die entsprechenden Zeitschrittweiten mit $\Delta t_{\rm FEM} = 10^{-4}$ s und $\Delta t_{\rm DEM} = 10^{-6}$ s festgelegt. In Bezug auf die Systemberandungen ist zu erwähnen, dass dafür die 'no-slip' Randbedingungen gelten.



Abbildung 7.1: Sedimentation von 125 Partikeln in einer Box: Geometrie und Angaben zum Fluid und zu den Partikeln.

Beim Absinken in Gravitationsrichtung übt der kompakte, aber lose Partikelblock auf das vor ihm befindliche Fluid eine Verdrängungswirkung aus. Die betreffenden Fluidteilchen müssen also der herannahenden Partikelgruppierung weichen. Entlang der vertikal angeordneten äußeren Partikel dieses Blocks bildet sich dem Maß des verdrängten Fluids entsprechend eine Aufwärtsströmung. Diese Strömung trifft im Nachlaufbereich der Gruppe zusammen und wird dann nach unten abgelenkt, sodass sich um die Anordnung quasi ein mitbewegter Wirbel ausbildet. Die dabei nach unten abgelenkte Strömung bewirkt ein schnelleres Absinken der unmittelbar um die vertikale Systemachse der Box angeordneten Partikel gegenüber denjenigen, die den Boxrändern zugewandt sind, zumal diese obendrein direkt von der Aufwärts-



Abbildung 7.2: Ausschnitt aus der Momentaufnahme zu den Geschwindigkeiten der Partikel und den Geschwindigkeitsvektoren der Strömungslösungen auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene.

strömung erfasst werden. Eine Momentaufnahme aus der zu diesem Beispiel stammenden Simulation, in der die Aufwärtsströmung bzw. der sich um die Partikelgruppierung bildende Wirbel zu erkennen ist, zeigt Abb. 7.2. Um die zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung zu illustrieren, wird in Abb. 7.3 eine diesbezügliche Bildfolge gegeben, welche mit dem in der vorliegenden Arbeit implementierten Verfahren gewonnen wurde. Bei Betrachtung dieser Folge kann man beispielsweise aus der Momentaufnahme zum Zeitpunkt t = 1.01 s erkennen, dass ein farblich dunkelblau gekennzeichnetes Partikel, das zu Beginn der Simulation sich in der obersten Reihe des Partikelblocks befand, den nun dispergierten Block sozusagen anführt. Zur Beschreibung der Systemantwort bietet es sich hier an, die zeitlichen Entwicklungen der gemittelten Partikelverteilung und Partikelgeschwindigkeit als charakteristische Größen heranzuziehen. Die entsprechenden Verläufe sind in



Abbildung 7.3: Sedimentation von 125 Partikeln in einer Box: Momentaufnahmen der Partikelpositionen zu verschiedenen Zeitpunkten der Simulation.

Abb. 7.4(a) wiedergegeben. Wie darin zu erkennen ist, behält die mittlere Systemantwort der Partikelphase ihre Symmetrie betreffend der horizontalen Ebene während der Simulation weitgehend bei. Besonders hervorzuheben ist in diesem Diagramm der Verlauf der gemittelten Partikelsinkgeschwindigkeit in Gravitationsrichtung. In dieser Hinsicht besitzen die Partikel mit ihrer kompakten Anordnung, die sie zu Beginn der Sedimentation haben, anfänglich eine kontinuierlich stark zunehmende gemittelte Sinkgeschwindigkeit. Nach einer gewissen Zeit geht die Kompaktheit der Gruppe durch das Auseinanderdriften der Partikel allerdings verloren (siehe Bild t = 0.20 s und t = 0.30 s in Abb. 7.3), sodass
dann die einzelnen Partikelsinkgeschwindigkeiten durch den Anstieg der jeweiligen Widerstandskräfte mehr oder weniger abrupt abnehmen (der Effekt des Fluidschattens ist von jetzt an nicht so sehr ausgeprägt). In der Folge schwankt die gemittelte Größe um ein gewisses Mittelmaß, und zwar bis die Partikel die Bodennähe erreichen. Eine vergleichbare Systemantwort zeigen auch die Ergebnisse in Veeramani *et al.* [260], wo eine qualitativ ähnliche Problemstellung betrachtet wird.¹ Der in dieser Arbeit dargestellte Verlauf wird für einen 'grob' qualitativen Vergleich in Abb. 7.4(b) mit den entsprechenden gemittelten horizontalen Partikelgeschwindigkeiten gezeigt.



Abbildung 7.4: (a) Sedimentation von 125 Partikeln in einer Box: Zeitverläufe der gemittelten Koordinaten und Geschwindigkeiten der Partikel. (b) Darstellung der Lösungen von Veeramani et al. [260] zu den gemittelten Partikelgeschwindigkeiten aus der Betrachtung einer qualitativ ähnlichen Problemstellung.

Zum Abschluss der Betrachtungen zu diesem Beispiel sollen noch die numerischen Lösungen der Primärvariablen Druck und Geschwindigkeit zu unterschiedlichen Zeitpunkten dargestellt werden. Dafür sind in Abb. 7.5 zwei Reihen von Momentaufnahmen angeführt. Hierin gibt die obere Bildersequenz die Partikel- und Fluidgeschwindigkeiten an, wobei die letzteren auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene wiedergegeben werden, und die untere Sequenz zeigt die entsprechende Druckantwort des Strömungsfeldes. Die Partikel besitzen in diesem Fall eine zur Systemskizze analoge farbliche Kennzeichnung. Aus den dargestellten Bildern kann man – qualitativ gesehen – die nahezu symmetrische Strömungslösung, welche mit der Partikelverteilung korrespondiert, sehr gut erkennen.

¹Das in Veeramani *et al.* [260] gezeigte Beispiel ist leider nicht in dem Maße dokumentiert, dass es nachgerechnet werden kann.



Geschwindigkeit

Abbildung 7.5: Sedimentation von 125 Partikeln in einer Box: Momentaufnahmen der Partikelund Strömungsgeschwindigkeiten (obere Bildreihe) und Momentaufnahmen der Partikelpositionen und Drucklösungen (untere Bildreihe) zu unterschiedlichen Zeitpunkten – nämlich jeweils von links nach rechts: t = 0.30 s, t = 0.40 s, t = 0.71 s, t = 1.01 s, t = 1.41 s. (Strömungslösungen auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene.)

7.2 Bidisperses Gemisch mit Auftriebs- und Absinkpartikeln

Es werden im Folgenden zwei Fallbeispiele zu bidispersen Fluid-Partikel-Gemischen betrachtet. Die Konfiguration des für beide Beispiele verwendeten Systems ist mit den entsprechenden Angaben in Abb. 7.6 dargestellt. Wie man diesen Angaben entnehmen kann, sind die Abmessungen der Box und ein großer Teil der spezifischen Größen mit denjenigen aus dem ersten Beispiel identisch (vgl. Abb. 7.1). Die Größen, welche sich bezüglich der zwei nachstehend zu betrachtenden Fälle voneinander unterscheiden, sind in der Darstellung farblich unterlegt. (Man beachte, dass die Partikel in Fall 2 im Gegensatz zu Fall 1 eine adhäsive Oberflächenwirkung besitzen.²) Zur Simulation des Strömungsfeldes wird das diskrete Modell aus dem vorhergehenden Beispiel herangezogen $(96 \times 96 \times 288)$ Elemente). Was die Zusammensetzung der aus 5184 Partikeln bestehenden bidispersen Phase angeht, so soll sie zur einen und zur anderen Hälfte aus Teilchen bestehen, die in Bezug auf das Fluid eine höhere bzw. geringere Dichte haben. Im Folgenden werden die schwereren Partikel mit \mathcal{P}_s und die leichteren mit \mathcal{P}_l bezeichnet. Die beiden Partikeltypen sind über die für den Zeitpunkt t = 0 gewählte $12 \times 12 \times 36$ Anordnung zufällig verteilt. Es bleibt noch zu erwähnen, dass der Volumenanteil der dispersen Phase beziehentlich des Boxvolumens 11.3% beträgt.



Abbildung 7.6: Bidisperses Gemisch in einer Box: Geometrie und Angaben zum Fluid und zu den Partikeln.

Fallbeispiel 1: Das Verhalten von bidispersen Auftriebs-Absink-Partikelgemischen wird in Weiland *et al.* [272] anhand eines Laborexperiments qualitativ betrachtet. Es wird in dieser Arbeit darauf aufmerksam gemacht, dass bei solchen Systemen ab einer Partikelvolumenkonzentration von ungefähr 10% sich im Bereich der Mischungszone fingerähnliche

²Der Fall 1 wurde bereits in Avci & Wriggers [8] vorgestellt.

Verteilungsmuster der Teilchen während der Entmischung ausbilden. So sind in der Hinsicht in Abb. 7.7 eine Reihe von Momentaufnahmen der Partikelverteilung dargestellt, die anhand des hier entwickelten Fluid-Partikel-Lösers gewonnen wurden. In diesen Bildern ist die Ausbildung von jenen Verteilungsstrukturen relativ gut ersichtlich, auch wenn das betrachtete System mit 11.3% knapp über der besagten kritischen Volumenkonzentrationsgrenze liegt. Man kann an dieser Stelle ferner festhalten, dass von der anfangs



Abbildung 7.7: Bidisperses Gemisch in einer Box: Momentaufnahmen der Partikelverteilung zu unterschiedlichen Zeitpunkten.

strukturierten Anordnung der Partikel zum Zeitpunkt t = 0.1 s nichts mehr zu sehen ist. Zur Sekunde t = 0.4 s haben sich bereits einige Partikel jeweils entsprechend ihrer Dichte, $\rho_s > \rho_F$ oder $\rho_l < \rho_F$, an der unteren bzw. oberen Berandungsfläche der Box angesammelt. Vergleicht man nun diese Aufnahme mit derjenigen zum Zeitpunkt t = 0.8 s, so ist rechts- und linksseitig der horizontalen Symmetrieebene ($x_3 = 3$ cm) gleichermaßen eine starke Abnahme des Mischungsbereichs auszumachen. In der nächsten Aufnahme t = 1.2 s hat sich dieser Mischungsbereich auf fast ein Minimum reduziert, sodass man hier schon gewissermaßen die Ausbildung einer interdispersen Grenzfläche an dieser Ebene erkennen kann. Beidseits der horizontalen Symmetrieebene bildet sich dann im weiteren Verlauf der Simulation ein immer größer werdendes entmischtes Fluidgebiet (Bild t = 1.7 s), bis letztlich alle auf- und absinkenden Partikel, wie in der Aufnahme t = 2.5 s zu sehen ist, sich jeweils im entsprechenden Bereich zusammenfinden. Die zu den obigen Partikelverteilungen zugehörigen Momentaufnahmen der Geschwindigkeiten sind in Abb. 7.8 dargestellt, wobei die Strömungslösungen auf der durch den Koordinatenursprung des Systems gehenden Diagonalebene gezeigt werden.

Bezüglich der beiden Partikeldichten gilt hier die folgende Relation: $(\rho_{P_s} - \rho_F) = |(\rho_{P_l} - \rho_F)|$. Somit ist die effektive Gewichtskraft eines schweren Partikels \mathcal{P}_s gleich der



Abbildung 7.8: Bidisperses Gemisch in einer Box: Momentaufnahmen der Geschwindigkeitslösungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten. (Fluidgeschwindigkeiten auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene.)



Abbildung 7.9: Zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung: (a) im unteren und (b) im oberen Bereich der Box. (c) Zeitentwicklung der gemittelten Partikelgeschwindigkeiten im mittleren Bereich der Box.

entgegengesetzt orientierten effektiven Auftriebskraft eines leichten Partikels \mathcal{P}_l .³ Demzufolge sollte die Simulation dieses Beispiels auch eine relativ symmetrische Systemantwort liefern. Zur Darstellung dieses Aspekts werden in Abb. 7.9(a) und Abb. 7.9(b) die erzielten zeitlichen Entwicklungen der Partikelverteilung im unteren bzw. oberen Bereich der Box angeführt und in Abb. 7.9(c) die gewonnenen Verläufe der gemittelten resultierenden Partikelgeschwindigkeiten im mittleren Bereich der Box, der hier wie folgt gewählt

³Die effektive Gewichtskraft stellt die um den Auftrieb reduzierte Gewichtskraft dar. In Entsprechung dazu beschreibt die effektive Auftriebskraft die um die Gewichtskraft reduzierte Auftriebskraft.

ist: $[1.25 \le x_3 \le 4.75]$. Es ist noch anzumerken, dass die auf den genannten Mischungsbereich bezogene totale mittlere Partikelgeschwindigkeit mit zunehmender Zeit und der entsprechend abnehmenden Konzentration signifikant zurückgeht. Die größeren Partikelgeschwindigkeiten, die bei einer höheren Konzentration im Mischungsbereich anzutreffen sind, haben nach Fessas & Weiland [68, 69] ihren Ursprung in den starken konvektiven Strömungen, die aus den Relativbewegungen zwischen den leichten und schweren Partikeln resultieren.

