

# **Analyse des Clustering-, Kollisions- und Agglomerationsverhaltens von Partikeln in laminaren und turbulenten Strömungen**

## **Dissertation**

zur Erlangung des  
Doktorgrades der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

des

Zentrums für Ingenieurwissenschaften  
der Martin-Luther-Universität  
Halle-Wittenberg

vorgelegt

von Dipl.-Ing. (FH) Martin Ernst  
geb. am 26.07.1982 in Halle (Saale)

Gutachter

1. Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
2. Prof. Dr.-Ing. habil. Gunther Brenner

Tag der öffentlichen Verteidigung: 22.09.2016



Berichte aus der Strömungstechnik

**Martin Ernst**

**Analyse des Clustering-, Kollisions- und  
Agglomerationsverhaltens von Partikeln  
in laminaren und turbulenten Strömungen**

Shaker Verlag  
Aachen 2016

**Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Halle, Univ., Diss., 2016

Copyright Shaker Verlag 2016

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4922-0

ISSN 0945-2230

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • E-Mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

*„Die Neigung der Menschen, kleine Dinge für wichtig zu halten, hat sehr viel Großes hervorgebracht.“*

GEORG CHRISTOPH LICHTENBERG

In Erinnerung an CLAYTON CROWE und LEONID I. ZAICHIK.



## Vorwort

Die Arbeiten zur vorliegenden Dissertation wurden im Zeitraum November 2007 bis April 2014 am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik des Zentrums für Ingenieurwissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg realisiert.

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld, der mir die Forschung in diesem interessanten Themengebiet ermöglichte und mir jederzeit beratend zur Seite stand. Ebenfalls danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. G. Brenner für die Übernahme der Zweitbegutachtung und Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. D. Hebecker für den Vorsitz der Promotionskommission.

Danken möchte ich meinen Kollegen, im Speziellen Herrn M. Dietzel, Herrn Dr.-Ing. M. Kuschel, Herrn Dr.-Ing. S. Stübing, Herrn Dr.-Ing. J. Lipowsky, Herrn Dr. S. Horender, Herrn L. Pasternak sowie Herrn A. Müller, die mir mit ihrer Expertise bei der Modellbildung und Programmierung sowie bei den numerischen Untersuchungen stets beratend zur Seite standen. Darüber hinaus danke ich Herrn M. Dietzel, Herrn Dr.-Ing. M. Weickert, Herrn Dr.-Ing. O. Schmidt, Herrn Dr.-Ing. H. Schomburg und Herrn Dr.-Ing. G. Teike für ihre Vorleistungen bei der Entwicklung des LBM-Strömungslösers. Herrn Dr. P. Fede danke ich für seine wertvollen Hinweise zur Implementierung der Pseudo-Spektral-Methode. Herrn Dr. habil. S. Laín möchte ich für die Diskussion der Clusteringergebnisse sowie für seine Gastfreundschaft während meiner beiden Forschungsaufenthalte in Cali, Kolumbien danken. Frau E. Schlauch und Herrn Dr. R. Seto danke ich für die fruchtbare Zusammenarbeit innerhalb des DFG-Schwerpunktprogramms 1273. Des Weiteren möchte ich Herrn M. Maiss und Herrn P. Krause für die Mitarbeit im Rahmen ihrer Studienarbeiten danken. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Deutschen Akademischen Austauschdienst danke ich für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit sowie dem IT-Servicezentrum der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg für die Bereitstellung von Rechenkapazitäten. Zudem danke ich Frau Jendryschik für die kritische Durchsicht dieser Arbeit.

Darüber hinaus möchte ich meiner Familie sowie meinen Freunden für die unterstützenden und aufmunternden Gespräche danken, insbesondere in der letzten Phase dieser Arbeit. Ganz besonderen Dank gilt Kathrin und Emil. Danke für Eure unendliche Geduld, sich selbst im Urlaub auf strömungstechnische Probleme einzulassen.



## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht das Clustering sowie die Kollision- und Agglomeration von Feststoffteilchen in laminaren und turbulenten Strömungen. Unter Anwendung direkter numerischer Simulationen wird der Einfluss verschiedener Randbedingungen wie die Trägheit der Teilchen und der Volumenanteil der dispersen Phasen auf das mesoskalige Bewegungs- und Clusteringverhalten sphärischer Punktpartikel analysiert. Darüber hinaus wird mit Hilfe eines zweiten mikroskaligen Ansatzes die fluiddynamische Wechselwirkung von aufgelösten Teilchen kurz vor ihrer Kollision sowie die strömungsinduzierte Agglomeration aufgelöster Primärpartikel ausgewertet und die hervorgehenden Agglomeratstrukturen morphologisch charakterisiert. Das zu diesem Zweck eingesetzte Berechnungsprogramm basiert auf der Lattice-Boltzmann-Methode.

Die Berechnung der Trajektorien diskreter in homogener isotroper Turbulenz suspendierter Punktpartikel erfolgt in einem Lagrangeschen Bezugssystem auf mesoskaliger Teilchenebene. Die in den Simulationen erfassten Partikel-Partikel-Kollisionen beruhen auf einem deterministischen Ansatz, dessen Funktionalität in einem fluidfreien Partikelsystem validiert wird. Das im Rahmen dieser Studie implementierte stochastische Turbulenzanregungsverfahren beruht auf der Pseudo-Spektral-Methode und generiert Energiespektren, die mit Mess- und Korrelationsdaten vergleichbar sind.

Um die Strömungsverhältnisse entlang der Phasengrenzen und die fluiddynamische Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln bei Kollisions- und Agglomerationsereignissen detailliert zu erfassen, werden die Teilchen auf mikroskaliger Ebene mittels aufgelöster Partikeloberflächen modelliert, deren gekrümmte Bounce-Back-Randbedingung für bewegte Primärpartikel und Agglomerate geeignet ist. Das darüber hinaus vorgestellte Rekonstruktionsschema für fehlende Verteilungsfunktionen unterbindet eine artifizielle Anziehung der Partikel unterhalb der Auflösungsgrenze des Fluids. Die Berechnung der Agglomeration von Partikeln erfolgt analog zu den Kollisionen auf Grundlage eines deterministischen Modellierungsansatzes.

Das Clusteringverhalten träger Partikel wird unter Anwendung der globalen Partikelakkumulation, Korrelationsdimension, radialen Partikelpaarkorrelation sowie der Minkowski-Funktionale als Funktion des Feststoffvolumenbruchs analysiert. Maximales Clustering der Teilchen ist im Allgemeinen für Partikel-Stokes-Zahlen um 1,0 zu beobachten, wenngleich die ermittelten Parameter der Akkumulation und Korrelationsdimension auf eine größtmögliche Entmischung der untersuchten Partikelkonzentrationen hindeuten.

trationen für eine Partikel-Stokes-Zahl von 1,25 hindeuten. Unter Berücksichtigung vergleichbarer Partikel-Stokes-Zahlen wird das Clustering durch die betrachteten Volumenbrüche geprägt, wohingegen eine Aufweitung der räumlichen Ausdehnung von Partikelclustern durch Partikel-Partikel-Kollisionen lediglich für den größten untersuchten Volumenbruch zu verzeichnen ist.

Des Weiteren steigt die Frequenz interpartikulärer Wechselwirkungen mit zunehmender Partikelträgheit sukzessive an. Zugleich nehmen die ermittelten Kollisionsraten für vergleichbare Partikel-Stokes-Zahlen mit steigendem Feststoffvolumenbruch zu. Durch Auswertung der Eulerschen Raumkorrelation von Partikelpaaren zeigt sich, dass die Relativgeschwindigkeiten kollidierender Teilchen für große Partikel-Stokes-Zahlen aufgrund ihrer größeren mittleren radialen Komponenten deutlich von den Relativgeschwindigkeiten benachbarter Partikel abweichen. Da dieses Verhalten für die Weiterentwicklung stochastischer Kollisionsmodelle von großer Bedeutung ist, wird für die in dieser Studie untersuchten Feststoffvolumenbrüche eine funktionale Form der Eulerschen Raumkorrelationen kollidierender Teilchen in Abhängigkeit der Partikel-Stokes-Zahl und des Partikelvolumenanteils vorgestellt.

