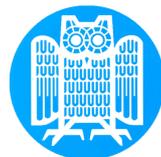


Numerische Simulation von Fällungsprozessen mittels Populationsbilanzen

Michael Roland

Februar 2010



**UNIVERSITÄT
DES
SAARLANDES**

Numerische Simulation von Fällungsprozessen mittels Populationsbilanzen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

an der Naturwissenschaftlich–Technischen Fakultät I
der Universität des Saarlandes, Saarbrücken

vorgelegt von Dipl.-Math.

Michael Roland



Saarbrücken, Februar 2010

Promotionskolloquium

Tag des Promotionskolloquiums	19.05.2010
Ort des Promotionskolloquiums	Saarbrücken

Dekan der Naturwissenschaftlich–Technischen Fakultät I Mathematik und Physik	Prof. Dr. Holger Hermanns Universität des Saarlandes
---	---

Prüfungsausschuss

Vorsitzender	Prof. Dr. Rainer Schulze–Pillot
Gutachter	Prof. Dr. Volker John
Gutachter	Prof. Dr. Gert Lube
Vertretung für Prof. Dr. Gert Lube	Prof. Dr. Joachim Weickert
akademischer Beisitzer	Dr. Friedemann Kemm

Danksagung

Zuerst und vor allem möchte ich meinem Doktorvater Herrn Prof. Volker John danken.

Einmal dafür, dass er es mir in meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an seinem Lehrstuhl ermöglicht hat, diese praxisnahe und interessante Arbeit anzufertigen. Darüber hinaus verdient er meinen besonderen Dank für seine großartige Unterstützung, für all die anregenden Diskussionen und Gespräche und sein großes Interesse am Erfolg dieser Arbeit.

Des Weiteren gilt mein Dank meinen Kolleginnen am Lehrstuhl, Dr. Adela Kindl, Carina Suciu und Ellen Schmeyer, für die angenehme Atmosphäre und das gute Arbeitsklima. Ihnen wünsche ich alles Gute für die Zukunft.

Dankbar bin ich auch Herrn Dr. Friedemann Kemm vor allem für seine Hilfe bei auftretenden Problem mit LaTeX.

Bedanken möchte ich mich auch bei Herrn Prof. Gert Lube für seine Bereitschaft, dass Zweitgutachten für diese Arbeit zu erstellen.

Herzlichen Dank auch an meine Eltern Ellen und Hans–Peter Roland für ihren uneingeschränkten Rückhalt.

Ein besonders Dankeschön geht an meine wunderbare Verlobte, Nadine Wagner, für das Korrekturlesen und ihre liebevolle Unterstützung.

Abschliessend möchte ich mich noch bei allen bedanken, die zu dieser Arbeit beigetragen haben und hier nicht namentlich erwähnt sind.

Kurzbeschreibung

Fällungsprozesse werden mit Hilfe von Populationsbilanzsystemen modelliert. Dies führt zu einem gekoppelten System von partiellen Differentialgleichungen (Navier–Stokes–Gleichungen, Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen, Transportgleichungen), die in Gebieten mit unterschiedlicher Dimension definiert sind. Ein sehr teurer Teil der Simulation dieser Systeme ist die Lösung der Gleichung, die die Partikelgrößenverteilung beschreibt, da diese in einem höher–dimensionalen Gebiet definiert ist als die restlichen Systemgleichungen. Es wurde der Einfluss von drei verschiedenen numerischen Verfahren zur Lösung eines Fällungsprozesses untersucht: Zwei Finite–Differenzen–Upwind–Verfahren und das lineare Finite–Element–Verfahren mit Flux–Corrected–Transport. Dabei zeigte sich, dass verschiedene Verfahren zu qualitativ unterschiedlichen Ergebnissen führen.

Abstract

Precipitation processes are modeled by population balance systems. This leads to a coupled system of partial differential equations (Navier–Stokes equations, convection–diffusion–reaction equations, transport equations) where the equations are defined in domains with different dimensions. An expensive part of their simulation is the solution of the equation for the particle size distribution (PSD) since this equation is defined in a higher–dimensional domain than the other equations in the system. This thesis studies different approaches for the solution of this equation: two finite difference upwind schemes and a linear finite element flux–corrected transport method. It is shown that the different schemes lead to qualitatively different solutions for an output of interest.

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	xv
Abbildungsverzeichnis	xvii
Nomenklatur	xxi
I Einleitung	1
II Numerische Simulation turbulenter inkompressibler Strömungen	5
§1 Die Navier–Stokes–Gleichungen	5
§1.1 Die Kontinuitätsgleichung	5
§1.2 Die Erhaltung des Impulses	6
§1.3 Die dimensionslosen Navier–Stokes–Gleichungen	12
§2 Turbulente Strömungen und Schwierigkeiten ihrer Simulation	16
§3 Klassische Large Eddy Simulation	23
§4 Die Variationelle Mehrskalen–Methode	28
§4.1 Die projektions–basierte Finite–Element VMS–Methode (FEVMS)	31
§4.2 Aspekte der Implementierung	32
§5 Numerische Simulation einer turbulenten Kanalströmung	35
§5.1 Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$	35
§5.2 Diskretisierung und Gitter	37
§5.3 Statistische Kenngrößen	39
§5.4 Turbulenzmodelle	41
§5.5 Numerische Ergebnisse der turbulenten Kanalströmung	42
§5.6 Zusammenfassung	51
III Finite–Element–Methoden zur numerischen Simulation von Fällungs- prozessen	53
§1 Populationsbilanzen	53
§2 Modellierung des Fällungsprozesses	60
§2.1 Entdimensionierung der Transportgleichungen und der Popula- tionsbilanz	65
§3 Diskretisierung des gekoppelten Systems	67
§3.1 Finite–Element–Methode für die Reaktionsgleichungen	67

§3.2	Algorithmus zur numerischen Lösung	76
IV	Numerische Ergebnisse der Simulation einer Fällungsreaktion	83
§1	Die modellierte Fällungsreaktion	83
§2	Aufbau und Konfiguration der numerischen Simulationen	87
§2.1	Modellparameter	88
§2.2	Die Software MooNMD	93
§2.3	Untersuchte Kenngrößen des Fällungsprozesses	93
§3	Ergebnisse der Simulationen in einem zweidimensionalen Gebiet	96
§3.1	Vergleichsstudie für verschiedene Einströmungspositionen	96
§3.2	Ergebnisse mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren	106
§3.3	Ergebnisse der Partikelgrößenverteilung	118
§3.4	Ein gekoppeltes System einer Konvektions–Diffusionsgleichung in 2D und einer Transportgleichung in 3D mit vorgegebener Lösung	122
§4	Ergebnisse der Simulationen in einem dreidimensionalen Gebiet	126
§4.1	Die numerische Methode	126
V	Zusammenfassung und Ausblick	141
	Literaturverzeichnis	145
	Index	157
	Curriculum Vitae	163
	Eidesstattliche Versicherung	165

Tabellenverzeichnis

II.1	Dimensionstafel zur Herleitung der Reynolds-Zahl	15
II.2	Notwendige Gitterfeinheit bei der Simulation	22
II.3	Informationen über die verwendeten Gitter	39
II.4	Rechenzeiten in Sekunden	45
III.1	Einteilung der kolloiddispersen Systeme	58
IV.1	Eigenschaften der Edukte	84
IV.2	Eigenschaften der Produkte	86
IV.3	Anzahl der Freiheitsgrade	92
IV.4	Modalwerte des Volumenanteils	99
IV.5	Mittlere Partikelgröße	101
IV.6	Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-3}$; Mittelwerte des Medians des Vo- lumenanteils	110
IV.7	Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-3}$; mittlere Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden	111
IV.8	Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-2}$; Mittelwerte des Medians des Vo- lumenanteils	112
IV.9	Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-2}$; mittlere Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden	113
IV.10	Gekoppeltes Testproblem mit vorgegebener Lösung I	123
IV.11	Gekoppeltes Testproblem mit vorgegebener Lösung II	124
IV.12	Anzahl der Freiheitsgrade	129
IV.13	Rechenzeiten der 3D/4D Simulationen	139

Abbildungsverzeichnis

II.1	Bereiche der Energiekaskade nach [Pop00]	19
II.2	Gebiet für turbulente Kanalströmungen mit $Re_\tau = 180$	35
II.3	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeit mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen	43
II.4	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeit mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen, Differenzen zum Referenzprofil	43
II.5	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeiten mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen	44
II.6	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeiten mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenzen zum Referenzprofil	46
II.7	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{\text{rms}}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen	46
II.8	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{\text{rms}}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen	47
II.9	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $\mathbb{R}_{12}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen	47
II.10	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $\mathbb{R}_{12}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen	48
II.11	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; anfängliche Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenz zu den Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, SvD	48
II.12	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; anfängliche Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenz zu den Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, VMS	49
II.13	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{\text{rms}}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, SvD	49
II.14	Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{\text{rms}}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, VMS	50

IV.1 Simulationsgebiet des zweidimensionalen Reaktors	88
IV.2 Strömungsfelder der verschiedenen Einströmungspositionen	97
IV.3 Volumenanteile für die verschiedenen Einströmungspositionen	99
IV.4 Kumulative Volumenanteile für die verschiedenen Einströmungspositionen	100
IV.5 Median des Volumenanteils für die verschiedenen Einströmungspositionen	101
IV.6 Konzentrationsfelder des Reaktanten CaCl_2 für die verschiedenen Einströmungspositionen	102
IV.7 Konzentrationsfelder des Reaktanten Na_2CO_3 für die verschiedenen Einströmungspositionen	103
IV.8 Konzentrationsfelder des gelösten Produktes CaCO_3 für die verschiedenen Einströmungspositionen	104
IV.9 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-3}$ mit dem FEM-FCT-Verfahren; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 30000\text{s}$; Strömungsfeld (oben links), Konzentrationen CaCl_2 (oben rechts), Na_2CO_3 (unten links) und CaCO_3 (unten rechts)	107
IV.10 Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils für $u_\infty = 10^{-3}$; FEM-FCT-Verfahren mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$	108
IV.11 Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils für $u_\infty = 10^{-3}$; alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$	109
IV.12 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ mit dem FWE-UPW-FDM; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zu den Zeitpunkten $\tilde{t} = 5000\text{s}$ (links) und $\tilde{t} = 10000\text{s}$ (rechts); von oben nach unten: Strömungsfeld, Konzentrationen CaCl_2 , Na_2CO_3 und CaCO_3	114
IV.13 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ mit dem FWE-UPW-FDM; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zu den Zeitpunkten $\tilde{t} = 15000\text{s}$ (links) und $\tilde{t} = 20000\text{s}$ (rechts); von oben nach unten: Strömungsfeld, Konzentrationen CaCl_2 , Na_2CO_3 und CaCO_3	115
IV.14 Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils in der Mitte der Ausströmung für $u_\infty = 10^{-2}$ und für alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.0025$, ($\Delta \tilde{t} = 0.25\text{s}$), $L = 32$ (oben); $\Delta t = 0.0025$, ($\Delta \tilde{t} = 0.25\text{s}$), $L = 64$ (unten)	116
IV.15 Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils in der Mitte der Ausströmung für $u_\infty = 10^{-2}$ und für alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 0.125\text{s}$), $L = 64$ (oben); $\Delta t = 0.000625$, ($\Delta \tilde{t} = 0.0625\text{s}$), $L = 64$ (unten)	117

- IV.16 Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; Schnitt für eine feste Partikelgröße; $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$; $\tilde{d}_p = 1\mu\text{m}$ (oben links); $\tilde{d}_p = 1.5\mu\text{m}$ (oben rechts); $\tilde{d}_p = 2\mu\text{m}$ (Mitte links); $\tilde{d}_p = 2.5\mu\text{m}$ (Mitte rechts); $\tilde{d}_p = 3\mu\text{m}$ (unten links); $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 3000\text{s}$; $\tilde{d}_p = 2\mu\text{m}$ (unten rechts) 119
- IV.17 Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ mit linearen FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für $\tilde{f} = 1e2 \cdot f_\infty$ (oben links); $\tilde{f} = 1e3 \cdot f_\infty$ (oben rechts); $\tilde{f} = 1e4 \cdot f_\infty$ (unten links); $\tilde{f} = 1e5 \cdot f_\infty$ (unten rechts) 120
- IV.18 Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; lineares FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ und $f = 1e-5 \cdot f_\infty$ (links); $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 3000\text{s}$ und $f = 1e4 \cdot f_\infty$ (rechts) 121
- IV.19 Simulationsergebnisse für das Testproblem (IV.9), (IV.10); $\Delta t = 0.001$, $N = 64$; FEM–FCT–Verfahren (links); FWE–UPW–FDM (rechts) 122
- IV.20 Simulationsgebiet des dreidimensionalen Reaktors 127
- IV.21 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 40000\text{s}$; skaliertes Strömungsfeld (oben links); Isofläche für CaCl_2 , mit $c_A = 0.25$ (oben rechts); Isofläche für Na_2CO_3 , mit $c_B = 0.25$ (unten links); Isofläche für CaCO_3 , mit $c_C = 0.01$ (unten rechts) 130
- IV.22 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; skaliertes Strömungsfeld (links); unskaliertes Strömungsfeld (rechts) 131
- IV.23 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$ mit linearen FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für CaCl_2 , mit $c_A = 0.25$ (oben links); Schnitt in der x – y –Ebene für CaCl_2 (oben rechts); Schnitt in der x – z –Ebene für CaCl_2 (unten links); Schnitt in der y – z –Ebene für CaCl_2 (unten rechts) 132
- IV.24 Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$ mit linearen FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für Na_2CO_3 , mit $c_B = 0.25$ (oben links); Schnitt in der x – y –Ebene für Na_2CO_3 (oben rechts); Schnitt in der x – z –Ebene für Na_2CO_3 (unten links); Schnitt in der y – z –Ebene für Na_2CO_3 (unten rechts) 133

IV.25	Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (oben links); FWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (oben rechts); BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.10$ (Mitte links); BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.50$ (Mitte rechts); lineares FEM-FCT-Verfahren, CaCO_3 , mit $c_C = 0.10$ (unten links); lineares FEM-FCT-Verfahren, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (unten rechts)	134
IV.26	Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; BWE-UPW-FDM, Schnitte in der x - y -Ebene für CaCO_3 (oben links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitte in der x - y -Ebene für CaCO_3 (oben rechts); BWE-UPW-FDM, Schnitte in der y - z -Ebene für CaCO_3 (Mitte links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitte in der y - z -Ebene für CaCO_3 (Mitte rechts); BWE-UPW-FDM, Schnitt in der x - z -Ebene für CaCO_3 (unten links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitt in der x - z -Ebene für CaCO_3 (unten rechts)	135
IV.27	Histogramm-Darstellung der Konzentration des gelösten Produktes CaCO_3 ; $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; FWE-UPW-FDM (oben); BWE-UPW-FDM (Mitte); lineares FEM-FCT-Verfahren (unten)	136
IV.28	Median des Volumensanteils in der Mitte der Ausströmung; $u_\infty = 10^{-2}$	138
IV.29	Median des Volumensanteils in der Mitte der Ausströmung; $u_\infty = 10^{-2}$	138

Nomenklatur

Abkürzungen

BWE	backward Euler method (implizites Euler-Verfahren)
<i>Da</i>	Damköhler-Zahl
DNS	Direkte Numerische Simulation
d.o.f.	degrees of freedom (Freiheitsgrade)
FDM	Finite-Differenzen-Methode
FEM	Finite-Element-Methode
FEM-FCT	Finite-Element-Methode mit Flux-Corrected-Transport
FWE	forward Euler method (explizites Euler-Verfahren)
LES	large eddy simulation (Grobstruktursimulation)
LPS	local projection stabilization (scheme)
<i>Re</i>	Reynolds-Zahl
SG	subgrid
SGS	subgrid-scale
SOLD	Spurious Oscillations at Layers Diminishing (Verfahren)
<i>St</i>	Strouhal-Zahl
SUPG	streamline-upwind Petrov-Galerkin (method)
SvD	Smagorinsky mit van Driest-Dämpfungsfunktion
UPW	Upwind-Schema
VMS	variationelle Mehrskalen (Methode)

lateinische Buchstaben

B_{nuc}	Nukleationsrate
c	Konzentration
c_{∞}	charakteristische Konzentration
$c_{C,\infty}$	charakteristische Konzentration des chemischen Stoffes C
$c_{C,\infty}^{\text{sat}}$	Sättigungskonzentration
C_2	Modellkonstante
C_G	Wachstumskonstante
C_{nuc}	Modellkonstante der Nukleation
d_p	Äquivalentdurchmesser der Partikel
$d_{p,0}$	untere Schranke der Partikelgröße
$d_{p,\infty}$	charakteristische Maßzahl der Partikelgröße
$d_{p,\text{min}}$	untere Schranke der Partikelgröße
$d_{p,\text{max}}$	obere Schranke der Partikelgröße
$d_{p,50}$	Median des Volumenanteils
D	Diffusionskoeffizient oder Diffusionsterm
f	Verteilungsdichtefunktion
f^*	Korrekturvektor
f_{∞}	charakteristische Maßzahl der Verteilungsdichtefunktion
g	Tiefpass-Filter
G	Wachstumsgeschwindigkeit
h	Gitterweite
h_{agg}	Vereinigungsfunktion der Partikel
h_{br}	Zerteilungsfunktion der Partikel
h_K	Durchmesser der Gitterzelle in Konvektionsrichtung
H	halbe Kanalbreite
i	imaginäre Einheit oder Komponente des Eigenschaftskordinatenvektors
j	Teilchenstromdichte
k_G	Wachstumsrate

k_{nuc}	Nukleationskonstante
k_r	kinetische Residuumsenergie
k_R	Reaktionsrate
l_∞	charakteristische Länge
L	Basisgröße Länge
L	Anzahl der Schichten des Gitters der inneren Koordinate
m_1	Partikelumfangdichte
m_2	Oberflächendichte
m_3	Volumendichte
M	Basisgröße Masse
N	Anzahl der Freiheitsgrade oder Partikelanzahldichte
N_{Reaktor}	Gesamtzahl der Partikel im Reaktor
p	Druck
p_∞	charakteristischer Druck
q_3	Volumenanteil
q_{tot}	totaler Volumenanteil
Q_3	kumulativer Volumenanteil
r	Rang einer Matrix oder Reaktionsanteil oder Residuumsvektor
r_{chem}	Funktion zur Modellierung der chemischen Reaktion
r_g	Funktion zur Modellierung des Konzentrationsrückgangs bedingt durch den Wachstumsprozess
r_{nuc}	Funktion zur Modellierung des Nukleationsprozesses
R	Reaktionsterm oder Rückstand
t	Zeit
t_R	Zeitskala der chemischen Reaktion
t_∞	charakteristische Zeit
t_λ	zeitliche Kolmogorov-Skale
T	Basisgröße Zeit oder Endzeitpunkt
u_i	Komponenten der Fluidgeschwindigkeit
$u_{1,\text{drive}}$	Antriebsgeschwindigkeit
u_{Diff}	Geschwindigkeit der Diffusion innerhalb der Reaktion

u_∞	charakteristische Geschwindigkeit
u_λ	räumliche Kolmogorov–Skale
u_τ	Friktionsgeschwindigkeit
U_{bulk}	Massengeschwindigkeit
$U_{\text{mean}}^{\text{DNS}}$	Referenzdaten für das diskrete mittlere Geschwindigkeitsprofil
v	Testfunktion
x	Maßzahl
x_i	Koordinaten eines Punktes im Raum

griechische Buchstaben

$\dot{\gamma}$	Schergefälle
$\delta(\cdot)$	Filterweite
ε	Dissipationsrate oder Viskositätsparameter
ζ	Viskositätskonstante
η	dynamische Viskosität
λ	kleinste Wirbelgröße
Λ_{chem}	Konstante in der chemischen Reaktion
Λ_{nuc}	Konstante im Nukleationsprozess
ν	kinematische Viskosität
ν_T	turbulente Viskosität
Π	Potenzprodukt
ρ	Massenkraft oder konstante Dichte
ϱ	Dichte
σ_i	Normal- und Zugspannungen
τ_{ij}	Scher- und Schubspannungen
τ_K	SUPG–Parameter
ψ	Zufallsfunktion
ω	Frequenz
$\boldsymbol{\omega}$	Wirbeldichte

Operatoren

∇	Nabla–Operator oder Gradient
$\nabla \cdot$	Divergenz
$\nabla \times$	Rotation
Δ	Laplace–Operator
∂	partielle Ableitung

Matrizen

A	Systemmatrix oder Dimensionsmatrix
D	siehe Seite 73
K	Exponentenmatrix
L	siehe Seite 15 oder Seite 73
M_C	konsistente Massenmatrix
M_L	gelumpfte Massenmatrix

Spezifikationen

$(\bar{\cdot})$	dimensionsbehaftete Größe
$\langle \cdot \rangle$	Mittelwert
$\langle \cdot \rangle_s$	räumliche Mittelung
$\langle \cdot \rangle_t$	zeitliche Mittelung
\cdot'	Fluktuation
$\bar{\cdot}$	gefilterte Größe oder große Skalen
$\bar{\cdot}$	gemittelte Größe
$\tilde{\cdot}$	kleine Skalen
$\hat{\cdot}$	Größe im Fourier–Raum oder nichtgelöste kleine Skalen
$(\cdot)_n$	Größe zum Zeitpunkt t_n
$(\cdot)^{(k)}$	linearisierte Größe
$(\cdot)^+$	Größe in Wandeinheiten

$(\cdot)_K$	Größe in Bezug auf die Gitterzelle K
$\underline{\cdot}$	Vektor mit Unbekannten der Finite-Element-Methode
$E[\cdot]$	Erwartungswert
$(\cdot)_A$	Größe in Bezug auf den chemischen Stoff A
$(\cdot)_B$	Größe in Bezug auf den chemischen Stoff B
$(\cdot)_C$	Größe in Bezug auf den chemischen Stoff C
$(\cdot)_i$	Größe in Bezug auf den Eigenschaftsraum

Vektoren

b	Konvektionsfeld
C	Konvektionsterm
f	Kraft
g	Kraftdichte
i	Eigenschafts- oder innere Koordinaten
k	Exponentenvektor
l	siehe Seite 15
m	Impuls
n	Flächennormale
u	Fluidgeschwindigkeit
x	Punkt im Raum

Tensoren

A^h	modellierte Spannungen
C	Querspannungstensor
D	Deformationstensor
G^H	großskaliger Anteil des Deformationstensors
I	Einheitstensor
L	Leonard-Spannungstensor oder große Skalen der FEVMS-Methode
\mathbb{R}	Reynoldsspannungen oder Reynolds-Spannungstensor

\mathbb{R}^r	ansiotroper Residuums–Spannungstensor
\mathbb{S}	Cauchy–Spannungstensor
\mathbb{T}	viskoser Anteil
τ^R	Residuums–Spannungstensor oder SG–Tensor

Gebiete und Ränder

V	Volumen
$V_{\mathbf{x}}$	Volumen im physikalischen Raum
$V_{\mathbf{i}}$	Volumen im Eigenschaftsraum
Ω	Gebiet oder Zustandsraum
$\Omega_{\mathbf{x}}$	Gebiet im physikalischen Raum
$\Omega_{\mathbf{i}}$	Gebiet im Eigenschaftsraum
∂V	Oberfläche des Volumens V
$\partial\Omega_D$	Gebiet mit Dirichlet–Randbedingungen
$\partial\Omega_N$	Gebiet mit Neumann–Randbedingungen

Funktionsräume und Klassen

$C^0(\Omega)$	Raum der stetigen Funktionen auf Ω
$C(\Omega)$	Raum der einmal stetig differenzierbaren Funktionen auf Ω
$C^2(\Omega)$	Raum der zweimal stetig differenzierbaren Funktionen auf Ω
$C_0^\infty(\Omega)$	Raum der auf Ω unendlich oft differenzierbaren Funktionen, die auf $\partial\Omega$ verschwinden
$H^1(\Omega)$	Sobolev–Slobodeckij–Raum $W^{1,2}(\Omega)$
$H_0^1(\Omega)$	Vervollständigung von $C_0^\infty(\Omega)$ bzgl. der Norm $\ \cdot\ _{W^{1,2}(\Omega)}$
$L_0^2(\Omega)$	Hilbert–Raum der Lebesgue–integrierbaren Funktionen zur Potenz 2, die auf $\partial\Omega$ verschwinden
L^H	Raum der großen Skalen
Q	Finite–Element–Raum
V	Finite–Element–Raum

V_D	Raum der Funktionen aus $H^1(\Omega)$, die die Dirichlet–Randbedingung auf $\partial\Omega_D$ erfüllen
V_0	Raum der Funktionen aus $H^1(\Omega)$, die auf $\partial\Omega_D$ verschwinden
$W^{k,p}(\Omega)$	Sobolev–Raum

mathematische Notationen

\mathbb{N}	natürliche Zahlen
\mathbb{R}	reelle Zahlen
dV	Volumenelement
ds	Oberflächenelement
dS	Flächenelement
\mathcal{O}	Landau–Symbol
Δ	infinitesimale Größe
π	Kreiszahl Pi
F	skalare Funktion
\mathcal{T}	Triangulierung

Kapitel I

Einleitung

Die meisten physikalischen Phänomene und Fragestellungen, von Fluidodynamik über elektro-magnetische Feldtheorie bis hin zu chemischen Reaktionen, lassen sich mit Hilfe von gekoppelten Systemen partieller Differentialgleichungen mathematisch formulieren. Daher ist die Anwendung von mathematischen Modellen auch in der Verfahrenstechnik und dem Chemieingenieurwesen weit verbreitet. Da eine experimentelle Untersuchung von solch komplexen Fragestellungen oft mit großen Schwierigkeiten verbunden oder sogar überhaupt nicht durchführbar ist, nimmt die numerische Simulation dieser Probleme einen immer größeren Stellenwert ein. Allerdings etablierten sich dynamische Modelle in der Verfahrens- oder Stoffwandlungstechnik, im Gegensatz zu anderen physikalischen oder ingenieurwissenschaftlichen Bereichen, erst in jüngerer Zeit [IDH⁺07]. Hier wurden vor allem stationäre Modelle zur chemischen Anlagenanalyse benutzt, da die Komplexität der ablaufenden Reaktionen sehr hoch ist und diese daher eine große mathematisch-physikalische Vielschichtigkeit aufweisen. Der Umstand einer fortschreitenden Entwicklung bei modernen Computern, verbunden mit der steigenden Effizienz numerischer Verfahren, ermöglicht jedoch inzwischen auch die Simulation anwendungsbezogener und realitätsnaher Probleme der chemischen Industrie.

Infolgedessen werden Simulationsrechnungen heutzutage in allen Aspekten der chemischen Produktion eingesetzt, angefangen bei der Entwicklung von Verfahren und ihrer Übertragung in die technische Realisierung, bis hin zu virtuellen Tests des Betriebes fertiger Produktionsanlagen [BBB⁺06]. Dabei dienen die Simulationsergebnisse sowohl der Verbesserung der Leistungsfähigkeit von maschinellen Prozessen als auch zur Optimierung der Produktionsabläufe. Darüber hinaus sind numerische Simulationen eine wichtige Hilfe zur Untersuchung von bisher nur teilweise verstandenen Prozessabläufen in der technischen Chemie [BBB⁺06] und ersetzen zunehmend die technisch höchst schwierig durchführbaren Messungen [WK04].

Ein typisches Beispiel für Prozessmodelle, die in der industriellen Anwendung eine große Bedeutung haben, sind Populationsbilanzsysteme. Diese Gleichungssysteme beschreiben das Verhalten einer Spezies, wobei dieser Begriff hier im weitesten Sinne zu verstehen ist, durch miteinander gekoppelte Bilanzgleichungen. Als Beispiele seien die Tröpfchenverteilung in Wolken [Sha03] oder die hier betrachtete Ausfällung von

Partikeln und ihrer Größenverteilung [JMR⁺] genannt.

Allein diese beiden Beispiele verdeutlichen bereits die Schwierigkeiten, die mit der Simulation von Populationsbilanzsystemen verbunden sind: Vergleicht man die Größe von einzelnen Tropfen oder Partikeln mit den Ausdehnungen einer Wolke oder eines chemischen Reaktors, innerhalb derer sie turbulenten Strömungen ausgesetzt sind, dann sieht man, dass innerhalb des untersuchten Problems Skalen verschiedenster Größe auftreten.

Vom Standpunkt der numerischen Simulation aus betrachtet, müssen jedoch noch weitere Herausforderungen beachtet werden: Die Partikelgrößenverteilung basiert nämlich nicht nur auf räumlichen Koordinaten und der Zeit, sondern hängt zusätzlich noch von den Eigenschaften der Partikel, sogenannten inneren Koordinaten, ab. Dabei entspricht jede Eigenschaft der Partikel einer zusätzlichen Dimension des Problems. Folglich ist die Gleichung der Populationsbilanz in einem höher-dimensionalen Gebiet definiert als die anderen Gleichungen des gekoppelten Systems. Es wird sich zeigen, dass die verschiedenen Dimensionen der einzelnen Gleichungen des Populationsbilanzsystems die Auswahl der numerischen Verfahren, die in dieser Arbeit benutzt werden, beeinflussen.

Im Allgemeinen beschreibt das Populationsbilanzsystem einer Fällungsreaktion den Transport von niedergeschlagenen Partikeln im Strömungsfeld einer Lösung und die darin ablaufenden chemischen und physikalischen Prozesse. Dies können beispielsweise die Nukleation der Partikel und deren Wachstum sein. Ihre große Bedeutung für die chemische Industrie zeigt sich darin, dass schon in der letzten Dekade, den neunziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts, über fünfzig Prozent aller Produkte in der Verfahrenstechnik in partikulärer Form vorlagen und ihr Anteil weiter zugenommen hat. Heutzutage liegt der Schwerpunkt auf der Produktion von Partikeln mit vorgeschriebenen Eigenschaften. Dies erlaubt die Herstellung von maßgeschneiderten Produkten, deren charakteristische Attribute wie etwa Form oder Größe ebenso vordefiniert sind, wie ihre chemische Funktionalität.

Die innerhalb eines chemischen Reaktors ablaufende Strömung ist in einer anwendungsbezogenen Betrachtung turbulent. Aufgrund der Komplexität von turbulenten Strömungen ist ihre Simulation selbst ein aktives Forschungsgebiet [BIL05, Joh04a, Sag02]. In den Simulationen in dieser Arbeit wird die projektions-basierte Finite-Element VMS-Methode angewendet, die einem relativ neuen Ansatz zur Turbulenzmodellierung entspricht und sich aus allgemeinen Prinzipien der Simulation von mehrskaligen Phänomenen ableitet [Hug95, Gue99].

Die innerhalb des Reaktors ablaufende chemische Reaktion wird durch ein System nichtlinearer Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen modelliert. Diese Gleichungen sind sowohl konvektions- als auch reaktionsdominant, was als eine zusätzliche Schwierigkeit berücksichtigt werden muss und ebenfalls einen sehr aktiven Forschungsbereich darstellt [RST08].

Einen Schwerpunkt der Fällungsreaktion bildet der Nukleationsprozess, der den Niederschlag der Partikel modelliert, wenn die Konzentration des gelösten Grundprodukts die Sättigungskonzentration erreicht. In den Simulationen selbst spielt das Verhalten der einzelnen Partikel der Population keine Rolle, da in verfahrenstechnischen Anwendungen die Partikelgrößenverteilung die wichtigste zu betrachtende Größe ist.

Die hier betrachtete chemische Reaktion soll in einer verdünnten Lösung ablaufen, da in diesem Fall der Einfluss der Partikel auf die Strömung selbst vernachlässigbar ist. Ebenfalls nicht berücksichtigt wird die Agglomeration und das Auseinanderbrechen von Partikeln, da der Wachstumsprozess hier als Granulation abläuft [LS96].

Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in drei Teile. Im ersten Kapitel wird die numerische Simulation einer turbulenten Kanalströmung untersucht. Dazu werden zunächst die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen hergeleitet und danach eine kurze Einführung in turbulente Strömungen und die Schwierigkeiten ihrer Simulation gegeben. Da turbulente inkompressible Strömungen, neben der hier betrachteten Fällungsreaktion, auch in vielen anderen natürlichen Prozessen und industriellen Abläufen eine wichtige Rolle spielen, ist ihre akkurate numerische Simulation von großer Bedeutung und noch immer eine Herausforderung.

Bedingt durch die begrenzte Auflösung von Diskretisierungen der zugrundeliegenden Navier–Stokes–Gleichungen ist es nicht möglich, das ganze Skalenspektrum einer turbulenten Strömung zu erfassen [Pop00]. Da die nichtgelösten Skalen allerdings wichtig für den turbulenten Charakter der Strömung sind und zudem die gelösten Skalen beeinflussen, ist die Anwendung von Turbulenzmodellen unumgänglich. Daher wird nach einer Darstellung der klassischen Large Eddy Simulation auch die Variationelle Mehrskalen–Methode ausführlich vorgestellt, wobei insbesondere auf die projektionsbasierte Finite–Element VMS–Methode (FEVMS) und die Aspekte ihrer Implementierung eingegangen wird [JK05, JK09].

Zum Abschluss dieses Kapitels werden die projektionsbasierte FEVMS–Methode und das Smagorinsky–LES–Modell mit van Driest–Dämpfungsfaktor für verschiedene Konfigurationen miteinander verglichen. Die besseren Ergebnisse der projektionsbasierten FEVMS–Methode für die Kanalströmung erlauben dabei die Einschätzung, dass sich diese auch eher zur Simulation des Strömungsfeldes innerhalb von chemischen Reaktoren eignet.

Im zweiten Kapitel wird zunächst auf die Herleitung der Partikelgrößenverteilung und der Populationsbilanz eingegangen. Da die Simulation von komplexen gekoppelten Systemen im Allgemeinen sehr zeitaufwendig ist, erfolgt eine Beschränkung des Zustandsraumes auf eine innere Koordinate, nämlich den Äquivalentdurchmesser der Partikel. Nach der Modellierung des Fällungsprozesses werden die zugrundeliegenden

Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen, die über die Geschwindigkeit mit den Navier–Stokes–Gleichungen gekoppelt sind, hergeleitet.

Diese Gleichungen beschreiben die innerhalb der kontinuierlichen Phase ablaufende chemische Reaktion zur Entstehung des gelösten Ausgangsproduktes. Darüber hinaus modellieren sie die Bildung von Nukleationskernen bei Erreichen der Sättigungskonzentration und beschreiben damit die Entfaltung der dispersen Phase. Des Weiteren sind sie mit der Populationsbilanz der Partikel gekoppelt und berücksichtigen so die durch das Partikelwachstum bedingten Veränderungen in der Konzentration des Ausgangsproduktes. Da diese Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen sowohl konvektions- als auch reaktionsdominant sind, werden mit der SUPG–Methode und dem linearen FEM–FCT–Verfahren zwei Verfahren zu ihrer Stabilisierung vorgestellt.

Aufgrund der Tatsache, dass die Bilanzgleichung der Partikelgrößenverteilung in einem höher–dimensionalen Gebiet definiert ist, ist ihre Lösung auch potentiell teurer als die der anderen Gleichungen. Daher werden mit dem expliziten und dem impliziten Euler–Verfahren mit einem Upwind–Finite–Differenzen–Verfahren noch zwei Verfahren geringerer Ordnung zur Diskretisierung der Populationsbilanz eingeführt, um diese zusammen mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren in numerischen Tests zu vergleichen.

Die numerischen Untersuchungen der verschiedenen Verfahren stellen den letzten Teil der Arbeit dar. Nach einer Beschreibung der chemischen Fällungsreaktion und der daran beteiligten Stoffe, werden zunächst der Aufbau und die Konfiguration der numerischen Simulationen erläutert und die untersuchten Kenngrößen definiert.

Die ersten Simulationen werden in einem zweidimensionalen Gebiet durchgeführt und bilden eine Vergleichsstudie für verschiedene Einströmungspositionen an den seitlichen Reaktorbegrenzungen. Diese Untersuchung zeigt, dass die verschiedenen Positionen einen beachtlichen Einfluss auf die Kenngrößen der Fällungsreaktion haben und dass Simulationen mit einer SUPG–Stabilisierung der Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen zu unphysikalischen Oszillationen in den Konzentrationsfeldern führen. Motiviert durch diese Erfahrungen, wird im Folgenden das lineare FEM–FCT–Verfahren untersucht und verwendet. Um die verschiedenen Diskretisierungen der Populationsbilanz zu vergleichen, werden diese für zwei verschiedene Strömungsgeschwindigkeiten der Hintergrundlösung simuliert.

Zur besseren Einordnung der qualitativen Unterschiede in den Ergebnissen dieser numerischen Tests, wird noch ein Modellproblem einer zweidimensionalen Konvektions–Diffusionsgleichung mit einer dreidimensionalen Transportgleichung und vorgegebener Lösung untersucht.

Den Abschluss bilden numerische Simulationen in einem dreidimensionalen chemischen Reaktor mit einer vierdimensionalen Populationsbilanzgleichung. Da die betrachtete Strömung mit einer Reynolds–Zahl $Re = 10000$ in diesem Fall turbulent ist, wird hier die projektions–basierte FEVMS–Methode verwendet.

Kapitel II

Numerische Simulation turbulenter inkompressibler Strömungen

§1 Die Navier–Stokes–Gleichungen

§1.1 Die Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt das Verhalten der Dichte in einem Volumen. Wesentlichste Aussage ist, dass die Quelle eines Flusses von Objekten die zeitliche Änderung seiner Dichte ist. Für die Herleitung der Kontinuitätsgleichung betrachtet man ein beliebiges Volumen V mit der Masse $\int_V \tilde{\rho} dV$. Des Weiteren wird angenommen, dass die Oberfläche von V die Bedingungen des Satzes von Gauß erfüllt.

Die zeitliche Veränderung der Dichte entspricht hier dem Zu- und Abfluss des betrachteten Volumens. Pro Zeiteinheit fließt durch ein Flächenelement ds (orientiert in Richtung der äußeren Flächennormale) die Fluidmenge $\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} ds$, wobei $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \tilde{u}_3)^T$ die Strömungsgeschwindigkeit ist.

Der Fluss durch die Gesamtoberfläche ist also

$$\oint_{\partial V} \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} ds.$$

Auf der anderen Seite kann die zeitliche Änderung des Fluids in dem Volumen auch folgendermaßen beschrieben werden,

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V \tilde{\rho} dV.$$

Da die Veränderung des Fluides im Volumen gleich dem Fluss durch die Oberfläche sein muss, gilt die Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \tilde{\rho} dV = - \oint_{\partial V} \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} ds.$$

Mit dem Satz von Gauß formt man das Oberflächenintegral um

$$\oint_{\partial V} \tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}} \, ds = \int_V \nabla \cdot (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}) \, dV$$

und erhält

$$\int_V \left[\frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV = 0.$$

Da diese Aussage für ein beliebiges Volumen V gilt, muss der Integrand verschwinden

$$\frac{\partial \tilde{\varrho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0. \quad (\text{II.1})$$

Dies ist die sogenannte *Kontinuitätsgleichung* oder auch das *Gesetz von der Erhaltung der Masse*. Mit anderen Worten, der Fluss durch eine geschlossene Oberfläche, welche weder Quellen noch Senken umschließt, ist Null. Dies ist ein Äquivalent der Aussage, dass Materie weder erzeugt noch zerstört werden kann. Übertragen auf die Fluidodynamik besagt dies, dass die zeitliche Änderung der Dichte $\tilde{\varrho}$ der räumlichen Änderung der Stromdichte, $-\nabla \cdot (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}})$, entspricht.

Im Falle von *inkompressiblen* Fluiden, d.h. $\tilde{\varrho} = \text{const.}$, reduziert sich die Kontinuitätsgleichung (II.1) zu

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0. \quad (\text{II.2})$$

§1.2 Die Erhaltung des Impulses

Ein Erhaltungsgesetz legt fest, dass eine gegebene messbare Größe eines abgeschlossenen physikalischen Systems keiner Veränderung während der Evolution des Systems unterliegt. Bei der Herleitung von Erhaltungssätzen betrachtet man einzelne Größen und die Gesamtheit ihrer Eigenschaften (z.B. Energie, Masse oder Impuls). Diese spiegeln im Allgemeinen die zugrunde liegenden Erhaltungsprinzipien wider.