Fallbeispiel 2: Bei diesem Fallbeispiel werden gegenüber der vorhergehenden Konfiguration zwei Änderungen vorgenommen. Und zwar wird an dieser Stelle zum einen davon ausgegangen, dass alle Partikel eine adhäsive Oberflächenwirkung besitzen. Zum anderen sollen die schweren Partikel nun eine Stoffdichte haben, die unwesentlich höher als die Fluiddichte ist. Aus dem zweiten Punkt folgt hier in Bezug auf das Verhältnis zwischen der effektiven Auftriebskraft von \mathcal{P}_l und der effektiven Gewichtskraft von \mathcal{P}_s die Relation 1 : 10. So stellt sich bei dieser Konfiguration der Effekt ein, dass infolge der vergleichsweise starken effektiven Auftriebskräfte der leichten Partikel gemeinsam mit der bestehenden Adhäsionswirkung unter den Teilchen sich Agglomerate ausbilden, welche größtenteils aufschwimmen. Ein Agglomerat kann natürlich auch entsprechend seiner Zusammensetzung absinken oder im Sonderfall einen Schwebezustand annehmen – diese beiden Fälle treten angesichts der hier bestehenden relativ großen Dichtedifferenz zwischen den zwei Partikeltypen allerdings vereinzelt auf. Um das numerisch simulierte Systemverhalten zu veranschaulichen, werden in Abb. 7.10 einige Momentaufnahmen der erzielten räumlichen Partikelverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten der Berechnung gezeigt. Jene Zeitverläu-



Abbildung 7.10: Bidisperses Gemisch in einer Box mit adhäsiven Partikeln: Momentaufnahmen der Partikelverteilung zu unterschiedlichen Zeitpunkten.

fe, die die Verteilung der Partikeltypen in der Box über die Simulationsdauer wiedergeben,



Abbildung 7.11: Zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung: (a) im unteren und (b) im oberen Bereich der Box. (c) Zeitentwicklung der gemittelten Partikelgeschwindigkeiten im mittleren Bereich der Box.



Abbildung 7.12: Bidisperses Gemisch in einer Box mit adhäsiven Partikeln: Momentaufnahmen der Geschwindigkeitslösungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten. (Fluidgeschwindigkeiten auf der durch den Ursprung des Koordinatensystems gehenden Diagonalebene.)

werden in Abb. 7.11(a) und Abb. 7.11(b) angeführt. Die zu diesem Fallbeispiel gehörenden Geschwindigkeitslösungen sind in Abb. 7.11(c) und Abb. 7.12 zu finden. Wenn man in der zuletzt genannten Abbildung das Bild zur Sekunde t = 1.7 s genauer betrachtet, so fallen einem die starken Strömungen auf, die jeweils rechts und links des aufschwimmenden großen Agglomerats existieren. Dieses Aufschwimmen bewirkt nämlich, dass das oben befindliche Fluid, welches dem herannahenden Agglomerat konsequenterweise weichen muss, seitlich nach unten verdrängt wird. Aus dieser Verdrängungswirkung resultiert dann entlang der Seitenwände der Box eine abwärtsgerichtete Fluidströmung.

7.3 Partikelbeladene Rohrströmung

Dieses Beispiel widmet sich der Beschreibung einer partikelbeladenen Rohrströmung.⁴ Die Geometrie des Rohrs ist mit den Abmessungen in Abb. 7.13 dargestellt. Wie zu erkennen ist, weist dieses Teil im mittleren Abschnitt eine Verjüngung auf. Die charakteristischen Angaben zur Festlegung der Fluid- und Partikelphase können der genannten Abbildung ebenso entnommen werden. Zu beachten ist im Folgenden, dass hier der Einfluss der Gravitation außer Acht bleibt. Ein weiterer Punkt, auf den an dieser Stelle explizit hingewiesen werden soll, ist die adhäsive Wechselwirkung, die sowohl im Hinblick auf die Interaktion zwischen Partikeln untereinander wie auch für die Partikel-Wand-Interaktion angesetzt wird, wobei gilt: $W_{PP} = W_{PW} = 10.0 \text{ erg/cm}^2$. Die disperse Phase besteht bei diesem Beispiel aus drei verschiedenen Partikeltypen, die sich lediglich bezüglich des Radiusses unterscheiden lassen. Was die Einbringung der Teilchen in das Fluid anbelangt, so wird hier auf die Weise verfahren, dass im Laufe der Simulation diese nach und nach am Einflussrand in die Strömung eingesetzt werden und dabei eine Anfangsgeschwindigkeit erhalten, welche der Einströmgeschwindigkeit des Fluids ($\overline{v} = 2 \text{ cm/s}$) entspricht. Die Positionierung der Partikel am Einströmrand und die Auswahl des Parti-



Abbildung 7.13: Problemstellung der partikelbeladenen Rohrströmung.

keltyps erfolgen nach einem Zufallsprinzip. Zur Berechnung dieses Beispiels wurde für das Strömungsgebiet eine auf drei Ebenen basierende FEM-Diskretisierung eingesetzt, wobei die feinste Ebene aus 2.304.000 \tilde{Q}_1/Q_0 -Elementen bestand (2.304.000 Druckknoten, 6.953.280 Geschwindigkeitsknoten). Die Durchführung der Simulation erfolgte mit folgenden Zeitschrittgrößen: $\Delta t_{\text{FEM}} = 10^{-4}$ s und $\Delta t_{\text{DEM}} = 10^{-6}$ s. Einige Momentaufnahmen der erzielten Geschwindigkeitslösungen sind für unterschiedliche Zeitpunkte in Abb. 7.14 dargestellt. Die Wiedergabe der Lösungen der Fluidphase erfolgt in den darin gezeigten Bildern auf zwei zueinander senkrechten Ebenen, die durch die Systemachse gehen.

⁴Dieses Beispiel wurde bereits in Wriggers & Avci [280] mit anderen Eingangsgrößen betrachtet.



zueinander senkrechten Ebenen, die jeweils durch die Systemachse des Rohres gehen, gezeigt. Abbildung 7.14: Partikelbeladene Rohrströmung: Momentaufnahmen der Partikel- und Fluidgeschwindigkeiten. Letztere werden auf zwei Erreicht das einströmende Fluid jene Stelle, wo die Verjüngung ansetzt, so beginnen die mehr zur Rohrwand hin befindlichen Fluidteilchen ihre Geschwindigkeitsrichtung stetig zu ändern – und zwar konform zur Rohrgeometrie. Die von dieser Anderung der Strömungssituation betroffenen Partikel können angesichts ihrer Massenträgheit den resultierenden gekrümmten Stromlinien im Allgemeinen nicht ohne Verzögerung folgen (Stokeszahl St > 0, vgl. (2.4)). Die Folge ist ein gewisser Schlupf zwischen diesen Stromlinien und den entsprechenden Partikeltrajektorien. In dem hier betrachteten Fall sind die besagten Verzögerungen der Partikelbewegungen allerdings so gering ($St \approx 1$), dass die dispersen Teilchen nicht vor dem Erreichen der Einmündung des engen Rohrstücks mit der Wandung in Kontakt treten. Wesentlich komplexer ist hingegen die Strömungssituation im Einmündungsgebiet. Denn durch den abnehmenden Abstand der Stromlinien, auf denen sich die Partikel bewegen, treten hier zahlreiche Partikel-Partikel-Stöße auf, aus welchen zumeist Agglomerate hervorgehen. Wird ein entstehendes Agglomerat zur Rohrwandung hin abgelenkt, so bleibt es dort aufgrund der Adhäsionswirkung zwischen den Partikeln und der Wand haften. Das Agglomerat wächst in der Folge allmählich durch weitere neu auftreffende Partikel und wird in Entsprechung zu den Strömungskräften entlang der Wandung fortbewegt. Diese Strömungssituation kann man in Abb. 7.15(b) im linken Bereich des Ausschnitts der Momentaufnahme sehr schön erkennen. Die anderen in Abb. 7.15 dargestellten Ausschnitte lassen auch erkennen, wie komplex die Entwicklung der Strömung auf der stromabgelegenen Seite des Systems ist. Dieses Gebiet soll nachstehend ein wenig näher betrachtet werden.



Abbildung 7.15: Ausschnitte aus der partikelbeladenen Rohrströmung: (a)-(c) Stromlinien sowie Partikelgeschwindigkeiten und (d) Partikelgeschwindigkeitsvektoren.

Um den Ausflussbereich der Verjüngung bildet sich wie bei einer Strömung über einen abgestuften Kanal [42] ein Wirbel aus (siehe Abb. 7.15(a)). Bei Betrachtung von Abb. 7.15(b) kann man zum einen sehen, dass im Laufe der Zeit Agglomerate in diesen Wirbel eingetragen werden. Zum anderen ist in diesem Bild der große Einfluss des Wirbels auf die Trajektorien der an ihm vorbeiströmenden Partikel auszumachen. Diesen Einfluss machen die Geschwindigkeitsvektoren der Partikel in Abb. 7.15(d) explizit deutlich, denn – wie zu sehen ist – bewegen sich einige unmittelbar vom Wirbel erfasste Partikel gegen die bestehende Hauptströmungsrichtung. Vergrößerte Ausschnitte der Systemantwort sind in Abb. 7.16 zu finden. Man sieht hier detailliert die Phasenwechselwirkung um



Abbildung 7.16: Partikelbeladene Rohrströmung: (oben) Momentaufnahme der Partikel- und Fluidgeschwindigkeiten und (unten) Momentaufnahme des Druckfeldes zum Zeitpunkt t = 6.5 s.

ein etwas größer ausgebildetes Agglomerat. In diesem Bild wird auf dessen Umströmung (Geschwindigkeitsfeld) und auf die diesbezüglich resultierende lokale Druckdifferenz von Luv nach Lee (Druckfeld) verwiesen. Ferner soll zum Abschluss festgehalten werden, dass

die Strömungskräfte, welche die direkt an der Wand befindlichen Partikel eines Agglomerats übertragen müssen, mit einer größer werdenden Partikelansammlung entsprechend zunehmen. So treten im Laufe der Simulation solche Fälle auf, dass ein Agglomerat sich bei einer ausreichend hohen Normalkraft vollkommen von der Wand loslöst oder ab einer gewissen Tangentialkraft durch die Strömung entlang der Wand gleitend vorangetrieben wird. Es zeigte sich, dass dieses Beispiel mit dem hier entwickelten Fluid-Partikel-Löser ohne Probleme behandelt werden konnte.

Kapitel 8: Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich im Rahmen der Direkten Numerischen Simulation (DNS) mit der Entwicklung und Umsetzung eines numerischen Verfahrens zur Simulation von partikelbeladenen 3D Strömungen. Dafür wurde hier ein 'Fictitious Domain'-Verfahren erarbeitet und erfolgreich realisiert. Der implementierte Ansatz beruht auf einer Vier-Wege-Kopplung zwischen der dispersen Partikelphase und der kontinuierlichen Fluidphase. Dabei wird in Bezug auf die Abbildung der beiden Phasen ein Konzept verfolgt, bei dem die erstgenannte Phase anhand sphärischer Teilchen beschrieben wird. Was die andere Phase angeht, so wird von einem Newtonschen Fluid ausgegangen. Angesichts der Vier-Wege-Kopplung der Fluid-Partikel-Wechselwirkung erlaubt das Verfahren die Simulation von sowohl verdünnten als auch dichten Mehrphasenströmungen. Der ausgearbeitete Fluid-Partikel-Löser wurde an zahlreichen Testbeispielen verifiziert und ist imstande komplexe partikelbeladene Strömungen zu berechnen.