Die Modellierung der Bewegung und Kollision aufgelöster Partikel wird mit Hilfe verschiedener Testfälle systematisch überprüft und mit Mess- und Simulationsdaten verglichen. Die Evaluation umfasst die aufgeprägte Oszillation einer Sphäre, die Sedimentation sphärischer Einzelpartikel sowie die Annäherung, Kollision und Taumelbewegung zweier hintereinander sedimentierender Kugeln. Um den Einfluss viskoser Kräfte auf die kurzreichweitigen fluiddynamischen Verdrängungseffekte zu quantifizieren, wird darüber hinaus die Annäherung von Partikeln in ebenen Scherströmungen untersucht. In den Berechnungen steigt die Kollisionswahrscheinlichkeit sowohl mit zunehmender Trägheit als auch mit kleiner werdendem initialen Partikelversatz an.

In einem letzten Schritt werden die Agglomeration und der Transport von Primärpartikeln und Agglomeraten mit aufgelösten Oberflächen analysiert. Die Umströmung im Raum fixierter Agglomerate zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Daten einer Finiten-Element-Methode, sodass das im Rahmen dieser Studie neu entwickelte Rekonstruktionsverfahren auch für nicht-sphärische Teilchen wie Agglomerate geeignet ist. Die direkte numerische Simulation der Agglomeration von Teilchen in einem sedimentierenden Partikelcluster demonstriert darüber hinaus die Leistungsfähigkeit der vorliegenden Lattice-Boltzmann-Methode für mehrere Partikel. Die in diesem Zusammenhang ermittelten Strukturparameter ermöglichen detaillierte Einblicke in den Entstehungsprozess der Agglomerate. Durch einen Vergleich der Agglomerationszeiten für mono- und polydisperse Systeme in ebenen Scherschichten wird zudem der Einfluss der fluiddynamischen Wechselwirkung auf die Agglomeration von Primärpartikeln quantifiziert.

## Abstract

The present study analyzes the clustering, collision and agglomeration of solid particles in laminar and turbulent fluid flows. By applying direct numerical simulations, the effect of various boundary conditions such as particle inertia and solid volume fraction on the transport and clustering of spherical point particles is investigated on the mesoscale particle level. In addition, the fluid dynamical interaction between approaching particles shortly before their collision as well as the flow induced agglomeration of primary particles is evaluated using a second microscale approach in which the particle surface is resolved by the numerical grid. In this context, the obtained agglomerate structures are characterized by various morphological parameters. The used computing program is based on the lattice-Boltzmann method.

The tracking of discrete point particles suspended in homogeneous isotropic turbulence is carried out in a Lagrangian frame of reference on the mesoscale particle level. In the performed simulations, collisions between particles are modeled by a deterministic approach which has been validated in a fluid-free particle system. The implemented stochastic forcing scheme for turbulence is based on a pseudo spectral method and generates energy spectra which are comparable with measurement data and empirical models.

In order to resolve flow conditions along the particle-fluid interface as well as fluid dynamical interactions between fluid and particles during collision events, particles are modeled on the microscale particle level with curved no-slip bounce-back boundary conditions. Furthermore, a newly introduced reconstructing scheme for missing distribution functions prevents an artificial attraction of resolved particles for gap distances smaller than the fluid resolution limit. In analogy to collisions, the agglomeration of particles is performed on the basis of a deterministic modeling approach.