In der klassischen Mechanik wird bei der Beobachtung einer Größe oft auf das Konzept der Kontrollmasse zurückgegriffen. In der Fluidodynamik ist allerdings ein anderer Ansatz üblich. Hier wird ein Kontrollvolumen statt einer Kontrollmasse betrachtet, da im Gegensatz zu Festkörpern die Geschwindigkeit eines Fluides von der Position abhängen kann.

Dieser Ansatz erlaubt es, den Impuls eines Fluides mit Hilfe des folgenden Integrals hinsichtlich des Kontrollvolumens darzustellen

$$\tilde{\mathbf{m}} = \int_V \tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}} \, dV.$$

Das 2. Newtonsche Gesetz, das Aktionsprinzip, beschreibt die Beziehung zwischen

der Veränderung des Impulses und den einwirkenden Kräften

$$\frac{d\tilde{\mathbf{m}}}{d\tilde{t}} = \sum \tilde{\mathbf{f}}.$$

Die Kräfte $\tilde{\mathbf{f}}$, die auf ein Fluid einwirken können, teilt man in zwei Gruppen:

- Oberflächenkräfte (z.B. Druck, Oberflächenspannung, Normal- oder Scherspannungen),
- Volumenkräfte (z.B. Gravitation, Zentripetalkraft, Corioliskraft, Scheinkräfte, elektromagnetische Kräfte).

Die Oberflächenkräfte können durch $\int_{\partial V} \mathbb{S} \cdot \mathbf{n} \, ds$ ausgedrückt werden. Dabei ist \mathbb{S} der Cauchy–Spannungstensor, der die molekulare Transportrate des Impulses beschreibt.

Die Volumenkräfte werden mit $\int_V \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{g}} \, dV$ beschrieben, wobei $\tilde{\mathbf{g}}$ eine gegebene Kraftdichte (Kraft pro Einheitsvolumen) ist.

Folglich kann man Newtons zweites Gesetz auch wie folgt formulieren:

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \int_V \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \, dV = \int_V \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{g}} \, dV + \int_{\partial V} \mathbb{S} \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (\text{II.3})$$

§1.2.1 Transporttheorem von Reynolds

Dieser Abschnitt beginnt mit einer kurzen Beschreibung der beiden elementaren Sichtweisen in der Fluidodynamik.

Beim *Eulerschen* Ansatz betrachtet man an einem Punkt $\tilde{\mathbf{x}}$ zur Zeit \tilde{t} ,

- die auftretende Veränderung in der Zeit, wenn man im Raumpunkt $\tilde{\mathbf{x}}$ verharrt (beschrieben durch $\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}$),
- die räumlichen Variationen zu einem bestimmten Zeitpunkt (beschrieben durch $\frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{x}}}$).

Im Gegensatz dazu steht die *Lagrangesche* Herangehensweise. Hier folgt man einem Partikel oder einer Partikelmenge im Raum und beobachtet die auftretende zeitliche Änderungsrate. Diese Veränderungen werden mit der sogenannten *Material-, totalen* oder *Lagrange–Ableitung*, $\frac{d}{d\tilde{t}}$, beschrieben.

Die Materialableitung ist die zeitliche Änderung einer Funktion F , deren Beobachter sich mit einem Partikel bewegt. Dieser Partikel hat zur Zeit \tilde{t} die Koordinaten $\tilde{\mathbf{x}}$ und die Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}}$ und bewegt sich in der Zeit $\tilde{t} + \Delta\tilde{t}$ zum Punkt $\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{u}}\Delta\tilde{t}$. Die strikte

mathematische Definition von $\frac{dF}{d\tilde{t}}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}})$ mit $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)^T$ ist gegeben durch

$$\frac{dF}{d\tilde{t}}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) = \lim_{\Delta\tilde{t} \rightarrow 0} \left[\frac{F(\tilde{t} + \Delta\tilde{t}, \tilde{x}_1 + \tilde{u}_1 \Delta\tilde{t}, \tilde{x}_2 + \tilde{u}_2 \Delta\tilde{t}, \tilde{x}_3 + \tilde{u}_3 \Delta\tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} - \frac{F(\tilde{t}, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)}{\Delta\tilde{t}} \right].$$

Mit einer Taylorentwicklung des ersten Terms nach $\tilde{\mathbf{x}}$ erhält man

$$\begin{aligned} \frac{dF}{d\tilde{t}}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) &= \lim_{\Delta\tilde{t} \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tilde{t}} \left[F(\tilde{t}, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) + \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}_1} \tilde{u}_1 \Delta\tilde{t} + \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}_2} \tilde{u}_2 \Delta\tilde{t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}_3} \tilde{u}_3 \Delta\tilde{t} + \frac{\partial F}{\partial \tilde{t}} \Delta\tilde{t} + \mathcal{O}((\Delta\tilde{t})^2) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}((\Delta\tilde{t})^3) + \dots - F(\tilde{t}, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) \right] \\ &= \lim_{\Delta\tilde{t} \rightarrow 0} \left[\tilde{u}_1 \frac{\partial F_1}{\partial \tilde{x}_1} + \tilde{u}_2 \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{x}_2} + \tilde{u}_3 \frac{\partial F_3}{\partial \tilde{x}_3} + \frac{\partial F}{\partial \tilde{t}} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}(\Delta\tilde{t}) + \mathcal{O}((\Delta\tilde{t})^2) + \dots \right], \end{aligned}$$

wobei \mathcal{O} das Landausche Symbol ist.

In diesem Zusammenhang muss man beachten, dass die Ableitungen $\tilde{u}_i = \frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}}$, also die zeitliche Veränderung von \tilde{x}_i , mittels der Materialableitung definiert werden. Im Allgemeinen beschreibt $d\tilde{x}_1 d\tilde{x}_2 d\tilde{x}_3$ ein infinitesimal kleines Volumen, welches nicht durch ein Medium beschränkt wird. Mit anderen Worten, die Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}}$ eines solchen Volumens ist nicht notwendigerweise die Fluidgeschwindigkeit. Sie kann auch die Geschwindigkeit eines Beobachters sein, der sich durch das Volumen bewegt. Diese Vorstellung zeigt erneut die Unterschiede der verschiedenen Sichtweisen in der Fluidodynamik auf.

Unter der Annahme des Grenzwertes, $\Delta\tilde{t} \rightarrow 0$, erhält man die Definition der Material- oder Lagrangeschen Ableitung

$$\frac{d}{d\tilde{t}} [F(\tilde{t}, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)] = \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \right) F(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}})$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i} \right) F(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}).$$

Diese Definition beschreibt die Materialableitung $\frac{d}{dt}$, mit Hilfe der Eulerschen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i}$ und $\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}$.

Abschließend kann man sagen, dass sich die Materialableitung aus der lokalen zeitlichen Änderung an einem festen Punkt und einem konvektiven Anteil, resultierend aus der Bewegung des Kontinuums, zusammensetzt.

Ein bedeutendes Instrument im Rahmen der Herleitung von Erhaltungsgleichungen ist das *Transporttheorem von Reynolds*.

Dieses, auch *Kontrollvolumen–Gleichung* genannt, zeigt die zeitliche Veränderung einer physikalischen Größe in einem sich bewegenden Kontrollvolumen. Es beschreibt die Wirkung der Materialableitung, wenn diese auf ein Integral einer Funktion über einem gegebenen Volumen angewandt wird,

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \left[\int_V F dV \right] = \int_V \left[\frac{dF}{d\tilde{t}} + F(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV.$$

Das betrachtete Volumen V ist eingebettet in das Fluid und bewegt sich mit diesem. Das Reynolds–Theorem gibt also die totale zeitliche Änderungsrate von $\int_V F dV$ an. Wenn man nun die Materialableitung durch die Eulerschen Ableitungen ausdrückt, erhält man

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \int_V F dV = \int_V \left[\frac{\partial F}{\partial \tilde{t}} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) F + F(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV. \quad (II.4)$$

Mit einem als linear angenommenen Impuls, d.h. $F = \tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}$, kann man den Operator $\nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F)$ folgendermaßen entwickeln:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F) &= \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{u}} (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}})] \\ &= \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{u}} \otimes (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}})] \\ &= \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} (\tilde{\varrho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \right)_{i=1,2,3} \\ &= \left(\sum_{j=1}^3 \tilde{u}_j \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} (\tilde{\varrho} \tilde{u}_i) + \tilde{\varrho} \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} \tilde{u}_j \right)_{i=1,2,3} \\ &= (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{u}}) (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \\ &= (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) F + F (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}). \end{aligned}$$

Diese Beziehung kann in das Transporttheorem für den linearen Impuls eingesetzt wer-

den und ergibt dessen am weitesten verbreitete Darstellung,

$$\frac{d}{dt} \int_V F dV = \int_V \left[\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F) \right] dV.$$

Das Integral der Quellenverteilung $\nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F)$ kann mit Hilfe des Divergenzsatzes in ein Oberflächenintegral überführt werden

$$\int_V \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} F) dV = \int_{\partial V} F \tilde{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\partial V} F (\tilde{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s}).$$

Diese Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes ergibt für das Transporttheorem:

$$\frac{d}{dt} \left[\int_V F dV \right] = \int_V \frac{\partial F}{\partial t} dV + \int_{\partial V} F (\tilde{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s}). \quad (\text{II.5})$$

Der erste Term dieser Darstellung repräsentiert die zeitliche Änderungsrate von F im Inneren des in der Bewegung befindlichen Volumens V . Der zweite Term stellt den gesamten Durchfluss von F durch die Hülle des sich bewegenden Volumens ∂V dar. Hierbei wird F pro Einheitsvolumen berechnet und $\tilde{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s}$ (Geschwindigkeit \times Oberfläche) ist der Durchfluss pro Zeiteinheit durch ein nach außen gerichtetes Flächenelement. Dies zeigt, dass die zeitliche Änderungsrate von $\int_V F dV$ für ein sich mit dem Fluid bewegendes Volumen gegeben ist durch die zeitliche Änderungsrate von $\int_V F dV$ für ein im Raum festes Volumen V plus den Fluss von F durch die Oberfläche ∂V von V .

§1.2.2 Die Impulserhaltung

Die Anwendung des Transporttheorems (II.4) auf die linke Seite der Gleichung (II.3) ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} dV &= \int_V \left[\frac{d}{dt} (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV \\ &= \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV. \end{aligned}$$

Mit dem Gauß'schen Satz erhält man für das Oberflächenintegral in (II.3):

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] dV = \int_V \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{g}} dV + \int_V \nabla \cdot \mathbb{S} dV.$$

Diese Darstellung ist unabhängig vom betrachteten Kontrollvolumen und liefert die *Impulserhaltung* oder die *Impulsbilanz–Gleichung*:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla)(\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}})(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) - \tilde{\rho}\tilde{\mathbf{g}} - \nabla \cdot \mathbb{S} = 0. \quad (\text{II.6})$$

Die Modellierung des Cauchy–Spannungstensors ist hier von grundlegender Bedeutung. Unter der Annahme eines *nicht-viskosen* oder *idealen Fluids*, d.h. alle inneren Reibungskräfte können vernachlässigt werden, ist es offensichtlich, dass der Spannungstensor nur vom Druck abhängt

$$\mathbb{S} = -\tilde{p}\mathbb{I}.$$

Aus dieser Betrachtung folgt, dass die Diagonaleinträge σ_x , σ_y und σ_z , des 3×3 Tensors zweiter Stufe,

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \sigma_x & & 0 \\ & \sigma_y & \\ 0 & & \sigma_z \end{bmatrix},$$

die Normal- oder Zugspannungen repräsentieren. Die Scher- und Schubspannungskomponenten können in diesem Fall vernachlässigt werden und (II.6) vereinfacht sich zu

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla)(\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}})(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) - \tilde{\rho}\tilde{\mathbf{g}} + \nabla\tilde{p} = 0. \quad (\text{II.7})$$

Hier ist zu beachten, dass die Divergenz eines Tensors berechnet werden soll und der Operator dann zeilenweise angewandt wird. Daher gilt in diesem Fall $\nabla \cdot \mathbb{S} = \nabla\tilde{p}$.

Bei der Betrachtung viskoser Fluide müssen auch die inneren Reibungskräfte

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix}$$

berücksichtigt werden.

Im Folgenden werden nur *Newtonsche Fluide* betrachtet, also Fluide deren Scherspannungen τ proportional zum Schergefälle, d.h. Geschwindigkeitsgradient senkrecht zu den Molekülschichten,

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}}$$

sind.

Die Proportionalitätskonstante, $\eta = \tau/\dot{\gamma}$, wird als *dynamische Viskosität* bezeichnet und hat die SI-Einheit $[\text{Ns}/\text{m}^2] = [\text{Pa} \cdot \text{s}]$. Die Viskosität ist ein Maß für den inneren

Widerstand eines Fluides, sich unter Spannungen zu verformen oder zu fließen.

Bei Newtonschen Fluiden hängt die Viskosität nur von der Temperatur, dem Druck und eventuell vom chemischen Aufbau des Fluides ab. In diesem Zusammenhang ist zu beachten, dass ein Temperaturanstieg im Fluid zu einem Anstieg der Fluidität, dem Kehrwert der Viskosität, führt.

Für Newtonsche Fluide erhält der Spannungstensor demnach noch einen viskosen Term \mathbb{T} , also ist

$$\mathbb{S} = -\tilde{p}\mathbb{I} + \mathbb{T} = (-\tilde{p} + \zeta \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbb{I} + 2\eta \mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}}),$$

wobei ζ eine weitere Viskositätskonstante ist. $\mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}})$ wird *Deformations-* oder auch *Green-Tensor* genannt und hat die Darstellung

$$\mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2} [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}^T].$$

Damit läßt sich die Impulsbilanz (II.6) schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla)(\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}})(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) - \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{g}} + \nabla \tilde{p} - \zeta \nabla(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) - 2\eta \nabla \cdot \mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}}) = 0. \quad (\text{II.8})$$

Die Untersuchung kompressibler Strömungen und Fluide benötigt weitere Informationen, wie man sie z.B. durch die Zustandsgleichung erhält. In dieser Arbeit werden allerdings nur *inkompressible* Strömungen, d.h. $\tilde{\rho}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) = \rho = \text{const.}$, betrachtet. Dies, zusammen mit der inkompressiblen Kontinuitätsgleichung (II.2), ergibt die inkompressible Impulserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} - 2\nu \nabla \cdot \mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}}) = \tilde{\mathbf{g}}, \quad (\text{II.9})$$

wobei $\nu = \eta/\rho$ dem Verhältnis der dynamischen Viskosität zur Massenkraft entspricht und *kinematische Viskosität* genannt wird.

§1.3 Die dimensionslosen Navier-Stokes-Gleichungen

In den Ingenieurwissenschaften und der Physik ist die Ähnlichkeitstheorie ein weitverbreitetes Werkzeug zur Simulation von Experimenten mit großer räumlicher Ausdehnung und zur Herleitung physikalischer Zusammenhänge. Die zugrundeliegende Dimensionsanalyse ermöglicht mit Hilfe dimensionsloser Kennzahlen die Rückführung komplexer physikalischer Vorgänge auf Modellprobleme.

In diesem Zusammenhang sagt man, dass ein Modell *Ähnlichkeit* mit der realen Anwendung hat, wenn beide die gleiche Geometrie und die gleichen kinematischen und dynamischen Kennzahlen besitzen. Dies erlaubt, Erkenntnisse, die über ein Mo-

dell gewonnen werden konnten, auf die ursprüngliche Fragestellung zu übertragen und so physikalische Phänomene in verschiedenen Maßstäben zu untersuchen. Um Aussagen über die Ähnlichkeit von Strömungen machen zu können, müssen zuerst die noch dimensionsbehafteten, inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen (II.2, II.9) entdimensioniert werden.

Dies geschieht mit Hilfe der Kennzahlen einer Strömung, der charakteristischen Länge l_∞ , der charakteristischen Zeit t_∞ sowie der charakteristischen Geschwindigkeit u_∞ . Im nächsten Abschnitt wird die Motivation zu dieser Wahl der Kennzahlen genauer erläutert und ihre angenommenen Werte, hier $l_\infty = 1\text{m}$, $t_\infty = 1\text{s}$ und $u_\infty = 1\text{m/s}$, physikalisch begründet.

Diese Größen erlauben die Separation von dimensionsgebundenen Variablen in ein Produkt einer Referenzgröße und einer dimensionslosen Variablen,

$$\tilde{\mathbf{u}} = u_\infty \mathbf{u}, \quad \tilde{p} = p_\infty p, \quad \tilde{t} = t_\infty t, \quad \tilde{x}_i = l_\infty x_i, \quad p_\infty = \rho u_\infty^2, \quad t_\infty = \frac{l_\infty}{u_\infty}.$$

Durch Substitution der Variablen und Umstellen der Gleichungen, können die Navier–Stokes–Gleichungen in eine von allen physikalischen Einheiten bereinigte Form überführt werden:

$$\frac{l_\infty}{t_\infty u_\infty} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - 2 \frac{\nu}{l_\infty u_\infty} \nabla \cdot \mathbb{D}(\mathbf{u}) = \frac{l_\infty}{u_\infty^2} \tilde{\mathbf{f}},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0.$$

Die verbliebenen Ausdrücke sind die dimensionslose Volumenkraft \mathbf{f} und die beiden wichtigsten Parameter zur Beschreibung der Kinematik und Dynamik einer Strömung, die *Reynolds–Zahl* Re und die *Strouhal–Zahl* St

$$\mathbf{f} = \frac{l_\infty}{u_\infty^2} \tilde{\mathbf{f}}, \quad Re = \frac{u_\infty l_\infty}{\nu}, \quad St = \frac{l_\infty}{t_\infty u_\infty}.$$

In diesem Zusammenhang sagt man, dass zwei Strömungen sich ähnlich verhalten, wenn sie neben einer ähnlichen Geometrie auch die gleiche Reynolds–Zahl und die gleiche Strouhal–Zahl besitzen. In der Modelltheorie spricht man dann von einer *vollständigen* (Modell-) Ähnlichkeit und sagt, das allgemeine Newtonsche Ähnlichkeitsgesetz ist erfüllt (vgl. [Goe75]).

Aus den oben angegebenen Kennzahlen folgt $St = 1$ und damit ergibt sich die am weitesten verbreitete Darstellung der dimensionslosen, inkompressiblen Navier–Stokes–

Gleichungen,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - 2Re^{-1} \nabla \cdot \mathbb{D}(\mathbf{u}) + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

Im folgenden Abschnitt wird genauer auf die Dimensionsanalyse von Strömungen eingegangen. Dabei soll eine andere Herangehensweise zur Herleitung sowohl der Reynolds-Zahl als auch der Strouhal-Zahl skizziert werden. Die verwendete Notation und die folgenden Definitionen orientieren sich dabei an den Darstellungen in [Goe75].

§1.3.1 Dimensionsanalyse und Strömungsmechanik

In der Strömungsmechanik lassen sich alle auftretenden physikalischen Größenarten, wie die Geschwindigkeit oder der Druck, auf das $\{M, L, T\}$ Grundgrößensystem zurückführen. Dabei symbolisieren M , L und T die Basisgrößen Masse, Länge und Zeit. Jede Basisgröße stellt dabei eine eigene Dimension dar, für die eine Basiseinheit definiert ist. Hier sind dies Kilogramm [kg], Meter [m] und Sekunde [s].

Das Ziel der Dimensionsanalyse ist die Darstellung der ursprünglich dimensionsgebundenen Variablen eines Modells durch ein Fundamentalsystem von dimensionslosen Potenzprodukten.

Ausgehend von einem beliebigen, aber fest gewählten System von Grundgrößen $\{M_1, \dots, M_m\}$ seien $x_1, \dots, x_n > 0$ die Maßzahlen der n physikalischen Größen eines betrachteten Modells mit den Dimensionen

$$[x_i] = \prod_{j=1}^m M_j^{a_{ij}}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Die Exponenten der Modellgrößen bilden dabei die Zeilen der zugehörigen Dimensionenmatrix A , welche die Basis für die Dimensionstafel und die weitergehenden Betrachtungen ist

$$A := (a_{ij})_{i=1, \dots, n; j=1, \dots, m}.$$

Dabei ist ein *Potenzprodukt* von Maßzahlen x_i ,

$$\Pi := \prod_{i=1}^n x_i^{k_i},$$

eine Maßzahl einer physikalischen Größe der Dimension

$$[\Pi] = \prod_{j=1}^m M_j^{l_j} \quad \text{mit} \quad \mathbf{l} = \mathbf{k}A.$$

Physikalische Größe	Maßzahl	M	L	T
charakteristische Geschwindigkeit	$u_\infty = x_1$	0	1	-1
Dichte	$\rho = x_2$	1	-3	0
dynamische Viskosität	$\eta = x_3$	1	-1	-1
charakteristische Länge	$l_\infty = x_4$	0	1	0
charakteristische Zeit	$t_\infty = x_5$	0	0	1

Tabelle II.1: Dimensionstafel zur Herleitung der Reynolds–Zahl

Sind mehrere Potenzprodukte gegeben, so definiert sich ihre Exponentenmatrix K durch die Gleichung

$$L = KA.$$

Nach [Goe75] bilden Potenzprodukte genau dann ein *unabhängiges System*, wenn die Zeilen von K linear unabhängig sind. Ein Potenzprodukt Π heißt *dimensionslos*, wenn die physikalische Größe mit der Maßzahl Π dimensionslos ist, d.h.

$$[\Pi] = \prod_{j=1}^m M_j^0 = 1 \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{1} = \mathbf{k}A = \mathbf{0}.$$

Ein System von dimensionslosen Potenzprodukten, Π_1, \dots, Π_l , der x_1, \dots, x_n heißt *Fundamentalsystem dimensionsloser Potenzprodukte*, wenn es ein unabhängiges System ist und wenn jedes beliebige dimensionslose Potenzprodukt der x_1, \dots, x_n sich als Potenzprodukt der Π_1, \dots, Π_l darstellen lässt.

Als Beispiel einer Dimensionsanalyse werden nun die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen betrachtet. Die folgende Dimensionstafel zeigt den Zusammenhang zwischen dem $\{M, L, T\}$ –System und den benötigten Maßzahlen der physikalischen Größen.

Für die Dimensionsmatrix aus der Tabelle II.1 ergibt sich

$$\left. \begin{array}{l} n = 5 \\ \text{rang}(A) = r = 3 \end{array} \right\} \implies n - r = 5 - 3 = 2 = l.$$

Das Fundamentalsystem besteht also aus $l = 2$ dimensionslosen und unabhängigen

Potenzprodukten. Diese sind gerade die im letzten Abschnitt definierten Kennzahlen,

$$\begin{aligned}\Pi_1 &= x_1^1 \cdot x_2^1 \cdot x_3^{-1} \cdot x_4^1 \cdot x_5^0 = Re = \frac{u_\infty l_\infty}{\nu}, \\ \Pi_2 &= x_1^{-1} \cdot x_2^0 \cdot x_3^0 \cdot x_4^1 \cdot x_5^{-1} = St = \frac{l_\infty}{u_\infty t_\infty}.\end{aligned}\tag{II.11}$$

Das bedeutet, wie bereits erwähnt, dass sich zwei Strömungen genau dann ähnlich sind, wenn sie die gleiche Reynolds-Zahl und die gleiche Strouhal-Zahl haben. Des Weiteren folgt aus dem Buckingham'schen Π -Theorem, dass alle anderen dimensionslosen Kennzahlen die Gestalt

$$\Pi = Re^{\lambda_1} St^{\lambda_2}, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R},$$

haben und sich somit durch die Reynolds- und die Strouhal-Zahl ausdrücken lassen.

§2 Turbulente Strömungen und Schwierigkeiten ihrer Simulation

Dieser Abschnitt soll eine kurze Einführung in die Theorie der Turbulenz geben. Aufgrund der Vielschichtigkeit des Themas und des großen Spektrums wissenschaftlicher Arbeiten zu turbulenten Strömungen, erfolgt eine strenge Beschränkung auf die für das Folgende notwendigen Erkenntnisse. Für umfangreichere und tiefergehende Informationen zu diesem facettenreichen Thema sei beispielhaft auf die drei Werke [Pop00], [Bat67], [Fri95] und die dort angegebenen Literaturverzeichnisse verwiesen.

Was ist Turbulenz?

Die Frage nach einer Definition der Turbulenz ist ein wichtiges, aber immer noch ungelöstes Problem in der Physik. Gemäß [JS98], geht die Fragestellung nach einer klaren mathematischen Definition des Begriffes unter anderem auf den britischen Mathematiker und Physiker Horace Lamb zurück. Dieser beschrieb schon 1879, dass es zu einem mathematischen Versagen bei der Betrachtung dieser Fragestellung kommt [Lam31, Lam79].

Infolgedessen nimmt man einen etwas unpräzisen Standpunkt ein und sagt, turbulente Strömungen treten bei hohen Reynolds-Zahlen auf oder anders ausgedrückt: Die Reynolds-Zahl, der wichtigste Parameter zur Beschreibung von Strömungen, dient als Maß für den Grad der Turbulenz. Dies begründet sich darin, dass mit steigender Reynolds-Zahl, also sinkender Viskosität, die Dominanz der nichtlinearen Konvektion gegenüber dem Diffusionsterm in (II.10) zunimmt.

Eine physikalische Definition erfolgt über die Beschreibung der grundlegenden Eigenschaften turbulenter Strömungen. Diese besitzen ein stetiges und breites Spektrum an

beobachtbaren räumlichen und zeitlichen Skalen und zeichnen sich durch einen hohen Einfluss der nichtlinearen Effekte aus. Zusätzlich besteht eine große Abhängigkeit von den gegebenen Anfangs- und Randbedingungen. Dies führt zu einer ungeordneten und schwer oder nicht vorhersagbaren Struktur, die nur statistische Aussagen erlaubt. Daher spricht man in diesem Zusammenhang oft von einem deterministischen Chaos [Fri95].

Dies spiegelt sich auch im Unterschied zwischen den rein deterministischen Navier–Stokes–Gleichungen und der stochastischen Natur der Turbulenz wieder. Die Frage, warum die Lösungen eines Gleichungssystems, basierend auf der Newtonschen Mechanik, Zufallsgrößen sind, kann durch die extrem hohe Sensitivität turbulenter Strömungen gegenüber allen Störungen beantwortet werden [Pop00]. Diese unvermeidbaren Störungen, wie Materialeigenschaften, Verunreinigungen oder Inhomogenitäten, kommen also noch zu der bereits erwähnten großen Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen hinzu.

Von der Analyse laminarer Strömungen weiß man, dass experimentelle und mathematische Ergebnisse eine hohe Übereinstimmung besitzen. Turbulente Strömungen benötigen hier eine andere Herangehensweise, da eine Theorie, die ein bestimmtes Geschwindigkeitsfeld berechnen will, bei auftretenden Zufallsgrößen falsch sein muss.

Die daher notwendige statistische Betrachtung turbulenter Strömungen geht auf Osborne Reynolds zurück. Dieser führte 1894 erstmals die nach ihm benannte *Reynolds–Zerlegung* der Geschwindigkeit ein

$$\mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}' \quad (\text{II.12})$$

Das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} wird hierbei aufgespaltet in eine Summe aus Mittelwert $\langle \mathbf{u} \rangle$ und zugehöriger Fluktuation \mathbf{u}' , wobei der Mittelwert $\langle \cdot \rangle = \langle \langle \cdot \rangle_s \rangle_t$ zuerst über den Raum und danach über die Zeit gebildet wird [Pop00]. Basierend auf der Reynolds–Zerlegung werden noch die folgenden statistischen Definitionen bei der Auswertung numerischer Simulationen benutzt:

Die *Varianz* oder *mittlere quadratische Abweichung*

$$\text{var}(\mathbf{u}) = \langle (\mathbf{u}')^2 \rangle,$$

die *Standardabweichung* oder *turbulente Intensität*

$$\sqrt{\text{var}(\mathbf{u})} = \langle (\mathbf{u}')^2 \rangle^{\frac{1}{2}},$$

und die *Kovarianzmatrix* oder *Reynolds–Spannungen*

$$\mathbb{R} = \langle \mathbf{u}' (\mathbf{u}')^T \rangle, \quad \mathbb{R}_{ij} = \langle u'_i u'_j \rangle.$$

Um die zugrunde liegenden physikalischen Mechanismen der Turbulenz näher zu

betrachten, muss zuerst der Begriff Wirbel erläutert werden. Dieser entzieht sich allerdings, wie schon zuvor der Begriff Turbulenz, einer genauen mathematischen Definition. Nach [Pop00] versteht man unter einem *Wirbel* eine turbulente Bewegung, die, lokalisiert in einem Gebiet, in diesem als kohärent angesehen werden kann. Dieses Gebiet kann zusätzlich auch noch kleinere Wirbel enthalten.

In diesem Zusammenhang versteht man unter der charakteristischen Länge l_∞ ein Maß für die größten Wirbel, welches mit der Länge vergleichbar ist, auf der sich die Geschwindigkeit der mittleren Strömung merklich ändert.

Die Energiekaskade von Richardson

Wie fast alle phänomenologischen Ansätze zur Theorie der Turbulenz beginnt auch dieser Abschnitt mit einer Betrachtung der Energiekaskade von Richardson [Ric22]. Deren Ausgangspunkt ist die grundlegende Annahme, dass eine turbulente Strömung eine Überlagerung von Turbulenzelementen oder Wirbeln verschiedenster Größe ist. Da die Navier–Stokes–Gleichungen ein physikalisch dissipatives System beschreiben, wird eine ständige Energiezufuhr benötigt, um dieses System in einem stationären Zustand zu halten [Fri95]. Dabei entstehen die größten Wirbel direkt aus der Instabilität der mittleren Geschwindigkeit der Strömung, erzeugt durch die Energiezufuhr. Sie selbst sind instabil und zerfallen ihrerseits in kleinere Wirbel, die durch ihre eigene Instabilität weiter zerfallen. In diesem Prozess wenden die Wirbel ihre ganze kinetische Energie, die sie von Wirbeln größerer Ordnung empfangen haben, zur Bildung von Wirbeln kleinerer Ordnung auf [OJ58]. Da sich dieser Prozess ständig wiederholt, spricht man von einer *Energiekaskade*.

Die Reynolds–Zahl der größten Wirbel, $Re = Re(l_\infty) = (u_\infty l_\infty)/\nu$, im Bereich der Energiezufuhr ist groß gegenüber der Reynolds–Zahl der Wirbel im Inertial- und Zerstreungsbereich und daher sind die direkten Effekte der Viskosität in dieser Skalengröße vernachlässigbar. Während der Kaskade werden die zerfallenden Wirbel allerdings immer kleiner und mit abnehmender Reynolds–Zahl bzgl. der Wirbelgröße nimmt der Einfluss der Viskosität solange zu, bis eine kleinste Wirbelgröße λ erreicht ist. Die Bewegung dieser kleinsten Wirbel kann als stabil und damit laminar angesehen werden, da hier der Einfluss der molekularen Viskosität so stark ist, dass er die Wirbelbewegung dominiert. Die gesamte kinetische Energie, die sich während der Kaskade übertragen hat, wird in diesem Skalenbereich von der molekularen Viskosität zerstreut und geht, hauptsächlich in Form von Wärme, in innere Energie des Systems über. Aus Experimenten weiß man, dass die von der Viskosität verursachten Effekte ungefähr ab einer Größenordnung von $l_D = 30\lambda$ relevant werden [Fri95].

Die Energie wird also auf den größten räumlichen Skalen zugeführt, fließt durch die kleiner werdenden Skalen in die kleinsten und zerstreut sich dort, vgl. Abbildung II.1. Dabei ist die *Dissipationsrate* der turbulenten Energie, ε [m^2/s^3], von Interesse und

nach [Pop04] definiert als

$$\varepsilon := 2\nu \langle \mathbb{D}(\mathbf{u}') : \mathbb{D}(\mathbf{u}') \rangle.$$

Experimentelle Untersuchungen zeigten die von der Reynolds-Zahl unabhängige Relation

$$\varepsilon \sim \frac{u_\infty^3}{l_\infty}. \quad (\text{II.13})$$

Die Dissipationsrate und damit die Größenordnung des Energietransfers wird also im ersten Schritt der Kaskade bestimmt, während die Zerstreuung selbst erst im letzten Schritt stattfindet [Pop00].

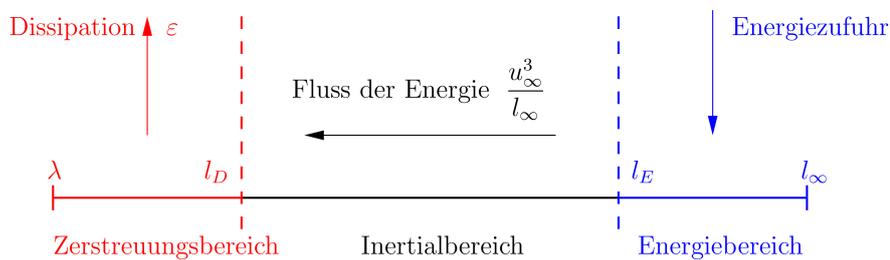


Abbildung II.1: Bereiche der Energiekaskade nach [Pop00]

Die Theorie von Kolmogorov

Gegenwärtig fehlt noch immer eine vollständig deduktive Theorie, die, beginnend mit den Navier–Stokes–Gleichungen, zum aktuellen Bild der Turbulenz führt [Fri95]. Erste Bestrebungen, aus den Navier–Stokes–Gleichungen Rückschlüsse auf die Energiekaskade zu ziehen, gehen auf G.I. Taylor zurück [Tay35]. Die von ihm dabei eingeführte isotrope Turbulenz ist ein Ausgangspunkt für die grundlegenden Arbeiten von Kolmogorov [Kol41, Goe58]. Gegenüber den Definitionen im Sinne von Taylor fordert Kolmogorov zusätzlich eine zeitliche Invarianz, ist aber umfassender bei der Behandlung der Geschwindigkeit [Goe58].

In diesem Kontext heißt ein Feld $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ *statistisch stationär*, wenn alle statistischen Kenngrößen invariant unter zeitlicher Verschiebung sind. Es heißt *statistisch homogen*, wenn alle statistischen Kenngrößen invariant unter räumlicher Verschiebung sind und sofern alle statistischen Kenngrößen zusätzlich noch invariant unter Drehungen und Spiegelungen des Koordinatensystems sind, so heißt das Feld (*lokal-*) *isotrop*.

An dieser Stelle sollte allerdings Erwähnung finden, dass isotrope Turbulenz bisher nur in Windkanalexperimenten realisiert werden konnte und im Allgemeinen als eine Idealisierung angesehen werden muss.

Die für hinreichend große Reynolds–Zahlen getroffenen Aussagen von Kolmogorov sind:

- Hypothese der lokalen Isotropie:
Die kleinskaligen turbulenten Bewegungen sind statistisch isotrop.
- 1. Ähnlichkeitshypothese:
Die Statistik der kleinskaligen turbulenten Bewegungen wird eindeutig durch die Größen ν und ε beschrieben.
- 2. Ähnlichkeitshypothese:
Die Statistik eines Turbulenzelements mit Skalierung l , $l_\infty \gg l \gg \lambda$, wird eindeutig durch ε beschrieben und ist unabhängig von ν .

Ausgehend von diesen Hypothesen, konnte Kolmogorov die nach ihm benannten Skalen einführen und die kleinsten auftretenden Skalen der Energiekaskade bestimmen. Die *Kolmogorov–Skalen* für gegebene Dissipationsrate ε und kinematische Viskosität ν lauten,

$$\lambda = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \text{ [m]}, \quad u_\lambda = (\varepsilon \nu)^{\frac{1}{4}} \text{ [m/s]}, \quad t_\lambda = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ [s]}. \quad (\text{II.14})$$

Die Reynolds–Zahl dieser kleinsten Skalen ist

$$Re(\lambda) = \frac{\mathbf{u}_\lambda}{\nu} = 1.$$

Zusätzlich kann die Dissipationsrate auch ausgedrückt werden durch

$$\varepsilon = \nu \frac{u_\lambda^2}{\lambda^2} = \nu \frac{1}{t_\lambda^2},$$

woraus die Beziehung

$$\frac{u_\lambda}{\lambda} = \frac{1}{t_\lambda}$$

folgt. Dies kann als eine Approximation der räumlichen Ableitung von u_λ angesehen werden, die für kleine λ die Veränderungen des Geschwindigkeitsgradienten beschreibt. Darüber hinaus zeigt die Beziehung, dass für die Kolmogorov–Skalen der Gradient der Geschwindigkeit im Bezug auf die Reynolds–Zahl gleichmäßig beschränkt ist [Sag02].

Mit den Beziehungen (II.13) und (II.14) ist es nun möglich, eine Abschätzung der Kolmogorov–Skalen bezüglich der größten Wirbel anzugeben:

$$\frac{\lambda}{l_\infty} \sim \left(\frac{\nu^3}{l_\infty^3 u_\infty^3} \right)^{\frac{1}{4}} = (Re(l_\infty))^{-\frac{3}{4}} = Re^{-\frac{3}{4}} \iff \lambda \sim Re^{-\frac{3}{4}}. \quad (\text{II.15})$$

An dieser Stelle soll nun auch auf die Situation in zwei Dimensionen eingegangen werden, da zwischen zwei- und dreidimensionalen turbulenten Strömungen grundlegende Unterschiede existieren. Zum einen verhalten sich die kleinsten Skalen, im Gegensatz zu (II.15), in zwei Dimensionen wie $\lambda = O(Re^{-\frac{1}{2}})$, siehe [Kra67], und zum anderen gibt es in der Physik genau genommen keine zweidimensionalen Strömungen.

Dieses lässt sich sehr gut mit Hilfe der *Wirbeldichte* $\boldsymbol{\omega}$ aufzeigen, die definiert ist als Rotation des Geschwindigkeitsfeldes, $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$. Wendet man den Rotationsoperator auf die Navier–Stokes–Gleichungen (II.10) mit $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ an, erhält man eine Entwicklungsgleichung für die Wirbeldichte,

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} - 2Re^{-1} \nabla \cdot \mathbb{D}(\boldsymbol{\omega}) + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

In dieser Gleichung wurde berücksichtigt, dass die Rotation des Druckterms verschwindet, $\nabla \times \nabla p = 0$. Zusätzlich kann auch der viskose Term für große Reynolds–Zahlen vernachlässigt werden,

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} \approx \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (\text{II.16})$$

Dies entspricht einer Gleichung für ein infinitesimales Material–Linielement [Joh06a]. Wenn die Dehnungsgeschwindigkeit, hervorgerufen durch den Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \mathbf{u}$, das Linielement dehnt, dann wird auch der Betrag $|\boldsymbol{\omega}|$ gedehnt. Diesen Aspekt nennt man *Wirbeldehnung*, ein wichtiges Charakteristikum dreidimensionaler Strömungen.

In zweidimensionalen Strömungen ist die rechte Seite der Gleichung (II.16) allerdings gleich Null, daher tritt hier keine Wirbeldehnung auf. Deren Fehlen zeigt, für große Reynolds–Zahlen, einen qualitativen Unterschied zu dreidimensionalen Strömungen [Pop00].

Dennoch sind Strömungen in zwei Dimensionen, vom mathematischen Standpunkt aus, ein nützliches Hilfsmittel für numerische Experimente und Tests neuer Verfahren. So kann man sagen, dass Verfahren, die in zwei Dimensionen scheitern, sehr wahrscheinlich in drei Dimensionen ebenfalls versagen werden. Andererseits gilt, dass gute Ergebnisse in zwei Dimensionen, ohne weitere Studien nicht zwangsläufig auf drei Dimensionen übertragbar sind [Joh06a].

Konsequenzen für die numerische Simulation

Die numerische Simulation von turbulenten Strömungen bereitet im Allgemeinen mehrere prinzipielle Probleme. Zum einen, durch die bereits erwähnte Dominanz der nicht-linearen Effekte und zum anderen durch das große kontinuierliche Spektrum an existierenden Skalen. Die Schwierigkeiten bei einer akkuraten Auflösung dieses Spektrums

zeigen sich schon im Verhältnis der größten auftretenden Wirbel zu den Kolmogorov-Skalen. Da jede Strömung durch die Navier–Stokes–Gleichungen vollständig beschrieben wird, wäre der nächstliegende Ansatz, diese so zu simulieren, dass alle vorkommenden Skalengrößen aufgelöst werden.