Das vorgestellte Konzept zur Simulation von Fluid-Partikel-Strömungen beruht auf einer Kopplung von zwei etablierten numerischen Methoden, nämlich auf der Verknüpfung der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) mit der Finite-Elemente-Methode (FEM). Die zur Behandlung der dispersen Phase eingesetzte DEM ist ein weitverbreitetes numerisches Verfahren für Partikelsimulationen. Dessen Entwicklung – hierzu zählen Erarbeitung, Implementierung und Verifikation der DEM-Algorithmen – bildet bei dieser Dissertation einen Schwerpunkt. Die Überprüfung der Komponenten der DEM-Software wird hier anhand einer Reihe von Testbeispielen vorgenommen. Dieser Programmteil des Fluid-Partikel-Lösers besteht aus drei großen Bausteinen, und zwar aus den Konstitutivbeziehungen für die Kontaktbeschreibung der Partikel, dem Zeitintegrations- und dem Kontaktsuchalgorithmus. Zur Beschreibung der Interaktion zwischen Partikeln untereinander und zwischen Partikeln mit Wandelementen wurden Konstitutivbeziehungen aus der Literatur herangezogen und umgesetzt. Die dabei implementierten Modelle sind in der Lage folgende Phänomene abzubilden: Normalkontakt, Tangentialkontakt, Torsionswiderstand und Rollwiderstand. Wie bekannt, erweisen sich DEM-Berechnungen als numerisch sehr aufwendige Simulationen. Dieser Punkt ist hauptsächlich auf den algorithmischen Aufwand in puncto Kontaktsuche zurückzuführen. So ist die Umsetzung von effizienten Suchmethoden für den Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Kontakt zwingend erforderlich, wenn Systeme mit einer größeren Partikelanzahl zu betrachten sind. Von daher wurde die konzipierte Partikelsoftware mit einem Suchalgorithmus ausgestattet, welcher aus einer Kombination der Verlet-Listen-Methode und dem Linked-Cell-Verfahren besteht.

Die Konstitutivgleichungen der Fluidphase werden in dieser Arbeit im Rahmen der FEM diskretisiert und gelöst. Dafür wurde ein bereits existierendes Programmpaket für Einphasenströmungen im Kontext der 'Fictitious Domain'-Methode so erweitert und angepasst, dass es zur Simulation von partikelbeladenen Mehrphasenströmungen eingesetzt werden kann. Ein wesentlicher Schwerpunkt der vorgenommenen Erweiterungen ist die Implementierung eines effizienten Verfahrens zur laufenden Lokalisierung jener Elemente im FEM-Netz, die von den frei beweglichen Partikeln im System räumlich überlagert werden. Denn die ständige Kenntnis über die Phasenzugehörigkeit aller Elemente im Mehrfeldgebiet ist aus zwei wesentlichen Aspekten unbedingt erforderlich – und zwar zum einen im Hinblick auf die Festlegung der fiktiven Randbedingungen und zum anderen zur Ermittlung der auf die Partikel wirkenden Strömungskräfte. Was den letzten Punkt angeht, so werden in dieser Arbeit zwei verschiedene Ansätze vorgestellt. Diese Ansätze wurden in den Fluid-Partikel-Löser eingebaut und anschließend wurde die Implementierung anhand von mehreren Testbeispielen erfolgreich verifiziert.

Um die Tauglichkeit der in der vorliegenden Arbeit entwickelten und umgesetzten Algorithmen zu demonstrieren, wurden drei Simulationsbeispiele vorgestellt, in welchen jeweils eine komplexe Fluid-Partikel-Strömung betrachtet wird. Die Beispiele konnten mit dem erarbeiteten Softwarepaket ohne numerische Schwierigkeiten simuliert werden. Dieser Punkt ist insofern erwähnenswert, da bei solchen Mehrfeldproblemen der Übergang von – relativ gesehen – einfachen zu komplexen Systemen oft mit numerischen Stabilitätsproblemen verbunden ist. Zusammenfassend ist außerdem festzuhalten, dass die bei diesen Beispielen erzielten Lösungen durch qualitative Plausibilitätsbetrachtungen stets gedeutet werden konnten.

An diese letzte Ausführung kann man den ersten Punkt eines möglichen Ausblicks unmittelbar ansetzen. Denn zur weiteren Absicherung des Fluid-Partikel-Lösers sind ohne Frage noch zusätzliche Verifikationssimulationen von aussagekräftigen, komplexen Systemen erforderlich – allerdings von hier an mit der Prämisse, dass die erzielten Lösungen nicht nur qualitativ, sondern auch quantitativ zu bewerten sind. Das Fehlen von gut dokumentierten experimentellen Arbeiten in der Fachliteratur, die für eine quantitative Verifikation einer DNS-Implementierung geeignet sind, stellt in diesem Zusammenhang aber ein grundlegendes Problem dar.

Der zweite Punkt betreffend eines Ausblicks zielt auf eine Weiterentwicklung des vorgestellten Verfahrens. Dessen Erweiterung kann zunächst darin bestehen, den Fluid-Partikel-Löser im Hinblick auf die Behandlung von Mehrphasenströmungen mit superelliptischen und/oder polygonalen Teilchengeometrien auszubauen. Darüber hinaus würde sich hier auch anbieten, die in die DEM-Software implementierten Routinen zur Beschreibung von dynamischen Wänden im Rahmen der 'Fictitious Domain'-Methode mit der Fluidphase zu koppeln. Diese Verknüpfung würde beispielsweise erlauben, gerührte Dispersionen zu simulieren. Im Zusammenhang mit der Modellerweiterung lassen sich an dieser Stelle noch zwei weitere sinnvolle Vorschläge anführen. Dabei bezieht sich einer der beiden unmittelbar auf die Beschreibung der Fluidphase unter Hinzunahme eines Turbulenzmodells. Der andere Vorschlag betrifft die Diskretisierung des Strömungsfeldes und gilt der Verbesserung der geometrischen Abbildung der Partikeloberflächen durch das Netz für eine genauere Erfassung der Phasenwechselwirkung. Ein diesbezüglich vielversprechender Ansatz kommt in Wan & Turek 270 zum Einsatz – allerdings im Rahmen von 2D Fluid-Partikel-Strömungen. Bei dem in dieser Veröffentlichung umgesetzten Verfahren werden die Maschen des Strömungsnetzes unter Einhaltung von gewissen Kriterien und Bewahrung der Elementtopologie mit abnehmender Maschengröße lokal so in Richtung der Partikeloberflächen verschoben und an diese ausgerichtet, dass an den Partikelrändern eine höhere Informationsdichte der Fluidströmung erzielt wird. Eine Umsetzung dieser Herausforderung für 3D Systeme würde den hier entwickelten Löser entscheidend erweitern.

Anhang A: Partikel-Wand-Kontakt

In diesem Kapitel soll das Verfahren beschrieben werden, das in der vorliegenden Arbeit zur Kontaktdetektion zwischen einem Partikel und einem ebenen Wandelement zum Einsatz kommt. Die Idee der im Folgenden aufgezeigten Strategie zur Behandlung dieser Problematik ist auf die Arbeiten von Kremmer & Favier [139, 140] zurückzuführen, wobei das Augenmerk der Autoren sich in [139] auf ein stationäres und in [140] auf ein bewegliches Wandelement richtet. Bevor nachstehend die wesentlichen Aspekte zur Durchführung der Partikel-Wand-Kontaktüberprüfung erläutert werden, sollen vorweg die dafür erforderlichen Basisgrößen zur Verfügung gestellt werden.

Für die Diskretisierung der inneren und der äußeren Berandungen eines Partikelsystems kommen hier Dreieckselemente zur Anwendung, da mit diesen komplexe Systemberandungen sehr einfach abgebildet werden können. Ein exemplarisches Dreieckselement \mathcal{T} , das für die Ausführungen in diesem Kapitel als Grundlage dienen soll, ist mit den zugehörigen Bezeichnungen in Abb. A.1 illustriert. Man kann in Bezug auf dieses Element folgende geometrische Beziehungen schon im Voraus angeben:

Grundlegende Größen für den Partikel-Wand-Kontakt:
Gegeben sind die Ortsvektoren zu den Elementknoten:
$$\mathbf{x}_{k_1}$$
, \mathbf{x}_{k_2} , \mathbf{x}_{k_3} .
Es gelten folgende Zusammenhänge:
(i) Seitenvektoren: $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k_2} - \mathbf{x}_{k_1}$, $\mathbf{y}_2 = \mathbf{x}_{k_3} - \mathbf{x}_{k_2}$, $\mathbf{y}_3 = \mathbf{x}_{k_1} - \mathbf{x}_{k_3}$
(ii) Seitenlängen: $y_1 = ||\mathbf{y}_1||$, $y_2 = ||\mathbf{y}_2||$, $y_3 = ||\mathbf{y}_3||$
(iii) Richtungsvektoren der Seiten: $\mathbf{e}_{y_1} = \frac{\mathbf{y}_1}{||\mathbf{y}_1||}$, $\mathbf{e}_{y_2} = \frac{\mathbf{y}_2}{||\mathbf{y}_2||}$, $\mathbf{e}_{y_3} = \frac{\mathbf{y}_3}{||\mathbf{y}_3||}$
(iv) Inkreisradius: $s = \sqrt{\frac{(v - y_1)(v - y_2)(v - y_3)}{v}}$ mit $v = \frac{y_1 + y_2 + y_3}{2}$
(v) Normaleneinheitsvektor auf \mathcal{T} : $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_{y_1} \times \mathbf{e}_{y_2}}{||\mathbf{e}_{y_1} \times \mathbf{e}_{y_2}||}$
(vi) Ortsvektor zum Inkreismittelpunkt: $\mathbf{x}_{\Delta} = \mathbf{x}_{k_1} + (v - y_2)\mathbf{e}_{y_1} + s\frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_{y_1}}{||\mathbf{n} \times \mathbf{e}_{y_1}||}$
(vii) Normalenvektor von M_{Δ} zu $q_{i=\{1,2,3\}}$: $\mathbf{l}_{i=\{1,2,3\}} = [(\mathbf{x}_{\Delta} - \mathbf{x}_{k_i}) \cdot \mathbf{e}_{y_i}]\mathbf{e}_{y_i} + \mathbf{x}_{k_i} - \mathbf{x}_{\Delta}$

Partikel-Wand-Kontakt bei stationärer Wand

Es lassen sich für den Kontakt zwischen dem Partikel \mathcal{P}_i und dem Wandelement \mathcal{T} sieben verschiedene Kontaktereignisse anführen, die vom entsprechenden Algorithmus zu erfassen sind [139]. Da ist zum einen der Fall, dass das Partikel auf die Elementfläche auftrifft,

und zum anderen kann das Partikel aber auch mit einem der drei Elementecken oder einem der drei Elementränder ein Kontaktereignis eingehen. Diese zu unterscheidenden Fälle sollen im Folgenden nacheinander betrachtet werden.



Abbildung A.1: Skizze zum Wandelement \mathcal{T} .