The clustering of inertial particles as a function of three solid volume fractions is analyzed with different parameters such as global particle accumulation, correlation dimension, radial particle-pair correlation and Minkowski functionals. In general, maximum clustering of particles can be observed for particle Stokes numbers around 1.0, although the obtained values of the accumulation and correlation dimension indicate a maximum segregation at a particle Stokes number of 1.25. Taking comparable particle Stokes numbers into account, clustering is mainly affected by the considered volume fractions, in which collisions between particles lead to a widening of the spatial particle distribution only for the largest analyzed solids load.

Furthermore, the frequency of inter-particle collisions increases with growing particle inertia. At the same time, the obtained collision rates increase at comparable particle Stokes numbers with increasing solid volume fraction. The analysis of the Eulerian spatial correlation of particle pairs shows that the relative velocity of colliding particles deviates from that of neighboring particles, in particular for large particle Stokes numbers. Since this new finding has a significant impact on the behavior of stochastic collision models, novel functional forms of the Eulerian spatial correlation are proposed as a function of the particle Stokes number and particle volume fraction.

The motion and collision of resolved particles is examined by means of different test cases and compared with measurement and simulation data from literature. The evaluation comprises the forced oscillation of a single sphere, the sedimentation of spherical particles as well as the drafting, collision and tumbling of two sedimenting spheres which are vertically placed in a row. In order to quantify the effect of viscous forces on the short range fluid dynamical interaction, the approach of two particles in plane shear flow is investigated. As a result, the collision probability increases with both increasing particle inertia and decreasing initial offset between particles.

In the last step, the transport and agglomeration of particles with resolved surfaces is analyzed. In this context, the fluid flow around agglomerates fixed in place shows a good agreement with the results obtained by a finite element method, which proves that the newly developed reconstruction scheme is also suitable for non-spherical particles such as agglomerates. Moreover, the agglomeration of particles in a sedimenting cluster demonstrates the capability of the developed lattice-Boltzmann method for several non-spherical particles. The obtained structural parameters allow detailed insights into the growing process of agglomerates. Finally, the agglomeration within mono- and poly-dispersed particle systems is used to quantify the effect of the short-range fluid dynamical interaction on the agglomeration of primary particles in laminar shear flows.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Stand des Wissens . . . . .	2
1.2	Zielsetzung der Arbeit . . . . .	7
1.3	Gliederung der Arbeit . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Numerische Methoden</b>	<b>11</b>
2.1	Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	11
2.1.1	Boltzmann-Gleichung . . . . .	11
2.1.2	D3Q19-Modell . . . . .	13
2.1.3	Einbindung externer Volumenkräfte . . . . .	15
2.2	Generierung homogener isotroper Turbulenz . . . . .	16
2.2.1	Pseudo-Spektral-Methode . . . . .	17
2.2.2	Berechnung der Fourier-Transformation . . . . .	19
2.3	Lagrangesches Tracking von Partikeln . . . . .	19
2.3.1	Partikelbewegungsgleichungen . . . . .	20
2.3.2	Bestimmung des Partikelzeitschritts . . . . .	24
2.4	Lagrangesches Tracking aufgelöster Partikel . . . . .	25
2.4.1	Modellierung gekrümmter Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	26
2.4.2	Partikelbewegungsgleichungen . . . . .	28
2.4.3	Bewegung der Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	30
2.4.4	Annäherung aufgelöster Feststoff-Fluid-Phasengrenzen . . . . .	31
2.5	Charakterisierung von Partikelclustern . . . . .	33
2.5.1	Globale Partikelakkumulation . . . . .	33
2.5.2	Korrelationsdimension . . . . .	36
2.5.3	Radiale Korrelation von Partikelpaaren . . . . .	37
2.5.4	Minkowski-Funktionale . . . . .	38
2.6	Modellierung von Partikel-Partikel-Kollisionen . . . . .	40
2.6.1	Deterministisches Kollisionsmodell . . . . .	40
2.6.2	Kollisionsoperator . . . . .	42
2.7	Modellierung der Partikelagglomeration . . . . .	44
2.7.1	Deterministisches Agglomerationsmodell . . . . .	44
2.7.2	Agglomerationsoperator . . . . .	45
2.7.3	Bewegungsgleichungen des Agglomerats . . . . .	46