Auf dieser Herangehensweise beruht die direkte numerische Simulation (DNS), die sich auf eine Standard–Diskretisierung der Navier–Stokes–Gleichungen (II.10) stützt und durch verschiedene Verfahren, wie z.B. Standard–Galerkin–Finite–Element–Methode oder Standard–Finite–Differenzen, realisiert werden kann.

Dies stellt aber auf der numerischen Seite sehr hohe Forderungen an die Feinheit der verwendeten Gitter, wenn tatsächlich das gesamte physikalische Skalenspektrum dargestellt werden soll. Bei der direkten numerischen Simulation ist dies aber unerlässlich, da hier keine Möglichkeit besteht, den Einfluss eventuell auftretender nicht aufgelöster Skalen zu modellieren.

Unter der Annahme, dass die Zellengröße h eines gleichmäßigen Gitters etwa das Auflösungsvermögen der Diskretisierung widerspiegelt, wie z.B. bei finiten Elementen niedriger Ordnung, muss hier $h \rightarrow 0$ gelten, um der Größe der Kolmogorov-Skalen entsprechen zu können [Joh06a]. Nach deren Abschätzung (II.15), ist die notwendige Gitterfeinheit also direkt abhängig von der Reynolds-Zahl der größten Wirbel.

Physik	Simulation
aufzulösende Skalen	Feinheit des Gitters
$\frac{l_\infty}{\lambda} \sim \text{Re}^{3/4}(l_\infty)$	$\frac{l_\infty}{\lambda} \sim \frac{l_\infty}{h} \sim N$

Tabelle II.2: Notwendige Gitterfeinheit bei der Simulation je Dimension

Dies verdeutlicht, wo der Flaschenhals bei der direkten numerischen Simulation liegt, nämlich in der Realisierbarkeit der notwendigen Feinheit der benötigten Gitter. Die Anzahl der Freiheitsgrade N verhält sich für räumlich dreidimensionale Probleme wie $\mathcal{O}((\text{Re}(l_\infty))^{9/4})$, da

$$N \approx \left(\frac{l_\infty}{\lambda}\right)^3 \sim \left((\text{Re}(l_\infty))^{3/4}\right)^3 = (\text{Re}(l_\infty))^{9/4} = \text{Re}^{9/4}. \quad (\text{II.17})$$

Darüber hinaus muss bei instationären Problemen noch zusätzlich die zeitliche Diskretisierung bei der Anzahl der Freiheitsgrade berücksichtigt werden.

Betrachtet man beispielsweise ein stationäres System in dem Gebiet $\Omega = (0, 1)^3$, mit der charakteristischen Länge $l_\infty = 1$ und annähernd 10^7 Freiheitsgraden: Hier erreicht man für die Kolmogorov-Skalen eine Auflösung der Größenordnung von etwa $\lambda \approx \frac{1}{215}$.

Dies ergibt mit der Abschätzung (II.17), dass nur Strömungen bis zu einer Reynolds-Zahl von $Re = Re(l_\infty) \approx 1290$ vollständig simuliert werden können, was weit unter den Reynolds-Zahlen für realitätsbezogene Anwendungen liegt.

Die Anforderungen an die Computer-Hardware für vollständig aufgelöste Strömungen sind daher so hoch, dass DNS-Simulationen auf kleinere Reynolds-Zahlen beschränkt bleiben. Infolge dieser Beschränkung sind Simulationen, die bis zur Kolmogorov-Skala auflösen, selten [Gra03] und häufig endet die Schärfe der Auflösung bei etwa 4λ [Col01].

Da die kleinen Skalen für die Physik innerhalb turbulenter Strömung aber sehr wichtig sind, haben numerische Methoden, die sie einfach vernachlässigen, entscheidende Nachteile. Deren Lösungen zeigen verstärkt Eigenschaften laminarer Strömungen, da wichtige Aspekte der Turbulenz nicht berücksichtigt werden können und sind damit für technische Anwendungen oft nutzlos [Joh06a].

Um bei der Simulation einer Strömung das gegenseitige Beeinflussen aller Turbulenzelemente zu beachten, muss dem Einfluss der kleinen, nicht aufgelösten Skalen auf die aufgelösten Skalen Rechnung getragen werden. Dies geschieht mit Hilfe von Turbulenz- oder subgrid-scale (SGS)-Modellen, mit denen man versucht, die schwierige Verbindung zwischen physikalischer Modellierung und numerischer Notwendigkeit herzustellen.

§3 Klassische Large Eddy Simulation

Die Large Eddy Simulation (LES) ist eine Lösungsmöglichkeit für die, im letzten Abschnitt beschriebenen, strukturellen Schwierigkeiten, die bei der Modellierung turbulenter Strömungen auftreten. Dabei wird der Ansatz verfolgt, nur die großen Strukturen aufzulösen, während man den Einfluss der kleinen Wirbel durch Turbulenzmodelle beschreibt. Dies ist, wie beschrieben, numerisch notwendig und physikalisch motiviert durch die Hypothesen von Kolmogorov, nach denen nur die großskaligen Turbulenzelemente von der Geometrie der Strömung abhängen und die kleinskaligen Wirbel einen universellen Charakter besitzen. Dieser Ansatz ermöglicht einen Zugang zur Simulation der instationären Fluidbewegung, der vielfältige Anwendungsmöglichkeiten in der Physik oder den Ingenieurwissenschaften eröffnet [FR00].

Der erste konzeptionelle Schritt der klassischen LES-Methoden ist die Beantwortung der Frage, „Was sind große Strukturen?“.

Eine mögliche Definition geht auf A. Leonard (1974) zurück, bei der die großskaligen Turbulenzelemente mit Hilfe einer räumlichen Filteroperation definiert werden [Leo74]. Dabei werden die auftretenden physikalischen Größen, Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}

und Druck p , mit einem geeigneten Tiefpass-Filter g gefaltet

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{y}) &= \frac{1}{\delta(\mathbf{y})^d} \int_{\mathbb{R}^d} g\left(\frac{\mathbf{y}-\mathbf{x}}{\delta(\mathbf{y})}\right) \mathbf{u}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \\ \bar{p}(\mathbf{y}) &= \frac{1}{\delta(\mathbf{y})^d} \int_{\mathbb{R}^d} g\left(\frac{\mathbf{y}-\mathbf{x}}{\delta(\mathbf{y})}\right) p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}.\end{aligned}\tag{II.18}$$

Über die gewählte Filterweite $\delta(\mathbf{y})$, oder allgemeiner, der turbulenten Auflösungs-Skalenlänge, wird eine untere Schranke für die Auflösung der Turbulenzelemente festgelegt. Das heißt, alle Wirbel bis zur Größe $\delta(\mathbf{y})$ werden simuliert und alle kleineren Strukturen über ein Turbulenzmodell betrachtet. Bei der Festlegung der lokalen Filterweite $\delta(\mathbf{y})$ muss allerdings beachtet werden, dass diese größer als die lokale Gitterweite $h(\mathbf{y})$ sein muss. Dabei kann man sagen, dass ein großes Verhältnis von Filter- zu Gitterweite $\delta(\mathbf{y})/h(\mathbf{y})$ eine hohe numerische Genauigkeit widerspiegelt, währenddessen ein kleinerer Wert einer höheren Auflösung der turbulenten Strukturen entspricht; allerdings mit geringerer numerischer Genauigkeit [Pop04]. Dies zeigt die große Abhängigkeit der LES-Methoden von der Filterweite und ist ein Grund, warum darauf basierende Vorhersagen nur minimal von $\delta(\mathbf{y})$ abhängen sollten.

Hier sei angemerkt, dass üblicherweise Filter für mehrdimensionale Gebiete, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d > 1$, durch Tensorprodukte eindimensionaler Filter gebildet werden [Joh06a], aber die Filterweite für verschiedene Raumrichtungen auch verschiedenen definiert werden kann [HMJ00].

Die Anwendung eines Filters führt also zu einer Zerlegung von Geschwindigkeit und Druck,

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \quad p = \bar{p} + p',\tag{II.19}$$

in gefilterte Größen $(\bar{\mathbf{u}}, \bar{p})$ und in Fluktuationsanteile (\mathbf{u}', p') oder anders ausgedrückt, in große und kleine Skalen.

Anhand dieser Zerlegung kann man gut die Stärken und Schwächen der LES erkennen. Die LES-Methoden sind am erfolgreichsten, wenn Transportprozesse (z.B. von Masse, Impuls oder Wärme) von den großen Skalen dominiert werden. Dies ist beispielsweise bei Strömungen ohne Scherspannungen und hoher Reynolds-Zahl der Fall. Die Schwächen der LES zeigen sich immer dann, wenn physikalische oder chemische Prozesse im Bereich der nichtgelösten Skalen ablaufen (z.B. chemische Reaktionen bei turbulenten Verbrennungsprozessen) oder wenn Bereiche ohne große Wirbelstrukturen existieren. Dies sind vor allem die wandnahen Regionen, in denen der Impulstransfer durch die wandnahen Strukturen stark beeinflusst wird und daher die Fluidbewegungen dort modelliert werden müssen [Pop04].

Die Simulation der gefilterten Größen $(\bar{\mathbf{u}}, \bar{p})$, steht also im Mittelpunkt der LES. Es sollte allerdings nicht außer Acht gelassen werden, dass es sich hier um sehr komplexe Objekte handelt. Die dreidimensionalen, zeitabhängigen und zufälligen Felder haben

zusätzlich noch eine Abhängigkeit von der (nicht physikalischen) Filterweite, die selbst noch von der Gitterfeinheit und der verwendeten numerischen Methode abhängen kann [Pop04, Sag02]. Für die Simulation werden allerdings noch Gleichungen benötigt, die das Verhalten der gefilterten Funktionen geeignet beschreiben. Dies zeigt eine, dieser Herangehensweise immanente Schwierigkeit auf, nämlich dass die Gleichungen, die die gefilterten bzw. gemittelten Größen beschreiben, nicht direkt aus physikalischen Überlegungen hergeleitet werden können.

Dieses Problem versucht man zu beheben, indem man auf die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen (II.10), definiert auf \mathbb{R}^d , $d = 2, 3$ und einem Zeitintervall $(0, T]$, einen geeigneten linearen Tiefpass-Filter anwendet

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}} - 2Re^{-1} \overline{\nabla \cdot \mathbb{D}(\mathbf{u})} + \overline{(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}} + \overline{\nabla p} &= \bar{\mathbf{f}} \quad \text{in } (0, T] \times \mathbb{R}^d, \\ \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}} &= 0 \quad \text{in } [0, T] \times \mathbb{R}^d. \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

Überträgt man die räumlichen Faltungen (II.18) vom physikalischen Raum \mathbb{R}^d in den Frequenz- oder Fourier-Raum,

$$\hat{\mathbf{u}}(\omega) = \int \mathbf{u}(\mathbf{x}) e^{-i\omega \mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad \hat{p}(\omega) = \int p(\mathbf{x}) e^{-i\omega \mathbf{x}} d\mathbf{x},$$

mit der räumlichen Frequenz ω , so vereinfacht sich jedes Faltungsintegral zu einem Produkt zweier Signale im Amplitudenspektrum,

$$\hat{\bar{\mathbf{u}}}(\omega) = \hat{g}(\omega) \hat{\mathbf{u}}(\omega), \quad \hat{\bar{p}}(\omega) = \hat{g}(\omega) \hat{p}(\omega).$$

Dies zeigt, dass Filter und Ableitung in (II.20) vertauscht werden können, da im Fourier-Raum Differentiation nur eine Multiplikation mit $i\omega$ ist und somit Filterung und Ableitung kommutieren [FR00].

Unglücklicherweise ist diese Vertauschung für die Navier–Stokes–Gleichungen (II.10) nur für den Fall $\Omega = \mathbb{R}^d$ und Filter mit konstanter Filterweite gültig. Die Ursache liegt in der Definition der Integrale (II.18) über den ganzen \mathbb{R}^d . Diese sind nur wohldefiniert für Funktionen, die ebenfalls auf dem ganzen \mathbb{R}^d definiert sind.

In den Fällen, in denen Ω ein beschränktes Gebiet ist, tritt hier ein Vertauschungsfehler auf. Die Ursachen können darin liegen, dass die Funktionen $(\bar{\mathbf{u}}, \bar{p})$ auf den ganzen \mathbb{R}^d fortgesetzt werden müssen. Alternativ kann man für beschränkte Gebiete nicht gleichmäßige Filter verwenden, für die gilt:

$$\text{supp}(g) \subseteq \bar{\Omega} \quad \text{mit} \quad \delta(\mathbf{y}) \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad \mathbf{y} \longrightarrow \partial\Omega$$

Weiterführende Betrachtungen über Vertauschungsfehler und ihre Abhängigkeit von den verwendeten Filtern findet man unter anderem in [Joh06a].

Da ein beschränktes Gebiet Ω in anwendungsbezogenen Simulationen jedoch die Regel ist, sollten Vertauschungsfehler nicht, wie in der Praxis üblich, vernachlässigt werden. Untersuchungen zeigen, dass in randnahen Bereichen Vertauschungsfehler nicht ignoriert werden können [BJ06, BCJ07], da es unter anderem zu einer Verletzung der Kontinuitätsgleichung, $\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \neq 0$, kommen kann.

Aus diesen Überlegungen, zusammen mit der äquivalenten Darstellung des nichtlinearen Terms,

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}^T),$$

ergeben sich die gefilterten Navier–Stokes–Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} - 2Re_\tau^{-1} \nabla \cdot \mathbb{D}(\bar{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u} \mathbf{u}^T}) + \nabla \bar{p} &= \bar{\mathbf{f}} \quad \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} &= 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega. \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

Diese Entwicklungsgleichungen für $\bar{\mathbf{u}}$ beinhalten zusätzlich zu dem erwähnten Vertauschungsfehler noch zwei weitere Probleme. Zum einen ist nicht geklärt, wie man geeignete Randbedingungen für $(\bar{\mathbf{u}}, \bar{p})$ wählt und zum anderen beinhalten die Gleichungen ein Abschließungsproblem.

Dieses Abschließungsproblem resultiert aus der Tatsache, dass der nichtlineare Konvektionsterm nicht ohne weiteres durch Terme von $\bar{\mathbf{u}}$ dargestellt werden kann, da gilt:

$$(\overline{\mathbf{u} \mathbf{u}^T}) \neq (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^T).$$

Die Differenz der beiden Terme ist der *Residuums–Spannungstensor* [Pop00] oder auch *SG–Tensor* [Sag02]

$$\tau^R = (\overline{\mathbf{u} \mathbf{u}^T}) - (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^T),$$

welcher die Scher- und Schubspannungen enthält, die nicht aufgelöst werden und Analogien zu den Reynolds–Spannungen aufweist. Mit der Definition des SG–Tensors können noch die *kinetische Residuumsenergie*

$$k_r = \frac{1}{2} \text{diag}(\tau^R)$$

und der *anisotrope Residuums–Spannungstensor* oder *SGS–Spannungstensor* definiert werden

$$\mathbb{R}^r = \tau^R - \frac{2}{3} k_r,$$

wobei dann der isotrope Anteil des Residuums–Spannungstensors in den gefilterten Druckterm integriert wird

$$\bar{p} = \bar{p} + \frac{2}{3} k_r.$$

Um den gefilterten nichtlinearen Term in (II.21) näher spezifizieren zu können, wird der SG-Tensor τ^R mit der (Galileo-invarianten) Leonard-Zerlegung [Leo74] in drei Summanden aufgespalten:

$$\tau^R = \mathbb{L} + \mathbb{C} + \mathbb{R}$$

Diese sind der Leonard-Spannungstensor

$$\mathbb{L} = \overline{\mathbf{u} \mathbf{u}^T} - \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^T,$$

der die Wechselwirkungen zwischen den großen Skalen beschreibt, der Querspannungstensor

$$\mathbb{C} = \overline{\mathbf{u} \mathbf{u}'^T} - \overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}^T},$$

der die Wechselwirkung zwischen den großen und den kleinen Skalen beschreibt und der Reynolds-Spannungstensor

$$\mathbb{R} = \overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}'^T},$$

der die Wechselwirkungen der nichtgelösten Skalen untereinander beschreibt [Sag02].

Ist der verwendete Filter in (II.18) ein *Reynolds-Operator*, d.h. er erfüllt die folgenden Eigenschaften [FR00, Sag02],

$$\overline{\bar{\mathbf{u}}} = \bar{\mathbf{u}}, \quad \overline{\mathbf{u}'} = 0 \quad \text{und} \quad \overline{\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}} = \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}},$$

dann folgt daraus, dass $\mathbb{L} = \mathbb{C} = \mathbf{0}$. Damit ist der Residuums-Spannungstensor τ^R identisch mit den Reynolds-Spannungen \mathbb{R} und für den Konvektionsterm ergibt sich die Darstellung

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u} \mathbf{u}^T}) &= \nabla \cdot \mathbb{R} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^T) \\ &= \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}'^T}) + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^T). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich das Problem der Abgeschlossenheit. In den insgesamt vier Gleichungen, drei Komponentengleichungen der Impulsbilanz und eine Kontinuitätsgleichung, treten neben den vier Unbekannten von Geschwindigkeit und Druck durch die Reynolds-Spannungen zusätzliche Unbekannte auf. Abgeschlossenheit kann hier also nur erreicht werden, indem die Reynolds-Spannungen durch ein Turbulenzmodell modelliert werden. Dies ist notwendig, da man keine mathematische Handhabung für das dynamische Verhalten der nichtgelösten Größen \mathbf{u}' und p' besitzt. Modelle für die Behandlung von \mathbb{R} sind also ein Schwerpunkt im Bereich der LES und anderer Methoden. Das in dieser Arbeit verwendete Turbulenzmodell wird zusammen mit den numerischen Ergebnissen vorgestellt.

§4 Die Variationelle Mehrskalen–Methode

Ein vielversprechender Ansatz, um die bekannten Probleme der klassischen LES–Methoden zu umgehen, sind variationelle Mehrskalen–Methoden (VMS). Wie die meisten Mehrskalen–Methoden beginnen auch die hier betrachteten VMS–Methoden mit einer *a priori* Separation der auftretenden Skalen in verschiedene Gruppen. Die klassischen LES–Methoden, wie sie im letzten Abschnitt beschrieben wurden, basieren dabei auf einer Aufteilung in große gelöste und kleine nichtgelöste Skalen. Bei vielen VMS–Methoden hingegen erfolgt eine Zerlegung in drei statt in zwei Skalengruppen: die großen gelösten Skalen, die kleinen gelösten Skalen und die kleinen nichtgelösten Skalen. Diese sogenannte 3–Level–Partition geht auf [Col01] zurück. Ebenso wie bei den LES–Methoden werden auch bei den VMS–Methoden nur die gelösten Strukturen simuliert. Daher wird die VMS–Methode auch als variationelle Mehrskalen–LES bezeichnet. Der Unterschied liegt in der Art und Weise, wie die gelösten Skalen definiert werden. Im Gegensatz zur räumlichen Mittelung der klassischen LES–Methoden werden bei den VMS–Methoden die auftretenden Skalen durch variationelle Projektionen in geeignete Räume separiert.

Bei einer adaptiven Wahl dieser Räume kommt es dann, im Gegensatz zu den im Folgenden betrachteten Methoden, zu einer *a posteriori* Separation der auftretenden Skalen [JK10]. Diese grundlegenden Ideen wurden hauptsächlich in den Arbeiten [Hug95, HMJ00, Gue99] entwickelt.

Gegenüber der räumlichen Filterung bieten Projektionen unter anderem den Vorteil, dass keine Probleme durch Vertauschung und Homogenität auftreten. Zusätzlich können VMS–Methoden leichter auf komplexe Geometrien erweitert werden [Col01].

Unter der Annahme, dass die kleinen nichtgelösten Skalen die großen gelösten Skalen nur indirekt, über den Umweg der kleinen gelösten Skalen, beeinflussen, zeigt sich hier eine der zentralen Ideen von 3–Level–VMS–Methoden: Nämlich den direkten Einfluß der nichtgelösten kleinen Skalen auf die gelösten kleinen Skalen zu beschränken und nicht wie bei der klassischen LES auf alle gelösten Skalen anzuwenden. Dies bedeutet, dass die Turbulenzmodelle, die den Einfluss der nichtgelösten Skalen beschreiben, nicht direkt die großen Skalen beeinflussen. Nur durch die Kopplung der drei Skalengruppen kommt es zu einem indirekten Einfluss auf die großen Skalen.

Der Ausgangspunkt der variationellen Mehrskalen–Methode ist die variationelle Formulierung der Navier–Stokes–Gleichungen (II.10). Diese lautet, hier für homogene Dirichlet–Randbedingungen und mit einer geeigneten Wahl von Räumen, z.B. $V = (H_0^1(\Omega))^d$ und $Q = L_0^2(\Omega)$:

Finde $\mathbf{u} : [0, T] \rightarrow V$ und $p : (0, T] \rightarrow Q$, so dass

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_t, \mathbf{v}) + (2Re^{-1}\mathbb{D}(\mathbf{u}), \mathbb{D}(\mathbf{v})) + b(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) - (p, \nabla \cdot \mathbf{v}) &= (\mathbf{f}, \mathbf{v}), & \forall \mathbf{v} \in V, \\ (q, \nabla \cdot \mathbf{u}) &= 0, & \forall q \in Q, \end{aligned} \quad (II.22)$$

erfüllt ist, mit $\mathbf{u}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) \in V$ und $b(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v}, \mathbf{w})$.

Um die Notation im Folgenden zu vereinfachen, wird für die Gleichungen (II.22) deren Kurzschreibweise

$$A(\mathbf{u}; (\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q)) = F(\mathbf{v}),$$

verwendet. Dabei beachte man, dass die Form $A(\mathbf{u}; (\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q)) = F(\mathbf{v})$ linear in den Testfunktionen ist. Die Zerlegung der Ansatz- und der Testräume in die drei Skalengruppen liefert

$$V = \bar{V} \oplus \tilde{V} \oplus \hat{V}, \quad Q = \bar{Q} \oplus \tilde{Q} \oplus \hat{Q},$$

wobei $(\bar{\cdot})$ die großen Skalen, $(\tilde{\cdot})$ die gelösten kleinen Skalen und $(\hat{\cdot})$ die nichtgelösten kleinen Skalen beschreibt. Diese 3-Skalen-Zerlegung ergibt für die Geschwindigkeit und den Druck

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} + \hat{\mathbf{u}}, \quad p = \bar{p} + \tilde{p} + \hat{p}$$

und für die Testfunktionen

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \tilde{\mathbf{v}} + \hat{\mathbf{v}}, \quad q = \bar{q} + \tilde{q} + \hat{q}.$$

Damit kann die variationelle Form der Navier–Stokes–Gleichungen (II.22) als gekoppeltes System von drei variationellen Gleichungen, je eine pro Skalentyp, dargestellt werden:

Finde $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} + \hat{\mathbf{u}} : [0, T] \rightarrow V = \bar{V} \oplus \tilde{V} \oplus \hat{V}$ und $p = \bar{p} + \tilde{p} + \hat{p} : (0, T] \rightarrow Q = \bar{Q} \oplus \tilde{Q} \oplus \hat{Q}$, so dass

$$\begin{aligned} A(\mathbf{u}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\bar{\mathbf{v}}, \bar{q})) + A(\mathbf{u}; (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) + A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) &= F(\bar{\mathbf{v}}), \\ A(\mathbf{u}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) + A(\mathbf{u}; (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) + A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) &= F(\tilde{\mathbf{v}}), \\ A(\mathbf{u}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{q})) + A(\mathbf{u}; (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{q})) + A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\hat{\mathbf{v}}, \hat{q})) &= F(\hat{\mathbf{v}}) \end{aligned}$$

erfüllt ist, für alle $(\mathbf{v}, q) \in V \times Q$.

Die dritte Gleichung, welche die nichtgelösten Größen der Testfunktionen repräsentiert, wird vernachlässigt, da man diese Skalen nicht verfügbar hat. Da, wie schon erläutert, der direkte Einfluss der nichtgelösten Skalen auf die großen Skalen ebenfalls

vernachlässigt wird, ergibt dies in der ersten Gleichung:

$$A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\bar{\mathbf{v}}, \bar{q})) = 0. \quad (\text{II.23})$$

Der Ausdruck $A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q}))$ in der zweiten Gleichung kann als Einfluss der nicht-gelösten Skalen auf die kleinen gelösten Skalen verstanden werden und wird daher durch ein Turbulenzmodell modelliert,

$$A(\mathbf{u}; (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) = B(\mathbf{u}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})). \quad (\text{II.24})$$

Dies zeigt noch einmal die Philosophie der 3-Level-VMS-Methoden, nämlich den Einfluss des benötigten Turbulenzmodells zu beschränken, indem es nur auf die kleinen gelösten Skalen direkt angewendet wird.

Die Wahl des Modells $B(\mathbf{u}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q}))$ selbst wird dabei durch physikalische Ideen der Turbulenzmodellierung und eventuell von speziellen, anwendungsbezogenen Überlegungen bestimmt. Vom numerischen Standpunkt aus wird durch das Modell zusätzliche Viskosität in das System gebracht, die als numerische Stabilisierung dient. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass Turbulenzmodelle bei den VMS-Methoden nicht zur Modellierung des Reynolds-Spannungstensors eingeführt werden wie bei der klassischen LES-Methode, sondern den Einfluss der nichtgelösten Skalen modellieren [JK05]. Zur Beschreibung der Effekte dieser Turbulenzelemente wird oft auf das weitverbreitete Smagorinsky-Modell und seine vielfältigen Varianten zurückgegriffen.

Durch die obigen Überlegungen und Vereinfachungen ergibt sich ein neues Gleichungssystem:

Finde $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} : [0, T] \rightarrow \bar{V} \oplus \tilde{V}$ und $p = \bar{p} + \tilde{p} : (0, T] \rightarrow \bar{Q} \oplus \tilde{Q}$, so dass

$$A(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\bar{\mathbf{v}}, \bar{q})) + A(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\bar{\mathbf{v}}, \bar{q})) = F(\bar{\mathbf{v}}), \quad (\text{II.25})$$

$$A(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) + A(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) \\ + B(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q})) = F(\tilde{\mathbf{v}}), \quad (\text{II.26})$$

für alle $(\bar{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{v}}, \bar{q}, \tilde{q}) \in \bar{V} \times \tilde{V} \times \bar{Q} \times \tilde{Q}$ erfüllt ist, wobei $B(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q}))$ das nur auf den kleinen gelösten Skalen agierende Modell ist.

Dem Einfluss auf die großen Skalen, z.B. durch die Energiekaskade, wird indirekt durch die Kopplung der beiden nichtlinearen Gleichungen Rechnung getragen, was einen weiteren Unterschied zu den klassischen LES-Methoden darstellt.

Um eine konkrete VMS-Methode zu charakterisieren, müssen also geeignete Räume \bar{V} , \tilde{V} , \bar{Q} , \tilde{Q} und ein passendes Modell $B(\bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}; (\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}), (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{q}))$ definiert werden.

Betrachtet man die Finite-Element-Methode zur Diskretisierung von (II.25), so gibt es mindestens zwei grundlegend verschiedene Herangehensweisen zur Realisierung einer

VMS-Methode. Einmal die Wahl von Standard-Finite-Element-Räumen für die großen Skalen $\bar{V} \times \bar{Q}$ in Verbindung mit Finite-Element-Räumen basierend auf Blasenfunktionen für die Räume $\tilde{V} \times \tilde{Q}$, die eine höhere Auflösung benötigen [Gra03, GWR05].

Dieser Ansatz kann abhängig von der Wahl der Blasenfunktionen noch weiter unterteilt werden. Da im Weiteren aber eine andere Vorgehensweise betrachtet wird, sei hier noch auf [JT06] und für numerische Untersuchungen auf [JK10] verwiesen.

§4.1 Die projektions-basierte Finite-Element VMS-Methode (FEVMS)

Bei diesem Konzept zur Wahl der geeigneten Räume beginnt man mit einen Standard-Finite-Element-Raum für alle gelösten Skalen und definiert dann zusätzlich einen Raum um die großen Skalen zu beschreiben [JK05]. Dabei verfolgt man prinzipiell die gleichen Ideen wie bei der dynamischen SGS-Methode, da beide Methoden den Einfluss des Turbulenzmodells beschränken [Li92, GPMC91]. Da das Smagorinsky-Modell mit konstantem Parameter C_S zuviel Diffusion einführt, wird dort, um dessen Einfluss zu begrenzen, eine geeignete Funktion $C_S(t, \mathbf{x})$ an Stelle von C_S verwendet. Bei den VMS-Methoden hingegen wird der Einfluss durch die adäquate Wahl eines Raumes für die kleinen Skalen beschränkt [Joh06a].

Seien V^h und Q^h Finite-Element-Räume für die Geschwindigkeit und den Druck, die die inf-sup Stabilitätsbedingung erfüllen. Das heißt, es existiert eine positive Konstante C unabhängig von der Gitterfeinheit h , so dass gilt:

$$\inf_{q^h \in Q^h} \sup_{v^h \in V^h} \frac{(\nabla \cdot \mathbf{v}^h, q^h)}{\|\nabla \mathbf{v}^h\|_{L^2} \|q^h\|_{L^2}} \geq C.$$

Darüber hinaus seien $L^H \subset L = \left\{ \mathbb{L} \in (L^2(\Omega))^{d \times d}, \mathbb{L} = \mathbb{L}^T \right\}$ ein endlich-dimensionaler Raum von symmetrischen $d \times d$ tensorwertigen Funktionen, um die großen Skalen zu beschreiben und $\nu_T = \nu_T(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}^h, p^h)$ eine nichtnegative Funktion, die die turbulente Viskosität repräsentiert. Damit ergibt sich für die (semi-diskrete) projektions-basierte FEVMS-Methode die folgende Form:

Finde $\mathbf{u}^h : [0, T] \rightarrow V^h$, $p^h : (0, T] \rightarrow Q^h$ und $\mathbb{G}^h : [0, T] \rightarrow L^H$, so dass

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_t^h, \mathbf{v}^h) + (2Re^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u}^h), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)) + ((\mathbf{u}^h \cdot \nabla) \mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) \\ - (p^h, \nabla \cdot \mathbf{v}^h) + (\nu_T (\mathbb{D}(\mathbf{u}^h) - \mathbb{G}^H), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)) &= (\mathbf{f}, \mathbf{v}^h) \quad \forall \mathbf{v}^h \in V^h, \\ (q^h, \nabla \cdot \mathbf{u}^h) &= 0 \quad \forall q^h \in Q^h, \\ (\mathbb{D}(\mathbf{u}^h) - \mathbb{G}^H, \mathbb{L}^H) &= 0 \quad \forall \mathbb{L}^H \in L^H. \end{aligned} \tag{II.27}$$

Die letzte Gleichung von (II.27) zeigt, dass \mathbb{G}^H die L^2 -Projektion von $\mathbb{D}(\mathbf{u}^h)$ in den Raum der großen Skalen L^H ist und somit \mathbb{G}^H den großskaligen Anteil von $\mathbb{D}(\mathbf{u}^h)$

repräsentiert. Folglich verkörpert die Differenz $\mathbb{D}(\mathbf{u}^h) - \mathbb{G}^H$ die aufgelösten kleinen Skalen.

Der zusätzliche viskose Term $(\nu_T (\mathbb{D}(\mathbf{u}^h) - \mathbb{G}^H), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h))$ in der Impulsbilanz der projektions-basierten FEVMS-Methoden bildet zusammen mit dem Raum L^H das Turbulenzmodell.

Darüber hinaus kann diese Darstellung einer VMS-Methode (II.27) zumindest für eine konstante turbulente Viskosität in die Form (II.25) transformiert werden [Joh06a, JK05].

§4.2 Aspekte der Implementierung

Ein ausschlaggebender Punkt für die numerische Effizienz und die Simulationsergebnisse der projektions-basierten FEVMS-Methoden der Form (II.27) ist die Wahl des Raumes der großen Skalen. Da L^H die Separation der Skalen bestimmt, gilt: Je größer L^H ist, desto kleiner wird der Anteil der aufgelösten kleinen Skalen am gesamten gelösten Skalenspektrum. Dabei kann man sagen, dass bei einer Wahl von Finite-Element-Räumen höherer Ordnung für $V^h \times Q^h$, L^H mittels Polynomen niedriger Ordnung auf dem gleichen Gitter wie $V^h \times Q^h$ gewählt werden kann [JR07]. Detaillierte Untersuchungen in [JK05] haben gezeigt, dass für L^H ein unstetiger Finite-Element-Raum auf dem feinsten Gitter mit einer L^2 -orthogonalen Basis am effizientesten ist.

Die Geschwindigkeit \mathbf{u}^h und der symmetrischen Tensor \mathbb{G}^H sind gegeben durch

$$\mathbf{u}^h = \begin{pmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ u_3^h \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbb{G}^H = \begin{pmatrix} g_{11}^H & g_{12}^H & g_{13}^H \\ g_{21}^H & g_{22}^H & g_{23}^H \\ g_{31}^H & g_{32}^H & g_{33}^H \end{pmatrix}.$$

Darüber hinaus seien für die Räume V^h und L^H die folgenden Basen gegeben:

$$V^h = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} v_i^h \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ v_i^h \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v_i^h \end{pmatrix} : i = 1, \dots, n_V \right\},$$

$$L^H = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} l_j^H & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & l_j^H & 0 \\ l_j^H & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & l_j^H \\ 0 & 0 & 0 \\ l_j^H & 0 & 0 \end{pmatrix}, \right.$$

$$\left. \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_j^H & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_j^H \\ 0 & l_j^H & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_j^H \end{pmatrix} : j = 1, \dots, n_L \right\}.$$

Nach einer impliziten Diskretisierung der Gleichung (II.27), durch beispielsweise ein Zwischenschritt– θ –Verfahren wie im folgenden Abschnitt und einer geeigneten Linearisierung des konvektiven Terms im aktuellen Zeitschritt, erhält man als algebraische Darstellung von (II.27) ein lineares Sattelpunktproblem der folgenden Form:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & B_1^T & \tilde{G}_{11} & \tilde{G}_{12} & \tilde{G}_{13} & \tilde{G}_{14} & \tilde{G}_{15} & \tilde{G}_{16} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & B_2^T & \tilde{G}_{21} & \tilde{G}_{22} & \tilde{G}_{23} & \tilde{G}_{24} & \tilde{G}_{25} & \tilde{G}_{26} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & B_3^T & \tilde{G}_{31} & \tilde{G}_{32} & \tilde{G}_{33} & \tilde{G}_{34} & \tilde{G}_{35} & \tilde{G}_{36} \\ B_1 & B_2 & B_3 & 0 & & & & & & \\ G_{11} & G_{12} & G_{13} & & M & & & & & 0 \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & & & \frac{M}{2} & & & & \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & & & & \frac{M}{2} & & & \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & & & & & M & & \\ G_{51} & G_{52} & G_{53} & & 0 & & & & \frac{M}{2} & \\ G_{61} & G_{62} & G_{63} & & & & & & & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ u_3^h \\ p^h \\ g_{11}^H \\ g_{12}^H \\ g_{13}^H \\ g_{22}^H \\ g_{23}^H \\ g_{33}^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1^h \\ f_2^h \\ f_3^h \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.28})$$

Die Matrix M , die im rechten unteren Block mehrfach auftritt, ist die Massenmatrix von L^H : $(M)_{ij} = (l_j^H, l_i^H)$. Die Matrizen des oberen linken Bereich, A_{11}, \dots, A_{33} und B_1, \dots, B_3 , werden assembliert, als ob (II.27) ohne die G^H enthaltenden Terme diskretisiert wäre, d.h. die Stabilisierung würde auf alle Skalen wirken. Die Einträge der Matrizen G_{11}, \dots, G_{63} und $\tilde{G}_{11}, \dots, \tilde{G}_{36}$ sind mit den Basen der Räume V^h und L^H einfach zu berechnen [JK05],

$$\begin{aligned} (G_{11}) &= ((v_j^h)_x, l_i^H) & G_{22} &= G_{33} = \frac{1}{2}G_{11}, \\ (G_{42}) &= ((v_j^h)_y, l_i^H) & G_{21} &= G_{53} = \frac{1}{2}G_{42}, \\ (G_{63}) &= ((v_j^h)_z, l_i^H) & G_{31} &= G_{52} = \frac{1}{2}G_{63}, \\ (\tilde{G}_{11}) &= (\nu_T l_j^H, (v_i^h)_x) & \tilde{G}_{22} &= \tilde{G}_{33} = \frac{1}{2}\tilde{G}_{11}, \\ (\tilde{G}_{24}) &= (\nu_T l_j^H, (v_i^h)_y) & \tilde{G}_{12} &= \tilde{G}_{35} = \frac{1}{2}\tilde{G}_{24}, \\ (\tilde{G}_{36}) &= (\nu_T l_j^H, (v_i^h)_z) & \tilde{G}_{13} &= \tilde{G}_{25} = \frac{1}{2}\tilde{G}_{36}. \end{aligned}$$

Alle anderen Matrizen G_{ij} und \tilde{G}_{ij} verschwinden. Daher müssen für die beiden Blöcke insgesamt nur sechs Matrizen assembliert werden. Die drei Matrizen des rechten unteren Blocks, G_{11} , G_{42} und G_{63} müssen dabei, ebenso wie die Matrix M , nur einmal vorab zur Anfangszeit assembliert werden, falls V^h und L^H zeitunabhängig sind. Die anderen drei Matrizen \tilde{G}_{11} , \tilde{G}_{24} und \tilde{G}_{36} werden nur für nicht konstante ν_T benötigt. In diesen Fällen hängt ν_T nämlich von der Lösung \mathbf{u}^h ab und daher muss die Assemblierung in jedem Zeitschritt der nichtlinearen Iteration neu erfolgen.

Da sich der Ansatz, dass gekoppelte System (II.28) zu lösen, als wenig effizient herausgestellt hat [JKL06], löst man zuerst die Gleichungen für $g_{11}^H, \dots, g_{33}^H$, die die L^2 -Projektion beschreiben und erhält dann ein Sattelpunktproblem für (\mathbf{u}^h, p^h) ,

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} & \tilde{A}_{13} & B_1^T \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} & \tilde{A}_{23} & B_2^T \\ \tilde{A}_{31} & \tilde{A}_{32} & \tilde{A}_{33} & B_3^T \\ B_1 & B_2 & B_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ u_3^h \\ p^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1^h \\ f_2^h \\ f_3^h \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.29})$$

wobei

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{11} &= A_{11} - \tilde{G}_{11}M^{-1}G_{11} - \frac{1}{2}\tilde{G}_{24}M^{-1}G_{42} - \frac{1}{2}\tilde{G}_{36}M^{-1}G_{63}, \\ &\vdots \\ \tilde{A}_{33} &= A_{33} - \tilde{G}_{36}M^{-1}G_{63} - \frac{1}{2}\tilde{G}_{11}M^{-1}G_{11} - \frac{1}{2}\tilde{G}_{24}M^{-1}G_{42}. \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

Eine effiziente Berechnung der auftretenden Terme ist an mehrere Bedingungen geknüpft [JK05]. Einmal sollte L^H eine L^2 -orthogonale Basis besitzen, da M in diesem Fall eine Diagonalmatrix und M^{-1} daher leicht zu berechnen ist. Darüber hinaus sollte die dünnbesetzte Struktur der Matrizen \tilde{A}_{ij} nicht größer sein als die der Matrizen A_{ij} , da sonst die Berechnung von Matrix-Matrix Produkten eventuell aufwendiger ist. Der entscheidendere Punkt ist allerdings, dass das Besetzungsmuster der Matrizen gleich ist, damit man die Produkte einfach zu den Matrizen A_{ij} addieren kann. dass die dünnbesetzte Struktur der Matrizen \tilde{A}_{ij} nicht größer sein sollte, als die der Matrizen A_{ij} , da sonst die Berechnung von Matrix-Matrix Produkten eventuell aufwendiger ist. Die Anforderungen, die eine Gleichheit der dünnbesetzten Strukturen von \tilde{A}_{ij} und A_{ij} garantieren, sind beispielsweise gegeben, wenn L^H ein unstetiger Finite-Element-Raum auf dem feinsten Gitter mit Basen aus stückweise Legendre-Polynomen ist [JK05].

§5 Numerische Simulation einer turbulenten Kanalströmung

Die beschriebenen Aspekte der Implementierung und Nutzung der projektions-basierten FEVMS-Methoden werden im Folgenden exemplarisch für eine turbulente Kanalströmung aufgezeigt.