Bei der Partikel-Wand-Kontaktdetektierung besteht der erste Schritt darin, das Partikel auf eine mögliche Interaktion mit der Elementfläche zu überprüfen. Das notwendige Kriterium lautet hierfür wie folgt:

$$g^{n} = g^{n}(\mathbf{x}, t) = R_{i} - |h| = R_{i} - |\mathbf{r}_{p} \cdot \mathbf{n}| \qquad \begin{cases} < 0 \text{ kein Kontakt} \\ \ge 0 \text{ möglicher Kontakt}, \end{cases}$$
(A.1)

wobei $\mathbf{r}_p = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{\Delta}$ der Vektor ist, der vom Mittelpunkt des Inkreises zum Partikelmittelpunkt zeigt (siehe Abb. A.2 oben). Liegt der Fall vor, dass $g^n \geq 0$ ist, dann ist im nächsten Schritt zu untersuchen, ob das Partikel in der Tat das Element \mathcal{T} berührt oder lediglich dessen Raumebene \mathcal{E} schneidet, ohne mit ihm in Kontakt zu treten. Für diesen Test schlagen Kremmer & Favier [139] vor, als Erstes den für die anstehenden Betrachtungen relevanten Bereich der Raumebene bezüglich \mathcal{T} einzugrenzen. Man unterteilt dafür das Element entsprechend Abb. A.1 rechts unten zuerst in die drei Teilflächen $\mathcal{T}_{i=\{1,2,3\}}$ und bildet dann für jede Teilfläche \mathcal{T}_i den Winkel α_i zwischen dem Normalenvektor \mathbf{l}_i und dem vom Inkreismittelpunkt M_{Δ} zum etwaigen Kontaktpunkt k zeigenden Vektor \mathbf{r}_k :

$$\alpha_{i=\{1,2,3\}} = \sphericalangle(\mathbf{l}_i, \mathbf{r}_k) \quad \text{mit} \quad \cos \sphericalangle(\mathbf{l}_i, \mathbf{r}_k) = \frac{\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{r}_k}{\underbrace{||\mathbf{l}_i||}_{S} \, ||\mathbf{r}_k||} , \ \mathbf{r}_k = \underbrace{\mathbf{x}_i - h\mathbf{n}}_{\mathbf{x}_k} - \mathbf{x}_{\bigtriangleup} .$$
(A.2)

Letztlich ist die Teilfläche mit dem kleinsten eingeschlossenen Winkel $\alpha_{\min} = Min[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3]$ für die nachfolgenden Ausführungen maßgeblich. Wenn beispielsweise hier gilt: $\alpha_{\min} = \alpha_1$, sodass \mathcal{T}_1 die signifikante Teilfläche ist (siehe Abb. A.2), dann kann der zweite Schritt des Ebenenkontakts wie folgt angegeben werden:

wenn
$$\begin{cases} \mathbf{r}_k \cdot \mathbf{e}_{l_1} \leq s \text{ und } g^n = R_i - |h| = 0 \implies \text{Kontakt mit der Elementfläche} \\ \mathbf{r}_k \cdot \mathbf{e}_{l_1} > s + R_i \implies \text{kein Kontakt}. \end{cases}$$
(A.3)

Bemerkung: Die hier vorgenommenen Ausführungen gelten in analoger Weise ebenso für \mathcal{T}_2 oder \mathcal{T}_3 , wenn einer dieser beiden Teilflächen näher zu betrachten ist.

Liegt der Umstand vor, dass beide Bedingungen in (A.3) nicht zutreffen, so befindet sich das Partikel entweder mit einem der beiden Eckpunkte k_1 oder k_2 in Kontakt oder mit dem Elementrand, der der Teilfläche \mathcal{T}_1 zugeordnet ist. Diese Fälle sind im unteren Teil der Abb. A.2 skizziert. In der linken Darstellung ist noch der Bereich der räumlichen Ebene \mathcal{E} angedeutet, in dem sich der Punkt k unter diesen Bedingungen befinden kann. Es ist anzumerken, dass der charakteristische Kontaktpunkt nunmehr nicht durch k, sondern durch k' gegeben ist. Man erhält diesen Punkt aus der orthogonalen Projektion von k auf



Abbildung A.2: Skizze zum Partikel-Wand-Kontakt.

die Randlinie von \mathcal{T}_1 bzw. auf die Verlängerung dieser Randlinie. Der zugehörige globale Ortsvektor kann aus

$$\mathbf{x}_{k'} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{r}_k \cdot \mathbf{e}_{l_1} - s)\mathbf{e}_{l_1} \tag{A.4}$$

gewonnen werden und der entsprechende lokale Vektor, der von M_{\triangle} auf k' zeigt, ist

folgendermaßen definiert:

$$\mathbf{r}_{k'} = \mathbf{x}_{k'} - \mathbf{x}_{\Delta} \,. \tag{A.5}$$

Um nun die eigentliche Kontaktüberprüfung des Partikels mit den Eckpunkten k_1 und k_2 sowie mit der betreffenden Elementkante vorzunehmen, sind dafür die beiden orthogonalen Projektionsvektoren von \mathbf{r}'_k auf die Richtungen von \mathbf{e}_{l_2} und \mathbf{e}_{l_3} zu bilden (siehe hierzu Abb. A.2 links unten). Man erhält sie aus

$$\mathbf{f}_{l_2} = (\mathbf{r}_{k'} \cdot \mathbf{e}_{l_2}) \mathbf{e}_{l_2} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{f}_{l_3} = (\mathbf{r}_{k'} \cdot \mathbf{e}_{l_3}) \mathbf{e}_{l_3} \,. \tag{A.6}$$

Die Aufgabe besteht zunächst darin, zu untersuchen, ob einer der beiden folgenden Fälle zutrifft: $||\mathbf{f}_{l_2}|| > s$ oder $||\mathbf{f}_{l_3}|| > s$. Denn im erstgenannten Fall kann man davon ausgehen, dass am Eckpunkt k_2 ein Kontaktereignis vorliegt, und im anderen Fall am Eckpunkt k_1 . Es gilt:

$$||\mathbf{f}_{l_3}|| > s \text{ und } g_{k_1}^n = R_i - ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_1}|| = 0 \implies \text{Kontakt am Knoten } k_1$$
(A.7)

$$||\mathbf{f}_{l_2}|| > s \text{ und } g_{k_2}^n = R_i - ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_2}|| = 0 \Rightarrow \text{Kontakt am Knoten } k_2.$$
 (A.8)

Der Normaleneinheitsvektor, der dem Abstandsmaß $g_{k_1}^n$ oder $g_{k_2}^n$ zugeordnet ist, lautet

$$\mathbf{n}_{k_1} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_1}}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_1}||} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{n}_{k_2} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_2}}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k_2}||}.$$
(A.9)

Wenn aber weder (A.7) noch (A.8) erfüllt ist, dann kann das Partikel nur noch mit der Elementkante der betrachteten Teilfläche in einem Kontaktverhältnis stehen. Das hinreichende Kriterium lautet in dem Fall:

$$||\mathbf{f}_{l_2}|| \le s \text{ oder } ||\mathbf{f}_{l_3}|| \le s \text{ mit } g^n = R_i - ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k'}|| = 0$$
 (A.10)

und der Normaleneinheitsvektor ist hier als

$$\mathbf{n}_{k'} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k'}}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{k'}||} \tag{A.11}$$

definiert.

Partikel-Wand-Kontakt bei dynamischer Wand

Viele industrielle mechanische Vorrichtungen, die zur Behandlung von losen granularen Medien konzipiert sind, besitzen dynamische innere und/oder äußere Systemberandungen, wie z. B. im Falle von Mischtrommeln, Separiertischen und Förderschnecken. Die zusätzliche Herausforderung besteht bei der Simulation von dergleichen Systemen gegenüber solchen mit stationären Wänden im Grunde darin, die Knotenkoordinaten der einzelnen Wandelemente gemäß den expliziten kinematischen Vorgaben für die Berandungen nach jedem Zeitschritt Δt zu ermitteln und dann die Kontaktüberprüfung in Bezug auf die aktuelle Position der Elemente durchzuführen. Es bietet sich hier dafür an, das eben betrachtete Verfahren als eine gesonderte Routine zu implementieren. Damit kann sie zur Kontaktüberprüfung zwischen den Partikeln und den betreffenden Wandelementen mit den jeweils aktuellen Ortsvektoren $\mathbf{x}_{k_1}, \mathbf{x}_{k_2}, \mathbf{x}_{k_3}$ als neue Eingangsgrößen herangezogen werden. Demgegenüber wird in der Arbeit von Kremmer & Favier [140] so vorgegangen, dass die zu Beginn der Simulation aus den Ortsvektoren der Elementknoten abgeleiteten Größen analog zu diesen Vektoren allesamt mitverschoben und/oder mitrotiert werden. Sie werden also nicht in jedem Zeitschritt von Grund auf neu berechnet.

Im Folgenden werden die Berechnungsschritte zur Beschreibung der Kinematik des Wandelementes \mathcal{T} betrachtet. Dabei soll zuerst die Translationsbewegung und im Anschluss daran die Rotationsbewegung von \mathcal{T} behandelt werden.

Translationsbewegung. Geht man davon aus, dass das Wandelement \mathcal{T} in Abb. A.3(a) eine gleichmäßig beschleunigte Translationsbewegung ausführt (konstante Translationsbeschleunigung \mathbf{a}_w , Anfangsgeschwindigkeit \mathbf{v}_w^0), so lauten die Berechnungsschritte zur Wiedergabe seiner Kinematik wie folgt:

Inkrementelle Translation von \mathcal{T} :

Gegeben: $\mathbf{a}_{w}, \mathbf{v}_{w}^{0}, \mathbf{x}_{k_{1}}^{n} = \mathbf{x}_{k_{1}}(t^{n}), \mathbf{x}_{k_{2}}^{n} = \mathbf{x}_{k_{2}}(t^{n}), \mathbf{x}_{k_{3}}^{n} = \mathbf{x}_{k_{3}}(t^{n}), \mathbf{v}_{w}^{n} = \mathbf{v}_{w}(t^{n})$ Bestimme: $\mathbf{x}_{k_{1}} = \mathbf{x}_{k_{1}}(t^{n+1}), \mathbf{x}_{k_{2}} = \mathbf{x}_{k_{2}}(t^{n+1}), \mathbf{x}_{k_{3}} = \mathbf{x}_{k_{3}}(t^{n+1}), \mathbf{v}_{w} = \mathbf{v}_{w}(t^{n+1})$ Es gilt: $\Delta t = t^{n+1} - t^{n}$

(i) Berechne den inkrementellen Verschiebungsvektor:

$$\Delta \mathbf{x} = \frac{1}{2} \mathbf{a}_w \Delta t^2 + \mathbf{v}_w^n \Delta t \,. \tag{A.12}$$

(ii) Ermittle die neuen Elementknotenkoordinaten:

$$\mathbf{x}_{k_1} = \mathbf{x}_{k_1}^n + \Delta \mathbf{x} \,, \, \mathbf{x}_{k_2} = \mathbf{x}_{k_2}^n + \Delta \mathbf{x} \,, \, \mathbf{x}_{k_3} = \mathbf{x}_{k_3}^n + \Delta \mathbf{x} \,. \tag{A.13}$$

(iii) Bestimme die neue Translationsgeschwindigkeit des Wandelements:

$$\mathbf{v}_w = \mathbf{a}_w \Delta t + \mathbf{v}_w^n \,. \tag{A.14}$$

Rotationsbewegung. Es soll hier analog zur Translationsbewegung von einer gleichmäßig beschleunigten Rotationsbewegung des Wandelements \mathcal{T} in A.3(b) ausgegangen werden (konstante Winkelbeschleunigung ζ_w , Anfangsgeschwindigkeit ω_w^0). Um nun die Rotationskinematik des Elements um eine gegebene Drehachse zu beschreiben, gilt es, auf dieser Achse einen Bezugspunkt festzulegen, der dann den Ursprung des lokalen Koordinatensystems für die Rotationsbeziehungen bildet. Dieser Punkt ist in Abb. A.3(b) als *B* gekennzeichnet; des Weiteren angegeben sind darin der Richtungsvektor \mathbf{e}_b der Drehachse und der Drehwinkel $\Delta \varphi$ um diese Achse. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die Orientierung von \mathbf{e}_b konstant sei.





Abbildung A.3: Illustrative Darstellung der Bewegung des Wandelements \mathcal{T} : (a) Translationsbewegung und (b) Rotationsbewegung.

Test des Algorithmus für den Partikel-Wand-Kontakt

Die Probe der Implementierung des oben beschriebenen Verfahrens erfolgt hier anhand der Simulation von zwei exemplarisch gewählten Partikeltestsystemen. Dabei sollen diese nicht nur stationäre, sondern auch bewegliche Berandungen besitzen – und zwar soll bei einem System ein Teil der Wände sich translatorisch bewegen und beim anderen System rotatorisch. Die Systeme und einige Momentaufnahmen von deren DEM-Simulationen sind in Abb. A.4 und Abb. A.5 gegeben. Es lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass bei den Berechnungen sämtliche auftretenden Kontaktereignisse stets erfolgreich erkannt wurden.



Abbildung A.4: Beispiel einer DEM-Simulation vom Einlassen eines pfahlähnlichen Objektes in eine Partikelumgebung: (a) Isometrische Ansicht des Gesamtsystems und (b) Querschnittsansicht des Systems. Die Momentaufnahmen zeigen von links nach rechts den Zeitablauf der Simulation zu den Zeitpunkten t = 0.0 s, t = 1.8 s und t = 3.6 s. Die Anzahl der Partikel im System beträgt 60 000.