<b>3</b>	<b>Direkte numerische Simulation der Fluidströmung</b>	<b>51</b>
3.1	Validierung des Strömungslösers . . . . .	51
3.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	51
3.1.2	Analyse der laminaren Fluidströmung . . . . .	53
3.2	Evaluation der Turbulenzanregung . . . . .	54
3.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	55
3.2.2	Kenngößen der turbulenten Fluidströmung . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Clustering und Kollision von Partikeln</b>	<b>67</b>
4.1	Numerische Konfiguration . . . . .	67
4.1.1	Kontinuierliche Phase . . . . .	67
4.1.2	Disperse Phase . . . . .	69
4.2	Lagrangesches Partikeltracking . . . . .	73
4.2.1	Analyse der Partikelkräfte . . . . .	73
4.2.2	Turbulenter Partikeltransport . . . . .	77
4.3	Charakterisierung von Partikelclustern . . . . .	81
4.3.1	Globale Partikelakkumulation . . . . .	82
4.3.2	Korrelationsdimension . . . . .	84
4.3.3	Radiale Korrelation von Partikelpaaren . . . . .	85
4.3.4	Minkowski-Funktionale . . . . .	86
4.4	Partikel-Partikel-Wechselwirkungen . . . . .	91
4.4.1	Validierung des deterministischen Kollisionsmodells . . . . .	91
4.4.2	Analyse des Kollisionsverhaltens . . . . .	93
4.4.3	Zwei-Partikel-Raumkorrelation der Partikelgeschwindigkeit . . . . .	99
<b>5</b>	<b>Fluiddynamische Wechselwirkung von Partikeln</b>	<b>105</b>
5.1	Oszillation eines sphärischen Partikels . . . . .	105
5.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	106
5.1.2	Analyse der stromungsinduzierten Partikelkraft . . . . .	107
5.2	Sedimentation von Einzelpartikeln . . . . .	108
5.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	108
5.2.2	Einfluss der räumlichen Diskretisierung . . . . .	110
5.2.3	Evaluation mit experimentellen Daten . . . . .	111
5.3	Sedimentation von Partikelpaaren . . . . .	115
5.3.1	Numerische Konfiguration . . . . .	115
5.3.2	Evaluation anhand numerischer Daten . . . . .	116
5.4	Annäherung von Partikeln in Scherströmungen . . . . .	118
5.4.1	Numerische Konfiguration . . . . .	119
5.4.2	Einfluss viskoser Fluidkräfte . . . . .	120

---

<b>6</b>	<b>Transport, Wachstum und Morphologie von Agglomeraten</b>	<b>123</b>
6.1	Fluiddynamische Wechselwirkung in Agglomeraten . . . . .	123
6.1.1	Numerische Konfiguration . . . . .	124
6.1.2	Einfluss der Partikel auf das Strömungsfeld . . . . .	126
6.1.3	Widerstandskräfte und Drehmomente auf Partikel . . . . .	127
6.2	Agglomeration sedimentierender Partikel . . . . .	131
6.2.1	Numerische Konfiguration . . . . .	131
6.2.2	Transientes Agglomerationsverhalten . . . . .	133
6.2.3	Charakterisierung der Agglomeratmorphologie . . . . .	135
6.3	Scherinduzierte Agglomeration von Partikeln . . . . .	138
6.3.1	Numerische Konfiguration . . . . .	138
6.3.2	Transientes Wachstum von Agglomeraten . . . . .	140
6.3.3	Charakterisierung der Agglomeratmorphologie . . . . .	146
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>153</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>159</b>
A.1	Trilineare Interpolationsmethode . . . . .	159
A.2	Grundgleichungen der Frequenzanalyse . . . . .	160
A.3	Analysierte Agglomeratstrukturen . . . . .	162
<b>B</b>	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>165</b>
<b>C</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>173</b>