§5.1 Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$

Die turbulente Kanalströmung wird durch die entdimensionierten und inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen (II.10)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - 2\nabla \cdot (Re_\tau^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u})) + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} \quad \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega, \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

beschrieben. Die im Folgenden angenommene Reynolds-Zahl beträgt $Re_\tau = 180$, wobei diese Definition auf der halben Kanalbreite H , der kinematischen Viskosität ν und der Friktionsgeschwindigkeit u_τ basiert [Pop00]. Das Gebiet Ω entspricht dem in den Simulationen verwendeten Kanal, einem Standardtest für turbulente Kanalströmungen [Pop00, MKM99],

$$\Omega = (-2\pi, 2\pi) \times (0, 2H) \times \left(-\frac{2}{3}\pi, \frac{2}{3}\pi\right),$$

bei dem üblicherweise $H = 1$ gewählt wird.



Abbildung II.2: Gebiet für turbulente Kanalströmungen mit $Re_\tau = 180$

In der Strömungsrichtung x und der Spannweitenrichtung z werden für die Geschwindigkeit \mathbf{u} periodische Randbedingungen angenommen. An den beiden festen Kanalwänden, bei $y = 0$ und $y = 2$ erfüllt \mathbf{u} die Haft-Randbedingung (engl.: no slip).

Die Definition der Anfangsbedingungen für die folgenden numerischen Simulationen basiert auf dem diskreten mittleren Geschwindigkeitsprofil $U_{\text{mean}}^{\text{DNS}}$, bereitgestellt in der Datendatei `chan180.means` von [MKM99]. Die dortigen Ergebnisse wurden mittels direkter numerischer Simulation erzielt und dienen im Folgenden als Referenzdaten. Das diskrete mittlere Geschwindigkeitsprofil wird linear interpoliert, $U_{\text{mean}}^{\text{DNS,lin}}$ und analog

zu [Gra06b] wird eine Störung addiert,

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1(0; x, y, z) &= U_{\text{mean}}^{\text{DNS,lin}}(y) + 0.1 U_{\text{bulk}} \psi, \\ \mathbf{u}_2(0; x, y, z) &= 0.1 U_{\text{bulk}} \psi, \\ \mathbf{u}_3(0; x, y, z) &= 0.1 U_{\text{bulk}} \psi.\end{aligned}\tag{II.32}$$

Dabei wird die Massen- oder Volumengeschwindigkeit durch

$$U_{\text{bulk}} = \frac{1}{H} \int_0^H U_{\text{mean}}^{\text{DNS,spline}}(y) dy \approx 15.6803,\tag{II.33}$$

berechnet, wobei $U_{\text{mean}}^{\text{DNS,spline}}(y)$ eine Spline-Interpolation von $U_{\text{mean}}^{\text{DNS}}(y)$ ist. Die Störung ist durch eine Zufallsfunktion, in C++ Notation,

$$\psi = \frac{2\text{rand}()}{\text{RAND_MAX}()} - 1,$$

mit Werten in $[-1, 1]$ gegeben und wird für jeden Freiheitsgrad und jede Komponente der Geschwindigkeit aufgerufen.

Das Anfangs-Geschwindigkeitsfeld (II.32) setzt sich also zusammen aus der linear interpolierten mittleren Geschwindigkeit $U_{\text{mean}}^{\text{DNS,lin}}(y)$ und einer zufälligen Geschwindigkeitsfluktuation von maximal 10% der Massengeschwindigkeit sowohl in negativer wie auch in positiver Richtung.

Aufgrund der Inkompressibilität der hier betrachteten Strömungen, sollte die Massengeschwindigkeit während den Simulationen konstant bleiben. Da Finite-Element-Funktionen allerdings nur diskret divergenzfrei sind, wird die Kontinuitätsgleichung nur approximativ erfüllt und eine Finite-Element-Diskretisierung kann im Allgemeinen keine Erhaltung der Massengeschwindigkeit garantieren. Um diesem Effekt entgegen zu steuern, wird eine dynamische Anpassung der rechten Seite der Navier-Stokes-Gleichungen nach jedem Zeitschritt vorgenommen. Die Strömungen werden durch einen Druckgradienten angetrieben. Sei $U_{\text{bulk,sim}}(t_k)$ die zum Zeitpunkt t_k berechnete Massengeschwindigkeit, dann definiert man die rechte Seite zum kommenden Zeitpunkt t_{k+1} durch

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\Delta t_k} \begin{pmatrix} U_{\text{bulk}} - U_{\text{bulk,sim}}(t_k) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\tag{II.34}$$

wobei Δt_k die Zeitschrittlänge von t_{k-1} nach t_k repräsentiert. Das heißt, durch die dynamische Anpassung wird die Strömung entweder beschleunigt oder abgebremst. Simulationen ohne diese Anpassung zeigen einen Anstieg oder einen Abfall der Massengeschwindigkeit in der berechneten Lösung, deren jeweilige Stärke von den verwendeten

Turbulenzmodellen abhängt [JR07].

§5.2 Diskretisierung und Gitter

In diesem Abschnitt wird zuerst die Diskretisierung der Navier–Stokes–Gleichungen (II.31) beschrieben. Die zusätzlichen Terme, die durch Turbulenzmodelle auftreten, werden zusammen mit diesen weiter unten behandelt. Des Weiteren wird auf das verwendete Gitter eingegangen und die simulierten Größen werden definiert.

Beginnend mit der Zeitdiskretisierung durch das Crank–Nicolson–Verfahren ergibt sich für den diskreten Zeitpunkt t_k das System

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_k + \frac{1}{2}\Delta t_k [-2\nabla \cdot (Re_\tau^{-1}\mathbb{D}(\mathbf{u}_k)) + (\mathbf{u}_k \cdot \nabla) \mathbf{u}_k] + \Delta t_k \nabla p_k \\ = \mathbf{u}_{k-1} + \frac{1}{2}\Delta t_k \mathbf{f}_k + \frac{1}{2}\Delta t_k \mathbf{f}_{k-1} - \frac{1}{2}\Delta t_k [-2\nabla \cdot (Re_\tau^{-1}\mathbb{D}(\mathbf{u}_{k-1})) \\ + (\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{k-1}], \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_k = 0, \end{aligned} \quad (\text{II.35})$$

wobei $\mathbf{u}_k = \mathbf{u}(t_k)$ ist. Dieser Ansatz wurde gewählt, da das Crank–Nicolson–Verfahren als effiziente und exakte Zeitdiskretisierung für die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen bekannt ist [Tur99, Joh06b, JMR06]. In den numerischen Simulationen ist $\Delta t_k = 0.002$, also wesentlich kleiner als die Kolmogorov–Zeitskala t_λ und liegt damit im Bereich des Zeitschritts aus [CM94]. Hier sei noch darauf hingewiesen dass diese Herangehensweise eine Inkonsistenz in der Zeitdiskretisierung des Druckterms erzeugt, die in [Joh04a] diskutiert wird.

Im nächsten Schritt wird die Gleichung (II.35) in eine variationelle Formulierung transformiert:

Finde $(\mathbf{u}_k, p_k) \in V \times Q$, so dass

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_k, \mathbf{v}) + \frac{1}{2}\Delta t_k [(Re_\tau^{-1}\mathbb{D}(\mathbf{u}_k), \mathbb{D}(\mathbf{v})) + ((\mathbf{u}_k \cdot \nabla) \mathbf{u}_k, \mathbf{v})] + \Delta t_k (p_k, \nabla \cdot \mathbf{v}) \\ = (\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{v}) + \frac{1}{2}\Delta t_k (\mathbf{f}_k, \mathbf{v}) + \frac{1}{2}\Delta t_k (\mathbf{f}_{k-1}, \mathbf{v}) \\ - \frac{1}{2}\Delta t_k [(Re_\tau^{-1}\mathbb{D}(\mathbf{u}_{k-1}), \mathbb{D}(\mathbf{v})) + ((\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{v})], \\ (\nabla \cdot \mathbf{u}_k, q) = 0, \end{aligned} \quad (\text{II.36})$$

für alle $(\mathbf{v}, q) \in V \times Q$ erfüllt ist.

Danach löst man (II.36) durch eine Fixpunktiteration, da diese Linearisierung effizienter ist als eine Newton–Methode [Joh06b]. Für $\mathbf{u}_k^{(0)} = \mathbf{u}_{k-1}$ löst man das lineare System (Oseen–System):

Finde $(\mathbf{u}_k^{(n)}, p_k^{(n)}) \in V \times Q$, so dass

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{u}_k^{(n)}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \Delta t_k \left[\left(Re_\tau^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u}_k^{(n)}), \mathbb{D}(\mathbf{v}) \right) + \left((\mathbf{u}_k^{(n-1)} \cdot \nabla) \mathbf{u}_k^{(n)}, \mathbf{v} \right) \right] \\ & \quad + \Delta t_k \left(p_k^{(n)}, \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \\ & = \left(\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \Delta t_k \left(\mathbf{f}_k, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \Delta t_k \left(\mathbf{f}_{k-1}, \mathbf{v} \right) \\ & \quad - \frac{1}{2} \Delta t_k \left[\left(Re_\tau^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u}_{k-1}), \mathbb{D}(\mathbf{v}) \right) + \left((\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{v} \right) \right] \quad (\text{II.37}) \\ & \left(\nabla \cdot \mathbf{u}_k^{(n)}, q \right) = 0, \end{aligned}$$

für alle $(\mathbf{v}, q) \in V \times Q$ erfüllt ist.

Im Folgenden wird (II.37) mit der Q_2/P_1^{disc} Finite-Element-Methode diskretisiert [JR07], d.h. die Geschwindigkeit wird durch stückweise triquadratische stetige Funktionen approximiert, während für den Druck stückweise lineare unstetige Funktionen verwendet werden.

Das in den numerischen Studien verwendete Gitter basiert auf einer gleichmäßigen Verfeinerung. Ausgehend von einer gröbsten Stufe, im Folgenden Level 0 genannt, werden die hexaederförmigen Gitterelemente dabei jeweils in acht Zellen unterteilt. In den periodischen Richtungen wurde als Startlevel ein gleichmäßiges 2×2 Gitter gewählt. Um eine bessere Auflösung im wandnahen Bereich zu erzielen, wurde in der y -Richtung, senkrecht zu den festen Wänden, ein nicht-gleichmäßiges Gitter, basierend auf der Kosinusfunktion, verwendet [Gra06b, Gra06a]:

$$y_i = 1 - \cos\left(\frac{i \pi}{N_y}\right), \quad i = 0, \dots, N_y.$$

Hierbei bezeichnet N_y die Anzahl der Gitterebenen in y -Richtung und $N_y + 1$ entspricht der Anzahl der Gitterpunkte. In den numerischen Simulationen wurden Gitter mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei ($l_0 = 2$) und in vier ($l_0 = 4$) Ebenen untersucht. Weitere gitterbezogene Informationen, wie die Freiheitsgrade (d.o.f.) für die Geschwindigkeit und den Druck bzgl. der verwendeten Finite-Element-Räume sind in Tabelle II.3 zusammengefasst. Dabei sind die wandnächsten Punkte, y_{\min}^+ , in sogenannten Wandeinheiten, $y^+ = Re_\tau y = 180y$, $y \in [0, 1]$, angegeben.

Im Folgenden werden nur Rechnungen auf groben Gittern betrachtet, da verschiedene Turbulenzmodelle untersucht und miteinander verglichen werden sollen. Auf Gittern deren Feinheit die Anwendung der Galerkin-Finite-Element-Methode erlauben, liefern diese im Allgemeinen bessere Ergebnisse als Methoden mit Turbulenzmodellen [Gra06b, Gra06a, JR07]. Daher ist es wichtig, hinreichend grobe Gitter zu verwenden, die einen

Level	l_0	Zellen	N_y	Freiheitsgrade \mathbf{u}	Freiheitsgrade p	y_{\min}^+
2	2	512	8	15104	2048	6.8508
2	4	1024	16	25344	4096	1.7293
3	2	4096	16	101376	16384	1.7293
3	4	8112	32	199680	32768	0.4386

Tabelle II.3: Informationen über die verwendeten Gitter

sinnvollen Einsatz von Turbulenzmodellen rechtfertigen.

§5.3 Statistische Kenngrößen

Um aussagekräftige Vergleiche der Simulationsrechnungen mit den Referenzdaten aus [MKM99] treffen zu können, werden die Simulationsergebnisse durch entsprechende zeitliche und räumliche Mittelwerte dargestellt. Da in Strömungs- und in Spannweitenrichtung gleichmäßige Gitter verwendet wurden, kann die räumliche Mittelung in den homogenen Richtungen durch das arithmetische Mittel ausgeführt werden. Daher wird die mittlere räumliche Geschwindigkeit zum Zeitpunkt t_k in der Ebene $y = \text{const.}$ durch

$$\mathbf{U}^h(t_k, y) := \langle \mathbf{u}(t_k, x, y, z) \rangle_s = \frac{1}{N_x N_z} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_z} \mathbf{u}^h(t_k, x_i, y, z_j)$$

berechnet, wobei N_x und N_z die Freiheitsgrade der jeweiligen Richtung in der Ebene $y = \text{const.}$ sind. Diese Mittelung wurde für alle y -Ebenen, die einen Freiheitsgrad in Richtung der Wandnormalen besitzen, berechnet. Analog zur räumlichen Mittelung kann auch bei der zeitlichen Mittelung auf das arithmetische Mittel zurückgegriffen werden, da auch abstandstreue Zeitschrittweiten verwendet wurden. Daher ist das Profil der mittleren Geschwindigkeit durch

$$\mathbf{U}_{\text{mean}}^h(y) := \langle \langle \mathbf{u}^h(t_k, x, y, z) \rangle_s \rangle_t = \frac{1}{N_t + 1} \sum_{k=0}^{N_t} \mathbf{U}^h(t_k, y)$$

gegeben und wird in den Visualisierungen durch die erste Komponente $U_{\text{mean}}^h(y)$ dargestellt.

Die simulierte Friktionsgeschwindigkeit u_τ^h ist definiert als das Mittel der berechneten Friktionsgeschwindigkeiten an beiden festen Kanalwänden, wobei diese an jeder

Kanalwand durch eine einseitige Differenz angenähert werden,

$$u_\tau^h = \frac{1}{2} \left(\frac{U_{\text{mean}}^h(y_{\text{min}}^+)}{y_{\text{min}}^+} - \frac{U_{\text{mean}}^h(2 - y_{\text{min}}^+)}{2 - y_{\text{min}}^+} \right).$$

Die statistischen Kenngrößen zweiter Ordnung, die bei der turbulenten Kanalströmung betrachtet werden, sind die Nichtdiagonal-Einträge des Reynolds-Spannungstensors und die quadratischen Mittel der Turbulenzintensitäten. Exemplarisch erfolgt bei der Diskussion der Simulationsergebnisse eine Beschränkung auf eine Komponente des Reynolds-Spannungstensors, nämlich $\mathbb{R}_{12} = \mathbb{R}_{uv}$. Hier bezeichnet u die Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung und v die Komponente in der Richtung der Kanalwandnormalen. Damit kann \mathbb{R}_{12} als statistische Mittelung definiert werden,

$$\mathbb{R}_{12} = \langle \langle uv \rangle_s \rangle_t - \langle \langle u \rangle_s \rangle_t \langle \langle v \rangle_s \rangle_t.$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass sich diese Definition der Mittelung auf [WJC02, IF03, Gra06a] bezieht und in der Literatur auch andere Definitionen gebräuchlich sind, z.B. in [HOM01]. Eine Diskussion dieser Problematik findet man in [JR07].

Die Nichtdiagonal-Einträge des Reynolds-Spannungstensors der DNS aus [MKM99], die als Vergleichsdaten herangezogen werden, können durch

$$\mathbb{R}_{ij}^{\text{DNS}} \approx \mathbb{R}_{ij}^h + \langle \langle \mathbb{A}_{ij}^h \rangle_s \rangle_t, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j$$

approximiert werden, wobei \mathbb{A}_{ij}^h für die modellierten Spannungen der ungelösten Skalen steht. Die im Folgenden visualisierten numerischen Ergebnisse der Reynolds-Spannungen werden noch mit der Friktionsgeschwindigkeit normalisiert,

$$\mathbb{R}_{ij}^{h,*} := \frac{\mathbb{R}_{ij}^h + \langle \langle \mathbb{A}_{ij}^h \rangle_s \rangle_t}{(u_\tau^h)^2}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j.$$

Die quadratischen Mittel der Turbulenzintensitäten berechnen sich aus der Abweichung der Normal- und Zugspannungen von der Isotropie und einer Normalisierung durch die Friktionsgeschwindigkeit aus

$$u_{\text{rms}}^{h,*} := \frac{\left| \mathbb{R}_{11}^h + \langle \langle \mathbb{A}_{11}^h \rangle_s \rangle_t - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \left(\mathbb{R}_{jj}^h + \langle \langle \mathbb{A}_{jj}^h \rangle_s \rangle_t \right) \right|^{\frac{1}{2}}}{u_\tau^h}.$$

Die berechneten quadratischen Mittel der Turbulenzintensitäten $u_{\text{rms}}^{h,*}$ werden in den

Darstellungen mit

$$\left| \mathbb{R}_{11}^{\text{MKM}} - \frac{1}{3} (\mathbb{R}_{11}^{\text{MKM}} + \mathbb{R}_{22}^{\text{MKM}} + \mathbb{R}_{33}^{\text{MKM}}) \right|^{\frac{1}{2}}$$

verglichen (vgl. [IF03]), wobei das Kürzel MKM die Referenzdaten aus [MKM99] kennzeichnet.

§5.4 Turbulenzmodelle

Als erstes wird das traditionelle und weitverbreitete Smagorinsky–LES–Modell betrachtet, welches einen zusätzlichen Term

$$(\nu_T \mathbb{D}(\mathbf{u}^h), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)), \quad \nu_T = C_S \delta_K^2 \|\mathbb{D}(\mathbf{u}^h)\|_F, \quad (\text{II.38})$$

in die Galerkin–Finite–Element–Methode einführt. Hierbei sind C_S eine frei wählbare Konstante und $\|\cdot\|_F$ die Frobeniusnorm. Eine gebräuchliche Wahl des Parameters δ_K ist $\delta_K = ch_K$, mit $c \in [1, 2]$. Für das Maß der Gitterzellengröße h_K haben numerische Tests gezeigt [JR07], dass die Wahl der kürzesten Kante der Zelle für h_K die besten Ergebnisse liefert.

Um die zu hohe Energiedissipation, die dem Smagorinsky–LES–Modell innewohnt, zu handhaben, wird zusätzlich noch der van Driest–Dämpfungsfaktor in der viskosen Unterschicht, $y^+ < 5$, eingeführt

$$\nu_T = C_S \delta_K^2 \|\mathbb{D}(\mathbf{u}^h)\|_F \left(1 - \exp\left(\frac{-y^+}{A}\right) \right)^2, \quad (\text{II.39})$$

mit $A = 26$ [Pop00] und der gleichen Konstanten C_S . In den numerischen Simulationen wurde das Smagorinsky–LES–Modell mit van Driest–Dämpfung implizit behandelt. Für die Modellierung der Reynolds–Spannungen im sogenannten Unterschichtsbereich ergibt sich der Term $\mathbb{A}^h = -\nu_T \mathbb{D}(\mathbf{u}^h)$.

Wie in den vorangegangenen Abschnitten erläutert, wird hier vor allem die VMS–Methode betrachtet. Dazu wird die Gleichung (II.27) mit dem Crank–Nicolson–Verfahren diskretisiert. Dies liefert die vollständig implizite projektions–basierte FEVMS–Methode im diskreten Zeitpunkt t_k :

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_k^h, \mathbf{v}^h) + \frac{1}{2} \Delta t_k \left[(2Re^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u}_k^h), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)) + ((\mathbf{u}_k^h \cdot \nabla) \mathbf{u}_k^h, \mathbf{v}^h) \right. \\ \left. + (\nu_{T,k} (\mathbb{D}(\mathbf{u}_k^h) - \mathbb{G}_k^H), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)) \right] - (p_k, \nabla \cdot \mathbf{v}^h) \\ = (\mathbf{u}_{k-1}^h, \mathbf{v}^h) - \frac{1}{2} \Delta t_k \left[(2Re^{-1} \mathbb{D}(\mathbf{u}_{k-1}^h), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h)) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left((\mathbf{u}_{k-1}^h \cdot \nabla) \mathbf{u}_{k-1}^h, \mathbf{v}^h \right) + \tag{II.40} \\
& \left(\nu_{T,k-1} \left(\mathbb{D}(\mathbf{u}_{k-1}^h) - \mathbb{G}_{k-1}^H \right), \mathbb{D}(\mathbf{v}^h) \right) \Big] \\
& + \frac{1}{2} \Delta t_k \left(\mathbf{f}_{k-1}, \mathbf{v}^h \right) + \frac{1}{2} \Delta t_k \left(\mathbf{f}_k, \mathbf{v}^h \right) \quad \forall \mathbf{v}^h \in V^h, \\
& (q^h, \nabla \cdot \mathbf{u}_k^h) = 0 \quad \forall q^h \in Q^h, \\
& \left(\mathbb{D}(\mathbf{u}_k^h) - \mathbb{G}_k^H, \mathbb{L}^H \right) = 0 \quad \forall \mathbb{L}^H \in L^H.
\end{aligned}$$

Für das inf-sup stabile Paar $V^h \times Q^h$ wurden die Finite-Element-Räume $V^h = Q_2$ und $Q^h = P_1^{\text{disc}}$ gewählt. Die Skalenseparation, die die Grundlage der VMS-Methode bildet, wird hier durch die Wahl des Raumes der großen Skalen des Geschwindigkeits-Deformationstensors L^H realisiert. Dabei werden die großen Skalen durch die L^2 -Projektion in den Raum L^H , die explizit in der dritten Gleichung angegeben ist, definiert.

Verglichen mit der variationellen Form der Navier-Stokes-Gleichungen (II.36) ist in der Impulsbilanz noch ein zusätzlicher Term, der den Einfluss der turbulenten Viskosität auf die kleinen gelösten Skalen beschreibt und implizit behandelt wird. Dieser spiegelt das Konzept der Beschränkung des Einflusses des Turbulenzmodells der VMS-Methode wider.

Als turbulente Viskosität ν_T wird das Smagorinsky-Modell (II.38) benutzt. Auf eine Integration des van Driest-Dämpfungsfaktors, wie in [JK10], wurde verzichtet, um die potentiellen Vorteile der VMS-Methode, nämlich einfache Modelle für den Einfluss der nichtgelösten Skalen verwenden zu können, stärker herauszustellen.

Für die Berechnung der Einträge des Reynolds-Spannungstensors und der quadratischen Mittel der Turbulenzintensitäten hat \mathbb{A}^h die Form $\mathbb{A}^h = -\nu_T \left(\mathbb{D}(\mathbf{u}^h) - \mathbb{G}^H \right)$.

§5.5 Numerische Ergebnisse der turbulenten Kanalströmung

Die Simulationen auf dem Gitter mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Ebenen, $l_0 = 2$, sind auf den Abbildungen II.3, II.7 und II.9 dargestellt. Die Ergebnisse für eine anfängliche Unterteilung in vier Ebenen, $l_0 = 4$, sind auf den Abbildungen II.5-II.10 dargestellt. In den Abbildungen und der Auswertung der Simulationsergebnisse wurden die Abkürzungen SVD-Methode, VMS P0 und VMS P1 verwendet. Diese stehen für das Smagorinsky-Modell mit van Driest-Dämpfungsfaktor und die projektions-basierte FEVMS-Methode mit der jeweiligen Wahl für den Raum L^H : $L^H = P_0$ (stückweise konstante Tensoren) und $L^H = P_1^{\text{disc}}$ (stückweise lineare, aber unstetige Tensoren).

Dabei zeigt sich für die mittlere Geschwindigkeit in Strömungsrichtung und $l_0 = 2$, Abb. II.3 und Abb. II.4, dass die Ergebnisse für die VMS-Methode, besonders für

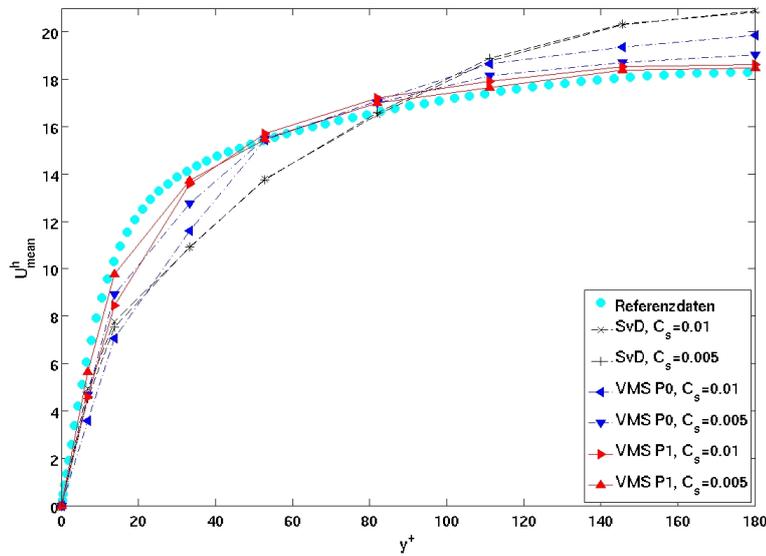


Abbildung II.3: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeit mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen

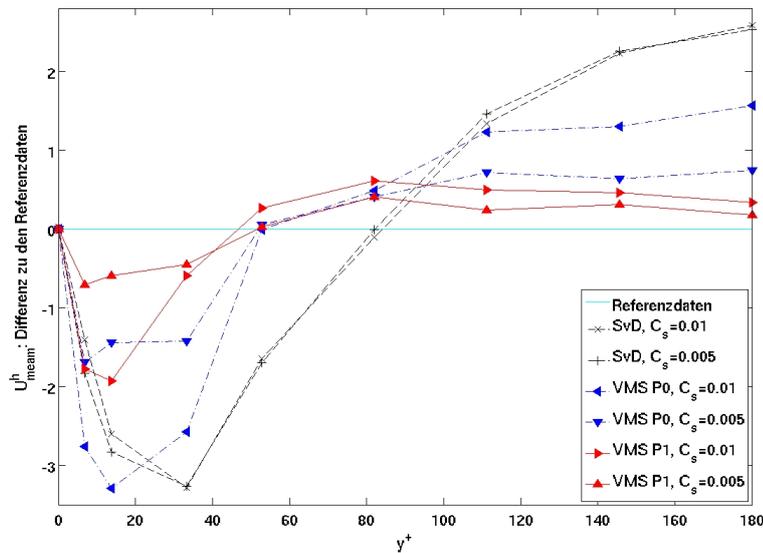


Abbildung II.4: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeit mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen, Differenzen zum Referenzprofil

VMS P1 mit $C_S = 0.005$, erheblich besser sind als für die SvD-Methode. Selbst auf diesen sehr groben Gittern sind die Kurven der VMS-Methode relativ nahe an den Referenzdaten, während sich die Kurven der SvD-Methode einem laminaren Profil annähern.

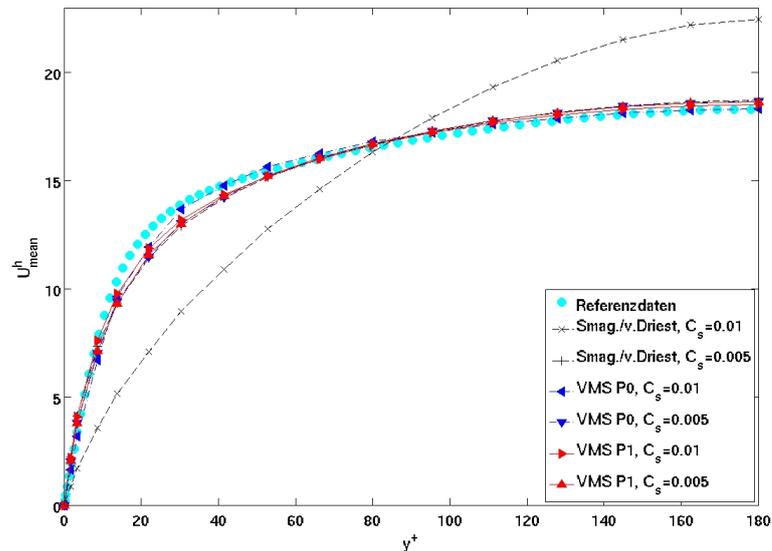


Abbildung II.5: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeiten mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen

Auf dem feineren Gitter $l_0 = 4$, Abb. II.5 und Abb. II.6, liegen die Ergebnisse wie erwartet insgesamt näher an den Referenzdaten, wobei die VMS-Methode mit $C_S = 0.01$ hier etwas besser abschneidet. Überraschenderweise sind die Ergebnisse für die SvD-Methode mit $C_S = 0.01$ sehr schlecht und zeigen einen völlig anderen Kurvenverlauf.

Die Abbildungen Abb. II.7 und Abb. II.8 zeigen die Ergebnisse der Turbulenzintensität $u_{\text{rms}}^{h,*}$ für beide Anfangsgitter. Die Kurven der VMS-Methode zeigen prinzipiell einen korrekten Verlauf, allerdings mit zu hohen Werten. Die Kurven der SvD-Methode haben nur für $l_0 = 4$ und $C_S = 0.005$ einen richtigen Verlauf. Alle anderen Kurven und Werte weichen stark von den Referenzkurven ab. Auf eine Darstellung der Ergebnisse von $v_{\text{rms}}^{h,*}$ und $w_{\text{rms}}^{h,*}$ wurde verzichtet, da sie ähnliche Resultate zeigen.

Die Komponente des Reynolds-Spannungstensors $\mathbb{R}_{12}^{h,*}$ ist in den Abbildungen Abb. II.9 und Abb. II.10 dargestellt. Für $l_0 = 2$ sieht man an den Spitzen der Kurven, wie stark der Einfluss des Modells \mathbb{A}_h im wandnahen Bereich ist. Die Ergebnisse spiegeln den Verlauf der Referenzkurve nicht gut wider und haben ebenfalls zu hohe Werte. Dies gilt auch für die Werte der Ergebnisse auf dem feineren Gitter mit $l_0 = 4$. Allerdings ist

hier die Form der Kurven korrekt. Einen weiteren Unterschied in den Ergebnissen sieht man bei den wandnahen Werten. Hier zeigen sich auf dem gröberen Gitter Spitzen, die auf dem feineren Gitter und den Referenzdaten nicht auftreten.

In den Abbildungen Abb. II.11, Abb. II.12, Abb. II.13 und Abb. II.14 sind die Ergebnisse einer Parameterstudie für die verschiedenen Turbulenzmodelle dargestellt. Dabei sieht man, dass die Kurvenverläufe für die VMS-Methode für alle Parameter einen qualitativ korrekten Verlauf zeigen, während dies für die SvD-Methode nicht der Fall ist, z.B. $C_s = 0.01$. Des Weiteren zeigt sich, dass die Ergebnisse für C_s -Werte kleiner als 0.005 für die VMS-Methode zu Verschlechterungen führen. Allerdings kann man insgesamt sagen, dass der Einfluss des Parameters C_s auf die VMS-Methode erheblich geringer ist, als auf die SvD-Methode. Dies liegt in der Tatsache begründet, dass das Turbulenzmodell nur auf einen Teilbereich der Skalen angewendet wird und daher Variationen des Parameters die VMS-Methode insgesamt weniger stark beeinflussen. Zusammenfassend wurden die besten Ergebnisse für VMS P0 und VMS P1 mit $C_s = 0.01$ erzielt. Bei der SvD-Methode waren die Resultate für $C_s = 0.005$ am besten.

Die Rechenzeiten sind beispielhaft für sechs Simulationen in Tabelle II.4 angegeben. Übersichtlich betrachtet wurden etwa zwei Drittel der Rechenzeit für das Lösen des nichtlinearen Systems verwendet und ein Drittel für die Assemblierung der Matrizen benötigt. Als Löser wurde dabei ein flexibles GMRES-Verfahren mit dem sogenannten multiple discretization multi-level Vorkonditionierer verwendet. Aus der Tabelle ist ersichtlich, dass die SvD-Methode immer das schnellste Verfahren war und bei den VMS-Methoden VMS P0 etwas schneller als VMS P1 war. Ähnliche Ergebnisse wurden auch in [JK05] beobachtet.

Parameter	SvD-Methode	VMS P0	VMS P1
$l_0 = 2 \quad C_s = 0.01$	128112 (100)	144559 (112)	156352 (122)
$l_0 = 4 \quad C_s = 0.005$	557518 (100)	597509 (107)	643438 (115)

Tabelle II.4: Rechenzeiten in Sekunden, Werte in den Klammern sind Prozentangaben in Bezug auf die SvD-Rechenzeiten

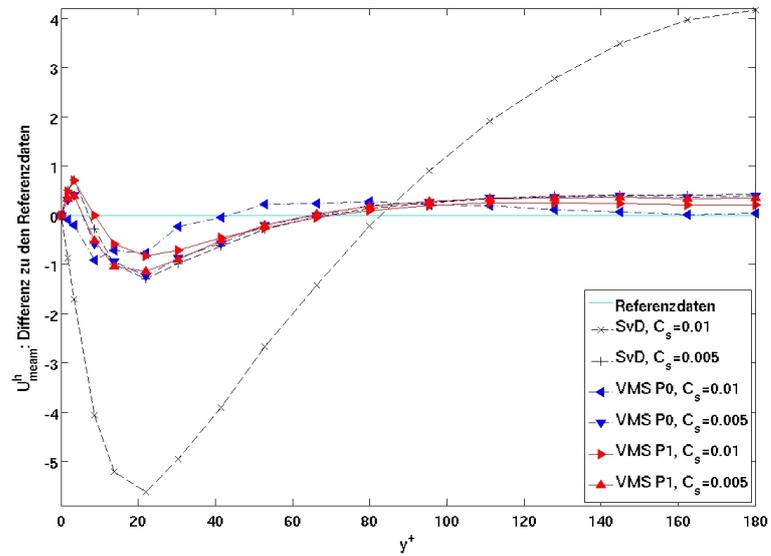


Abbildung II.6: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; mittlere Geschwindigkeiten mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenzen zum Referenzprofil

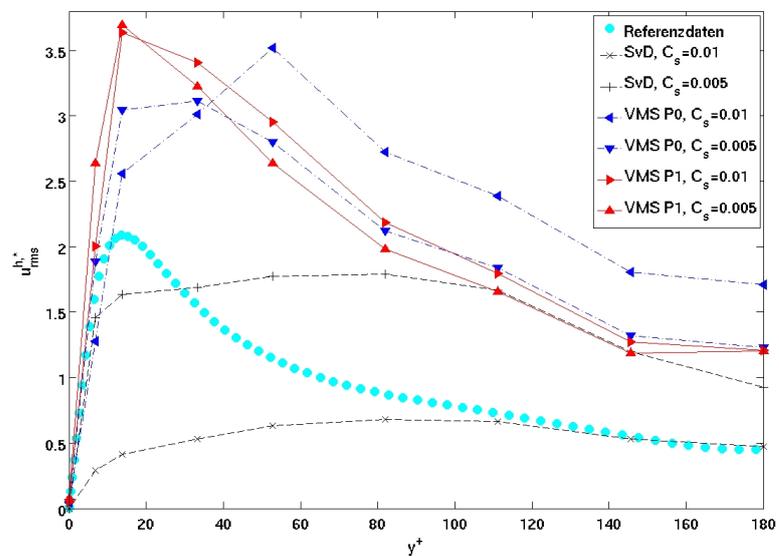


Abbildung II.7: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{rms}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen

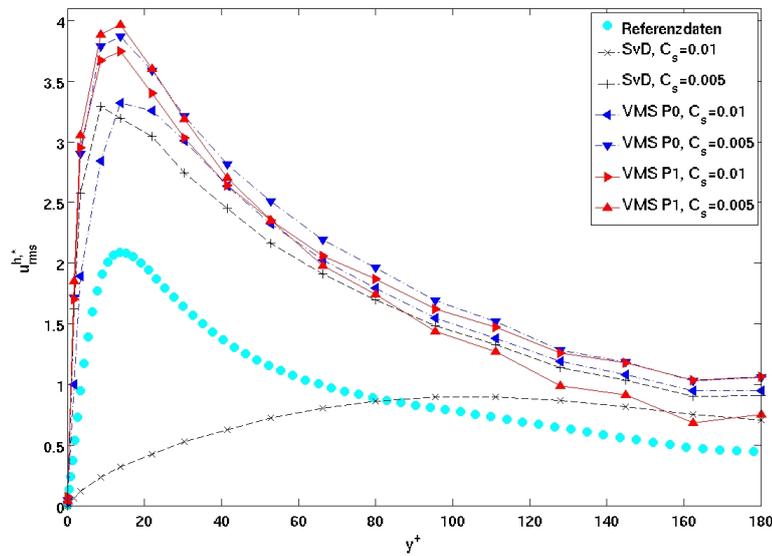


Abbildung II.8: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{rms}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen

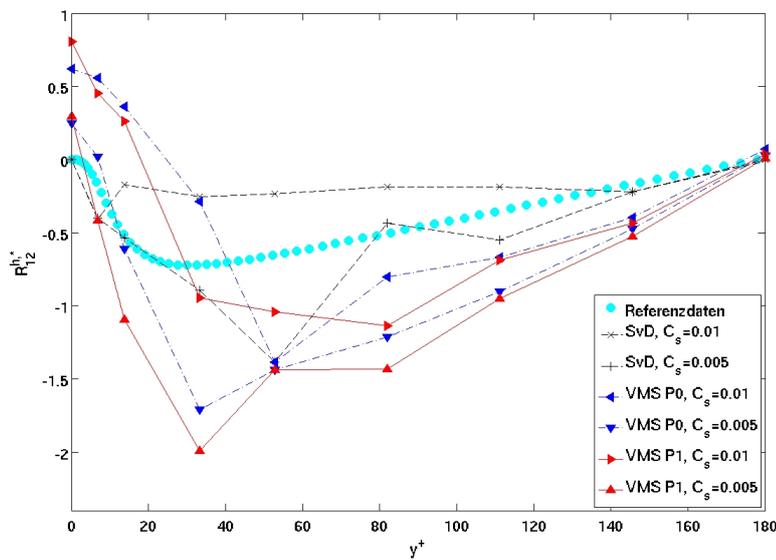


Abbildung II.9: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $R_{12}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in zwei Gitterebenen

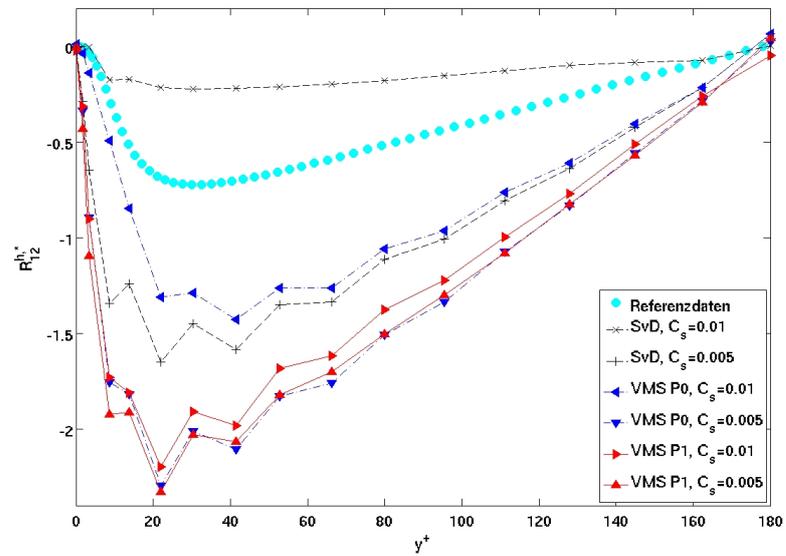


Abbildung II.10: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $R_{12}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen

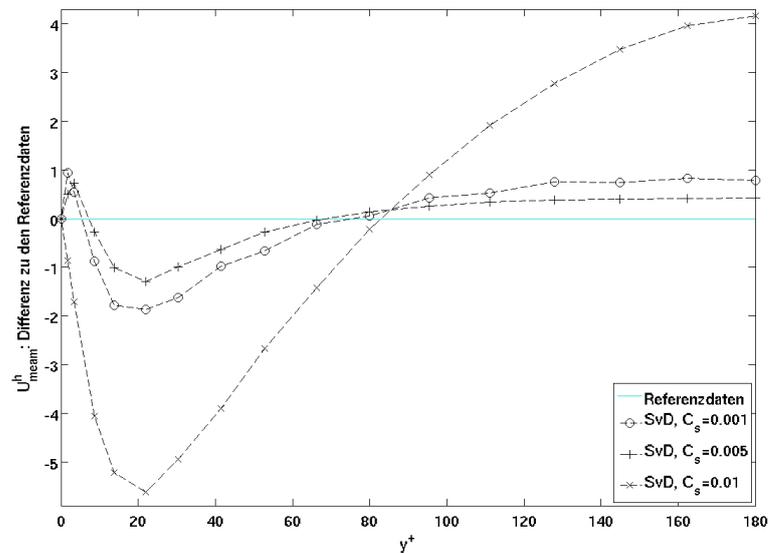


Abbildung II.11: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; anfängliche Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenz zu den Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, SvD

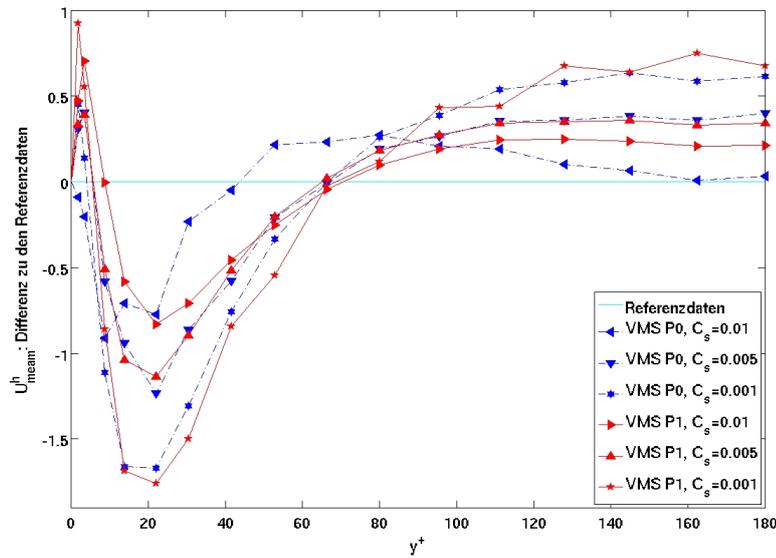


Abbildung II.12: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; anfängliche Unterteilung in vier Gitterebenen, Differenz zu den Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, VMS

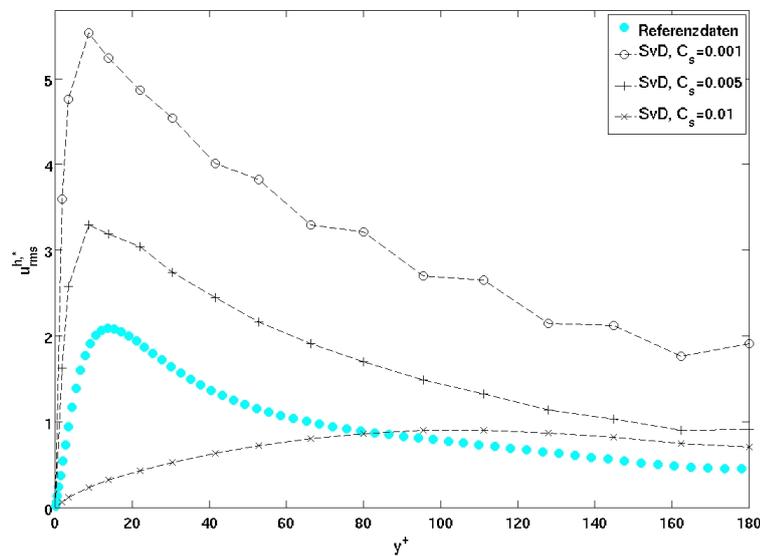


Abbildung II.13: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; u^h_{rms} , mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, SvD

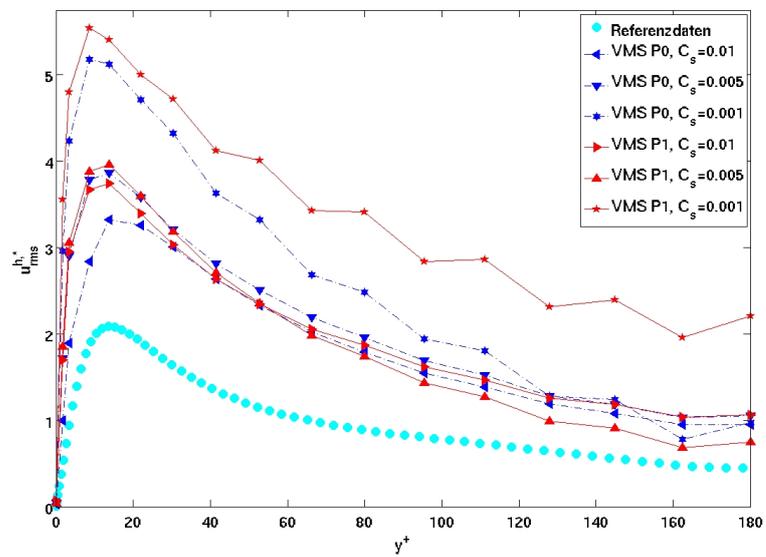


Abbildung II.14: Turbulente Kanalströmung mit $Re_\tau = 180$; $u_{rms}^{h,*}$, mit einer anfänglichen Unterteilung in vier Gitterebenen, Referenzdaten für die mittlere Geschwindigkeit, VMS

§5.6 Zusammenfassung

Dieser Abschnitt betrachtete Simulationen zur turbulenten Kanalströmung auf groben Gittern, um einen Vergleich zwischen den projektions-basierten FEVMS-Methoden und dem Smagorinsky-LES-Modell mit van Driest-Dämpfungsfaktor zu ermöglichen. Als Fazit kann man sagen, dass die VMS-Methoden qualitativ gute Approximationen der Referenzdaten sowohl bei den Profilen der mittleren Geschwindigkeit als auch bei den statistischen Kenngrößen ergaben. Allerdings zeigen die Rechnungen bei den Reynolds-Spannungen und den quadratischen Mitteln der Turbulenzintensitäten quantitativ zu hohe Absolutwerte.

Jedoch zeigen die VMS-Methoden im Verhältnis zu den LES-Rechnungen eine deutliche geringere Sensitivität gegenüber den verschiedenen Möglichkeiten bei der Parameterwahl der Wirbelviskositätsmodelle. Dies zeigt noch einmal die Philosophie der VMS-Methode auf, nämlich den Einfluss der Turbulenzmodelle auf die notwendigen Skalenbereiche zu beschränken. Daher lässt sich abschließend sagen, dass die VMS-Methoden zur Simulation der turbulenten Strömungen in Fällungsreaktionen dem Smagorinsky-LES-Modell vorzuziehen sind.

Da die Wahl des Raumes L^H einen größeren Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat, als Veränderungen bei den Parametern der Wirbelviskositätsmodelle, motiviert dies eine adaptive Wahl des Raumes der großen Skalen. Dieser ganz neue Ansatz zur Definition der Räume wird in der Arbeit [JK10] vorgestellt.

Dort wird die projektions-basierte FEVMS-Methode durch die Möglichkeit einer adaptiven Wahl des Raumes L^H erweitert. Diese Vorgehensweise hat mehrere Vorteile, da man nicht mehr gezwungen ist, sich zu Beginn der Simulation auf einen bestimmten Raum für die großen Skalen festzulegen. Dies ermöglicht, während der laufenden Simulation, auf Änderungen innerhalb der turbulenten Strömung einzugehen und diese zu berücksichtigen.

Da der Raum der großen Skalen nicht länger gleichförmig ist, können verschiedene Gitterzellen auch Finite-Element-Tensoren mit unterschiedlichen polynomialen Graden haben. Somit ist diese neue, erweiterte Methode besser an die turbulente Struktur der Strömung angepasst, die von Bereichen mit annähernd laminarer Strömung bis zu Bereichen mit stark turbulentem Charakter reichen kann.

Je turbulenter ein Teilbereich des Strömungsgebietes ist, desto größer sollte der Einfluss des Turbulenzmodells sein und damit sollte auch der lokale polynomiale Grad des Raumes L^H sinken. In diesem Zusammenhang ist der lokale Umfang der Turbulenz von Bedeutung, der durch die lokalen nichtgelösten Skalen gegeben ist. Da diese Skalenbereiche aber nicht berechnet werden können, werden diese a posteriori durch die lokale L^2 -Norm der gelösten kleinen Skalen kontrolliert. Hinter dieser Vorgehensweise steht die Annahme, dass sich die Stärke der lokalen turbulenten Intensität in der Größe der lokalen gelösten kleinen Skalen widerspiegelt. Mit anderen Worten, sind in einem Teilbereich viele gelöste kleine Skalen, dann geht man davon aus, dass sich in diesem

Bereich auch viele nichtgelöste kleine Skalen befinden und umgekehrt.

Durch diese Kontrolle der Turbulenzintensitäten ist man in der Lage einen Algorithmus mit adaptiver Wahl der Räume der großen Skalen aufzubauen. Die numerischen Studien für verschiedene Strömungsprobleme in [JK10] zeigen, dass die adaptive Wahl des Raumes der großen Skalen eine Kontrolle des Einflusses des Turbulenzmodells erlaubt. Im Vergleich zur projektions-basierten FEVMS-Methode ohne adaptive Wahl des Raumes L^H stellt die neue Methode meist eine Verbesserung dar. Zusammenfassend kann man sagen, dass hier weitere Untersuchungen zur adaptiven Wahl der Räume sehr vielversprechend sind.

Kapitel III

Finite-Element-Methoden zur numerischen Simulation von Fällungsprozessen

§1 Populationsbilanzen

Sowohl in der Chemie als auch in der Biologie und den Ingenieurwissenschaften gibt es viele Beispiele von Systemen in denen Partikel auftreten. Der Begriff Partikel ist hier möglichst allgemein und umfassend zu verstehen, denn Populationsbilanzen können von chemischen Reaktionsprodukten über Kristallwachstum bis zu biologischen Spezies vieles beschreiben.

Im Folgenden werden Systeme aus dispergierten Partikeln in einer kontinuierlichen Phase betrachtet. Solche partikelförmigen Produkte, die in einer dispersen Form vorliegen, haben für die Verfahrenstechnik in der chemischen Industrie eine zunehmende Bedeutung. Ihr Stellenwert wird deutlich, wenn man bedenkt, dass bereits vor einer Dekade über die Hälfte aller Produkte in der Produktion und Verarbeitung in partikulärer Form vorlag [Win99] und ihr Anteil weiter zugenommen hat.

Diese dispersen Stoffsysteme können durch Populationsbilanzen modelliert werden und treten vor allem in den Prozessen der chemischen Industrie auf, deren Ziel die Produktion bestimmter Partikel ist. Hier sind besonders die Ausfällungsreaktionen von großer Bedeutung, da sie eine zielgerichtete Produktion von Partikeln mit vorgegebenen Eigenschaften, wie etwa maßgeschneiderte Spezialprodukte, erlauben.

Vom Standpunkt der Modellierung hängt das Verhalten der Partikel im System davon ab, wie viele Eigenschaften man ihnen zuschreiben und simulieren möchte. Die beschreibenden Parameter können hierbei sowohl in diskreter (z.B. Flag zur Unterscheidung verschiedener Materialien) als auch in kontinuierlicher Form (z.B. Größe eines Partikels) gegeben sein. Die Partikel selbst können dabei entweder von Beginn an Teil des Systems sein oder erst durch innere Prozesse zu einem späteren Zeitpunkt entstehen und sowohl untereinander als auch mit der kontinuierlichen Phase wechselwirken.

Die Populationsbilanzen müssen also Transportphänomene und Reaktionsprozesse mit den Aspekten der evolutionären Entwicklung der Partikel in einen Zusammenhang bringen. Dies geschieht aus systemwissenschaftlicher Sicht durch *eigenschaftsverteilte Systeme*, die durch ein gekoppeltes System partieller Integro–Differentialgleichungen aus physikalischen Bilanzgleichungen und Erhaltungsgesetzen beschrieben werden [Gil97].

Für die meisten praktischen Anwendungen ist es ausreichend, anzunehmen, dass der Zustand eines Partikels durch einen endlich–dimensionalen Vektor, den sogenannten *Zustandsvektor* des Partikels, beschrieben werden kann. Dieser Partikelzustand beinhaltet zum einen die Veränderungsrate der Variablen und zum anderen den Entstehungs– und Vernichtungsprozess der Partikel.

Üblicherweise wird hier zwischen den Ortskoordinaten oder *äußeren* Koordinaten $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)$ und den Eigenschafts– oder *inneren* Koordinaten $\tilde{\mathbf{i}} = (\tilde{i}_1, \dots, \tilde{i}_d)$ unterschieden. Der Zustandsvektor $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}})$ liegt dann im *Zustandsraum*

$$\Omega = \Omega_{\tilde{\mathbf{x}}} \times \Omega_{\tilde{\mathbf{i}}},$$

einem Produkt aus dem physikalischen Raum und dem Raum der inneren Koordinaten, der je eine Dimension pro zugeschriebener Partikeleigenschaft besitzt.

Obwohl die einzelnen Partikel zufällig im Zustandsraum verteilt sind, kann man für große Populationen durch Mittelung und Erwartungswerte ein deterministisches oder auch statistisches Verhalten beschreiben. Um geeignete Größen für die Darstellung der simulierten Partikelpopulationen zu definieren, nimmt man an, dass eine *Verteilungsdichtefunktion* auf dem Zustandsraum Ω definiert werden kann [Ram00]:

$$E \left[\tilde{n}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) \right] = \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}).$$

Die linke Seite ist der Erwartungs- oder Mittelwert über die Anzahl der Partikel im aktuellen Zeitpunkt \tilde{t} , was der auf der rechten Seite beschriebenen Verteilungsdichtefunktion \tilde{f} entspricht. Diese kann nach [Ram00] als hinreichend glatt und differenzierbar angenommen werden und erlaubt, die Anzahl von Partikeln in jeder Region des Zustandsraumes zu berechnen. Die Gesamtzahl der Partikel zum Zeitpunkt \tilde{t} im ganzen System ist demnach gleich

$$\int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}} \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{x}}}} \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) dV_{\tilde{\mathbf{x}}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}}$$

und die Gesamtzahl der Partikel im physikalischen Raum pro Einheitsvolumen zum

Zeitpunkt \tilde{t} ist

$$N(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}} \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) dV_{\tilde{\mathbf{i}}},$$

was einer lokalen (gemittelten) Partikelanzahldichte im physikalischen Raum entspricht. Dies ermöglicht, falls es für die Anwendung von Vorteil ist, die Integration auf die Teilmengen des Eigenschaftsraumes $\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}$ zu beschränken, die die gewünschte(n) Eigenschaft(en) der Partikel separieren.

Von physikalisch–technisch größerer Bedeutung sind die Volumen- und Massendichten, wie der *Volumenanteil*

$$q_3(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) = \frac{\tilde{v}(\tilde{\mathbf{i}}) \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}})}{q_{\text{tot}}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}})}.$$

Hier entspricht $\tilde{v}(\tilde{\mathbf{i}})$ dem Volumen eines Partikels im inneren Zustand $\tilde{\mathbf{i}}$ und

$$q_{\text{tot}}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}} \tilde{v}(\tilde{\mathbf{i}}) \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) dV_{\tilde{\mathbf{i}}}$$

ist der *totale Volumenanteil* aller Partikel im System. Eine weitere wichtige Beschreibungsgröße ist der *kumulative Volumenanteil*

$$Q_3(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{i}) = \int_{\tilde{i}_1}^{\tilde{i}_2} q_3(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{i}) d\tilde{i},$$

der den Volumenanteil der Partikel, mit der im Eigenschaftsraum skalaren, separat betrachteten Eigenschaft \tilde{i} repräsentiert, die zwischen den Eigenschaftswerten \tilde{i}_1 und \tilde{i}_2 liegen. Betrachtet man die Definitionen für die Volumenanteile für diskrete Partikeleigenschaften, werden die Integrale durch Summen ersetzt.

Da die zeitliche Veränderung der äußeren Koordinaten einer Bewegung im physikalischen Raum entspricht, sagt man analog, dass die zeitliche Veränderung der inneren Koordinaten einer Bewegung im abstrakten Eigenschaftsraum entspricht. Um diese konvektiven Prozesse zu beschreiben, definiert man neben der physikalischen Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}}$ auch eine "Geschwindigkeit" $\tilde{\mathbf{u}}_i$ bzgl. der inneren Koordinaten. Dies erlaubt nun die Definition von Partikelströmen, die die Anzahl der Partikel angeben, welche pro Zeiteinheit und pro Flächeneinheit, welche senkrecht auf der Geschwindigkeitsrichtung steht, fließen:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) \tilde{\mathbf{u}} &\cong \text{Fluss durch den physikalischen Raum,} \\ \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{i}}) \tilde{\mathbf{u}}_i &\cong \text{Fluss durch den Eigenschaftsraum.} \end{aligned}$$

Zur Herleitung von Bilanzgleichungen für die Partikel in einem Gebiet des Zustandsraumes müssen die im Prozess vorkommenden populationsdynamischen Mechanismen miteinander verknüpft werden. Dabei unterscheidet man zwischen zwei Arten von Wechselwirkungen. Differenziert betrachtet sind dies einerseits die direkten Interaktionen der Partikel untereinander, also die Vereinigung h_{agg} und die Zerteilung h_{br} , die ausschließlich in der dispersen Phase stattfinden und als Integrale über den Eigenschaftsraum dargestellt werden können.

Andererseits gibt es noch die Wechselwirkungen zwischen der kontinuierlichen Phase und dem Partikelkollektiv. Hierbei differenziert man zwischen der zeitlichen Veränderung von Partikeleigenschaften und dem Entstehungs- und Vernichtungsprozess der Partikel. Dieser wird durch die Nukleation \tilde{r}_{nuc} beschrieben, wobei positive Funktionswerte die Bildung von Partikeln auszeichnen und negative deren Auflösung.

Diese Wechselwirkungen zwischen den Partikeln und der kontinuierlichen Phase können durch eine Phasenbilanz beschrieben werden [Ram00] oder die verschiedenen Terme werden, wie im Weiteren, in die Bilanzgleichungen der einzelnen Phasen integriert. Die Nukleation, die immer an einen Massentransport gekoppelt ist, wird in den Bilanzgleichungen der kontinuierlichen Phase mittels Austauschströmen modelliert, während die zeitlichen Veränderungen in den Eigenschaftskordinaten in die Populationsbilanz der dispersen Phase einfließen.

In [Ram85] wird ein Partikelraum–Kontinuum definiert, das den Zustandsraum Ω durchzieht und mit einer allgemeinen Einbettung der Partikel eine Beschreibung der Relativbewegungen zwischen den Partikeln und der kontinuierlichen Phase erlaubt. Allerdings werden im Folgenden nur Systeme betrachtet, bei denen keine solchen Relativbewegungen auftreten und dementsprechend das Kontinuum und die kontinuierliche Phase identisch sind. Daher kann man ein Gebiet $V = V_{\tilde{\mathbf{x}}} \times V_{\tilde{\mathbf{i}}}$ des Zustandsraumes, welches sich stetig in Raum und Zeit verändert, zur Aufstellung einer Bilanzgleichung für die Anzahl der Partikel verwenden. Die zeitliche Veränderung der Verteilungsdichtefunktion in $V(\tilde{t})$ entspricht dann genau der Summe aus der Zerteilung und der Vereinigung von Partikeln in dem Gebiet,

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \int_{V_{\tilde{\mathbf{x}}}(\tilde{t})} \int_{V_{\tilde{\mathbf{i}}}(\tilde{t})} \tilde{f} dV_{\tilde{\mathbf{x}}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}} = \int_{V_{\tilde{\mathbf{i}}}(\tilde{t})} h_{\text{agg}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}} + \int_{V_{\tilde{\mathbf{i}}}(\tilde{t})} h_{\text{br}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}}.$$

In diesem Zusammenhang sollte man noch einmal berücksichtigen, dass die Nukleation, im Gegensatz zu [Ram00], zusammen mit der kontinuierlichen Phase behandelt wird. Die Materialableitung der Verteilungsdichtefunktion f kann nun mit Hilfe des Transporttheorems von Reynolds (II.5) in Eulersche Ableitungen umgewandelt werden,

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \int_{V_{\tilde{\mathbf{x}}}(\tilde{t})} \int_{V_{\tilde{\mathbf{i}}}(\tilde{t})} f dV_{\tilde{\mathbf{x}}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}} = \int_{V_{\tilde{\mathbf{x}}}(\tilde{t})} \int_{V_{\tilde{\mathbf{i}}}(\tilde{t})} \left[\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{f}) + \nabla_{\tilde{\mathbf{i}}} \cdot (\tilde{\mathbf{u}}_{\tilde{\mathbf{i}}} \tilde{f}) \right] dV_{\tilde{\mathbf{x}}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}}.$$

Durch die allgemeine Wahl der Integrationsgebiete und der Stetigkeit der Integranden erlaubt dies nun die nachstehende Definition der Populationsbilanz der dispersen Phase,

$$\begin{array}{cccc}
 \text{Akkumulation} & & \text{Konvektion} & & \text{Zerteilung} & & \text{Vereinigung} \\
 \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} & + & \nabla_{\mathbf{i}} \cdot (\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{i}} \tilde{f}) & + & \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{f}) & = & \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}} h_{\text{br}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}} + \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{i}}}} h_{\text{agg}} dV_{\tilde{\mathbf{i}}}.
 \end{array} \tag{III.1}$$

Eine wichtige Vereinfachung, die hier wie in vielen anderen Modellen zu Populationsbilanzen auch, gemacht wird, ist die Vernachlässigung von direkter Interaktion zwischen einzelnen Partikeln. Wie in [Ram00] beschrieben, ist nur eine indirekte Wechselwirkung zwischen den Partikeln über den Umweg der kontinuierlichen Phase erlaubt. Diese Modellannahme ist immer dann möglich, wenn, wie bei dem im Folgenden betrachteten Ausfällungsprozess, die zu erwartende Größe der Eigenschaftskordinate(n) klein gegenüber der Größenordnung der kontinuierlichen Phase ist und die Gesamtzahl der Partikel im System so gering ist, dass sie die kontinuierliche Phase nicht direkt beeinflussen. Man spricht in diesem Fall auch von sogenannten *dünnen Lösungen*. Des Weiteren ist eine effiziente Auswertung der globalen Integralterme mit einem hohen Rechenaufwand verbunden, da geeignete numerische Verfahren benötigt werden, um vollbesetzte Matrizen zu vermeiden [GH03, BGH03]. Von der verfahrenstechnischen Seite besteht zusätzlich noch das Problem, dass die analytische Gestalt der Kerne in den Quellen und Senken, wenn überhaupt, nur annähernd bekannt ist. Hier ist von Vorteil, dass die Vorgänge der Vereinigung und Zerteilung von Partikeln bei chemischen Ausfällungsprozessen oft nur eine untergeordnete Bedeutung haben und daher in diesem Fall vernachlässigt werden können. Mit dieser Einschränkung auf indirekte Wechselwirkungen vereinfacht sich die Populationsbilanz der dispersen Phase zu

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{i}} \cdot (\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{i}} \tilde{f}) + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{f}) = 0. \tag{III.2}$$

Das Spektrum der Anwendungen von Populationsbilanzen (III.1) bei eigenschaftsverteilten Prozessen in der chemischen Industrie und Verfahrenstechnik ist, wie bereits erwähnt, groß. Sie können von Zerkleinerungs- oder Kristallisationsprozessen über Partikelfällungen bis zu Emulsionen oder Aerosolen, wie Bakterien oder Rauch, vieles beschreiben. Abhängig von der Art des Prozesses sind die Individuen der Population und die ihnen zugeschriebenen Eigenschaften zu wählen. Die spezifischen Eigenarten eines Beispielprozesses spiegeln sich dabei in der Art und Anzahl der Eigenschaftskordinaten und ihrer Veränderungsrate $\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{i}}$ wider.

Im Folgenden soll auf die Simulation einer Populationsbilanz mit einer inneren Koordinaten eingegangen werden. Als Beispiel wurde eine Fällungsreaktion gewählt, da

diese in vielfältigen Formen in der Produktion chemischer Substanzen, insbesondere von Partikeln auftreten. Ihre Simulation ist daher von großem Interesse, um ein besseres Verständnis für sie zu entwickeln und ihre Kontrolle und Optimierung zu verbessern [JMR⁺].

Vom chemischen Standpunkt aus versteht man unter einer *Fällungsreaktion* eine chemische Reaktion, bei der in einem Lösungsmittel ein Feststoff ausgebildet wird. Dieser entstandene Stoff wird als *Ausfällung* oder *Niederschlag* bezeichnet. Der Fällungsprozess kann durch ein, bei einer Reaktion gebildetes unlösliches Produkt oder eine Übersättigung der Lösung hervorgerufen werden, wobei der erste Fall hier nicht betrachtet wird. Bei diesen Prozessen kommt es zu einem Übergang von einer annähernd echten Lösung, die aus einer kontinuierlichen Phase besteht, zu einer kolloiden Lösung oder Dispersion. Wobei man hier unter einer Phase einen Substanzbereich versteht, in dem die physikalischen und chemischen Eigenschaften homogen sind, d.h. man kann in der betrachteten Längenskala keine Uneinheitlichkeiten mehr erkennen [LK02]. In diesem Zusammenhang versteht man unter einer *kolloiden Lösung* ein kolloiddisperses System, in dem die Feststoffe in einem Dispersionsmittel, hier die kontinuierliche Phase, verteilt vorliegen. Kolloide Systeme können Dispersionsmittel und dispergierten Stoff in verschiedenen Aggregatzuständen enthalten. So unterscheidet man beispielsweise:

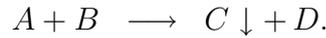
Bezeichnung	Dispersionsmittel	dispergierter Stoff
Aerosol	gasförmig	fest
Suspension	flüssig	fest
Emulsion	flüssig	flüssig

Tabelle III.1: Einteilung der kolloiddispersen Systeme, nach [LK02]

Des Weiteren gibt es in der Chemie auch Unterscheidungen bezüglich der Teilchengröße in der dispersen Phase. Beispielsweise spricht man bei einer Partikelgröße zwischen 1nm und 1 μ m von *kolloid dispers gelöst*, während kleinere Partikel *molekular dispers gelöste* Systeme bilden. Insbesondere Nanopartikelsysteme weisen aufgrund ihres „Großen–Oberfläche–zu–Volumen–Verhältnisses“ sehr interessante Eigenschaften auf [SP02].

Zusätzlich unterscheidet man noch zwischen *monodispersen* Mehrphasensystemen, bei denen alle vorhandenen Partikel innerhalb einer Größenklasse liegen und *polydispersen* Systemen mit einem kontinuierlichen Spektrum an auftretenden Partikelgrößen. Dabei untersucht man in der Dispersitätsanalyse die Gleichmäßigkeit der Verteilungen verschiedener Partikelgrößen.

Bei dem im Folgenden betrachteten Prozess liegen gelöste Edukte oder Reaktanten als Ausgangsstoffe in einem Lösungsmittel vor. Die bei der chemischen Reaktion entstehenden Produkte erzeugen konsekutiv eine Übersättigung des Systems und bilden in Folge dessen einen Niederschlag aus. Es handelt sich also um eine Suspension folgender Gestalt



Der Prozess wird durch ein Populationsbilanzsystem modelliert. Die kontinuierliche Phase, das Strömungsfeld des Lösungsmittels, wird dabei durch die Navier–Stokes–Gleichungen beschrieben, während die chemische Reaktion und der Transport der Reaktanten durch Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen simuliert werden.

Die bei der Fällungsreaktion entstehenden Partikel sollen nur eine innere Koordinate, nämlich ihre Größe, besitzen. Da bei realen chemischen Prozessen auftretende Partikel unregelmäßig geformt sind, wird in der Simulation ein geometrischer Äquivalentdurchmesser als Maß für die tatsächliche Größe benutzt. Dieser wird mit \tilde{d}_p bezeichnet und entspricht dem volumenäquivalenten Kugeldurchmesser der wirklichen Partikel.

Für diese eine kontinuierliche Eigenschaft wird der Eigenschaftsraum zu einem reellen Intervall,

$$\Omega_{\tilde{r}} = \left[\tilde{d}_{p,0}, \tilde{d}_{p,\max} \right],$$

wobei $\tilde{d}_{p,0}$ eine untere und $\tilde{d}_{p,\max}$ eine obere Schranke der Partikel- oder Korngröße ist.

Die in der Gleichung (III.2) auftretende Geschwindigkeit der inneren Koordinate entspricht dann der zeitlichen Veränderung der Partikelgröße \tilde{d}_p , was einem Wachstumsprozess gleichkommt:

$$\tilde{\mathbf{u}}_i = \frac{\partial \tilde{d}_p}{\partial t} = \tilde{G}(\tilde{c}_C).$$

Der Wachstumsprozess hängt von der vorhandenen Konzentration \tilde{c}_C des ausfällenden Stoffes ab, da das eigentliche Wachstum einen Massentransfer von der kontinuierlichen hin zur dispersen Phase benötigt und ist nicht abhängig vom Äquivalentdurchmesser der einzelnen Partikel. Dies entspricht allerdings einer Modellannahme für die hier betrachtete Fällungsreaktion und kann nicht ohne weiteres auf andere Prozesse übertragen werden. Mit der Produktregel und der Kontinuitätsgleichung für inkompressible Strömungen (II.2) ergibt sich für die Terme in (III.2),

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{f}) &= \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{f} + \tilde{f} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \\ &= \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{f}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{i}} \cdot (\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{i}} \tilde{f}) &= \frac{\partial}{\partial \tilde{d}_p} (\tilde{G}(\tilde{c}_C) \tilde{f}) \\
&= \frac{\partial}{\partial \tilde{d}_p} \tilde{G}(\tilde{c}_C) \tilde{f} + \tilde{G}(\tilde{c}_C) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{d}_p} \\
&= \tilde{G}(\tilde{c}_C) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{d}_p}.
\end{aligned}$$

Dies liefert nun die Gleichung für die Populationsbilanz der Ausfällungsreaktion mit einer inneren Koordinate:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{f} + \tilde{G}(\tilde{c}_C) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{d}_p} = 0. \quad (\text{III.3})$$

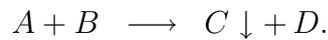
Hierbei beschreibt der erste Term die Akkumulation, also die zeitliche Veränderung der Partikelgrößenverteilung. Für einzelne Partikelgrößenintervalle entspricht dies einer Veränderung ihrer Partikelkonzentration. Der zweite und der dritte Term stellen die Konvektionsanteile der Populationsbilanz dar. Da Konvektion im physikalischen Sinne immer an den Transport von Materie gekoppelt ist, kann man den zweiten Term als Translokation einer konservativen Größe im Flussfeld mit der Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}}$ interpretieren [Dem94]. Der dritte und letzte Term kann analog zum zweiten gedeutet werden, allerdings mit Bezug auf die innere Koordinate an Stelle des physikalischen Raumes. Dies kommt einer Multiplikation des Wachstumsprozesses mit der größenabhängigen Veränderung der Partikelgrößenverteilung gleich und beschreibt den konvektiven Partikelfluss entlang der inneren Größenachse.

Die numerische Simulation von Populationsbilanzen, die im Folgenden betrachtet wird, ist aufgrund der sehr komplexen chemischen Vorgänge und der physikalischen Mechanismen problembehaftet. Dies führt zu einer Reihe von Schwierigkeiten, die in diesem Zusammenhang berücksichtigt werden müssen [WK04], wie zum Beispiel die Minimierung von numerischer Diffusion [JS08, JMR⁺] oder die Erhaltung der verschiedenen Momente der Verteilungen [LSH95, WGN01].

§2 Modellierung des Fällungsprozesses

Den ersten Schritt bei der Herstellung von Partikeln stellt meist die chemische Umwandlung der Ausgangssubstanzen dar. Das hier betrachtete Modell einer Suspension beschreibt eine Partikelsynthese mittels einer Fluid–Partikel–Umwandlung durch den Niederschlag einer Fällungsreaktion. Da die Zeitspanne, in der die zugrundeliegende chemische Umwandlung der Edukte oder Reaktanten im Prozess abläuft, in der Regel sehr viel kürzer ist, als deren Verweilzeit im Reaktor, wird oft auf eine detaillierte Un-

tersuchung der Umwandlungsreaktion verzichtet und wie im Folgenden, eine globale Reaktionsgleichung für das System angesetzt [WK04, KHS99],



Den Ausgangspunkt der Charakterisierung des Partikelwachstums und einer später erfolgenden Modellvalidierung bilden, neben den Eigenschaften der Partikel, vor allem die Gleichungen für die Konzentrations- und Geschwindigkeitsfelder innerhalb des Reaktors. Diese sollen nun aufgestellt werden. Dazu seien \tilde{c}_i [kmol/m³], $i \in \{A, B, C\}$, die Konzentrationen der gelösten Substanzen A , B und des gelösten Produktes C . Die ebenfalls bei der Reaktion entstehende Substanz D wird nicht betrachtet, da sie für die hier gewählte Beispielreaktion weder einen Einfluss auf die Populationsbilanz noch auf die kontinuierliche Phase besitzt [JMR⁺].

Innerhalb der physikalischen Chemie betrachtet man in der Reaktionskinetik die zeitliche Evolution von physikalisch-chemischen Vorgängen. Dies geschieht mittels makrokinetischer Gleichungen, die, im Gegensatz zur Mikrokinetik, neben den zeitlichen Abläufen einer Reaktion auch dem Einfluss von Transportphänomenen Rechnung tragen [Atk06, Brd90].

Die im Reaktor ablaufenden Transportprozesse werden hierfür in Diffusion und Konvektion unterteilt. Dabei versteht man unter *Diffusion* einen Prozess, bei dem Materie durch die zufällige molekulare Bewegung von einzelnen Teilchen innerhalb eines Systems transportiert wird [Cra64]. Ergibt sich aus den zufälligen Bewegungen der Teilchen, etwa durch Mittelung, ein gerichteter Transport, so wird dieser durch einen Konzentrationsgradienten $\nabla\tilde{c}$ angetrieben, der die kontinuierliche räumliche Veränderung der Konzentration beschreibt.

Eine quantitative Aussage über diese Bewegung erlaubt das empirische erste Gesetz von Adolf Fick, welches später von Albert Einstein aus der Thermodynamik hergeleitet wurde [ER06]. Es basiert auf der Hypothese, dass die Teilchenstromdichte \tilde{j} , [kmol/m²s], proportional zum Konzentrationsgradienten ist

$$\tilde{j} = -D\nabla\tilde{c},$$

wobei die Proportionalitätskonstante dem jeweiligen Diffusionskoeffizienten D , [m²/s], der zugrundeliegenden Substanz entspricht. Da auch hier die Kontinuitätsgleichung (II.1) erfüllt sein muss, gilt

$$\frac{\partial\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot \tilde{j} = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial\tilde{c}}{\partial t} = D\Delta\tilde{c}.$$

Dies entspricht dem zweiten Fick'schen Gesetz, welches eine Beziehung zwischen der zeitlichen Veränderung der Konzentration, also der Reaktionsgeschwindigkeit und den örtlichen Konzentrationsunterschieden herstellt [Atk06].

Diese Gleichung wird nun um den Konvektionsanteil erweitert. Dieser entspricht dem kontinuierlichen Transport eines gelösten oder kolloidal vorliegenden Stoffes, bedingt durch die großskalige Strömung innerhalb des Reaktors. Dies führt zu einer Erweiterung der Teilchenstromdichte um einen zusätzlichen Term,

$$\tilde{j} = -D\nabla\tilde{c} + \tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}$$

und ergibt zusammen mit der Inkompressibilität des Fluides eine Konvektions–Diffusionsgleichung,

$$\frac{\partial\tilde{c}}{\partial t} - D\Delta\tilde{c} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla\tilde{c} = 0,$$

welche in der Regel von der Konvektion dominiert wird.

Eine allgemeinere Betrachtung der Transportgleichung für eine skalare Größe enthält noch einen zusätzlichen Term, der die Quellen und Senken der Größe beschreibt. Dies geschieht hier durch eine funktionale Beschreibung der chemischen Reaktion und ergibt die makrokinetischen Gleichungen für die beiden Ausgangsstoffe der Reaktion.

Das Verhalten, der den Edukten A und B zugrundeliegenden Konzentrationsfelder \tilde{c}_A und \tilde{c}_B , kann nun durch ein System von skalaren Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen für die entsprechenden Konzentrationen beschrieben werden,

$$\begin{aligned} \frac{\partial\tilde{c}_i}{\partial t} - D_i\Delta\tilde{c}_i + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla\tilde{c}_i \\ + \tilde{r}_{\text{chem}}(\tilde{c}_A, \tilde{c}_B) = 0 \quad \text{in } (0, \tilde{T}] \times \tilde{\Omega}, \quad i \in \{A, B\}. \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

Hierbei bezeichnet D_i den jeweiligen Diffusionskoeffizienten, $(0, \tilde{T}]$ das untersuchte Zeitintervall und $\tilde{\Omega}$ die Reaktorgeometrie. Je höher die Konzentrationen der Ausgangsstoffe in einem Gebiet sind, desto größer ist dort auch die Reaktionsgeschwindigkeit, da die Reaktion von A und B nur bei einem direkten Kontakt der gelösten Stoffe stattfinden kann. Daher wird die chemische Reaktion durch eine, von den Konzentrationen abhängige, Funktion modelliert,

$$\tilde{r}_{\text{chem}}(\tilde{c}_A, \tilde{c}_B) = k_{\text{R}}\tilde{c}_A\tilde{c}_B,$$

wobei $\tilde{r}_{\text{chem}}(\tilde{c}_A, \tilde{c}_B)$ die Einheit $[\text{kmol}/(\text{m}^3\text{s})]$ hat. Die hier auftretende Größe k_{R} , $[\text{m}^3/(\text{kmol}\cdot\text{s})]$, ist ein chemischer Modellparameter, der die von den Reaktanten abhängige Reaktionsrate beschreibt.

Die Gleichung für das gelöste Reaktionsprodukt C ist ebenfalls eine Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichung. Sie ist durch die chemische Reaktion mit den Gleichungen der Reaktanten gekoppelt und enthält zusätzlich noch einen Term für den Nukleationsprozess. Darüber hinaus enthält sie noch einen Term zur Beschreibung des

Verbrauchs der Substanz C infolge des Partikelwachstums, welcher über die Partikelverteilungsdichte mit der Populationsbilanz gekoppelt ist,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}_C}{\partial t} - D_C \Delta \tilde{c}_C + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{c}_C - \tilde{r}_{\text{chem}}(\tilde{c}_A, \tilde{c}_B) \\ + \tilde{r}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C) + \tilde{r}_g(\tilde{c}_C, \tilde{f}) = 0 \quad \text{in } (0, \tilde{T}] \times \tilde{\Omega}. \end{aligned} \quad (\text{III.5})$$

Analog zu den obigen Gleichungen ist D_C [m^2/s] der Diffusionskoeffizient des gelösten Produkts der Reaktion. Der Term der chemischen Reaktion hat hier ein negatives Vorzeichen, da die Senken der Gleichungen für \tilde{c}_A und \tilde{c}_B der Quelle ihres Produktes entsprechen müssen. Da in der Realität keine negativen Stoffkonzentrationen auftreten können und hier innerhalb des Reaktors keine Rückreaktionsschritte betrachtet werden, besitzt die Gleichung für \tilde{c}_C auch keine Senke, die einer Quelle in (III.4) entsprechen könnte.

In welchem Maß Stoffe in der kontinuierlichen Phase löslich sind, hängt von ihrer individuellen Löslichkeit ab. Häufig lösen sie sich allerdings nur bis zu einer maximalen Konzentration, der *Sättigungskonzentration* auf [Ros02]. Die Lösung erreicht dann ihre Löslichkeitsgrenze oder *Sättigung*, wenn die weitere Stoffaufnahme unter den gegebenen Reaktorbedingungen zu einem energetisch ungünstigeren Zustand führen würde. Durch die ablaufenden Reaktionsmechanismen entsteht so innerhalb des Reaktors ein metastabiler Zustand, der die Voraussetzung für die Fällungsreaktion bildet, da nun ein einphasiges Gemisch vorliegt, obwohl ein Mehrphasensystem thermodynamisch stabiler wäre [Ott06].