Abbildung A.5: Beispiel einer DEM-Simulation von einer Mischtrommel: (a) Isometrische Ansicht des Gesamtsystems und (b) Frontalansicht der Trommel. Die Momentaufnahmen zeigen von links nach rechts den Zeitablauf der Simulation zu den Zeitpunkten t = 0.0 s, t = 10.6 s, t = 21.2 s und t = 42.4 s. Die Anzahl der Partikel im System beträgt 260 000.

Literaturverzeichnis

- Ai, J.; Chen, J.-F.; Rotter, J. M. & Ooi, J. Y.: Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technol.* 206 (2011), 269–282.
- [2] Albers, N. & Spahn, F.: The influence of particle adhesion on the stability of agglomerates in saturn's rings. *Icarus* 181 (2006), 292–301.
- [3] Alder, B. J. & Wainwright, T. E.: Phase transition for a hard sphere system. J. Chem. Phys. 27 (1957), 1208–1209.
- [4] Allen, M. P. & Tildesley, D. J.: Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press 1987.
- [5] Andre, D.; Iordanoff, I.; Charles, J.-I. & Neauport, J.: Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **213** (2012), 113–125.
- [6] Apte, S. V.; Martin, M. & Patankar, N. A.: A numerical method for fully resolved simulation (FRS) of rigid particle-flow interactions in complex flows. J. Comput. Phys. 228 (2009), 2712–2738.
- [7] Attard, P. & Parker, J. L.: Deformation and adhesion of elastic bodies in contact. *Phys. Rev. A* 46 (1992), 7959–7971.
- [8] Avci, B. & Wriggers, P.: Numerical simulation of particle-fluid systems. In Mueller-Hoeppe, D.; Loehnert, S. & Reese, S. (eds.): *Recent Developments and Innovative Applications in Computational Mechanics*. Springer 2011, pp. 249–256.
- [9] Avci, B. & Wriggers, P.: A DEM-FEM coupling approach for the direct numerical simulation of 3D particulate flows. J. Appl. Mech. **79** (2012).
- [10] Baaijens, F. P. T.: A fictitious domain/mortar element method for fluid-structure interaction. Int. J. Numer. Methods Fluids 35 (2001), 743-761.
- [11] Bagchi, P. & Balachandar, S.: Steady planar straining flow past a rigid sphere at moderate reynolds number. J. Fluid Mech. 466 (2002), 365–407.
- [12] Becker, E. & Bürger, W.: Kontinuumsmechanik. Teubner Studienbücher 1975.
- [13] Belytschko, T.; Liu, W. K. & Moran, B.: Nonlinear Finite Element Analysis for Continua and Structures. John Wiley & Sons 2000.
- [14] Bierwisch, C.; Kraft, T.; Riedel, H. & Moseler, M.: Die filling optimization using three-dimensional discrete element modeling. *Powder Technol.* **196** (2009), 169–179.

- [15] Bierwisch, C.; Kraft, T.; Riedel, H. & Moseler, M.: Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling. J. Mech. Phys. Solids 57 (2009), 10–31.
- [16] Bradley, R. S.: The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids. *Philos. Mag.* 13 (1932), 853 – 862.
- [17] Braess, H.: Untersuchungen von Strömungen in zeitlich veränderlichen Gebieten mit der Methode der Finiten Elemente. Dissertation (2000), Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Leibniz Universität Hannover.
- [18] Breugem, W.-P.: A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows. J. Comput. Phys. 231 (2012), 4469–4498.
- [19] Bridges, F. G.; Hatzes, A. & Lin, D. N. C.: Structure, stability and evolution of Saturn's rings. *Nature* **309** (1984), 333–335.
- [20] Bridges, F. G.; Supulver, K. D.; Lin, D. N. C.; Knight, R. & Zafra, M.: Energy loss and sticking mechanisms in particle aggregation in planetesimal formation. *Icarus* 123 (1996), 422–435.
- [21] Brilliantov, N. V.; Albers, N.; Spahn, F. & Pöschel, T.: Collision dynamics of granular particles with adhesion. *Phys. Rev. E* 76 (2007).
- [22] Brilliantov, N. V. & Pöschel, T.: Rolling friction of a viscous sphere on a hard plane. Europhys. Lett. 42 (1998), 511–516.
- [23] Brilliantov, N. V. & Pöschel, T.: Collision of adhesive viscoelastic particles. In Hinrichsen, H. & Wolf, D. (eds.): *The Physics of Granular Media*. Wiley-VCH 2004, chap. 8, pp. 189–209.
- [24] Brilliantov, N. V.; Spahn, F.; Hertzsch, J. M. & Pöschel, T.: The collision of particles in granular systems. *Physica A* 231 (1996), 417–424.
- [25] Brilliantov, N. V.; Spahn, F.; Hertzsch, J. M. & Pöschel, T.: Model for collisions in granular gases. *Phys. Rev. E* 53 (1996), 5382–5392.
- [26] Bronstein, I. N.; Semendjajew, K. A.; Musiol, G. & Mühlig, H.: Taschenbuch der Mathematik. Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch 2008, 7 edn.
- [27] Brooks, A. N. & Hughes, T. J. R.: Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **32** (1982), 199–259.
- [28] Brown, P. P. & Lawler, D. F.: Sphere drag and settling velocity revisited. J. Environ. Eng. 129 (2003), 222–231.
- [29] Bruhns, O. T.: Elemente der Mechanik III, Kinetik. Shaker 2004.

- [30] Cambou, B.; Jean, M. & Radjai, F. (eds.): Micromechanics of Granular Materials. John Wiley & Sons 2009.
- [31] Chapman, B.; Jost, G. & van der Pas, R.: Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming. The MIT Press 2008.
- [32] Chaudhury, M. K. & Whitesides, G. M.: Direct measurement of interfacial interactions between semispherical lenses and flat sheets of poly(dimethylsiloxane) and their chemical derivatives. *Langmuir* 7 (1991), 1013–1025.
- [33] Cheng, N.-S.: Comparison of formulas for drag coefficient and settling velocity of spherical particles. *Powder Technol.* 189 (2009), 395–398.
- [34] Chokshi, A.; Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D.: Dust coagulation. Astrophys. J. 407 (1993), 806–819.
- [35] Chung, T. J.: Computational Fluid Dynamics. Cambridge University Press 2002.
- [36] Cleary, P. W.: Recent advances in DEM modelling of tumbling mills. *Miner. Eng.* 14 (2001), 1295–1319.
- [37] Cleary, P. W.: Large scale industrial DEM modelling. Eng. Comput. 21 (2004), 169–204.
- [38] Cleary, P. W.: Industrial particle flow modelling using discrete element method. Eng. Comput. 26 (2009), 698–743.
- [39] Clift, R.; Grace, J. R. & Weber, M. E.: Bubbles, Drops and Particles. Academic Press 1978.
- [40] Crowe, C. T.: Multiphase Flow Handbook. CRC Press 2006.
- [41] Crowe, C. T.; Schwarzkopf, J. D.; Sommerfeld, M. & Tsuji, Y.: Multiphase Flows with Droplets and Particles. CRC Press 2011, 2 edn.
- [42] Cruchaga, M. A.: A study of the backward-facing step problem using a generalized streamline formulation. *Commun. Numer. Methods Eng.* 14 (1998), 697–708.
- [43] Cundall, P. A.: A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. In *Proceedings of the International Symposium of Rock Fracture*, 1971, Nancy, France, Paper No. II-8.
- [44] Cundall, P. A. & Strack, O. D. L.: Discrete numerical model for granular assemblies. Geotechnique 29 (1979), 47–65.
- [45] Curnier, A.: Unilateral contact mechanical modelling. In Wriggers, P. & Panagiotopoulos, P. (eds.): New developments in contact problems. Springer 1999, no. 384 in CISM Courses and Lectures.

- [46] D'Addetta, G. A.; Kun, F. & Ramm, E.: On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials. *Granular Matter* 4 (2002), 77–90.
- [47] Dandy, D. S. & Dwyer, H. A.: A sphere in shear-flow at finite Reynolds-number effect of shear on particle lift, drag, and heat-transfer. J. Fluid Mech. 216 (1990), 381–410.
- [48] Datta, A.; Mishra, B. K.; Das, S. P. & Sahu, A.: A DEM analysis of flow characteristics of noncohesive particles in hopper. *Mater. Manuf. Processes* 23 (2008), 196–203.
- [49] de Boer, R.: Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure. Springer 1982.
- [50] Derjaguin, B. V.; Muller, V. M. & Toporov, Y. P.: Effect of contact deformations on adhesion of particles. J. Colloid Interface Sci. 53 (1975), 314–326.
- [51] Diaz-Goano, C.; Minev, P. D. & Nandakumar, K.: A fictitious domain/finite element method for particulate flows. J. Comput. Phys. 192 (2003), 105–123.
- [52] Dintwa, E.; Tijskens, E. & Ramon, H.: On the accuracy of the Hertz model to describe the normal contact of soft elastic spheres. *Granular Matter* 10 (2008), 209–221.
- [53] Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M.: Resistance to rolling in the adhesive contact of two elastic spheres. *Philos. Mag. A* 72 (1995), 783–803.
- [54] Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M.: The physics of dust coagulation and the structure of dust aggregates in space. Astrophys. J. 480 (1997), 647–673.
- [55] Donea, J. & Huerta, A.: Finite Element Methods for Flow Problems. John Wiley & Sons 2003.
- [56] Duchanoy, C. & Jongen, T. R. G.: Efficient simulation of liquid-solid flows with high solids fraction in complex geometries. *Comput. Fluids* **32** (2003), 1453–1471.
- [57] Durst, F.: Grundlagen der Strömungsmechanik. Springer 2006.
- [58] Eldredge, K. R. & Tabor, D.: The mechanism of rolling friction: 1. The plastic range. Proc. R. Soc. London, Ser. A 229 (1955), 181–198.
- [59] Fadlun, E. A.; Verzicco, R.; Orlandi, P. & Mohd-Yusof, J.: Combined immersedboundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *J. Comput. Phys.* 161 (2000), 35–60.
- [60] Feng, J.; Hu, H. H. & Joseph, D. D.: Direct simulation of initial-value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 1. Sedimentation. J. Fluid Mech. 261 (1994), 95–134.

- [61] Feng, J.; Hu, H. H. & Joseph, D. D.: Direct simulation of initial-value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 2. Couette and Poiseuille flows. J. Fluid Mech. 277 (1994), 271–301.
- [62] Feng, Y. Q.; Xu, B. H.; Zhang, S. J.; Yu, A. B. & Zulli, P.: Discrete particle simulation of gas fluidization of particle mixtures. AIChE Journal 50 (2004), 1713–1728.
- [63] Feng, Y. T.; Han, K. & Owen, D. R. J.: Coupled lattice Boltzmann method and discrete element modelling of particle transport in turbulent fluid flows: Computational issues. Int. J. Numer. Methods Eng. 72 (2007), 1111–1134.
- [64] Feng, Z. G. & Michaelides, E. E.: Proteus: a direct forcing method in the simulations of particulate flows. J. Comput. Phys. 202 (2005), 20–51.
- [65] Fernandez, J. W.; Cleary, P. W. & McBride, W.: Effect of screw design on hopper drawdown of spherical particles in a horizontal screw feeder. *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011), 5585–5601.
- [66] Ferziger, J. H.: Numerical Methods for Engineering Applications. John Wiley & Sons 1998, 2 edn.
- [67] Ferziger, J. H. & Peric, M.: Numerische Strömungsmechanik. Springer 2008.
- [68] Fessas, Y. P. & Weiland, R. H.: Convective solids settling induced by a buoyant phase. AIChE J. 27 (1981), 588–592.
- [69] Fessas, Y. P. & Weiland, R. H.: The settling of suspensions promoted by rigid buoyant particles. Int. J. Multiphase Flow 10 (1984), 485–507.
- [70] Fortes, A. F.; Joseph, D. D. & Lundgren, T. S.: Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical-particles. J. Fluid Mech. 177 (1987), 467–483.
- [71] Franca, L. P. & Frey, S. L.: Stabilized finite-element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 99 (1992), 209–233.
- [72] Franca, L. P.; Frey, S. L. & Hughes, T. J. R.: Stabilized finite-element methods: I. Application to the advective-diffusive model. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 95 (1992), 253–276.
- [73] Frenkel, D. & Smit, B.: Understanding Molecular Simulation. Academic Press 2002.
- [74] Fuller, K. N. G. & Roberts, A. D.: Rubber rolling on rough surfaces. J. Phys. D: Appl. Phys. 14 (1981), 221–239.
- [75] Galdi, G. P. & Rannacher, R. (eds.): Fundamental Trends in Fluid-Structure Interaction (Contemporary Challenges in Mathematical Fluid Dynamics and Its Applications), vol. 1. World Scientific Publishing 2010.
- [76] Galdi, G. P.; Rannacher, R.; Robertson, A. M. & Turek, S.: Hemodynamical Flows

 Modeling, Analysis and Simulation, vol. 37 of Oberwolfach Seminars. Birkhäuser 2008.