Als Folge davon findet ein Phasenübergang statt, indem eine neue, zweite, disperse Phase aufgebaut wird. Dabei vollzieht sich diese Zustandsänderung nicht im gesamten Reaktor, sondern räumlich lokal an den Stellen, an denen die Konzentration des Stoffes \tilde{c}_C die Löslichkeitsgrenze überschreitet. Dort findet eine *Nukleation* oder Keimbildung statt, indem in der fluiden Phase feindisperse Partikel ausgebildet werden. Im Gegensatz zur *heterogenen* Nukleation, wie beispielsweise bei der Wolkenbildung, bei der vorhandene Aerosole als Kondensationskeime dienen [KHS99], findet hier eine *homogene* Nukleation statt, die im freien Raum aus einer gesättigten Lösung heraus abläuft [Atk00].

Das Auftreten dieser Nukleationszentren verhindert eine weitere Übersättigung der Lösung, da ihre Entstehung zu einer Verminderung der Stoffkonzentration führt. Die Verminderungsrate $\tilde{r}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C)$, [$\text{kmol}/(\text{m}^3\text{s})$], die durch die Nukleation bedingt wird, ist gegeben durch

$$\tilde{r}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C) = C_{\text{nuc}} \tilde{d}_{\text{p},0}^3 \tilde{B}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C),$$

wobei C_{nuc} , [kmol/m^3], eine Modellkonstante für die Nukleation ist. Des Weiteren repräsentiert $\tilde{d}_{\text{p},0}$, [m^3], die Keimgröße, also den kleinsten im Modell auftretenden

Partikeldurchmesser und $\tilde{B}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C)$ [1/(m³s)] die Nukleationsrate mit der die Partikel entstehen und die in [Ram00] modelliert wurde,

$$\tilde{B}_{\text{nuc}}(\tilde{c}_C) = \begin{cases} k_{\text{nuc}} \left(\tilde{c}_C - c_{C,\infty}^{\text{sat}} \exp\left(\frac{C_2}{\tilde{d}_{p,0}}\right) \right)^5 & \text{falls } \tilde{c}_C > c_{C,\infty}^{\text{sat}} \exp\left(\frac{C_2}{\tilde{d}_{p,0}}\right), \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Hier bezeichnet k_{nuc} , [(1/(m³s))/(kmol/m³)⁵], die Nukleationskonstante der Kernbildung, $c_{C,\infty}^{\text{sat}}$, [kmol/m³], die Sättigungskonzentration des Stoffes C und C_2 , [m], eine weitere Modellkonstante.

Entscheidend für die Entfaltung der neuen Phase ist, dass sich genügend Nukleationszentren mit hinreichender Größe, hier $\tilde{d}_{p,0}$, bilden können, da diese stabiler sind als kleinere Kerne und auf deren Kosten wachsen [Wed04]. Dabei lagern sich die Moleküle zu Nukleationskernen zusammen [Abr74], die dann die notwendigen Oberflächen bereitstellen, an die sich weitere Moleküle anlagern und so die Fällungsreaktion auslösen [AdP07]. Sobald ausreichend Nukleationszentren vorliegen, setzt die Phasenneubildung ein. Allerdings bedarf es einer, von der betrachteten Reaktion abhängigen, starken Übersättigung, um überhaupt eine Ausbildung von Nukleationskeimen zu erreichen. Dies liegt bei der homogenen Nukleation an der spontanen Bildung der Kerne, deren Bildungshäufigkeit proportional zu der relativen Übersättigung durch die Konzentration \tilde{c}_C ist. Da die Fällung selbst ein extrem schneller Vorgang ist, der jeweils innerhalb weniger Millisekunden abgeschlossen ist, ist häufig die Kinetik des Übersättigungsaufbaus bestimmend für die Geschwindigkeit der Partikelentstehung [SP02].

Der letzte Term in (III.5) trägt ebenfalls zur Reduktion von \tilde{c}_C bei und beschreibt die Abnahme der Konzentration infolge des Wachstums der Partikel,

$$\tilde{r}_g(\tilde{c}_C, \tilde{f}) = C_G \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\text{max}}} \tilde{G}(\tilde{c}_C) \tilde{d}_p \tilde{f} d(\tilde{d}_p).$$

Dabei ist C_G , [kmol/m³], die Wachstumskonstante des Modells, $\tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p)$, [1/m⁴], die Partikelgrößenverteilung und $\tilde{d}_{p,\text{max}}$, [m], eine obere Schranke des Äquivalentdurchmessers \tilde{d}_p , [m], der Partikel.

Die Funktion $\tilde{G}(\tilde{c}_C)$, [m/s], beschreibt den Wachstumsprozess und kann als unabhängig von der Größe der Partikel modelliert werden [HFS⁺07]. Die Wachstumsgeschwindigkeit ist proportional zur absoluten Übersättigung [JB02] und gegeben als

$$\tilde{G}(\tilde{c}_C) = k_G (\tilde{c}_C - c_{C,\infty}^{\text{sat}}),$$

mit der konstanten Wachstumsrate k_G , [m⁴/(kmols)]. An der Partikeloberfläche liegt dabei die Konzentration $c_{C,\infty}^{\text{sat}}$ der gesättigten Lösung vor, während in der Lösungsumge-

bung die Übersättigung \tilde{c}_C herrscht. Bedingt durch diesen Konzentrationsunterschied findet Diffusion von Molekülen in Partikelrichtung statt und ermöglicht das weitere Wachstum der gebildeten Partikel [JB02]. Dabei ist die Verweilzeit der Partikel im Reaktor entscheidend für ihr Wachstum [RDHM01], da hier gleichmäßige und runde Partikel simuliert werden, deren Wachstum schichtweise durch wiederholte Stoffaufnahme stattfindet [BS97], bis die Partikel aus dem Reaktor ausgetragen werden. Im Gegensatz zum Wachstum durch Agglomeration spricht man bei diesem ziebelartigen Wachstum von Granulation (layering) [LS96]. Da die relative Übersättigung die Geschwindigkeit der Partikelentstehung steuert, während die absolute Übersättigung das Partikelwachstum bestimmt, kann man sagen, dass ein Niederschlag umso feiner ausfällt, je schwerer er löslich ist [JB02].

Zusammen mit der Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung (III.3),

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{f} + \tilde{G}(\tilde{c}_C) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{d}_p} = 0 \quad \text{in } (0, \tilde{T}] \times \tilde{\Omega} \times (\tilde{d}_{p,0}, \tilde{d}_{p,\max})$$

und den inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen (II.10) sind nun alle Gleichungen zur Simulation der Ausfällungsreaktion gegeben und innerhalb des Modells über die kinetischen Parameter der einzelnen Gleichungen gekoppelt.

Um die Notwendigkeit möglichst realitätsnaher numerischer Simulationsrechnungen zu unterstreichen, sei noch einmal darauf hingewiesen, dass zwar die verfahrenstechnischen und apparativen Voraussetzungen für die Partikelproduktion gegeben sind, aber noch immer die geeigneten Testmethoden zur Untersuchung der grundlegenden physikalischen Mechanismen der Wachstumsprozesse fehlen und diese teilweise noch nicht untersucht und verstanden sind [LS96, WK04]. Schon aufgrund der sehr kleinen Zeitskalen bei der Partikelentstehung ist deren experimentelle Untersuchung, z.B. mittels Anemometern [TB00], mit einem hohen technischen Aufwand verbunden oder sogar nahezu unmöglich [SP02].

§2.1 Entdimensionierung der Transportgleichungen und der Populationsbilanz

Analog zu den Überlegungen über die Entdimensionierung der Navier–Stokes–Gleichungen im vorangegangenen Kapitel, sind auch hier die dimensionslosen Darstellungen der Transportgleichungen und der Populationsbilanz die Basis für alle weiterführenden numerischen Betrachtungen. Die Ähnlichkeitstheorie ermöglicht dabei eine Rückführung auf Modellprobleme, deren Simulationsergebnisse auf die originalen Fragestellungen übertragbar sind.

Den Ausgangspunkt bilden daher, wie schon in §1.3, die charakteristischen und di-

mensionslosen Kennzahlen, die eine Entdimensionierung der Gleichungen ermöglichen:

$$\tilde{\mathbf{u}} = u_\infty \mathbf{u}, \quad \tilde{p} = p_\infty p, \quad \tilde{t} = t_\infty t, \quad \tilde{x}_i = l_\infty x_i, \quad p_\infty = \rho u_\infty^2, \quad t_\infty = \frac{l_\infty}{u_\infty}.$$

Die entdimensionierten Navier–Stokes–Gleichungen ergeben sich für die Simulation der Modelle der chemischen Reaktion und der sich daraus entwickelnden Partikelpopulation entsprechend (II.10) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - Re^{-1} \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{0} \quad \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } (0, T] \times \Omega. \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Des Weiteren müssen hier noch die dimensionslosen, charakteristischen Konzentrationen sowohl für die Reaktanten als auch für das gelöste Produkt eingeführt werden, indem die dimensionsgebundenen Variablen in ein Produkt einer Referenzgröße und einer dimensionslosen Variablen separiert werden,

$$\tilde{c}_i = c_\infty c_i, \quad i \in \{A, B\}, \quad \tilde{c}_C = c_{C,\infty} c_C.$$

Durch Substitution der Variablen und Umstellen der Gleichungen können die Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen für die Konzentrationsfelder von \tilde{c}_A und \tilde{c}_B in eine von allen physikalischen Einheiten bereinigte Form überführt werden:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} - \frac{D_i}{u_\infty l_\infty} \Delta c_i + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i + k_R \frac{l_\infty c_\infty}{u_\infty} c_A c_B = 0 \quad \text{in } (0, T] \times \Omega. \quad (\text{III.7})$$

Zur Entdimensionierung der Gleichung für die Konzentration des Reaktionsproduktes \tilde{c}_C und der Populationsbilanz werden hier noch zusätzliche charakteristische Größen für die Partikelgrößenverteilung \tilde{f} und den Äquivalentdurchmesser der Partikel als dimensionslose Variablen eingeführt,

$$\tilde{f} = f_\infty f, \quad \tilde{d}_p = d_{p,\infty} d_p, \quad d_{p,\infty} = \tilde{d}_{p,\max}.$$

Darüber hinaus definiert man noch die charakteristischen Maßzahlen

$$c_{C,\infty} = c_{C,\infty}^{\text{sat}} \exp\left(\frac{C_2}{\tilde{d}_{p,0}}\right), \quad \text{und} \quad f_\infty = \frac{u_\infty}{C_G k_G d_{p,\infty}^3 l_\infty}.$$

Zur Entdimensionierung von Gleichung (III.5) wird diese mit dem Term $l_\infty c_{C,\infty}^{-1} u_\infty^{-1}$ multipliziert und das Integral mit $t = d_{p,\infty}^{-1} \tilde{d}_p$ substituiert. Um eine bessere Lesbarkeit und eine verkürzte Darstellung der entdimensionierten Gleichung zu ermöglichen,

werden noch die folgenden Konstanten eingeführt:

$$\Lambda_{\text{chem}} = k_{\text{R}} \frac{c_{\infty}^2 l_{\infty}}{c_{C,\infty} u_{\infty}}, \quad \Lambda_{\text{nuc}} = C_{\text{nuc}} \tilde{d}_{\text{p},0}^3 k_{\text{nuc}} \frac{l_{\infty} c_{C,\infty}^4}{u_{\infty}}, \quad \tilde{d}_{\text{p},0} = d_{\text{p},\infty} d_{\text{p},\min}.$$

Mit ihnen erhält man für die Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichung des gelösten Reaktionsproduktes c_C dessen entdimensionierte Darstellung,

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_C}{\partial t} - \frac{D_C}{u_{\infty} l_{\infty}} \Delta c_C + \mathbf{u} \cdot \nabla c_C - \Lambda_{\text{chem}} c_A c_B + \Lambda_{\text{nuc}} \max\{0, (c_C - 1)^5\} \\ + \left(c_C - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right) \int_{d_{\text{p},\min}}^1 d_{\text{p}}^2 f \, d(d_{\text{p}}) = 0 \quad \text{in } (0, T] \times \Omega. \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

Hier sei noch erwähnt, dass bei einer anderen Wahl der Konstanten f_{∞} ein zusätzlicher Faktor auf der linken Seite der Gleichung (III.8) auftreten würde.

Die Herleitung der dimensionslosen Populationsbilanz erfolgt analog zu der obigen Vorgehensweise. Ausgehend von Gleichung (III.3) erhält man so

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f + G(c_C) \frac{l_{\infty}}{d_{\text{p},\min}} \frac{\partial f}{\partial d_{\text{p}}} = 0 \quad \text{in } (0, T] \times \Omega \times (d_{\text{p},\min}, 1), \quad (\text{III.9})$$

mit der dimensionslosen Wachstumsrate,

$$G(c_C) = \frac{k_{\text{G}} c_{C,\infty}}{u_{\infty}} \left(c_C - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right).$$

§3 Diskretisierung des gekoppelten Systems

§3.1 Finite–Element–Methode für die Reaktionsgleichungen

Da die Reaktionsgleichungen für die Konzentrationen c_A und c_B der beiden Ausgangsstoffe durch den gleichen Typ einer skalaren Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichung beschrieben werden und zudem miteinander gekoppelt sind, wird für sie auch eine gemeinsame Strategie zur Diskretisierung verwendet.

Der Einfachheit halber wird diese zunächst am Beispiel einer linearen Konvektions–

Diffusions–Reaktionsgleichung der Form

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c}{\partial t} - \varepsilon \Delta c + \mathbf{u} \cdot \nabla c + r c &= f \quad \text{in } (0, T] \times \Omega, \\
 c &= c_D \quad \text{in } [0, T] \times \partial\Omega_D, \\
 \varepsilon \nabla c \cdot \mathbf{n} &= 0 \quad \text{in } [0, T] \times \partial\Omega_N, \\
 c(0, \cdot) &= c_0 \quad \text{in } \Omega,
 \end{aligned} \tag{III.10}$$

erläutert. Die Größe c entspricht hier der Konzentration eines Kontaminants, welches durch das Konvektionsfeld mit der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} transportiert wird. Dabei betrachtet man das Konvektionsfeld, ebenso wie den Reaktionskoeffizienten, der im Quellterm $r c$ den Reaktionsanteil modelliert, als zeitabhängige Größe. Zudem entspricht $\varepsilon > 0$ einem Diffusionskoeffizienten, der hier auch als ein Viskositätsparameter interpretiert werden kann. Für die Randbedingung gilt, dass $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$ ist, wobei $\partial\Omega_N$ dem Rand mit Neumann–Randbedingungen entspricht und $\partial\Omega_D$ dem Rand mit Dirichlet–Randbedingungen. Des Weiteren ist c_0 die Anfangskonzentration in Ω und c_D die vorgeschriebene Konzentration auf dem Rand $\partial\Omega_D$.

Analog zu den Navier–Stokes–Gleichungen im vorhergehenden Kapitel wird auch die Zeitdiskretisierung der skalaren Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen mit dem Zwischenschritt– θ –Verfahren realisiert,

$$\begin{aligned}
 c_k + \theta_1 \Delta t_k (-\varepsilon \Delta c_k + \mathbf{u}_k \cdot \nabla c_k + r_k c_k) \\
 = c_{k-1} - \theta_2 \Delta t_k (-\varepsilon \Delta c_{k-1} + \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{k-1} + r_{k-1} c_{k-1}) \\
 + \theta_3 \Delta t_k f_{k-1} + \theta_4 \Delta t_k f_k,
 \end{aligned} \tag{III.11}$$

mit dem konstanten Zeitschritt $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$ und den Parametern $\theta_1, \dots, \theta_4$. Dabei erhält man für die Wahl $\theta_1 = \theta_4 = 1, \theta_2 = \theta_3 = 0$ das Rückwärts–Euler–Verfahren und für $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = 0.5$ das Crank–Nicolson–Verfahren. Die Gleichung (III.11) kann hier als stationäre Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichung zum Zeitpunkt t_k verstanden werden und enthält jeweils einen Term für die Konvektion, die Diffusion und die Reaktion,

$$\begin{aligned}
 D &= \theta_1 \Delta t_k \varepsilon, \\
 C &= \theta_1 \Delta t_k \mathbf{u}_k, \\
 R &= 1 + \theta_1 \Delta t_k r.
 \end{aligned}$$

Im nächsten Schritt wird (III.11) mit der Finite–Element–Methode diskretisiert. Dazu wird die Gleichung mit geeigneten Testfunktionen multipliziert und in ihre variationelle Formulierung transformiert. Um eine einfache und gut lesbare Darstellung der Methode für die Modellgleichung zu erhalten, werden konforme Finite–Elemente und Dirichlet–

Randbedingungen betrachtet.

Sei V_D der Teilraum von $H^1(\Omega)$, dessen Elemente die Dirichlet–Randbedingungen erfüllen und V_0 der Teilraum von $H^1(\Omega)$, dessen Funktionen auf $\partial\Omega_D$ verschwinden. Damit liest sich die variationelle Formulierung von (III.11) wie folgt:

Finde $c_k \in V_D$, so dass

$$\begin{aligned} & (c_k, v) + \theta_1 \Delta t_k [(\varepsilon \nabla c_k, \nabla v) + (\mathbf{u}_k \cdot \nabla c_k + r_k c_k, v)] \\ &= (c_{k-1}, v) - \theta_2 \Delta t_k [(\varepsilon \nabla c_{k-1}, \nabla v) + (\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{k-1} + r_{k-1} c_{k-1}, v)] \\ & \quad + \theta_3 \Delta t_k (f_{k-1}, v) + \theta_4 \Delta t_k (f_k, v), \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

für alle $v \in V_0$ gilt.

Die Galerkin–Finite–Element–Formulierung von (III.12) erhält man, indem die unendlich dimensionalen Räume V_D und V_0 durch geeignete Finite–Element–Räume ersetzt werden. Da die Definition von Finite–Element–Räumen auf der zugrundeliegenden Triangulierung \mathcal{T}^h beruht, wird vorausgesetzt, dass diese die Kompatibilitätsbedingungen erfüllt [Cia78]. Die Galerkin–Finite–Element–Formulierung lautet also:

Finde $c_k^h \in V_D^h$, so dass

$$\begin{aligned} & (c_k^h, v^h) + \theta_1 \Delta t_k [(\varepsilon \nabla c_k^h, \nabla v^h) + (\mathbf{u}_k \cdot \nabla c_k^h + r_k c_k^h, v^h)] \\ &= (c_{k-1}^h, v^h) - \theta_2 \Delta t_k [(\varepsilon \nabla c_{k-1}^h, \nabla v^h) + (\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{k-1}^h + r_{k-1} c_{k-1}^h, v^h)] \\ & \quad + \theta_3 \Delta t_k (f_{k-1}, v^h) + \theta_4 \Delta t_k (f_k, v^h), \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

für alle $v^h \in V_0^h$ gilt.

Bei der numerischen Simulation von Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen ist es von Bedeutung, quantitative Aussagen zum Verhältnis zwischen Konvektion, Diffusion und Reaktion machen zu können, da die Galerkin–Finite–Element–Formulierung für konvektions- oder reaktionsdominante Gleichungen nicht numerisch stabil ist [RST08]. Diese Stabilitätsprobleme zeigen sich beispielsweise in stark ausgeprägten unphysikalischen Oszillationen, die in den berechneten Lösungen von Gleichung (III.13) im gesamten Gebiet Ω auftreten und diese unbrauchbar werden lassen. Da die den Fällungsprozess beschreibenden Gleichungen sowohl konvektions- als auch reaktionsdominant sind, gilt hier

$$0 < \varepsilon \ll \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(\Omega)},$$

$$0 < \varepsilon \ll \|r\|_{L^\infty(\Omega)}.$$

Ein charakteristisches Kennzeichen solcher konvektions- und reaktionsdominanten Gleichungen ist unter anderem das Auftreten von scharfen Grenzschichten in deren Lösungen. Ihre exakte numerische Simulation erfordert daher die Anwendung von Stabilisierungsmethoden, die einerseits die scharfen Grenzschichten berechnen können und andererseits das Auftreten der unphysikalischen Oszillationen verhindern [JS08].

§3.1.1 Die SUPG–Methode

Eine sehr populäre Finite–Elemente–Stabilisierungsmethode für konvektionsdominante Probleme ist die sogenannte *streamline–upwind Petrov–Galerkin method*, die SUPG abgekürzt wird [BH82, HB79]. Diese addiert künstliche Diffusion in Stromlinienrichtung

$$\sum_{K \in \mathcal{T}^h} \tau_K (\text{Residuum von (III.11)}, \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \quad (\text{III.14})$$

zur Gleichung (III.13). Die Parameterfamilie $\{\tau_K\}$ ist abhängig von den verwendeten Gitterzellen $K \in \mathcal{T}^h$ und kann auf verschiedene Arten bestimmt werden. Das Residuum der Gleichung (III.11) ist hier definiert als die Differenz zwischen der linken und der rechten Seite.

Addiert man die SUPG–Stabilisierung zum diskreten Problem (III.13), erhält man

$$\begin{aligned} & (c_k^h, v^h) + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) (c_k, \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \\ & + \theta_1 \Delta t_k \left[(\varepsilon \nabla c_k^h, \nabla v^h) + (\mathbf{u}_k \cdot \nabla c_k^h + r_k c_k^h, v^h) \right. \\ & \left. + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) ((-\varepsilon \Delta c_k + \mathbf{u}_k \cdot \nabla c_k + r_k c_k), \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \right] \\ = & (c_{k-1}^h, v^h) + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) (c_{k-1}, \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \\ & - \theta_2 \Delta t_k \left[(\varepsilon \nabla c_{k-1}^h, \nabla v^h) + (\mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{k-1}^h + r_{k-1} c_{k-1}^h, v^h) \right. \\ & \left. + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) ((-\varepsilon \Delta c_{k-1} + \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{k-1} + r_{k-1} c_{k-1}), \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla v^h)_K \right] \\ & + \theta_3 \Delta t_k \left[(f_{k-1}, v^h) + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) (\Delta t_k f_{k-1}, \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \right] \\ & + \theta_4 \Delta t_k \left[(f_k, v^h) + \sum_{K \in \mathcal{T}^h} (\tau_K \theta_1 \Delta t_k) (\Delta t_k f_k, \mathbf{u}_k \cdot \nabla v^h)_K \right]. \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Die wichtigsten und schwierigsten Fragen bei der SUPG–Stabilisierung treten bei der Wahl der Parameterfamilie $\{\tau_K\}$ auf, was auch ein Grund für die vielfältige Literatur zur Stabilisierung von Konvektions–Diffusionsgleichungen ist. Bei zeitabhängigen Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen, die beispielsweise Fällungsreaktionen beschreiben, tritt besonders bei kleinen Zeitschrittweiten Δt_k die Situation auf, dass, neben der Konvektionsdominanz, die Reaktion die Diffusion und die Konvektion

dominiert [JS08].

Daher müssen geeignete Parameterfamilien die reaktionsbedingten Eigenschaften der Gleichung berücksichtigen. In der Literatur finden sich mehrere Ansätze und Vorschläge für dieses Problem, beispielsweise in [Cod00, FV00, Hau02, KLR02, LR06]. Diese verschiedenen Parameterfamilien wurden, zusammen mit anderen Stabilisierungsmethoden, in [JS08] untersucht und verglichen. Dabei zeigte sich, dass die Wahl von [KLR02, LR06] bei den SUPG-Verfahren für die gewählten Modelle (3-Körper-Rotationsproblem [LeV96] und Hindernis mit wechselnder Höhe [JMT97]) die besten Ergebnisse in Bezug auf Genauigkeit und Rechenzeiten lieferte. Die dort vorgestellte Wahl der Parameterfamilie $\{\tau_K\}$ lautet für (bi-) lineare Finite-Element-Methoden

$$\tau_K \sim \min \left\{ \frac{h_K}{2\theta_1 \Delta t_k \|\mathbf{u}_k\|_2}, \frac{1}{1 + \theta_1 \Delta t_k r_k}, \frac{h_K^2}{\theta_1 \Delta t_k \varepsilon} \right\}. \quad (\text{III.16})$$

Dabei wurde aus numerischen Gesichtspunkten die in [LR06] verwendete $\|\cdot\|_{L^\infty(K)}$ -Norm durch die in anderen Ansätzen verwendete $\|\cdot\|_2$ -Norm ersetzt [JS08]. Der Parameter h_K entspricht dabei dem Durchmesser der Gitterzelle K in der Konvektionsrichtung, wie in [JK07, FV00] vorgeschlagen und diskutiert. Allerdings ist eine geeignete Wahl für h_K , für den Fall einer starken Dominanz der Reaktion, auch über die Konvektion, wie dies für kleine Zeitschrittweiten der Fall ist,

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + \theta_1 \Delta t_k r_k} &\leq \frac{h_K}{2\theta_1 \Delta t_k \|\mathbf{u}_k\|_2}, \\ \Leftrightarrow 2\theta_1 \Delta t_k \|\mathbf{u}_k\|_2 &\leq h_K + h_K \theta_1 \Delta t_k r_k, \end{aligned}$$

für Δt_k sehr klein gegenüber h_K ,

weniger bedeutsam, da der Reaktionsbeitrag hier alle anderen Parameter dominiert und der Reaktionsterm die Größe h_K nicht enthält [JS08].

§3.1.2 Finite-Element-Methode mit Flux-Corrected-Transport

Motiviert durch die eher schlechten Erfahrungen mit der SUPG-Methode §3.1.1 und dem Upwind-Schema, beispielsweise in [JMR⁺], wurden umfangreiche numerische Studien zu stabilisierten Finite-Element-Methoden für skalare Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen durchgeführt [JS08, JS09]. Diese Studien verglichen neben der SUPG-Methode und einem 1-level local projection stabilization (LPS) Verfahren, auch mehrere Spurious Oscillations at Layers Diminishing (SOLD) Verfahren [JK07, JK08c] und Finite-Element-Method Flux-Corrected-Transport (FEM-FCT) Verfahren [Kuz09, KM05, KMT04], jeweils für lineare und bilineare Finite-Elemente.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die ausführlichen Untersuchungen in [JS08, JS09] zu dem Schluss kommen, dass die FEM–FCT–Verfahren erheblich bessere Ergebnisse liefern als alle anderen Verfahren. Im Besonderen ist das lineare FEM–FCT–Schema aus [Kuz09] zu nennen, da dort ein sehr gutes Verhältnis von Genauigkeit und Effizienz erreicht wird. Daher wird dieses auch in den numerischen Studien zur Fällungsreaktion einen Schwerpunkt bilden und im Folgenden kurz eingeführt und erläutert werden.

Die FEM–FCT–Verfahren wurden ursprünglich für Transportgleichungen, d.h. Gleichung der Gestalt (III.10) mit $\varepsilon = r = f = 0$, entwickelt. Ihre Anfänge gehen auf [BB73] zurück und ihre grundlegende Methodik ist nicht die Editierung der Bilinearform der Finite–Element–Diskretisierung, wie dies andere Stabilisierungsansätze, z.B. die SUPG–Verfahren, machen, sondern eine Modifikation auf der algebraischen Ebene. Um die Vorgehensweise zu präzisieren, wird für das Modellproblem (III.10) mit dem Crank–Nicolson–Verfahren und der Galerkin–Finite–Element–Methode eine Matrix/Vektor–Darstellung gewählt:

$$(M_C + 0.5\Delta t_k A) \underline{u}_k = (M_C + 0.5\Delta t_k A) \underline{u}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_k \quad \text{||I.17}$$

M_C entspricht hier der konsistenten Massenmatrix und die Matrix A symbolisiert die Summe aus Diffusion, Konvektion und Reaktion. Die Notationen \underline{u}_k , \underline{f}_k , etc. sollen jeweils einen Vektor mit den unbekanntem Koeffizienten der Finite–Element–Methode repräsentieren.

Eines der grundlegenden Prinzipien der FEM–FCT–Verfahren beruht auf der physikalischen Notwendigkeit, nur solche Lösungen von (III.10) als sinnvoll zu erachten, die *positivitätserhaltend* sind; das heißt Lösungen, für die gilt:

$$c_0(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad \text{und} \quad c \geq 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega_D \quad \implies \quad c(t, \mathbf{x}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \forall t > 0.$$

Mit anderen Worten, es sollten nur Konzentrationsfelder auftreten, die keine negativen Werte annehmen, da diese Unterschwünge nicht den physikalischen und chemischen Gesetzmäßigkeiten entsprechen würden. Allerdings geht diese Eigenschaft der Nichtnegativität der Konzentrationsfelder im Allgemeinen bei einer Finite–Element–Diskretisierung der kontinuierlichen Gleichungen verloren [Kuz09]. Um diese dennoch zu erhalten, benutzt man unter anderem das Konzept der sogenannten M –Matrizen, das im Folgenden kurz vorgestellt wird.

Eine reguläre Matrix A heißt *invers–monoton*, wenn ihre Inverse A^{-1} existiert und die Ungleichung $A^{-1} \geq 0$ komponentenweise erfüllt. Diese Eigenschaft erlaubt die Definition eines diskreten Vergleichsprinzips, welches besagt, dass für invers–monotone Matrizen A ,

$$A\mathbf{v} \leq A\mathbf{w} \quad \implies \quad \mathbf{v} \leq \mathbf{w},$$

gilt. In diesem Zusammenhang bilden die sogenannten M –Matrizen die wichtigste Klas-

se invers-monotoner Matrizen [RST08]. Diese definiert man als die invers-monotonen Matrizen, die zusätzlich noch die Eigenschaft $a_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$ erfüllen. Da allerdings die Berechnung der inversen Matrix sehr aufwendig sein kann und daher die Bedingung $A^{-1} \geq 0$ nur mit großem Aufwand überprüft werden kann, verwendet man meist leichter zu kontrollierende Kriterien [RST08]. Beispielweise sind alle strikt diagonaldominanten Matrizen mit $a_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$ und $a_{ii} > 0 \forall i$ M -Matrizen [QV94].

Darüber hinaus wird bei der Modifikation der algebraischen Ebene auch die Definition der L -Matrizen benutzt. Dabei heißt eine Matrix A L -Matrix, wenn für $i, j \in \{1, \dots, n\}$ die Ungleichungen $a_{ii} \geq 0$ und $a_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$ gelten [KA00].

Der erste Schritt des FEM-FCT-Verfahrens ergibt sich nun aus der folgenden Überlegung, die mit dem *Maximumprinzip*, hier für die lineare Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichung (III.10), beginnt:

Sei $\mathbf{u} \in C(\bar{\Omega})$ und $r \in C(\bar{\Omega})$ und r auf Ω nichtnegativ, was für Fällungsreaktionen immer erfüllt ist. Dann gilt für jedes $c \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, dass c sein Maximum auf dem Rand von Ω annimmt.

Wenn das Maximumprinzip für das stetige Problem erfüllt ist, dann sollte es auch für die diskrete Gleichung gelten. Dabei ist diese Forderung erfüllt, wenn die Systemmatrix der diskreten Gleichung eine M -Matrix ist. Dies garantiert zusätzlich auch, dass die Lösung positiverhaltend ist.

Daher beginnt das FEM-FCT-Verfahren mit der Definition der Matrizen

$$\begin{aligned} L &= A + D, \\ D &= (d_{ij}), \quad d_{ij} = -\max\{0, a_{ij}, a_{ji}\} = \min\{0, -a_{ij}, -a_{ji}\} \text{ für } i \neq j, \\ &\quad d_{ii} = -\sum_{j=1, j \neq i} d_{ij}, \\ M_L &= \text{diag}(m_i), \quad m_i = \sum_{j=1}^N m_{ij}, \end{aligned} \tag{III.18}$$

wobei N der Anzahl der Freiheitsgrade entspricht. Die Zeilen- und Spaltensummen der Matrix D sind Null und die Matrix L besitzt keine positiven Nichtdiagonaleinträge. Des Weiteren ist M_L eine Diagonalmatrix, die durch das sogenannte *mass lumping* (deutsch: Masse-Klumpen [HB06]) erzeugt wird. Anstelle der Gleichung (III.18) wird nun die Gleichung

$$(M_L + 0.5\Delta t_k L) \underline{u}_k = (M_L + 0.5\Delta t_k L) \underline{u}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_k \tag{III.19}$$

betrachtet. Diese repräsentiert die algebraische Darstellung eines stabilen Verfahrens niedriger Ordnung. Die Lösung von (III.19) zeigt keine störenden und unphysikalischen Oszillationen mehr, allerdings werden auftretende Grenzschichten verschmiert, da der

Operator auf der linken Seite zuviel numerische Diffusion produziert.

Im nächsten Schritt des FEM–FCT–Verfahrens wird die rechte Seite von (III.19) so modifiziert, dass die Diffusion, dort wo sie nicht benötigt wird, wieder entfernt wird. Diese Modifikation erfolgt durch die Addition eines zusätzlichen Vektors derart, dass die unphysikalischen Oszillationen weiterhin unterdrückt werden,

$$\begin{aligned} (M_L + 0.5\Delta t_k L) \underline{u}_k &= (M_L + 0.5\Delta t_k L) \underline{u}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_{k-1} + 0.5\Delta t_k \underline{f}_k \\ &\quad + \underline{f}^* (\underline{u}_k, \underline{u}_{k-1}). \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

Der Ansatz zur Bestimmung des Vektors \underline{f}^* benutzt den Residuumsvektor von (III.19) und (III.17)

$$\begin{aligned} \underline{r} &= (M_L + 0.5\Delta t_k L - (M_C + 0.5\Delta t_k A)) \underline{u}_k \\ &\quad - (M_L + 0.5\Delta t_k L - (M_C - 0.5\Delta t_k A)) \underline{u}_{k-1} \\ &= (M_L - M_C) (\underline{u}_k - \underline{u}_{k-1}) + \Delta t_k D (0.5\underline{u}_k + 0.5\underline{u}_{k-1}). \end{aligned}$$

Dabei muss der Residuumsvektor adäquat gewichtet werden. Zur Definition dieser Gewichte wird \underline{r} für $i = 1, \dots, N$ in die einzelnen Flüsse

$$\begin{aligned} \underline{r}_i &= \sum_{j=1}^N \underline{r}_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^N [m_{ij} (\underline{u}_{k,i} - \underline{u}_{k,j}) - m_{ij} (\underline{u}_{k-1,i} - \underline{u}_{k-1,j}) \\ &\quad - \Delta t_k 0.5 d_{ij} (\underline{u}_{k,i} - \underline{u}_{k,j}) - \Delta t_k 0.5 d_{ij} (\underline{u}_{k-1,i} - \underline{u}_{k-1,j})] \end{aligned} \quad (\text{III.21})$$

zerlegt. In diesem Zusammenhang können die Residuumsflüsse auch als

$$\begin{aligned} \underline{r}_{ij} &= m_{ij} (\underline{u}_{k,i} - \underline{u}_{k-1,i}) - m_{ij} (\underline{u}_{k,j} - \underline{u}_{k-1,j}) \\ &\quad - 0.5\Delta t_k d_{ij} (\underline{u}_{k,i} - \underline{u}_{k-1,i}) + 0.5\Delta t_k d_{ij} (\underline{u}_{k,j} - \underline{u}_{k-1,j}) \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

geschrieben werden [Kuz09]. Der Ansatz für den zusätzlichen Korrekturvektor ist gegeben als

$$\underline{f}_i^* (\underline{u}_k, \underline{u}_{k-1}) = \sum_{j=1}^N \alpha_{ij} \underline{r}_{ij}, \quad i = 1, \dots, N,$$

mit den Gewichten $\alpha_{ij} \in [0, 1]$. Sollten die Gewichte zusätzlich vom Residuumsvek-

tor abhängen, erhält man nichtlineare FEM–FCT–Verfahren, die in [KMT04, KM05] beschrieben sind. Für den Fall, dass die Gewichte alle gleich Eins sind, erhält man die Galerkin–Finite–Element–Methode (III.17) zurück [JS08].

Dem linearen FEM–FCT–Verfahren, dass in [Kuz09] beschrieben wird, liegt folgende Idee zugrunde: Man ersetzt \underline{u}_k in Gleichung (III.22) durch eine Approximation, die mit einem expliziten Schema berechnet wird. Zu diesem Zweck, definiert man einen Zwischenwert

$$\underline{u}_{k-1/2} := \frac{\underline{u}_k + \underline{u}_{k-1}}{2}$$

und setzt diesen in (III.22) ein

$$\begin{aligned} r_{ij} = & 2m_{ij} (\underline{u}_{k-1/2,i} - \underline{u}_{k-1,i}) - 2m_{ij} (\underline{u}_{k-1/2,j} - \underline{u}_{k-1,j}) \\ & - \Delta t_k d_{ij} (\underline{u}_{k-1/2,i} - \underline{u}_{k-1/2,j}). \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

Die Approximation von $\underline{u}_{k-1/2}$ kann mittels des Vorwärts–Euler–Verfahrens berechnet werden, indem man im diskreten Zeitpunkt t_{k-1} einen halben Zeitschritt $\Delta t_k/2$ macht,

$$\tilde{\underline{u}} = \underline{u}_{k-1} - \frac{\Delta t_k}{2} M_L^{-1} (L\underline{u}_{k-1} - \underline{f}_{k-1}). \quad (\text{III.24})$$

Die numerischen Flüsse des linearen FEM–FCT–Verfahrens erhält man dann durch Einsetzen dieser Approximation in (III.23),

$$r_{ij} = \Delta t_k [m_{ij} (\underline{v}_{k-1/2,i} - \underline{v}_{k-1/2,j}) - d_{ij} (\tilde{u}_i - \tilde{u}_j)],$$

mit den abkürzenden Schreibweisen

$$\begin{aligned} \underline{v}_{k-1/2,i} &= \left(M_L^{-1} (\underline{f}_{k-1} - L\underline{u}_{k-1}) \right)_i, \\ \tilde{u}_i &= \underline{u}_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2} \underline{v}_{k-1/2,i}. \end{aligned}$$

Zur Berechnung der Gewichte wird der Algorithmus von Zalesak [Zal79] benutzt. Eine Motivation für diesen, findet sich zusammen mit einer ausführlichen Diskussion in [KM05]. Analog zu [JS08] wird hier aus Gründen der Vollständigkeit der Algorithmus nur kurz wiedergegeben:

1. Berechne die Summen der positiven und der negativen antidiffusiven Flüsse im Knoten i

$$P_i^+ = \sum_{j=1, j \neq i}^N \max \{0, r_{ij}\}, \quad P_i^- = \sum_{j=1, j \neq i}^N \min \{0, r_{ij}\},$$

2. Berechne den Abstand zu einem lokalen Extremum der Hilfslösung

$$Q_i^+ = \max \left\{ 0, \max_{j=1, \dots, N, j \neq i} (\tilde{u}_j - \tilde{u}_i) \right\}, \quad Q_i^- = \min \left\{ 0, \min_{j=1, \dots, N, j \neq i} (\tilde{u}_j - \tilde{u}_i) \right\},$$

3. Berechne die nodalen Korrekturfaktoren

$$R_i^+ = \min \left\{ 1, \frac{m_i Q_i^+}{P_i^+} \right\}, \quad R_i^- = \min \left\{ 1, \frac{m_i Q_i^-}{P_i^-} \right\},$$

4. Berechne die Gewichte

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \min \{ R_i^+, R_j^- \} & \text{wenn } r_{ij} > 0 \\ \min \{ R_i^-, R_j^+ \} & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Hilfslösung \tilde{u} dient der Einhaltung des Maximumprinzips [JS08] und da sie in (III.24) mit einer expliziten Methode berechnet wurde, muss eine CFL-Bedingung erfüllt werden, um die Stabilität der Rechnung zu garantieren. Nach [KM05, Kuz09] ist diese CFL-Bedingung

$$\Delta t_k < 2 \min_i \frac{m_i}{l_{ii}}, \quad (\text{III.25})$$

und sie wird in allen folgenden Simulationsrechnungen erfüllt [JR10].