- [77] Gerthsen, T.: Chemie für den Maschinenbau 1: Anorganische Chemie für Werkstoffe und Verfahren. Universitätsverlag Karlsruhe 2006, 8 edn.
- [78] Giannakopoulos, A. E.: The return mapping method for the integration of friction constitutive relations. *Comput. Struct.* **32** (1989), 157–167.
- [79] Gibou, F. & Min, C.: Efficient symmetric positive definite second-order accurate monolithic solver for fluid/solid interactions. J. Comput. Phys. 231 (2012), 3246– 3263.
- [80] Gilmanov, A.; Sotiropoulos, F. & Balaras, E.: A general reconstruction algorithm for simulating flows with complex 3D immersed boundaries on cartesian grids. J. Comput. Phys. 191 (2003), 660–669.
- [81] Glowinski, R.; Pan, T. W.; Hesla, T. I. & Joseph, D. D.: A distributed Lagrange multiplier fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. Multiphase Flow* 25 (1999), 755–794.
- [82] Glowinski, R.; Pan, T. W.; Hesla, T. I.; Joseph, D. D. & Periaux, J.: A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for flows around moving rigid bodies: Application to particulate flow. Int. J. Numer. Methods Fluids 30 (1999), 1043– 1066.
- [83] Glowinski, R.; Pan, T. W.; Hesla, T. I.; Joseph, D. D. & Periaux, J.: A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: Application to particulate flow. J. Comput. Phys. 169 (2001), 363–426.
- [84] Goldstein, H.; Poole, C. P. & Safko, J. L.: Classical Mechanics. Addison Wesley 2001, 3 edn.
- [85] Greenwood, J. A.: Adhesion of elastic spheres. Proc. R. Soc. London, Ser. A 453 (1997), 1277–1297.
- [86] Gresho, P. M. & Sani, R. L.: Incompressible Flow and the Finite Element Method, Volume 1, Advection-Diffusion. Wiley 2000.
- [87] Gresho, P. M. & Sani, R. L.: Incompressible Flow and the Finite Element Method, Volume 2, Isothermal Laminar Flow. Wiley 2000, 2 edn.
- [88] Grest, G. S.; Dunweg, B. & Kremer, K.: Vectorized link cell Fortran code for molecular-dynamics simulations for a large number of particles. *Comput. Phys. Commun.* 55 (1989), 269–285.
- [89] Griebel, M.; Knapek, S. & Zumbusch, G.: Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Springer 2007.
- [90] Gross, D.; Ehlers, W. & Wriggers, P.: Formeln und Aufgaben zur Technischen Mechanik 3 – Kinetik, Hydrodynamik. Springer 2005, 7 edn.

- [91] Gross, D.; Hauger, W.; Schnell, W. & Schröder, J.: Technische Mechanik 3 Kinetik. Springer 2004, 8 edn.
- [92] Guermond, J. L.; P. Minev, P. & Shen, J.: An overview of projection methods for incompressible flows. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 195 (2006), 6011–6045.
- [93] Hackbusch, W.: Multi-Grid Methods and Applications. Springer 1985.
- [94] Hagedorn, P.: Technische Mechanik Dynamik (Band 3). Harri Deutsch 2008, 4 edn.
- [95] Hatzes, A. P.; Bridges, F. G. & Lin, D. N. C.: Collisional properties of ice spheres at low impact velocities. Mon. Not. R. Astron. Soc. 231 (1988), 1091–1115.
- [96] Hertz, H.: Über die Berührung fester elastischer Körper. Journal für die reine und angewandte Mathematik 92 (1882), 156–171.
- [97] Heywood, J. G.; Rannacher, R. & Turek, S.: Artificial boundaries and flux and pressure conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. Int. J. Numer. Methods Fluids 22 (1996), 325–352.
- [98] Hilton, J. & Cleary, P. W.: The influence of particle shape on flow modes in pneumatic conveying. *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011), 231–240.
- [99] Hinrichsen, H.: The Physics of Granular Media. Wiley-VCH 2004.
- [100] Hirsch, C.: Numerical Computation of Internal and External Flows Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. Butterworth-Heinemann 2007, 2 edn.
- [101] Hirt, C. W.; Amsden, A. A. & Cook, J. L.: Arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. J. Comput. Phys. 14 (1974), 227–253.
- [102] Hofmann, T.: The world of neglected dimensions colloids. Chem. unserer Zeit 38 (2004), 24–35.
- [103] Hoomans, B. P. B.; Kuipers, J. A. M.; Briels, W. J. & van Swaaij, W. P. M.: Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach. *Chem. Eng. Sci.* 51 (1996), 99–118.
- [104] Hu, H. H.: Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. Int. J. Multiphase Flow 22 (1996), 335–352.
- [105] Hu, H. H.; Joseph, D. D. & Crochet, M. J.: Direct simulation of fluid particle motions. Theor. Comput. Fluid Dyn. 3 (1992), 285–306.
- [106] Hu, H. H.; Patankar, N. A. & Zhu, M. Y.: Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the Arbitrary Lagrangian-Eulerian technique. J. Comput. Phys. 169 (2001), 427–462.

- [107] Huang, J. & Nydal, O. J.: A hybrid algorithm of Event-Driven and Time-Driven methods for simulations of granular flows. *Commun. Comput. Phys.* 10 (2011), 1027–1043.
- [108] Hughes, T. J. R. & Brooks, A.: A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion, Finite Element Methods for Convection Dominated Flows, (ed. T.J.R. Hughes) AMD-Vol. 34 (1979), ASME, New York, 19-35.
- [109] Hughes, T. J. R.; Franca, L. P. & Balestra, M.: A new finite-element formulation for computational fluid-dynamics: V. Circumventing the Babuska-Brezzi condition -A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equalorder interpolations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 59 (1986), 85–99.
- [110] Hughes, T. J. R.; Franca, L. P. & Hulbert, G. M.: A new finite-element formulation for computational fluid-dynamics: VIII. the Galerkin/Least-Squares method for advective-diffusive equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 73 (1989), 173–189.
- [111] Ilinca, F. & Hetu, J.-F.: Numerical simulation of fluid-solid interaction using an immersed boundary finite element method. *Comput. Fluids* 59 (2012), 31–43.
- [112] Israelachvili, J. N.: Intermolecular & Surface Forces. Academic Press Limited 1992.
- [113] Iwashita, K. & Oda, M.: Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM. J. Eng. Mech. 124 (1998), 285–292.
- [114] Jiang, M. J.; Yu, H. S. & Harris, D.: A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance. *Comput. Geotech.* 32 (2005), 340–357.
- [115] Johnson, A. A. & Tezduyar, T. E.: Simulation of multiple spheres falling in a liquidfilled tube. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 134 (1996), 351–373.
- [116] Johnson, A. A. & Tezduyar, T. E.: 3D simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 145 (1997), 301–321.
- [117] Johnson, A. A. & Tezduyar, T. E.: Advanced mesh generation and update methods for 3D flow simulations. *Comput. Mech.* 23 (1999), 130–143.
- [118] Johnson, A. A. & Tezduyar, T. E.: Methods for 3D computation of fluid-object interactions in spatially periodic flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 190 (2001), 3201–3221.
- [119] Johnson, K. L.: 100 years of Hertz contact. Proc. Instn. Mech. Engrs. 196 (1982), 363–378.
- [120] Johnson, K. L.: Contact Mechanics. Cambridge University Press 1987.
- [121] Johnson, K. L.: Continuum mechanics modeling of adhesion and friction. Langmuir 12 (1996), 4510–4513.

- [122] Johnson, K. L.: Adhesion and friction between a smooth elastic spherical asperity and a plane surface. Proc. R. Soc. London, Ser. A 453 (1997), 163–179.
- [123] Johnson, K. L. & Greenwood, J. A.: An adhesion map for the contact of elastic spheres. J. Colloid Interface Sci. 192 (1997), 326–333.
- [124] Johnson, K. L.; Kendall, K. & Roberts, A. D.: Surface energy and contact of elastic solids. Proc. R. Soc. London, Ser. A 324 (1971), 301–313.
- [125] Johnson, S.; Williams, J. R. & Cook, B.: Contact resolution algorithm for an ellipsoid approximation for discrete element modeling. *Eng. Comput.* **21** (2004), 215–234.
- [126] Johnson, T. A. & Patel, V. C.: Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. J. Fluid Mech. 378 (1999), 19–70.
- [127] Jonsen, P.; Palsson, B. I.; Tano, K. & Berggren, A.: Prediction of mill structure behaviour in a tumbling mill. *Miner. Eng.* 24 (2011), 236–244.
- [128] Kafui, K. D.; Thornton, C. & Adams, M. J.: Discrete particle-continuum fluid modelling of gas-solid fluidised beds. *Chem. Eng. Sci.* 57 (2002), 2395–2410.
- [129] Kajishima, T.; Takiguchi, S.; Hamasaki, H. & Miyake, Y.: Turbulence structure of particle-laden flow in a vertical plane channel due to vortex shedding. JSME Int J., Ser. B 44 (2001), 526–535.
- [130] Kawaguchi, T.; Tanaka, T. & Tsuji, Y.: Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two- and three-dimensional models). *Powder Technol.* **96** (1998), 129–138.
- [131] Kempe, T. & Froehlich, J.: An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. J. Comput. Phys. 231 (2012), 3663–3684.
- [132] Kendall, K.: Rolling friction and adhesion between smooth solids. Wear 33 (1975), 351–358.
- [133] Kendall, K.: Inadequacy of coulomb-friction law for particle assemblies. Nature 319 (1986), 203–205.
- [134] Ketterhagen, W. R.; Curtis, J. S.; Wassgren, C. R. & Hancock, B. C.: Predicting the flow mode from hoppers using the discrete element method. *Powder Technol.* 195 (2009), 1–10.
- [135] Kohring, G. A.: Computer-simulations of granular-materials: The effects of mesoscopic forces. J. Phys. I 4 (1994), 1779–1782.
- [136] Kozicki, J. & Tejchman, J.: Numerical simulations of sand behaviour using DEM with two different descriptions of grain roughness. In Oñate, E. & Owen, D. R. J. (eds.): *Particle-Based Methods II: Fundamentals and Applications*, 2011, Proceedings of the International Conference on Particle-Based Methods, 26-28 October 2011, Barcelona.

- [137] Kraume, M.: Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik: Grundlagen und apparative Umsetzungen. Springer 2003.
- [138] Kraus, J. & Margenov, S.: Robust Algebraic Multilevel Methods and Algorithms: 5 (Radon Series on Computational and Applied Mathematics). Walter De Gruyter Inc 2009.
- [139] Kremmer, M. & Favier, J. F.: A method for representing boundaries in discrete element modelling - part I: Geometry and contact detection. Int. J. Numer. Methods Eng. 51 (2001), 1407–1421.
- [140] Kremmer, M. & Favier, J. F.: A method for representing boundaries in discrete element modelling - part II: Kinematics. Int. J. Numer. Methods Eng. 51 (2001), 1423–1436.
- [141] Kruggel-Emden, H.; Sturm, M.; Wirtz, S. & Scherer, V.: Selection of an appropriate time integration scheme for the discrete element method (DEM). *Comput. Chem. Eng.* **32** (2008), 2263–2279.
- [142] Kruggel-Emden, H.; Wirtz, S. & Scherer, V.: A study on tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior. *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008), 1523–1541.
- [143] Kruggel-Emden, H.; Wirtz, S. & Scherer, V.: Applicable contact force models for the discrete element method: The single particle perspective. J. Pressure Vessel Technol. 131 (2009).
- [144] Kuhn, M. R. & Bagi, K.: Alternative definition of particle rolling in a granular assembly. J. Eng. Mech. 130 (2004), 826–835.
- [145] Kurzweil, P. & Scheipers, P.: Chemie: Grundlagen, Aufbauwissen, Anwendungen und Experimente. Vieweg+Teubner 2010, 8 edn.
- [146] Kuwabara, G. & Kono, K.: Restitution coefficient in a collision between two spheres. Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 26 (1987), 1230–1233.
- [147] Lambert, J. D.: Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem. Wiley & Sons 1991.
- [148] Landau, L. D. & Lifschitz, E. M.: *Elastizitätstheorie*. No. VII in Lehrbuch der theoretischen Physik, Akademie-Verlag 1966, 2 edn.
- [149] Latzel, M.; Luding, S. & Herrmann, H. J.: Macroscopic material properties from quasi-static, microscopic simulations of a two-dimensional shear-cell. *Granular Mat*ter 2 (2000), 123–135.
- [150] Le, V. D.; Khoo, B. C. & Lim, K. M.: An implicit-forcing immersed boundary method for simulating viscous flows in irregular domains. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **197** (2008), 2119–2130.