§3.2 Algorithmus zur numerischen Lösung

In diesem Abschnitt wird eine detaillierte Beschreibung der numerischen Methoden zur Lösung des gekoppelten Systems vorgestellt. Eine allgemeine Klassifizierung von gekoppelten Problemen und eine Definition des Begriffes findet man in [Zie84, ZC88]. Dort definiert man ein *gekoppeltes Problem* als mathematische Problemstellung, die auf mehreren Gebieten unterschiedliche physikalische Eigenschaften beschreiben kann und aus deren Formulierung kein Satz abhängiger Variablen eliminiert werden kann. Darüber hinaus kann das Problem in keinem der Gebiete unabhängig von den Lösungen in den anderen Gebieten gelöst werden.

Die hier betrachtete Fällungsreaktion ordnet sich in diesem Kontext in die Problemklasse ein, deren räumliche Definitionsgebiete der untersuchten physikalischen und chemischen Effekte vollständig übereinstimmen [Zie84].

Bei der Lösung des gekoppelten Systems wird, im Gegensatz zu einem monolithischen Lösungsansatz, bei dem die gekoppelten Gleichungen als ein System gelöst werden, ein partitionierter Lösungsansatz verfolgt. Dieser hat nicht den Nachteil, dass

sich bei der simultanen Lösung meist Eigenschaften der Teilprobleme, wie beispielsweise dünnbesetzte Matrizen, nicht auf das Gesamtsystem vererben und ermöglicht, da die Systemgleichungen nur schwach gekoppelt sind, eine sequentielle Lösungsstrategie. Die Teilprobleme werden also getrennt voneinander gelöst und die Kopplungseinflüsse werden durch Geschwindigkeits- und Konzentrationsfelder übertragen. Dabei hat die sequentielle Lösungsstrategie den Vorteil, dass bei der Implementierung des Lösungsalgorithmus auf jedes Teilproblem gesondert eingegangen werden kann und dadurch jeweils spezielle Lösungsstrategien zum Einsatz kommen können. Allerdings hat dies den Nachteil, dass Stabilisierungs- und Konvergenzaussagen sehr erschwert werden [FP80].

Als erster Schritt bei dieser konzeptionellen Herangehensweise erfolgt eine Zeitdiskretisierung aller Systemgleichungen mit einer einheitlichen Zeitschrittlänge. Dieser Ansatz führt in jedem diskreten Zeitpunkt zu einem gekoppelten System von Gleichungen, das im Raum linearisiert, diskretisiert und iterativ gelöst werden muss.

Die Navier–Stokes–Gleichungen (III.6) bilden hier den Ausgangspunkt, da sie weder von den Konzentrationsfeldern c_A , c_B und c_C noch von der Partikelgrößenverteilung f abhängen. Darüber hinaus sind die Navier–Stokes–Gleichungen über das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} der zugrundeliegenden Strömung mit den Konvektionstermen der anderen Gleichungen des gekoppelten Systems verbunden. Analog zur Zeitdiskretisierung der Navier–Stokes–Gleichungen im letzten Kapitel wird auch hier ein Zwischenschritt- θ -Verfahren angewandt. Allerdings ist hier für die betrachteten Anwendungen, im Gegensatz zu (II.35), der Vektor der rechten Seite $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ gesetzt, weshalb die entsprechenden Terme aus (II.35) entfallen. Außerdem wird, bei den Rechnungen mit einem zweidimensionalen Reaktor, an Stelle des Deformationstensors $\mathbb{D}(\mathbf{u}_k)$ die Laplace–Operator Schreibweise $\Delta \mathbf{u}_k$ verwendet.

In den numerischen Simulationen im nächsten Kapitel wird immer das Crank–Nicolson–Verfahren, $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = 0.5$, zur Zeitdiskretisierung benutzt, da es in numerischen Studien zu inkompressiblen laminaren Strömungen ein gutes Verhältnis von Genauigkeit zu Effizienz zeigte [JMR06]. Insbesondere im Vergleich zum impliziten Rückwärts–Euler–Verfahren, $\theta_1 = \theta_4 = 1$, $\theta_2 = \theta_3 = 0$, erwies es sich als wesentlich exakter [Joh04b, JMR06]. Das Crank–Nicolson–Verfahren geht auf [CN47] zurück und ist ein implizites Einschritt–Verfahren, das auf den Ideen der Finite–Differenzen–Verfahren basiert. Dabei ist es ein A-stabiles, aber nicht stark A-stabiles Verfahren zweiter Ordnung.

Im nächsten Schritt wird das System mit einer Fixpunktiteration linearisiert (Oseen–Gleichungen) und mit einer inf–sup stabilen Finite–Element–Methode im Raum diskretisiert, wobei im Folgenden das Q_2 Finite–Element für die Strömungsgeschwindigkeit und das P_1^{disc} Finite–Element für den Druck verwendet werden. Dieses Paar von Finite–Element–Räumen zeigte sich in numerischen Untersuchungen als eine der besten Möglichkeiten zur Diskretisierung der inkompressiblen (laminaren) Navier–Stokes–Gleichungen [GS00, Joh04b, Joh06b]. Da in den numerischen Simulationen auch lami-

nare Strömungen betrachtet werden, ist für diese weder eine Stabilisierung der räumlichen Diskretisierung der Navier–Stokes–Gleichungen [BBJL07] noch eine Anwendung von Turbulenzmodellen notwendig [RST08]. Nach der Lösung der Navier–Stokes–Gleichungen zum diskreten Zeitpunkt t_k , ist das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}_k berechnet, das über die Kopplung in die Konvektionsterme der anderen Systemgleichungen einfließt. Danach werden zuerst die Reaktionsgleichungen der beiden Reaktanten gelöst und im Anschluss die Gleichung des Reaktionsproduktes und die Populationsbilanz der Partikel.

Dazu wird das gekoppelte nichtlineare System (III.7) für die Konzentrationsfelder der Reaktanten c_A und c_B analog zu den Navier–Stokes–Gleichungen mit dem Crank–Nicolson–Verfahren zeitlich diskretisiert und anschließend im diskreten Zeitpunkt t_k mit einer Fixpunktiteration gelöst. Dabei besteht jeder Schritt der Iteration aus zwei Teilschritten:

1. Löse die Diskretisierung von (III.7) für $c_{A,k}$ mit der gegenwärtig verfügbaren Approximation von $c_{B,k}$.
2. Danach löse die Diskretisierung von (III.7) für $c_{B,k}$ mit der in Teilschritt 1 berechneten Lösung von $c_{A,k}$.

Die neue Approximation von c_A zum Zeitpunkt t_{k+1} wird also mit der verfügbaren Approximation von c_B zum Zeitpunkt t_k berechnet und danach wird unter Verwendung dieser Approximation von c_A der neue Wert von c_B in t_{k+1} bestimmt. Man löst folglich mit $c_{B,k}^{(0)} = c_{B,k-1}$ die Gleichungen

$$\begin{aligned} & c_{A,k}^{(i)} + \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_A}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{A,k}^{(i)} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla c_{A,k}^{(i)} + k_R \frac{l_\infty c_\infty}{u_\infty} c_{A,k}^{(i)} c_{B,k}^{(i-1)} \right) \\ &= c_{A,k-1} + \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_A}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{A,k-1} + \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{A,k-1} + k_R \frac{l_\infty c_\infty}{u_\infty} c_{A,k-1} c_{B,k-1} \right) \end{aligned} \quad (\text{III.26})$$

und

$$\begin{aligned} & c_{B,k}^{(i)} + \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_B}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{B,k}^{(i)} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla c_{B,k}^{(i)} + k_R \frac{l_\infty c_\infty}{u_\infty} c_{A,k}^{(i)} c_{B,k}^{(i)} \right) \\ &= c_{B,k-1} + \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_B}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{B,k-1} + \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{B,k-1} + k_R \frac{l_\infty c_\infty}{u_\infty} c_{A,k-1} c_{B,k-1} \right), \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

für $i = 1, 2, \dots$ im Reaktor Ω . Die Iteration wird beendet, wenn das Residuum des gekoppelten Systems hinreichend klein ist, wobei das Stopp–Kriterium immer nur nach dem Durchlauf beider Teilschritte der Fixpunktiteration geprüft wird. Bemerkenswert ist zudem, dass nur der Term, der die chemische Reaktion beschreibt, aktualisiert

wird. Bei den Gleichungen (III.26) und (III.27) bedeutet dies, dass die rechte Seite unverändert bleibt.

Nach der Berechnung der beiden Konzentrationsfelder der Edukte, kann im nächsten Schritt des Algorithmus die Konzentration des Reaktionsproduktes c_C berechnet werden. Um diese Rechnung zu erleichtern, werden die beiden letzten Terme von (III.8) bezüglich c_C in der Zeit explizit behandelt. Dies führt, nach der Diskretisierung in der Zeit, zu der folgenden linearen Gleichung,

$$\begin{aligned}
& c_{C,k} + \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_C}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{C,k} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla c_{C,k} \right) \\
= & c_{C,k-1} - \frac{\Delta t_k}{2} \left(-\frac{D_C}{u_\infty l_\infty} \Delta c_{C,k-1} + \mathbf{u}_{k-1} \cdot \nabla c_{C,k-1} \right) \\
& + \frac{\Delta t_k}{2} \left[\Lambda_{\text{chem}} (c_{A,k-1} c_{B,k-1} + c_{A,k} c_{B,k}) \right. \\
& \left. - \Lambda_{\text{nuc}} (\max \{0, (c_{C,k-2} - 1)^5\} + \max \{0, (c_{C,k-1} - 1)^5\}) \right. \\
& \left. - \left(c_{C,k-2} - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right) \int_{d_{p,\min}}^1 d_p^2 f_{k-2} d(d_p) \right. \\
& \left. - \left(c_{C,k-1} - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right) \int_{d_{p,\min}}^1 d_p^2 f_{k-1} d(d_p) \right], \tag{III.28}
\end{aligned}$$

welche einer linearen Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichung zum Zeitpunkt t_k entspricht. Bei der räumlichen Diskretisierung und der Stabilisierung dieser Gleichung werden ebenfalls das lineare FEM–FCT–Verfahren mit dem Q_1 Finite–Element oder eine SUPG–Stabilisierung angewandt. Nachdem die Gleichung (III.28) gelöst ist, sind alle Konzentrationsfelder im Zeitpunkt t_k bekannt.

Die Transportgleichung (III.9), die die Populationsbilanz modelliert, ist, im Gegensatz zu den bisherigen Gleichungen, in einem höher–dimensionalen Gebiet definiert. Wie in §1 ausgeführt, ist die betrachtete innere Koordinate die Partikelgröße des Niederschlags der Fällungsreaktion. Für jede weitere zu simulierende Partikeleigenschaft würde eine Dimension hinzukommen. Die erhöhte Anzahl der Dimensionen ist auch der Grund, warum man eine teurere und aufwendigere Lösung erwartet als bei den anderen Gleichungen des gekoppelten Systems. Daher sollen verschiedene Herangehensweisen zur Diskretisierung von (III.9) untersucht werden. Dabei sollen sowohl Verfahren höherer Ordnung als auch Verfahren niedriger Ordnung miteinander in Relation gesetzt werden. Das Ziel ist ein Vergleich von aufwendigen und weniger teuren Verfahren im Hinblick auf die Genauigkeit und die benötigten Rechenzeiten.

Der erste Ansatz, der untersucht werden soll, ist das lineare FEM–FCT–Verfahren, das in §3.1.2 beschrieben ist. Da die FEM–FCT–Verfahren ursprünglich für Transport–

gleichungen entwickelt wurden, können sie gut auf Gleichungen vom Typ (III.9) angewandt werden. Nach der Diskretisierung in der Zeit, wird die Populationsbilanz (III.9) mit der Galerkin–Finite–Element–Methode mit dem Q_1 Finite–Element im Raum diskretisiert. Auf die dabei assemblierten Matrizen wird dann das obige lineare FEM–FCT–Verfahren angewandt, da für dieses Schema akkurate und genaue Lösungen erwartet werden können [Kuz09].

Allerdings sind die FEM–FCT–Verfahren aus verschiedenen Gründen recht teuer. Einmal, weil die Assemblierung von Finite–Element–Matrizen in höheren Dimensionen Quadraturregeln erfordert, die hinreichend viele Quadraturpunkte einbeziehen und die Anwendung solcher Verfahren zur numerischen Integration in drei oder mehr Dimensionen sehr zeitintensiv sind [Joh06b]. Des Weiteren wird die Flusskorrektur (engl.: flux–correction) mit steigender Anzahl von Freiheitsgraden und steigender Konnektivität der Matrixeinträge immer aufwendiger und damit teurer. Unglücklicherweise treten bei höher–dimensionalen Problemen, wie Gleichung (III.9), beide potentielle Schwierigkeiten auf und darüber hinaus erfordert das Verfahren zusätzlich die Lösung eines linearen Gleichungssystems in jedem diskreten Zeitschritt, was die Rechenzeit noch weiter verlängert.

Aus diesem Grund sollen auch weniger aufwendige Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz untersucht und mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren verglichen werden. Dazu werden im nächsten Kapitel Simulationen mit dem expliziten und dem impliziten Euler–Verfahren mit einem Upwind–Finite–Differenzen–Verfahren, [LeV92], präsentiert.

Beim expliziten Euler–Verfahren wird, wie bei allen expliziten Verfahren, der zukünftige Zustand des System aus dem gegenwärtig Bekannten berechnet. In diesem Fall sind dies das Strömungsfeld der Lösung \mathbf{u}_k^h und das Konzentrationsfeld des gelösten Produkts $c_{C,k}^h$. Daraus ergibt sich die Darstellung zur Berechnung der Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt t_k ,

$$f_k^h = f_{k-1}^h - \Delta t_k \left(\mathbf{u}_k^h \cdot \nabla f_{k-1}^h + \frac{k_G c_{C,\infty} l_\infty}{u_\infty d_{p,\infty}} \left(c_{C,k}^h - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right) \frac{\partial f_{k-1}^h}{\partial d_p} \right). \quad (\text{III.29})$$

Die beiden Konvektionsterme auf der rechten Seite wurden hier mit einem Upwind–Verfahren diskretisiert. Betrachtet man beispielsweise als Stützstelle den Knoten $(\mathbf{x}, d_{p,i})$, dann approximiert das Upwind–Verfahren den Konvektionsterm im Eigenschaftsraum bezüglich der inneren Koordinate in $(\mathbf{x}, d_{p,i})$ durch

$$\left(G_k^h \frac{\partial f_{k-1}^h}{\partial d_p} \right) (\mathbf{x}, d_{p,i})$$

$$\approx \begin{cases} G_k^h(\mathbf{x}) \frac{f_{k-1}^h(\mathbf{x}, d_{p,i}) - f_{k-1}^h(\mathbf{x}, d_{p,i-1})}{d_{p,i} - d_{p,i-1}} & \text{falls } G_k^h(\mathbf{x}) \geq 0, \\ G_k^h(\mathbf{x}) \frac{f_{k-1}^h(\mathbf{x}, d_{p,i+1}) - f_{k-1}^h(\mathbf{x}, d_{p,i})}{d_{p,i+1} - d_{p,i}} & \text{falls } G_k^h(\mathbf{x}) < 0 \end{cases} \quad (\text{III.30})$$

mit

$$G_k^h(\mathbf{x}) = \frac{k_G c_{C,\infty} l_\infty}{u_\infty d_{p,\infty}} \left(c_{C,k}^h(\mathbf{x}) - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right).$$

Hier sind die beiden Stützstellen $(\mathbf{x}, d_{p,i-1})$ und $(\mathbf{x}, d_{p,i+1})$ die Nachbarknoten von $(\mathbf{x}, d_{p,i})$ im Eigenschaftsraum der inneren Koordinate.

Aus Gleichung (III.29) ist ersichtlich, dass die Berechnung von f_k^h mit dem expliziten Euler-Verfahren mit einem Upwind-Finite-Differenzen-Verfahren bzgl. der räumlichen Koordinate, im Folgenden auch FWE-UPW-FDM abgekürzt, keine Lösung eines linearen Gleichungssystems erfordert. Daher ist in diesem Punkt ein Vorteil in der Rechengeschwindigkeit gegenüber dem linearen FEM-FCT-Verfahren zu erwarten.

Als zweites Verfahren niedriger Ordnung wurde das implizite Euler-Verfahren, ebenfalls mit einem Upwind-Finite-Differenzen-Verfahren bzgl. der räumlichen Koordinate, gewählt. Dies ergibt bei der Diskretisierung der Populationsbilanz (III.9) für die Berechnung der Partikelgrößenverteilung zum zukünftigen Zeitpunkt,

$$f_k^h + \Delta t_k \left(\mathbf{u}_k^h \cdot \nabla f_k^h + \frac{k_G c_{C,\infty} l_\infty}{u_\infty d_{p,\infty}} \left(c_{C,k}^h - \frac{c_{C,\infty}^{\text{sat}}}{c_{C,\infty}} \right) \frac{\partial f_k^h}{\partial d_p} \right) = f_{k-1}^h. \quad (\text{III.31})$$

Die Diskretisierung der Konvektionsterme bezüglich den räumlichen und der inneren Koordinate in (III.31) ist mit einer analogen Upwind-Methode wie in (III.30) realisiert. Das implizite Euler-Verfahren, im Folgenden BWE-UPW-FDM abgekürzt, benötigt im Gegensatz zum expliziten Fall allerdings in jedem diskreten Zeitpunkt das Lösen eines linearen Gleichungssystems. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass in den folgenden numerischen Studien ein quadratisches Gebiet in zwei bzw. drei Dimensionen als chemischer Reaktor benutzt wird und daher ein quadratisches bzw. kubisches Gebiet vorliegt, für das sich Finite-Differenzen-Verfahren besonders gut zur Anwendung eignen.

Bei der Lösung der Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung wird das lineare FEM-FCT-Verfahren mit dem Q_1 Finite-Element auf Rechteckgittern angewandt. Da sich die Matrix M_L aus Gleichung (III.20) dabei während der Simulation nicht ändert, kann sie in einem Vorverarbeitungsschritt berechnet werden. Im Gegensatz dazu muss die Matrix A , die zur Berechnung der Matrix L aus (III.20) benötigt wird, in jedem Schritt des Algorithmus neu assembliert werden. Der Ausdruck mit dem höchsten polynomialen Grad in der Anwendung des linearen FEM-FCT-Verfahrens ist der Transport-

term im physikalischen Raum. Da das Geschwindigkeitsfeld mit dem Q_2 Finite-Element approximiert wird und daher in jeder räumlichen Koordinate vom polynomialen Grad 2 ist und der räumliche Gradient in der Finite-Element-Partikelgrößenverteilungsfunktion eine bilineare Funktion ist, ist deren Produkt von polynomialen Grad 3 in jeder räumlichen Koordinate.

Die Evaluation der numerischen Simulationen wird zeigen, dass die Anwendung des linearen FEM-FCT-Verfahrens, wie erwartet, teurer und aufwendiger ist als die des impliziten Euler-Verfahrens (BWE-UPW-FDM). Zusätzlich muss auch der Algorithmus zur Berechnung der Flussbegrenzer (engl.: flux limiter) in jedem diskreten Zeitschritt durchgeführt werden, was die benötigte Rechenzeit weiter vergrößert.

Vergleichbar zu den unterschiedlichen Rechenzeiten sind auch die Anforderungen an den vorhandenen Speicherplatz bei allen drei Diskretisierungsansätzen für die Populationsbilanz verschieden. Dabei zeigt sich, dass das explizite Euler-Verfahren (FWE-UPW-FDM) nur einen vernachlässigbaren zusätzlichen Speicherbedarf hat, während bei den impliziten Verfahren eine höher-dimensionale Systemmatrix gespeichert werden muss. Wenn man daher die Matrix des linearen FEM-FCT-Verfahrens mit der des impliziten Euler-Verfahrens (BWE-UPW-FDM) vergleicht, sieht man, dass die Matrix des linearen FEM-FCT-Verfahrens aufgrund ihrer stärkeren Konnektivität mehr Einträge besitzt. Um das Assemblieren dieser Matrizen zu beschleunigen, werden beim linearen FEM-FCT-Verfahren Informationen einiger Such-Operationen zur Anfangszeit gespeichert. Dies führt zwar einerseits zu einer erheblichen Beschleunigung, andererseits allerdings auch zu einem beträchtlichen Anstieg des benötigten zusätzlichen Speicherbedarfs.

Kapitel IV

Numerische Ergebnisse der Simulation einer Fällungsreaktion

§1 Die modellierte Fällungsreaktion

Zu Beginn des Kapitels über die numerischen Ergebnisse der Simulationsrechnungen soll kurz auf die ablaufende chemische Reaktion und die daran beteiligten Stoffe eingegangen werden. Dabei werden auch die chemischen und physikalischen Eigenschaften der Edukte und Produkte betrachtet, da diese direkten Einfluss auf die Wahl der Parameter zur Entdimensionierung der Simulationsgleichungen haben. Des Weiteren werden die meistverbreiteten industriellen Verwendungsmöglichkeiten der erzeugten Stoffe angegeben. Die Informationen über die chemischen Stoffe und deren Eigenschaften stammen größtenteils aus der GESTIS–Stoffdatenbank des Instituts für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (BGIA).

Die chemische Reaktion

Im Allgemeinen versteht man unter einer chemischen Reaktion einen Vorgang, bei dem chemische Spezies ineinander umgewandelt werden [Czi08]. Bei diesem Prozess entstehen aus einem oder mehreren Edukten ein oder mehrere Reaktionsprodukte, wobei deren gezielte Herstellung eine der Hauptaufgaben in der Verfahrenstechnik und der chemischen Industrie ist [WK04]. Daher sind Kenntnisse über den zeitlichen Ablauf der chemischen Reaktion, also über deren Kinetik, erforderlich, um die reaktionstechnischen Aufgabenstellungen qualitativ und quantitativ zu lösen. Beispielsweise entscheidet der erwartete zeitliche Reaktionsablauf über die Wahl des Reaktortyps, d.h. zwischen einem kontinuierlich betriebenen Rohrreaktor oder einem Rührkesselreaktor [BBB⁺06]. Darüber hinaus sind weitere quantitative kinetische Angaben und Parameter notwendig, wenn auch der Verlauf der chemischen Umsetzung und die erzielbare Ausbeute bestimmt werden sollen [BMW99]. Da der Ablauf einer chemischen Reaktion in einem heterogenen Reaktionssystem oftmals von Stoff- und Wärmetransportvorgängen überlagert wird, muss auch diesen Transportphänomenen in den Parametern und Reak-

tionsinformationen Rechnung getragen werden [WK04, BBB⁺06]. Bevor im Folgenden genauer auf die Modellparameter eingegangen wird, sollen nun zuerst die chemische Reaktion und die beteiligten Stoffe vorgestellt werden.

Eigenschaften			
Name	Calciumchlorid		Natriumcarbonat
Summenformel	CaCl ₂		Na ₂ CO ₃
Aggregatzustand	fest		fest
Molekulargewicht [g/mol]	110.98		105.99
Dichte [g/cm ³]	wasserfrei	2.15	2.533
	Dihydrat	1.85	
Schmelzpunkt	wasserfrei	782°C	–
	Dihydrat	176°C	
	Tetrahydrat	35°C	
Siedepunkt (Zersetzung)	> 1600°C	Zersetzung ab 400°C	
Wasserlöslichkeit [g/l]	740		216.6
pH-Wert	8...10		11.5
Lebensmittelzusatzstoff	E509		E500

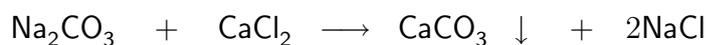
Tabelle IV.1: Physikalische und chemische Eigenschaften der Edukte

Den Ausgangspunkt der Reaktion bilden dabei die beiden Edukte Natriumcarbonat und Calciumchlorid. Natriumcarbonat, mit der chemischen Formel Na₂CO₃, ist ein Salz der schwachen Kohlensäure. Es ist eines der vielseitigsten chemischen Produkte und wird heute in fast allen Industriezweigen eingesetzt. Das Natrium liegt hier in der Oxidationsstufe +1 und der Sauerstoffanteil in der Oxidationsstufe -1 vor [BMW99]. Dieses wasserfreie Salz löst sich in Wasser unter heftiger Wärmeentwicklung und bildet dabei eine stark alkalische Lösung aus, was eine als gefährlich einzustufende chemische Reaktion darstellt und daher auch besondere Anforderungen an die verwendeten Reaktoren stellt. Chemische Reaktoren, in denen Natriumcarbonat eingesetzt wird, sollten folglich, wie für Calciumchlorid und Calciumcarbonat auch, geschlossene Apparaturen sein, die zusätzlich jegliche Staubentwicklung vermeiden.

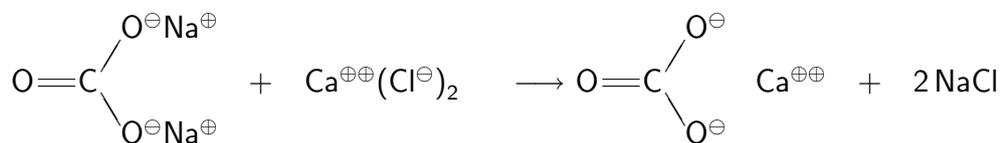
Der zweite Reaktant ist Calciumchlorid, ein Salz, genauer ein Chlorid des Erdalkalimetalls Calcium, mit der Summenformel CaCl_2 . Das Calcium liegt dabei in der Oxidationsstufe +2 vor, während das Chlor die Oxidationsstufe -1 hat. Beide liegen aufgrund des großen Elektronegativitätsunterschiedes als Ionen vor, deren Bindung über die elektrostatische Wechselwirkung erfolgt [WK04]. In Reinform bildet Calciumchlorid farblose Kristalle aus, die im wasserfreien Zustand stark hygroskopisch sind und sich in Wasser exotherm auflösen [BMW99].

Beide Edukte werden im simulierten Versuchsaufbau durch seitliche Öffnungen in den Reaktor eingeströmt und reagieren bei Kontakt zu Natriumchlorid und Calciumcarbonat, das bei Erreichen einer Sättigungskonzentration in einer Fällungsreaktion als Niederschlag feste Partikel ausbildet §2. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass das Natriumchlorid oder Kochsalz bei der ablaufenden Ausfällung keine Rolle spielt und nur als Nebenprodukt auftritt. Daher wird im Simulationsprozess die Solutkonzentration des Kochsalzes innerhalb der kontinuierlichen Phase auch nicht berücksichtigt. Im Allgemeinen ist das Auftreten von Nebenprodukten in der technischen Chemie bei vielen Verfahren unumgänglich, wobei heute die anfallenden Nebenprodukte selbst weiterverarbeitet werden oder, falls nicht möglich, einer Wiederverwertung in einem Recycling-Prozess zugeführt werden [BBB+06].

Die hier modellierte chemische Reaktion kann zusammenfassend als Umsatzgleichung,



oder detaillierter als Reaktions- und Strukturformel,



geschrieben werden.

Das Hauptprodukt der Reaktion ist das ausgefällte Calciumcarbonat, ein Calciumsalz der Kohlensäure, mit der chemischen Formel CaCO_3 . Wie in der Strukturformel gezeigt, besteht Calciumcarbonat aus einem Ionengitter mit Ca^{2+} -Ionen und CO_3^{2-} -Ionen im Verhältnis 1:1 [Teg04]. In der Chemie unterscheidet man im Allgemeinen zwischen zwei Arten von Calciumcarbonat. Dies ist einmal das sogenannte GCC-Calciumcarbonat (engl.: ground calcium carbonate), welches in der Natur vor allem in Form von Mineralien in Sedimentgesteinen auftritt. Außerdem ist dieses Calciumcarbonat auch der Hauptbestandteil von Kalkstein und Marmor. Zusätzlich ist es ebenso in menschlichen Knochen und Zähnen zu finden, wie im Außenskelett vieler Tiere und Pflanzen [Teg04]. Darüber hinaus gibt es in der industriellen Anwendung vielfältige Verwendungsmöglichkeiten für natürliches Calciumcarbonat. Beispielsweise wird es in

der Baustoffindustrie sowohl als Füllstoff als auch in der Zementherstellung benutzt. Überdies dient Calciumcarbonat als Weißpigment in der Herstellung von vielen unterschiedlichen Produkten, z.B. Farben, Papier, Keramik, Kunststoffe und Putze.

Die zweite Art von Calciumcarbonat, die unterschieden wird, ist das hier betrachtete PCC–Calciumcarbonat (engl.: precipitated calcium carbonate). Durch die industrielle Produktion kann dieses überall dort eingesetzt werden, wo hochreine Stoffe benötigt werden. Dies sind einmal pharmazeutische Produkte, hier wird Calciumcarbonat als Füllmittel für Tabletten benutzt, dient als Mittel gegen Magensäure, bei Niereninsuffizienz und in der Herstellung von homöopathischen Substanzen. Der zweite große Anwendungsbereich von ausgefälltem Calciumcarbonat ist die Nahrungsmittelindustrie. Hier wird Calciumcarbonat vor allem in diabetischen Lebensmitteln als Kochsalzersatz und Säureregulator eingesetzt, fungiert aber auch als Käsereifungsmittel oder in Sojamilchprodukten und ist ein wichtiger Trägerstoff für Aromen. Ferner benutzt man industrielles Calciumcarbonat zur Materialschonung in Latexhandschuhen und als Putzkörper in Zahnpflegemitteln. Zudem wird mittlerweile das natürliche Calciumcarbonat in machen Industriezweigen vom PCC–Calciumcarbonat verdrängt. So wird beispielsweise in der Herstellung von PVC–Materialien und in der Papierindustrie, wegen der hohen Opazität immer häufiger auf Ausfällungsprodukte zurückgegriffen [WK04, Teg04].

Eigenschaften		
Name	Calciumcarbonat	Natriumchlorid
Summenformel	CaCO_3	NaCl
Aggregatzustand	fest	fest
Molekulargewicht [g/mol]	100.09	58.44
Dichte [g/cm ³]	Aragonit 2.93 Calcit 2.73	2.17
Schmelzpunkt	–	801°C
Siedepunkt (Zersetzung)	Zersetzung ab 825°C	1461°C
Wasserlöslichkeit [g/l]	0.014	358
pH-Wert	9.5 . . . 10.5	4.5 . . . 7
Lebensmittelzusatzstoff	E170	–

Tabelle IV.2: Physikalische und chemische Eigenschaften der Produkte

§2 Aufbau und Konfiguration der numerischen Simulationen

Da der zeitliche Ablauf einer chemischen Reaktion quantitativ durch deren Kinetik beschrieben wird, gibt diese den funktionalen Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit der Reaktion und den Größen, die sie beeinflussen, wieder. Dabei sind die wichtigsten Einflussfaktoren für chemische Umsetzungen, die in einer homogenen Phase ablaufen, im Allgemeinen die Konzentrationen der Edukte, der Absolutdruck und die Temperatur [BBB⁺06], wobei für die im Folgenden simulierte Fällungsreaktion die Modellannahme getroffen wird, dass diese isothermal abläuft. Das bedeutet, dass durch Zu- oder Abführung der Reaktionswärme die Temperatur über die gesamte Reaktionsdauer und den gesamten Reaktionsraum konstant gehalten wird [WK04].

Bei einem Reaktionssystem, das sich aus mehreren Phasen, hier Flüssigkeit/Feststoff, zusammensetzt und dessen Reaktionspartner während der ablaufenden Reaktion von einer Phase in eine andere übergehen, hängt die Reaktionsgeschwindigkeit und die Reaktionsumsetzung nicht nur von der Kinetik ab, sondern von deren Zusammenwirken mit den Transportvorgängen [BBB⁺06].

Daher hat die Messtechnik zur Analyse und Charakterisierung disperser Partikelsysteme mittlerweile eine Vielzahl leistungsstarker Methoden entwickelt. Hier sind beispielsweise die Laserlicht-Beugungsspektroskopie, die Photonenkorrelationsspektroskopie, die Laserdoppler-Anemometrie, akustische Messmethoden und die quantitative Bildauswertung zu nennen [Les87, PMR93, LJSB03]. Allerdings wird auch zunehmend die simultane Erfassung mehrerer Signale genutzt, um zusätzlich zur Partikelgröße auch Geschwindigkeit, Konzentration oder andere Systemeigenschaften zu erfassen [WK04]. Diese Verfahren der kontaktfreien Diagnostik zur Gewinnung von Feldinformationen innerhalb des Reaktors werden vor allem aufgrund der oft sehr hohen Temperaturen in den Reaktoren und den zu erwartenden Partikelablagerungen auf den Messgeräten selbst verwendet, da ein Sondeneinsatz im Inneren meist nicht möglich ist [WK04, BMW99].

Allerdings haben auch diese Verfahren Schwächen, da die reine Anwesenheit der Partikel die Messsignale stark beeinflussen oder sogar auslöschen kann. Dennoch sind solche Messungen von großer Bedeutung für die Prozesskontrolle, da sie einerseits zur Verifikation der Simulationen dienen und andererseits maßgeblichen Einfluss auf die Bestimmung der Prozessparameter haben [WK04, BBB⁺06]. Da also der direkte Einsatz von Messsonden zur Informationsgewinnung in der Regel nicht möglich ist, ist die Modellvalidierung mittels Simulationsrechnungen von großer und zunehmender Bedeutung in der Verfahrenstechnik. Dies zeigt sich auch gerade unter dem Gesichtspunkt der steigenden Anforderungen an die Produkteigenschaften, beispielsweise bei der Produktion von Partikeln im Submikronbereich und der Verkürzung von Entwicklungszeiten [LJSB03]. All diese Faktoren unterstreichen noch einmal die Notwendigkeit, möglichst realitätsnahe numerische Simulationsrechnungen zu entwickeln und verdeutlichen, welche große Relevanz der Modellierung und der Simulation innerhalb der Verfahrenstechnik zukommen [WK04, IDH⁺07].

§2.1 Modellparameter

Für die Simulation der Populationsbilanz, die die chemische Fällungsreaktion modelliert, wird als chemischer Reaktor ein quadratisches Gebiet in zwei Dimensionen (engl.: cavity), $\Omega = (0, 1)^2$, angenommen (siehe Abbildung IV.1). Dieses enthält auf der linken und der rechten Seite je eine Öffnung der Größe $1/32$, durch die die beiden Edukte in den Reaktor eingeströmt werden. Für die Position der beiden Einströmungen werden im Folgenden verschiedene Testfälle simuliert und an Hand dieser Ergebnisse verglichen. Am Boden des Reaktors befindet sich an der Position $(0.5, 0)$ eine Ausströmung der Größe $1/16$, durch die der Niederschlag ausgeschieden wird. Diese Konfiguration eines Testreaktors für numerische Simulationen wird meist als T-Mixer bezeichnet.

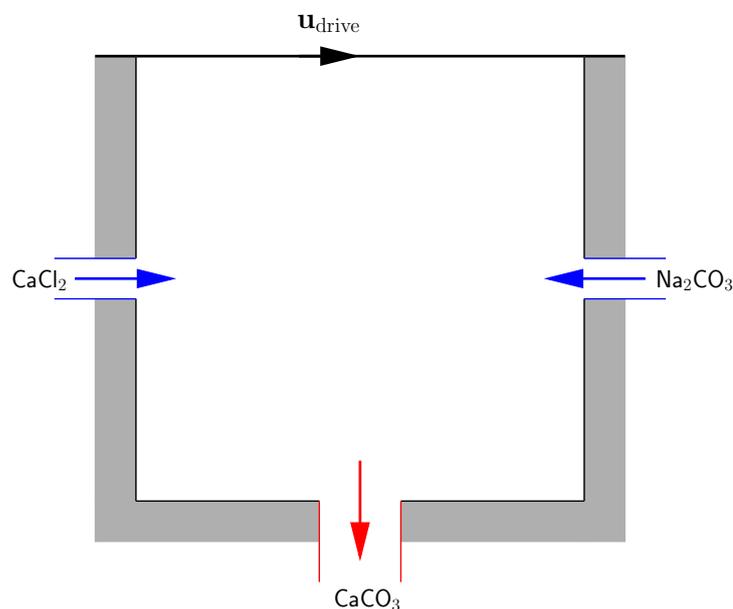


Abbildung IV.1: Simulationsgebiet des zweidimensionalen Reaktors

Für die Navier–Stokes–Gleichungen (III.6), dem Ausgangspunkt des gekoppelten Systems, werden parabolische Einströmungsprofile mit einem Integralmittelwert von 1 (Maximalwert 1.5) angewendet. An der Öffnung am Reaktorboden werden Ausfluss–Randbedingungen angenommen.

Die Konzentrationen der beiden Reaktanten, $A = \text{CaCl}_2$ an der linken und $B = \text{Na}_2\text{CO}_3$ an der rechten Einströmung, sind für alle Zeitpunkte gleich 1 gesetzt,

$$c_A = 1 \quad \text{auf} \quad [0, T] \times [0] \times [15/32, 1/2],$$

$$c_B = 1 \quad \text{auf} \quad [0, T] \times [1] \times [15/32, 1/2].$$

Außerhalb der Einströmungen sind für c_A und c_B homogene Neumann–Randbedingungen gesetzt. Für die Konzentration des gelösten Reaktionsproduktes, $C = \text{CaCO}_3$, werden auf dem ganzen Rand homogene Neumann–Randbedingungen angenommen. Die Randbedingungen für die Partikelgrößenverteilung bezüglich der inneren Koordinate oder der Partikelgröße sind

$$\begin{aligned} f(t, x_1, x_2, d_{p,\min}) &= \frac{B_{\text{nuc}}(c_C)}{f_{\infty} G(c_C)} \quad \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2)) > 0, \\ f(t, x_1, x_2, d_{p,\min}) &= 0 \quad \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2)) = 0, \\ f(t, x_1, x_2, d_{p,\max}) &= 0 \quad \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2)) < 0, \end{aligned}$$

wobei hier

$$B_{\text{nuc}}(c_C(t, x_1, x_2)) = k_{\text{nuc}} c_{C,\infty}^5 \max\{0, (c_C - 1)^5\}$$

ist. Hinsichtlich der räumlichen Koordinaten ist die Partikelgrößenverteilung auf dem Abschluss der seitlichen Einströmungen Null gesetzt [RST08],

$$f(t, x_1, x_2, d_p) = 0 \quad \text{auf } [0, T] \times [0] \times [15/32, 1/2] \times (d_{p,\min} \times d_{p,\max}],$$

$$f(t, x_1, x_2, d_p) = 0 \quad \text{auf } [0, T] \times [1] \times [15/32, 1/2] \times (d_{p,\min} \times d_{p,\max}].$$

Abgesehen von den beiden Einströmungen, wird die Durchmischung der beiden Reaktanten zusätzlich durch die Bewegung der oberen Reaktorbegrenzung angeregt. Die Geschwindigkeit dieser Antriebsbewegung beträgt $\mathbf{u}_{\text{drive}} = (u_{1,\text{drive}}/u_{\infty}, 0)^T$, wobei in den Simulationen die Werte $u_{1,\text{drive}} = 10^{-3} \text{ m/s}$ und $u_{\infty} \in \{10^{-3}, 10^{-2}\} \text{ m/s}$ angenommen und untersucht werden. Die Anfangs–Geschwindigkeitsfelder der Hintergrundströmung sind vollständig entwickelte Strömungen, die in einem Vorverarbeitungsschritt berechnet wurden. Die Konzentrationsfelder von c_A , c_B und c_C werden zu Beginn im Reaktorgebiet Ω Null gesetzt und die Einströmung der Edukte beginnt zum Zeitpunkt $t = 0$. Zu diesem Zeitpunkt sollen sich auch keine Partikel innerhalb des Reaktors befinden und daher ist auch die Anfangsbedingung für die Partikelgrößenverteilung gleich Null.