- [151] Lebedev, V. I. & Laikov, D. N.: Quadrature formula for the sphere of 131-th algebraic order of accuracy. Dokl. Akad. Nauk SSSR 366 (1999), 741–745.
- [152] Lechman, J. B.: Aerosol cluster impact and break-up: I. Model and implementation (2010), Sandia National Laboratories.
- [153] Lechman, J. B. & Takato, Y.: Aerosol cluster impact and break-up: II. Atomic and cluster scale models (2010), Sandia National Laboratories.
- [154] Lee, J.: Heap formation in two-dimensional granular media. J. Phys. A: Math. Gen. 27 (1994), L257–L262.
- [155] Lee, J. & Herrmann, H. J.: Angle of repose and angle of marginal stability molecular-dynamics of granular particles. J. Phys. A: Math. Gen. 26 (1993), 373– 383.
- [156] Lee, T. R.; Chang, Y. S.; Choi, J. B.; Kim, D. W.; Liu, W. K. & Kim, Y. J.: Immersed finite element method for rigid body motions in the incompressible Navier-Stokes flow. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **197** (2008), 2305–2316.
- [157] Leopardi, P.: A partition of the unit sphere into regions of equal area and small diameter. *Electron. Trans. Numer. Anal.* 25 (2006), 309–327.
- [158] Li, S.; Marshall, J. S.; Liu, G. & Yao, Q.: Adhesive particulate flow: The discreteelement method and its application in energy and environmental engineering. *Prog. Energy Combust. Sci.* 37 (2011), 633–668.
- [159] Liao, C.-C.; Chang, Y.-W.; Lin, C.-A. & McDonough, J. M.: Simulating flows with moving rigid boundary using immersed-boundary method. *Comput. Fluids* **39** (2010), 152–167.
- [160] Lillie, C.: Dreidimensionales Diskrete Elemente Modell für Superellipsoide. Dissertation (2008), Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Leibniz Universität Hannover.
- [161] Lin, S.-Y.; Chin, Y.-H.; Hu, J.-J. & Chen, Y.-C.: A pressure correction method for fluid-particle interaction flow: Direct-forcing method and sedimentation flow. Int. J. Numer. Methods Fluids 67 (2011), 1771–1798.
- [162] Ling, W.; Chung, J. N. & Crowe, C. T.: Direct numerical simulation of the two-way coupled interaction between particles and mixing layer. Proc. R. Soc. London, Ser. A 456 (2000), 2931–2955.
- [163] Löhner, R.: Applied computational fluid dynamics techniques. John Wiley & Sons 2008, 2 edn.
- [164] Loskofsky, C.; Song, F. & Newby, B. Z.: Underwater adhesion measurements using the JKR technique. J. Adhes. 82 (2006), 713–730.
- [165] Love, A. E. H.: A treatise on the mathematical theory of elasticity. Dover Publications 1944.
- [166] Luding, S.: Die Physik kohäsionsloser granularer Medien. Habilitationsschrift (1997), Institut für Computeranwendungen 1, Universität Stuttgart.
- [167] Luding, S.: Stress distribution in static two-dimensional granular model media in the absence of friction. *Phys. Rev. E* 55 (1997), 4720–4729.
- [168] Luding, S.: Collisions & contacts between two particles. In Herrmann, H. J.; Hovi, J. P. & Luding, S. (eds.): *Physics of dry granular media*, Springer 1998, vol. 350, pp. 285–304.
- [169] Luding, S.: Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packings. Int. J. Solids Struct. 41 (2004), 5821–5836.
- [170] Luding, S.: Cohesive, frictional powders: contact models for tension. Granular Matter 10 (2008), 235–246.
- [171] Luding, S.: Introduction to discrete element methods: Basics of contact force models and how to perform the micro-macro transition to continuum theory. In *EJECE* (Alert Course Lecture, Aussois), 2008, pp. 785–826.
- [172] Luo, K.; Wang, Z. & Fan, J.: A modified immersed boundary method for simulations of fluid-particle interactions. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 197 (2007), 36–46.
- [173] Magnaudet, J.; Rivero, M. & Fabre, J.: Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble: 1. Steady straining flow. J. Fluid Mech. 284 (1995), 97–135.
- [174] Malvern, L. E.: Introduction to the mechanics of a continuous medium. Prentice-Hall 1969.
- [175] Marshall, J. S.: Discrete-element modeling of particulate aerosol flows. J. Comput. Phys. 228 (2009), 1541–1561.
- [176] Masud, A. & Hughes, T. J. R.: A space-time Galerkin/least-squares finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 146 (1997), 91–126.
- [177] Maugis, D.: Adhesion of spheres The JKR-DMT transition using a Dugdale model. J. Colloid Interface Sci. 150 (1992), 243–269.
- [178] Maugis, D.: Adhesion of solids: Mechanical aspects. In Bhushan, B. (ed.): Modern Tribology Handbook (Volume One). CRC Press 2001.
- [179] McCormick, S. F.: Multigrid Methods. Frontiers In Applied Mechanics, SIAM 1987.
- [180] Mishra, B. K.: A review of computer simulation of tumbling mills by the discrete element method - Part II - Practical applications. Int. J. Miner. Process. 71 (2003), 95–112.

- [181] Mittal, R. & Iaccarino, G.: Immersed boundary methods. Annu. Rev. Fluid Mech. 37 (2005), 239–261.
- [182] Mordant, N. & Pinton, J. F.: Velocity measurement of a settling sphere. Eur. Phys. J. B 18 (2000), 343–352.
- [183] Morgado, W. A. M. & Oppenheim, I.: Energy dissipation for quasielastic granular particle collisions. *Phys. Rev. E* 55 (1997), 1940–1945.
- [184] Müller, P. & Pöschel, T.: Three balls problem revisited On the limitations of Event-Driven modeling. Arxiv preprint arXiv:1009.6153 (2010).
- [185] Muller, V. M.; Yushchenko, V. S. & Derjaguin, B. V.: On the influence of molecular forces on the deformation of an elastic sphere and its sticking to a rigid plane. J. Colloid Interface Sci. 77 (1980), 91–101.
- [186] Munjiza, A.: The Combined Finite-Discrete Element Method. John Wiley & Sons 2004.
- [187] Münster, R.; Mierka, O. & Turek, S.: Finite element-fictitious boundary methods (FEM-FBM) for 3D particulate flow. Int. J. Numer. Methods Fluids 69 (2011), 294–313.
- [188] Munz, C.-D. & Westermann, T.: Numerische Behandlung gewöhnlicher und partieller Differenzialgleichungen. Springer 2006.
- [189] Muschelknautz, E. & Krambrock, W.: Vereinfachte Berechnung horizontaler pneumatischer Förderleitungen bei hoher Gutbeladung mit feinkörnigen Produkten. *Chem. Ing. Tech.* 41 (1969), 1164–1172.
- [190] Nakamura, I.: Steady wake behind a sphere. *Phys. Fluids* **19** (1976), 5–8.
- [191] Oertel, H.; Böhle, M. & Dohrmann, U.: *Strömungsmechanik*, vol. 5. Vieweg+Teubner 2009.
- [192] Oñate, E. & Owen, D. R. J. (eds.): Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications. Proceedings of the International Conference on Particle-Based Methods, 25-27 November 2009, Barcelona, CIMNE 2009.
- [193] Oñate, E. & Owen, D. R. J. (eds.): Particle-Based Methods II: Fundamentals and Applications. Proceedings of the International Conference on Particle-Based Methods, 26-28 October 2011, Barcelona, CIMNE 2011.
- [194] Pao, Y. H.: Extension of the Hertz theory of impact to the viscoelastic case. J. Appl. Phys. 26 (1955), 1083–1088.
- [195] Patankar, N. A. & Sharma, N.: A fast projection scheme for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Commun. Numer. Methods Eng.* 21 (2005), 419–432.

- [196] 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 particulate flows. *Int. J. Multiphase Flow* 26 (2000), 1509–1524.
- [197] Persson, B. N. J.: Sliding Friction, Physical Principles and Applications. Springer 2000.
- [198] Peskin, C. S.: Flow patterns around heart valves: a numerical method. J. Comput. Phys. 10 (1972), 252–271.
- [199] Peskin, C. S.: The immersed boundary method. Acta Numerica 11 (2002), 479–517.
- [200] Plimpton, S.: Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics. J. Comput. Phys. 117 (1995), 1–19.
- [201] Popov, V. L.: Kontaktmechanik und Reibung: Von der Nanotribologie bis zur Erdbebendynamik. Springer 2010, 2 edn.
- [202] Pöschel, T.: Granular material flowing down an inclined chute: a molecular-dynamics simulation. J. Phys. II 3 (1993), 27–40.
- [203] Pöschel, T.; Brilliantov, N. V.; Formella, A.; Heckel, M.; Krülle, C.; Müller, P.; Salueña, C. & Schwager, T.: Contact of granular particles and the simulation of rapid flows using Event-Driven molecular dynamics. *EJECE* **12** (2008), 827–870.
- [204] Pöschel, T. & Schwager, T.: Computational Granular Dynamics. Springer 2005.
- [205] Prohl, A.: Projection and Quasi-Compressibility Methods for Solving the Incompressible Navier-Stokes Equations. B. G. Teubner 1997.
- [206] Quentrec, B. & Brot, C.: New method for searching for neighbors in molecular dynamics computations. J. Comput. Phys. 13 (1973), 430–432.
- [207] Raman, C. V.: The photographic study of impact at minimal velocities. *Phys. Rev.* 12 (1918), 442–447.
- [208] Ramirez, R.; Pöschel, T.; Brilliantov, N. V. & Schwager, T.: Coefficient of restitution of colliding viscoelastic spheres. *Phys. Rev. E* 60 (1999), 4465–4472.
- [209] Rannacher, R.: Finite element methods for the incompressible Navier-Stokes equations (1999), Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg.
- [210] Rannacher, R. & Turek, S.: Simple nonconforming quadrilateral stokes element. Numer. Methods Partial Differential Equations 8 (1992), 97–111.
- [211] Rapaport, D. C.: The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press 1995.
- [212] Rougier, E.; Munjiza, A. & John, N. W. A.: Numerical comparison of some explicit time integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 61 (2004), 856–879.

- [213] Saad, Y.: Iterative methods for sparse linear systems (2000), 2nd edition.
- [214] Saff, E. B. & Kuijlaars, A. B. J.: Distributing many points on a sphere. Math. Intelligencer 19 (1997), 5–11.
- [215] Saksono, P. H.; Dettmer, W. G. & Peric, D.: An adaptive remeshing strategy for flows with moving boundaries and fluid-structure interaction. Int. J. Numer. Methods Eng. 71 (2007), 1009–1050.
- [216] Savkoor, A. R. & Briggs, G. A. D.: Effect of tangential force on contact of elastic solids in adhesion. Proc. R. Soc. London, Ser. A 356 (1977), 103–114.
- [217] Schäfer, J.; Dippel, S. & Wolf, D. E.: Force schemes in simulations of granular materials. J. Phys. I 6 (1996), 5–20.
- [218] Schlichting, H. & Gersten, K.: Grenzschicht-Theorie. Springer 2006, 10 edn.
- [219] Schreiber, P.: Eine nichtkonforme Finite-Elemente-Methode zur Lösung der inkompressiblen 3-D Navier-Stokes-Gleichungen. Dissertation (1996), Institut für Angewandte Mathematik, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg.
- [220] Schwager, T. & Pöschel, T.: Coefficient of restitution and linear-dashpot model revisited. *Granular Matter* 9 (2007), 465–469.
- [221] Schwarz, H.-R. & Köckler, N.: Numerische Mathematik. Teubner Verlag 2004, 5 edn.
- [222] Shirayama, S.: Flow past a sphere Topological transitions of the vorticity field. AIAA J. 30 (1992), 349–358.
- [223] Sigloch, H.: Technische Fluidmechanik, vol. 6. Springer 2008.
- [224] Solutions DEM: Edem (2012), URL http://www.dem-solutions.com/.
- [225] Special Issue: The discrete element method: Numerical modelling of discontinua, vol. 21. Eng. Comput. 2004.
- [226] Special Issue: The discrete element method: Aspects of recent developments in computational mechanics of discontinua, vol. 26. Eng. Comput. 2009.
- [227] Stein, E. & Barthold, F.-J.: *Elastizitätstheorie*. Ernst & Sohn 1996.
- [228] Stevens, A. B. & Hrenya, C. M.: Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts. *Powder Technol.* 154 (2005), 99–109.
- [229] Stieß, M.: Mechanische Verfahrenstechnik 2. Springer 1997.
- [230] Stoer, J.: Numerische Mathematik 1. Springer 2005, 9 edn.
- [231] Struckmeier, J.: Numerische lineare Algebra und Mehrgitterverfahren. Vorlesungsskript (2007).

- [232] Tabata, M. & Itakura, K.: A precise computation of drag coefficients of a sphere. Int. J. Comput. Fluid Dyn. 9 (1998), 303–311.
- [233] Tabor, D.: The mechanism of rolling friction: 2. The elastic range. Proc. R. Soc. London, Ser. A 229 (1955), 198–220.
- [234] Tabor, D.: Surface forces and surface interactions. J. Colloid Interface Sci. 58 (1977), 2–13.
- [235] Takiguchi, S.; Kajishima, T. & Miyake, Y.: Numerical scheme to resolve the interaction between solid particles and fluid turbulence. JSME Int J., Ser. B 42 (1999), 411–418.
- [236] Taneda, S.: Experimental investigation of the wake behind a sphere at low Reynolds numbers. J. Phys. Soc. Jpn. 11 (1956), 1104–1108.
- [237] Tanida, K.; Honda, K.; Kawano, N.; Kawaguchi, T.; Tanaka, T. & Tsuji, Y.: Particle motion in screw feeder simulated by discrete element method. In *International Conference on Digital Printing Technologies*, 1998, pp. 429–431.
- [238] Tannehill, J. C.; Anderson, D. A. & Pletcher, R. H.: Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Taylor & Francis 1997.
- [239] Tavarez, F. A. & Plesha, M. E.: Discrete element method for modelling solid and particulate materials. Int. J. Numer. Methods Eng. 70 (2007), 379–404.
- [240] Technalysis: Passage (2012), URL http://www.technalysis.com/.
- [241] Tek AC: Newton (2012), URL http://www.demsoftware.net/.
- [242] ten Cate, A.; Nieuwstad, C. H.; Derksen, J. J. & van den Akker, H. E. A.: Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity. *Phys. Fluids* 14 (2002), 4012–4025.
- [243] Tezduyar, T. E.: Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations. 1992, vol. 28 of Advances in Applied Mechanics, pp. 1–44.
- [244] Tezduyar, T. E.; Behr, M. & Liou, J.: A new strategy for finite-element computations involving moving boundaries and interfaces - The Deforming-Spatial-Domain Space-Time procedure: 1. The concept and the preliminary numerical tests. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 94 (1992), 339–351.
- [245] Tezduyar, T. E.; Behr, M.; Mittal, S. & Liou, J.: A new strategy for finite-element computations involving moving boundaries and interfaces - The Deforming-Spatial-Domain Space-Time procedure: 2. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 94 (1992), 353-371.
- [246] Tillemans, H. J. & Herrmann, H. J.: Simulating deformations of granular solids under shear. *Physica A* 217 (1995), 261–288.

- [247] Ting, J. M.; Khwaja, M.; Meachum, L. R. & Rowell, J. D.: An ellipse-based discrete element model for granular-materials. Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech. 17 (1993), 603–623.
- [248] Tomas, J.: Mechanics of nanoparticle adhesion A continuum approach. In Mittal, K. L. (ed.): Particles on surfaces 8: Detection, adhesion and removal., Utrecht: VSP 2003, pp. 183 – 229.
- [249] Tomas, J.: Mechanics of particle adhesion (2006), Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg.
- [250] Tomboulides, A. G. & Orszag, S. A.: Numerical investigation of transitional and weak turbulent flow past a sphere. J. Fluid Mech. 416 (2000), 45–73.
- [251] Truckenbrodt, E.: Fluidmechanik, Band 1: Grundlagen und elementare Strömungsvorgänge dichtebeständiger Fluide. Springer 1996, 4 edn.
- [252] Tsuji, Y.; Tanaka, T. & Ishida, T.: Lagrangian numerical-simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder Technol.* **71** (1992), 239–250.
- [253] Turek, S.: A comparative study of time-stepping techniques for the incompressible Navier-Stokes equations: From fully implicit non-linear schemes to semi-implicit projection methods. Int. J. Numer. Methods Fluids 22 (1996), 987–1011.
- [254] Turek, S.: On discrete projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations: An algorithmical approach. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 143 (1997), 271–288.
- [255] Turek, S.: Efficient Solvers for Incompressible Flow Problems. An Algorithmic and Computational Approach. Springer 1999.
- [256] Turek, S. & Becker, C.: FEATFLOW. Finite element software for the incompressible Navier-Stokes equations. Institute for Applied Mathematics, University of Heidelberg (1998).
- [257] Turek, S. & Hron, J.: Numerical techniques for multiphase flow with liquid-solid interaction. In Galdi, G. P.; Rannacher, R.; Robertson, A. M. & Turek, S. (eds.): *Hemodynamical Flows – Modeling, Analysis and Simulation*, Birkhäuser 2008, vol. 37 of *Oberwolfach Seminars*, pp. 379–501.
- [258] Uhlmann, M.: An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. J. Comput. Phys. 209 (2005), 448–476.
- [259] Valentini, P. & Schwartzentruber, T. E.: A combined Event-Driven/Time-Driven molecular dynamics algorithm for the simulation of shock waves in rarefied gases. J. Comput. Phys. 228 (2009), 8766–8778.
- [260] Veeramani, C.; Minev, P. D. & Nandakumar, K.: A fictitious domain formulation for flows with rigid particles: A non-Lagrange multiplier version. J. Comput. Phys. 224 (2007), 867–879.

- [261] Verlet, L.: Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.* 159 (1967), 98–103.
- [262] Versteeg, H. & Malalasekra, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. Prentice-Hall 2007, 2 edn.
- [263] van Wachem, B.; van der Schaaf, J.; Schouten, J.; Krishna, R. & van den Bleek, C.: Experimental validation of Lagrangian-Eulerian simulations of fluidized beds. *Powder Technol.* **116** (2001), 155–165.
- [264] Wachs, A.: A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows: Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with collisions. *Comput. Fluids* 38 (2009), 1608–1628.
- [265] Wachs, A.: PeliGRIFF, a parallel DEM-DLM/FD direct numerical simulation tool for 3D particulate flows. J. Eng. Math. 71 (2011), 131–155.
- [266] Walker, J.: Ein Ball mit Drall: kein klarer Fall! Spektrum Wiss. (1984), 146–150.
- [267] Wall, W. A.: Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten Finiten Elementen. Dissertation (1999), Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [268] Wan, D. & Turek, S.: Direct numerical simulation of particulate flow via multigrid FEM techniques and the fictitious boundary method. Int. J. Numer. Methods Fluids 51 (2006), 531–566.
- [269] Wan, D. & Turek, S.: An efficient multigrid-FEM method for the simulation of solid-liquid two phase flows. J. Comput. Appl. Math. 203 (2007), 561–580.
- [270] Wan, D. & Turek, S.: Fictitious boundary and moving mesh methods for the numerical simulation of rigid particulate flows. J. Comput. Phys. 222 (2007), 28–56.
- [271] Wang, Z.; Fan, J. & Luo, K.: Combined multi-direct forcing and immersed boundary method for simulating flows with moving particles. Int. J. Multiphase Flow 34 (2008), 283–302.
- [272] Weiland, R. H.; Fessas, Y. P. & Ramarao, B. V.: On instabilities arising during sedimentation of two-component mixtures of solids. J. Fluid Mech. 142 (1984), 383–389.
- [273] Wellmann, C.: A two-sacle model of granular materials using a coupled DE-FE approach. Dissertation (2011), Institut für Kontinuumsmechanik, Leibniz Universität Hannover.
- [274] Wellmann, C.; Lillie, C. & Wriggers, P.: A contact detection algorithm for superellipsoids based on the common-normal concept. *Eng. Comput.* 25 (2008), 432–442.
- [275] Wesseling, P. & Oosterlee, C. W.: Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics. J. Comput. Appl. Math. 128 (2001), 311–334.

- [276] Williams, J. R. & Oconnor, R.: A linear complexity intersection algorithm for discrete element simulation of arbitrary geometries. Eng. Comput. 12 (1995), 185–201.
- [277] Wriggers, P.: On consistent tangent matrices for frictional contact problems. In Pande, G. & Middleton, J. (eds.): *Proceedings of NUMETA 87*, M. Nijhoff Publishers, Dordrecht 1987.
- [278] Wriggers, P.: Computational Contact Mechanics. Springer 2006, 2 edn.
- [279] Wriggers, P.: Nonlinear Finite Element Methods. Springer 2008.
- [280] Wriggers, P. & Avci, B.: Coupling of discrete and finite element methods for the simulation of 3D particulate flow problems. In Zavarise, G. & Boso, D. P. (eds.): Bytes and Science. Cimne 2012, pp. 59–70.
- [281] Yao, Z. H.; Wang, H. S.; Liu, G. R. & Cheng, M.: Improved neighbor list algorithm in molecular simulations using cell decomposition and data sorting method. *Comput. Phys. Commun.* 161 (2004), 27–35.
- [282] Yu, Z. S.: A DLM/FD method for fluid/flexible-body interactions. J. Comput. Phys. 207 (2005), 1–27.
- [283] Zhang, L.; Gerstenberger, A.; Wang, X. D. & Liu, W. K.: Immersed finite element method. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 193 (2004), 2051–2067.
- [284] Zhu, H. P.; Zhou, Z. Y.; Yang, R. Y. & Yu, A. B.: Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. *Chem. Eng. Sci.* 62 (2007), 3378– 3396.
- [285] Zhu, H. P.; Zhou, Z. Y.; Yang, R. Y. & Yu, A. B.: Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings. *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008), 5728–5770.

Curriculum Vitae

Persönliche Daten:

Name:	Bircan Avci
Geburtsdatum:	27. August 1974
Geburtsort:	Bakirköy/Istanbul, Türkei
Nationalität:	deutsch
Familienstand:	verheiratet

Beruflicher Werdegang:

seit 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kontinuumsmechanik
	der Leibniz Universität Hannover
	(Leitung: Prof. DrIng. habil. Dr. h.c. Peter Wriggers)
2005 - 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baumechanik und
	Numerische Mechanik der Leibniz Universität Hannover
	(Leitung: Prof. DrIng. habil. Dr. h.c. Peter Wriggers)
2005	$Tragwerksplaner \ im \ Architekturb \ \"urb \ architekturb \ arch$
	Leinfelden-Echterdingen

Ausbildung:

wesens an der Universität Stuttgart
eur)
ngenieurwesens an der FH Pforzheim
n Görwihl und in Albbruck
lbstadt
ochschulreife)

EU-Forschungsprojekte:

seit 2013	FP7-EU-Forschungsprojekt NUMEXAS:
	Numerical Methods and Tools for Key Exascale Computing
	Challenges in Engineering and Applied Sciences
2006 - 2009	FP6-EU-Forschungsprojekt RAMWASS:
	Integrated Decision Support System for Risk
	Assessment and Management of the Water-Sediment-Soil System
	at River Basin Scale in Fluvial Ecosystems

Auszeichnung:

2011	Finalist bei der internationalen Melosh-Competition:
	Twenty-Third Annual Robert J. Melosh Medal Competition for the
	Best Student Paper on Finite Element Analysis, 29th April 2011,
	Duke University, Durham, USA. Titel der Arbeit:
	CFD-DEM Coupling for Simulation of 3D Particulate Flows.