Populationsbilanzmodelle können flexibel an Verfahren zur Partikelproduktion angepasst werden und dienen darüber hinaus auch dem Aufbau von Prozessregelsystemen. Jedoch verfügen sie über eine Vielzahl von Parametern, die nicht a priori bekannt sind. Daher müssen die Modelle mit experimentell ermittelten Parametern bestückt werden [WK04]. Die hier verwendeten Prozessparameter sind in den Arbeiten [VKvR92, CB96, DZ97, TG95] ermittelt und bestimmt worden:

- $\nu = 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$
- $\varrho = 1 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$
- $k_G = 10^{-7} \frac{\text{m}^4}{\text{kmol s}},$
- $k_{\text{nuc}} = 10^{24} \left(\left(\frac{1}{\text{m}^3 \text{s}} \right) / \left(\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right)^5 \right),$
- $k_R = 10^{-2} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol s}},$
- $c_{C,\infty}^{\text{sat}} = 1.37 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3},$
- $C_2 = 7.2 \cdot 10^{-9} \text{m},$
- $C_G = 45.98 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3},$
- $C_{\text{nuc}} = 15.33 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3},$
- $D_{\text{CaCl}_2} = 1.5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$
- $D_{\text{NaCO}_3} = 1.5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$
- $D_{\text{CaCO}_3} = 1.5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$
- $\tilde{d}_{p,0} = 10^{-9} \text{m},$
- $\tilde{d}_{p,\text{max}} = 10^{-4} \text{m}.$

Als dimensionslose Kennzahlen, die in der Ähnlichkeitstheorie eine Rückführung auf Modellprobleme ermöglichen, erwiesen sich für diesen Testreaktor folgende Referenzgrößen zur Entdimensionierung der Gleichungen als günstig:

- $l_\infty = 1 \text{m},$
- $u_\infty = 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ oder

- $u_\infty = 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}$,
- $t_\infty = 10^3 \text{s}$ für $u_\infty = 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und
- $t_\infty = 10^2 \text{s}$ für $u_\infty = 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}$
- $c_\infty = 1 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$,
- $c_{C,\infty} = 0.183502 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$,
- $d_{p,\infty} = 10^{-4} \text{m}$,
- $f_\infty = 2.17486 \cdot 10^{14} \frac{1}{\text{m}^4}$ für $u_\infty = 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und
- $f_\infty = 2.17486 \cdot 10^{15} \frac{1}{\text{m}^4}$ für $u_\infty = 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}$.

Die Wahl von $\tilde{d}_{p,\max}$ beruht dabei auf den Erfahrungen aus [JMR⁺]. Die Reynolds-Zahl der simulierten Strömungen ist für die numerischen Experimente mit $u_\infty = 10^{-3} \text{m/s}$ gleich $Re = 1000$ und für die Rechnungen mit $u_\infty = 10^{-2} \text{m/s}$ gleich $Re = 10000$.

Die wichtigsten Kenngrößen in der chemischen Reaktionstechnik sind die sogenannten *Damköhler-Zahlen* [Dam57]. Diese beschreiben die Wechselwirkung zwischen der chemischen Kinetik und der Geschwindigkeit der physikalischen Transportvorgänge [Chr06]. Dabei ist hier die Damköhler-Zahl erster Art von besonderer Bedeutung, da sie das Verhältnis der Geschwindigkeitskonstanten der Reaktion und der Geschwindigkeitskonstanten des konvektiven Stofftransports darstellt [EK06],

$$Da = \frac{k_R c_\infty l_\infty}{u_\infty},$$

$$Da = 10^4 \quad \text{für } u_\infty = 10^{-3} \text{m/s},$$

$$Da = 10^3 \quad \text{für } u_\infty = 10^{-2} \text{m/s}.$$

Dieser Wert der Damköhler-Zahl erster Art tritt bei der Simulation der Fällungsreaktion im Reaktionsterm der Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen der Edukte (III.7) als Faktor in den Regionen auf, in denen der jeweils andere Reaktant Werte nahe Eins, also $c \sim c_\infty$ ist, annimmt. Derartige Referenzgrößen ermöglichen Rückschlüsse auf die Abläufe innerhalb des Reaktors, da die Geschwindigkeit, mit der eine chemische Umsetzung in einem mehrphasigen System abläuft, prinzipiell durch das Zusammenwirken der Geschwindigkeiten von chemischer Reaktion und physikalischen Transportvorgängen bestimmt wird [EK06]. Die Damköhler-Zahl zweiter Art ist ein Maß für das

Verhältnis zwischen der durch die Reaktion umgesetzten und der durch die Diffusion, mit der Geschwindigkeit u_{Diff} , heran transportierten Stoffmenge und dient daher der Abschätzung von Betriebsbedingungen innerhalb des Reaktors [EK06, Chr06],

$$Da_{II} = \frac{k_R c_\infty l_\infty}{u_{\text{Diff}}}.$$

Neben den äußeren und den inneren Transportvorgängen, dienen die Damköhler-Zahlen dritter und vierter Art zur Beschreibung von Verhältnissen zwischen der entstehenden Reaktionswärme, physikalischer Wärmezuführung und der Wärmeleitung. Darüber hinaus gibt die turbulente Damköhler-Zahl das Verhältnis zwischen den makroskopischen Zeitskalen der turbulenten Strömung und der Zeitskala der chemischen Reaktion t_R wieder [Zie71],

$$Da_t = \frac{t_\infty}{t_R}.$$

Die Zeitdiskretisierung wird mit Hilfe äquidistanter Zeitschritte realisiert. Das Geschwindigkeitsfeld und die Konzentrationsfelder werden auf einem Gitter mit 64×64 Quadraten berechnet. Bezüglich der inneren Koordinate werden Gitter mit $L \in \{32, 48, 64\}$ Schichten verwendet. In der Tabelle IV.3 sind die zugehörigen Informationen über die Anzahl der Freiheitsgrade dargestellt.

simulierte Größe	Anzahl der Freiheitsgrade
Geschwindigkeitsfeld	33282
Druck	12288
Konzentrationsfelder	4225
Partikelgrößenverteilung, mit $L = 32$	139425
Partikelgrößenverteilung, mit $L = 48$	207025
Partikelgrößenverteilung, mit $L = 64$	274625

Tabelle IV.3: Anzahl der Freiheitsgrade für die Simulationsrechnungen

Die numerischen Studien in [JMR⁺] zeigen, dass bei der Fällungsreaktion eher kleinere Partikel entstehen. Aus diesem Grund sollte das Gitter zur Beschreibung der Partikelgröße in Richtung $d_{p,\text{min}}$ stärker verfeinert werden. Daher wird für die innere Koordinate ein anisotropes Gitter verwendet, dessen Gitterpunkte sich entsprechend der

Formel

$$d_{p,i} = 1 + (1 - d_{p,\min}) \frac{\tanh\left(2.75 \left(\frac{i}{L-1}\right)\right)}{\tanh(2.75)}, \quad i = 0, \dots, L, \quad (\text{IV.1})$$

verteilen. Die Anzahl der Freiheitsgrade dieser Gitter ist ebenfalls in der Tabelle IV.3 angegeben. Dabei kann man sagen, dass für jede Anzahl von Gitterebenen, die Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung die mit Abstand größte Gleichung innerhalb des Systems ist.

§2.2 Die Software MoonMD

Die hier vorgestellten numerischen Experimente wurden alle mit dem wissenschaftlichen Programmpaket MoonMD, **M**athematics and **o**bject **o**riented **N**umerics in **M**agDeburg, durchgeführt, das am Institut für Analysis und Numerik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg entwickelt wurde. Das Software-Paket wurde als universell einsetzbares C++ Programm zur Lösung von zwei- und dreidimensionalen Problemen entwickelt und erfolgreich eingesetzt. Eine detaillierte Beschreibung der Software findet sich in [JM04] und auf der Homepage des Projekts.

Die linearisierten Navier–Stokes–Gleichungen wurden mit einem flexiblen GMRES–Verfahren (generalized minimal residual method) mit einem gekoppelten Mehrgitter–Vorkonditionierer gelöst [Joh06b]. Die linearisierten Gleichungen der chemischen Reaktion wurden mit dem direkten Löser UMFPACK (Unsymmetric MultiFrontal PACKage) gelöst [Dav04]. Für die lineare Gleichung in drei Dimensionen, die bei den Untersuchungen der Populationsbilanz mit dem impliziten Euler–Verfahren (BWE–UPW–FDM) und dem linearen FEM–FCT–Verfahren auftritt, wird als Löser die GMRES–Methode mit einem SSOR (symmetric successive over relaxation) Vorkonditionierer verwendet. Dabei zeigte sich in den numerischen Studien, dass zur Lösung der Populationsbilanz im Allgemeinen nur wenige Iterationsschritte notwendig waren [JR10].

§2.3 Untersuchte Kenngrößen des Fällungsprozesses

Wie zu Beginn von Kapitel III allgemein beschrieben, sind für Transportprozesse, die innerhalb von Strömungen ablaufen, die verschiedenen Momente der Partikelverteilungsdichte von großer technischer Bedeutung. Ihre Definitionen basieren auf statistischen Beschreibungen, die mit Hilfe der Partikelgrößenverteilung, die als eine Verteilungsdichtefunktion auf dem Zustandsraum Ω definiert wurde, dargestellt werden können. Diese Herangehensweise ist notwendig, da die Wechselwirkung eines einzelnen Partikels in einer Flüssigkeit von der Anordnung aller Partikel und Moleküle in seiner näheren Umgebung und den Wechselwirkungen mit ihnen abhängt und diese Vielteilchenwechselwirkungen eine dominierende Rolle spielen [GW00].

Den Ausgangspunkt bildet hier das 0-te Moment,

$$N(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p) d(d_p), \quad (\text{IV.2})$$

das die *Anzahldichte* der Partikel beschreibt. Es erlaubt eine Darstellung der Partikelanzahl pro Einheitsvolumen des Reaktors zum Zeitpunkt \tilde{t} . Das 1-te Moment, die *Partikelumfangdichte*,

$$m_1(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \pi d_p \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p) d(d_p), \quad (\text{IV.3})$$

und das 2-te Moment, die *Oberflächendichte*,

$$m_2(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \pi d_p^2 \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p) d(d_p), \quad (\text{IV.4})$$

spielen in der verfahrenstechnischen Betrachtung von Fällungsreaktionen nur eine untergeordnete Rolle, da sie im Verhältnis nur über eine geringe Aussagekraft bzgl. des Partikelniederschlags verfügen [WK04]. Die Oberflächendichte findet in der Regel nur Anwendung bei photometrischen Messverfahren zur Partikelgrößenanalyse. Im Gegensatz dazu ist das Moment dritten Grades das Wichtigste in der prozesstechnischen Analyse ablaufender chemischer Reaktionen. Dabei definiert sich die *Volumendichte* als

$$m_3(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \frac{4}{3} \pi d_p^3 \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p) d(d_p) \quad (\text{IV.5})$$

und sie kann mit Hilfe von Dichteangaben der chemischen Stoffe zu einer *Massendichte* erweitert werden. Die verschiedenen Dichten sind von großer Bedeutung, da sie die Änderungen der Partikelgrößenverteilung in dynamisch ablaufenden Prozessen als Funktionen formulieren.

Ausgehend von den Momenten der Partikelgrößenverteilung können weitere Kenngrößen der chemischen Reaktion beschrieben werden. Das 0-te Moment, die *Anzahldichte*, erlaubt beispielsweise die Berechnung der Partikelanzahl in bestimmten Teilbereichen des Reaktors, die von Interesse bei der Reaktionsanalyse sind. Ebenso kann die Gesamtzahl der Partikel im Reaktor zum Zeitpunkt \tilde{t} bestimmt werden,

$$N_{\text{Reaktor}}(\tilde{t}) = \int_{\Omega} \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \tilde{f}(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{d}_p) d(d_p) d\mathbf{x}.$$

In diesem Zusammenhang sind, wie erwähnt, die Momente dritten Grades die aussagekräftigsten [Kre05, Kae06]. Diese erlauben die Definition von *Volumenanteilen*, die das anteilige Volumen der Partikel mit einem fest bestimmten Äquivalentdurchmesser \tilde{d}_p am Gesamtvolumen aller Partikel am Ort \tilde{x} zu einem bestimmten Zeitpunkt \tilde{t} angeben. Für die Evaluation des Fällungsprozesses ist der Volumenanteil an der Ausströmung, $(0.5l_\infty, 0)$, von der größten Bedeutung, da die ausgeschiedene Niederschlagsmenge die dominierende Referenzgröße für Produktionsprozesse darstellt,

$$q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) := \frac{d_p^3 f(\tilde{t}, 0.5l_\infty, 0, \tilde{d}_p)}{m_3(\tilde{t}, 0.5l_\infty, 0)}. \quad (\text{IV.6})$$

Der Volumenanteil ist eine dimensionslose Gehaltsgröße mit der auch Angaben in Volumenprozent gemacht werden können. Allerdings sollte man bei Volumenanteilen, genau wie bei Volumenkonzentrationen, stets beachten, dass alle Angaben, im Unterschied zu Massenanteilen, von der vorherrschenden Temperatur abhängen [WK04, Czi08].

Aufbauend auf die Volumenanteile, können auch *kumulative Volumenanteile* definiert werden,

$$Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_p} q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) d(d_p). \quad (\text{IV.7})$$

Dabei versteht man unter kumulativ einen additiven Zuwachs, hier durch das Integral ausgedrückt, der, ausgehend von Null, die Volumenanteile $q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)$ am Zentrum der Ausströmung des Reaktors zum Zeitpunkt \tilde{t} kontinuierlich aufsummiert. Aus statistischer Sichtweise ist der kumulative Volumenanteil $Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)$ eine kumulative Verteilungsfunktion, die den Volumenanteil $q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)$, interpretiert als Wahrscheinlichkeitsverteilung, beschreibt.

Durch die Einführung des kumulativen Volumenanteils ist auch die Definition eines *Medians* des Volumenanteils möglich,

$$\tilde{d}_{p,50}(\tilde{t}) := \left\{ \tilde{d}_p : Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) = 0.5 \right\}. \quad (\text{IV.8})$$

Der Median beschreibt in der Statistik als 0.5-Quantil ein Maß für die Streuung einer Verteilung und hat den Vorteil, robust gegenüber Ausreißern zu sein [Kre05, Kae06]. In diesem Zusammenhang halbiert der Median oder Zentralwert die Partikelpopulation, indem er als Mediangröße die Partikel separiert. Mit anderen Worten, die Mediangröße ist die Grenze, bei der zum Zeitpunkt \tilde{t} 50 Prozent der Partikel kleiner und 50 Prozent der Partikel größer als der Wert $\tilde{d}_{p,50}(\tilde{t})$ sind.

§3 Ergebnisse der Simulationen in einem zweidimensionalen Gebiet

§3.1 Vergleichsstudie für verschiedene Einströmungspositionen

In den ersten numerischen Studien zur Fällungsreaktion sollen verschiedene Positionen für die Einströmungsöffnungen des zweidimensionalen Reaktors untersucht werden. Dazu wird die Antriebsgeschwindigkeit der oberen Reaktorwand $(u_{1,\text{drive}}, 0)^T = (1, 0)^T$ gesetzt. Die verschiedenen Positionen für die Öffnungen werden wie folgt als Intervalle auf den seitlichen Reaktorwänden gewählt: Im unteren Bereich der seitlichen Begrenzungen für $y \in (8/32, 9/32)$, im mittleren Bereich für $y \in (15/32, 16/32)$ und im oberen Bereich für $y \in (22/32, 23/32)$.

Die vollständig entwickelten Geschwindigkeitsfelder der Lösung für die 9 verschiedenen Positionspaare sind in Abbildung IV.2 angegeben. Alle Strömungsfelder zeigen einen großen Wirbel in der Mitte des Reaktors und kleinere in der linken oberen und der unteren rechten Ecke.

Um den Einfluss der verschiedenen Einströmungspositionen besser vergleichen zu können, werden die Volumenanteile und der Median für die einzelnen Varianten dargestellt. Die Abbildungen des Volumenanteils q_3 und des kumulativen Volumenanteils Q_3 zeigen beide die entsprechenden Kurven zum Zeitpunkt $\tilde{T} = 50000$. Die Positionen in den jeweiligen Abbildungen entsprechen dabei immer den verschiedenen Konfigurationen der Einströmungen. Alle hier dargestellten Kurven sind mit der Finite-Elemente-Methode mit der SUPG-Stabilisierung (III.15, III.16) für Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen berechnet worden. Die Simulationsrechnungen wurden auf einem Intel(R) Xeon(R) X5355 Prozessor mit 2.66GHz ausgeführt. Die Berechnung der 20000 Zeitschritte zum Erreichen des Endzeitpunktes $\tilde{T} = 50000$ dauerte zwischen 123300 und 134700 Sekunden [JMR⁺].

Auf der Abzisse des Koordinatensystems wird die Partikelgröße d_p aufgetragen, die als innere Koordinate des Eigenschaftsraums ein Längenmaß, hier der Äquivalentdurchmesser, darstellt. Diese Vorgehensweise ermöglicht auch die Definition von Korn- oder Partikelklassen durch eine Unterteilung der d_p -Achse in Partikelgrößenintervalle,

$$\Delta d_p^{(i)} = d_p^{(i)} - d_p^{(i-1)},$$

die ein Feinheitsmerkmal definieren [Sti09].

Auf der Ordinate werden einmal die Volumenanteile q_3 aufgetragen, die den Anteil an der Gesamtmenge bezogen auf die Partikelklassen darstellen und darüber hinaus die kumulativen Volumenanteile Q_3 , die den Volumenanteil an der Gesamtmenge darstellen, der unterhalb einer bestimmten Partikelgröße liegt [Sti09, WK04].

Da Q_3 im physikalischen Raum für die Reaktorausströmung berechnet wurde, beschreibt sie eine im Chemieingenieurwesen und der Partikeltechnologie als *Durchgang*

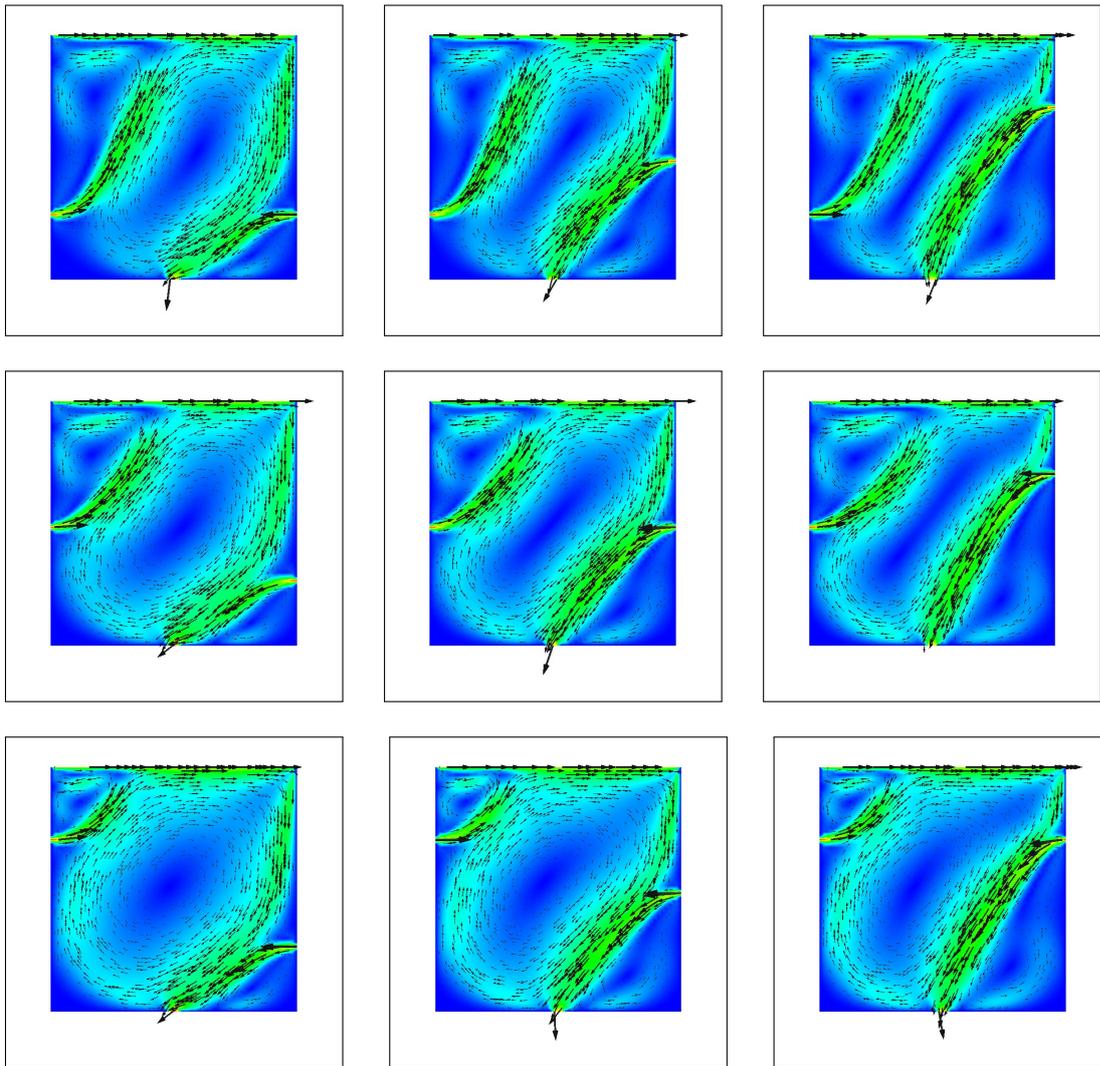


Abbildung IV.2: Strömungsfelder der verschiedenen Einströmungspositionen

bezeichnete Größe, also die Volumenanteile der ausgetragenen Partikel des Niederschlags. Diese Interpretation erlaubt auch die daraus folgende Definition des *Rückstandes*, $R(\tilde{t}, \tilde{d}_p) = 1 - Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)$, bei der Partikelgröße \tilde{d}_p .

Der kumulative Volumenanteil hat nach seiner Definition folgende Eigenschaften, die in Abbildung IV.4 sehr gut zu erkennen sind [Sti09]:

- für $d_p \leq d_{p,\min}$ ist $Q_3 = 0$,
- für $d_p \geq d_{p,\max}$ ist $Q_3 = 1$ und
- zwischen $d_{p,\min}$ und $d_{p,\max}$ steigt Q_3 monoton an.

An den Darstellungen der verschiedenen Kurven für q_3 in Abbildung IV.3 und für Q_3 in Abbildung IV.4 kann man die Zusammenhänge zwischen den Definitionen der beiden Kenngrößen ablesen. Da Q_3 als Verteilungsfunktion interpretiert werden kann und als das Integral von q_3 über die innere Koordinate definiert wird, kann man umgekehrt sagen, dass q_3 auch als Differentialquotient,

$$q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) = \frac{dQ_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)}{d(d_p)},$$

geschrieben werden kann. Dabei drückt $q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) \cdot d(d_p)$ den Volumenanteil der Partikel der Größe \tilde{d}_p aus. Die Eigenschaften von q_3 ergeben sich dann aus denen von Q_3 ,

- für $d_p \leq d_{p,\min}$ ist $q_3 = 0$ und
- für $d_p \geq d_{p,\max}$ ist $q_3 = 0$.

Außerdem hat der Volumenanteil q_3 als Funktion sein Maximum am Wendepunkt der Funktion des kumulativen Volumenanteils Q_3 , was auch in den Abbildungen IV.3 und IV.4 der numerischen Simulationen sehr gut dargestellt wird. Des Weiteren gilt für die maximale Partikelgröße, die innerhalb des Reaktors auftreten kann [Sti09],

$$\int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) d(d_p) = Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_{p,\max}) = 1,$$

was einer Normierungsbedingung für verfahrenstechnische Referenzgrößen entspricht und in bestimmten Prozessanalysen von Bedeutung ist.

Häufig ist es bei der Analyse von chemischen Reaktionen sinnvoll, die Partikelgrößenverteilung durch die Angabe nur eines Wertes zu charakterisieren und dabei dessen zeitlichen Verlauf auszuwerten [Sti09]. Dabei kommt dem Median des Volumenanteils eine wesentliche Rolle und eine große praktische Bedeutung zu. Darüber hinaus ist gelegentlich auch der *Modalwert* von Wichtigkeit, der der mengenreichsten Partikelgröße und damit dem Maximum des Volumenanteils entspricht. In der Tabelle IV.4 sind die Modalwerte für die verschiedenen Varianten der Reaktoreinströmungen angegeben. Die Positionen in der Tabelle entsprechen ebenfalls den Positionen in den anderen Abbildungen.

Spielen bei der ablaufenden chemischen Reaktion die Partikeloberflächen eine größere Rolle als bei Fällungsreaktionen, beispielsweise bei Stofftrennungen, dann betrachtet man noch zusätzlich die spezifische Oberfläche und den Sauterdurchmesser als weitere spezielle Kenngrößen [Sti09, WK04, BMW99].

Bei einer vergleichenden Betrachtungsweise der Abbildungen IV.3 und IV.5 kann man zwei verschiedene Klassen von Ergebnissen erkennen. In der ersten Klasse ist der Maximalwert des Volumenanteils q_3 von der Größenordnung 10^{-5} und der entsprechende

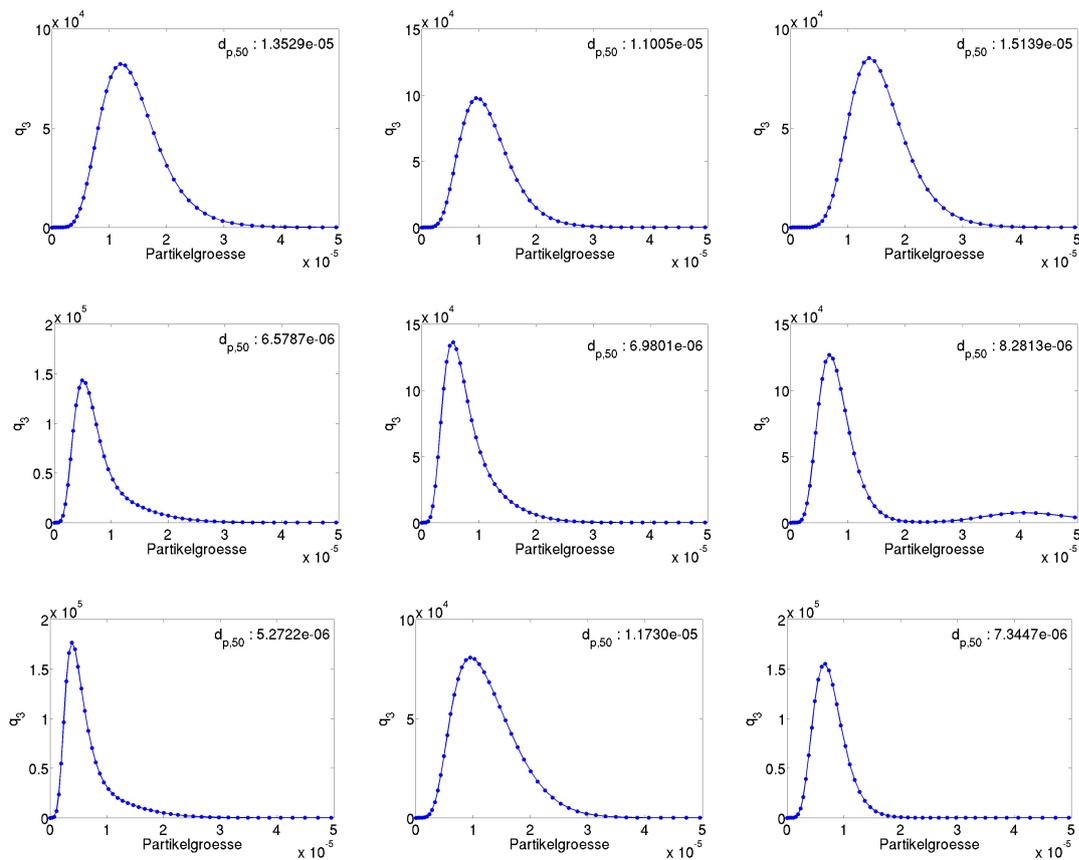


Abbildung IV.3: Volumenanteile für die verschiedenen Einströmungspositionen

Modalwerte für $q_3(50000, \tilde{d}_p)$		
1.190748e-5	9.496227e-6	1.369283e-5
4.927822e-6	5.500550e-6	6.721452e-6
4.378876e-6	9.496227e-6	6.721452e-6

Tabelle IV.4: Modalwerte des Volumenanteils für die verschiedenen Einströmungspositionen

Median, in der rechten oberen Ecke der Kurven angegeben, ungefähr 10^{-5} . Zu dieser Klasse von Ergebnissen gehören alle, bei denen die linke Einströmung im unteren Teil der Reaktorbegrenzung liegt, und zusätzlich ist auch das Ergebnis, bei dem die linke Einströmung im oberen Teil und die rechte im mittleren Teil der Reaktorbegrenzung liegt, in dieser Gruppe enthalten. Bei der zweiten Klasse von Ergebnissen liegt der

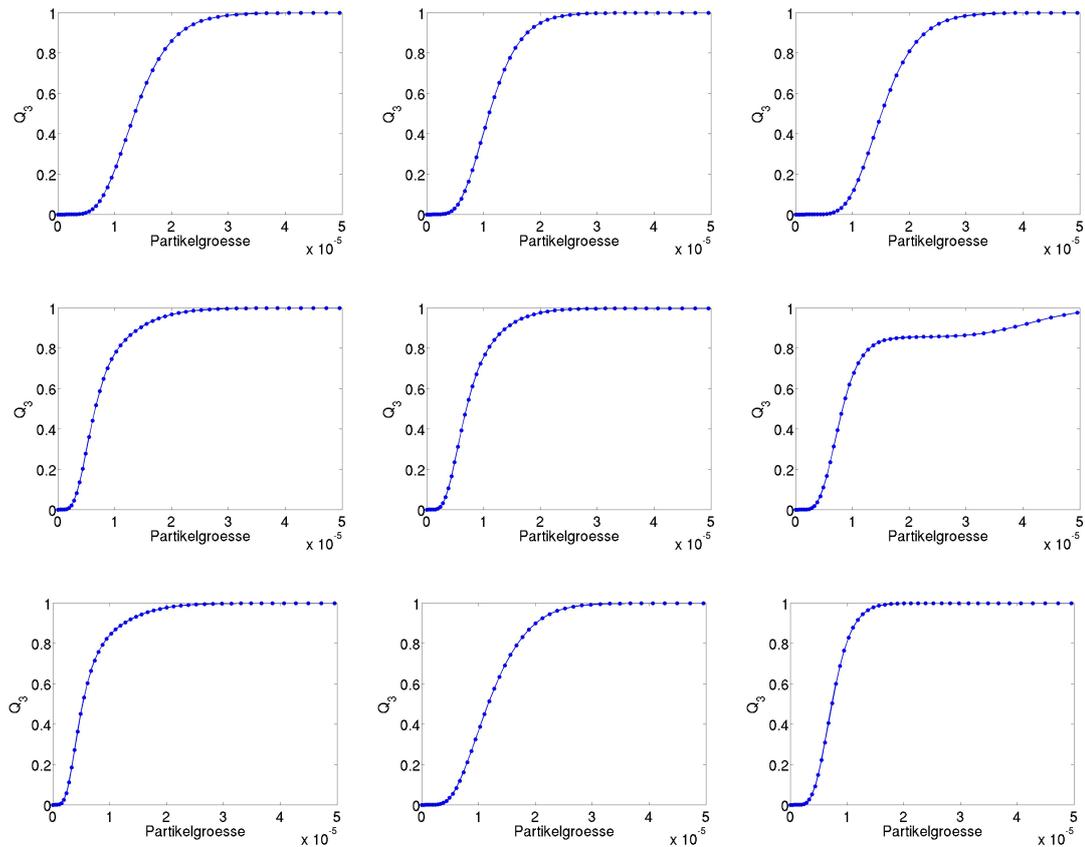


Abbildung IV.4: Kumulative Volumenanteile für die verschiedenen Einströmungspositionen

Volumenanteil an den Modalwerten deutlich höher als 10^5 und die dazugehörigen Medianwerte sind erheblich geringer als 10^{-5} . Insbesondere liegen alle Ergebnisse mit der linken Einströmung im mittleren Bereich der Reaktorbegrenzung in dieser Klasse.

Der Median des Volumenanteils steht mit der mittleren Partikelgröße,

$$\bar{d}_p = \int_{\tilde{d}_{p,\min}}^{\tilde{d}_{p,\max}} \tilde{d}_p q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) d(d_p),$$

in Beziehung, die wiederum von der mittleren Verweilzeit der Partikel im Reaktor abhängt. Die mittlere Partikelgröße ist in Tabelle IV.5 für die verschiedenen Positionen der Reaktoreinströmungen angegeben. Allerdings besitzt der Median eine größere Aussagekraft als die mittlere Partikelgröße und daher wird für die mittlere Partikelgröße, ebenso wie für die Modalwerte, auf eine Darstellung über die Zeit verzichtet [WK04, Sti09].

Die Abbildungen IV.6, IV.7 und IV.8 zeigen die Ergebnisse der SUPG-Methode zur

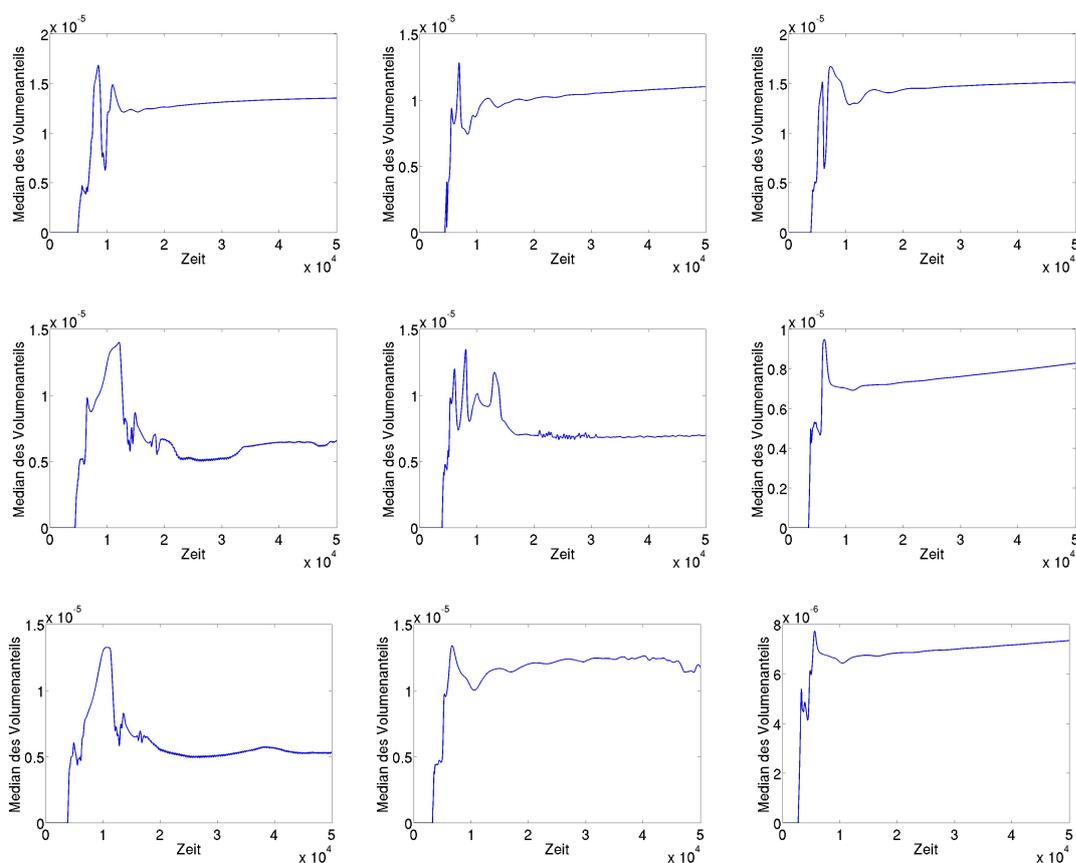


Abbildung IV.5: Median des Volumenanteils für die verschiedenen Einströmungspositionen

mittlere Partikelgröße		\bar{d}_p
1.4313e-05	1.1656e-05	1.5849e-05
7.9311e-06	8.2521e-06	1.2936e-05
6.6280e-06	1.2605e-05	7.7211e-06

Tabelle IV.5: Mittlere Partikelgröße für die verschiedenen Einströmungspositionen

Stabilisierung der Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen des gekoppelten Systems. Es werden die verschiedenen Konzentrationsfelder der Reaktanten CaCl_2 und Na_2CO_3 , sowie ihres gelösten Produktes CaCO_3 für die verschiedenen Einströmungspositionen dargestellt.

Die Abbildung IV.6 zeigt dabei die Konzentration des an der linken Reaktorbegren-

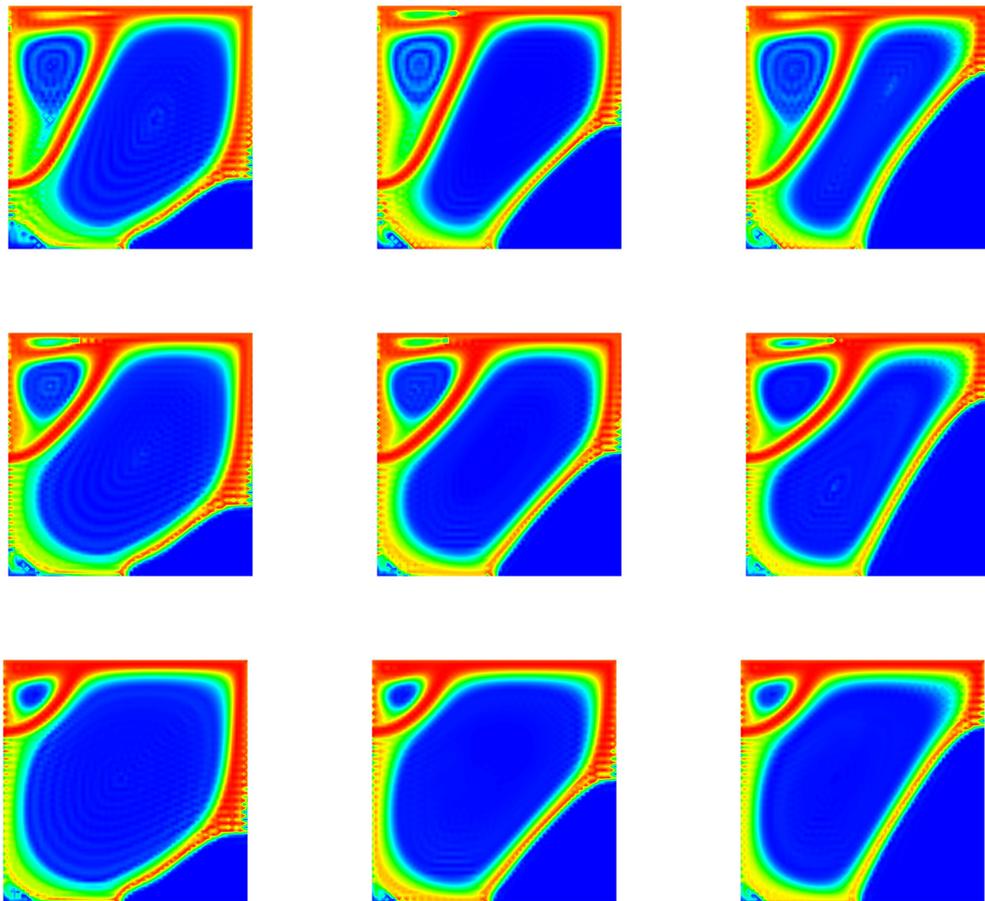


Abbildung IV.6: Konzentrationsfelder des Reaktanten CaCl_2 für die verschiedenen Einströmungspositionen

zung einströmenden Eduktes CaCl_2 zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 20000\text{s}$. Das auf der gegenüberliegenden Reaktorseite eintretende Edukt Na_2CO_3 ist in Abbildung IV.7 zum gleichen Zeitpunkt dargestellt. Die Struktur des Strömungsfeldes der Hintergrundlösung aus Abbildung IV.2 lässt sich dabei gut in den einzelnen Konzentrationsfeldern erkennen. Die Substanzen werden entlang des großen mittleren Wirbels und der beiden kleineren Wirbel in der linken oberen und der rechten unteren Ecke transportiert.

Dabei verteilt sich das CaCl_2 ausgehend von der linken Einströmung entlang des großen mittleren Wirbels und der oberen Reaktorbegrenzung bis zur rechten Einströmung. Von dort aus wird es durch die Wachstumsregion in Richtung der Ausströmung transportiert und gelangt dann wieder zum Ausgangspunkt zurück. Die Konzentration des auf der rechten Seite einströmenden Na_2CO_3 verteilt sich fast ausschließlich im Bereich des Wirbels in der rechten unteren Ecke und wird von diesem entlang der

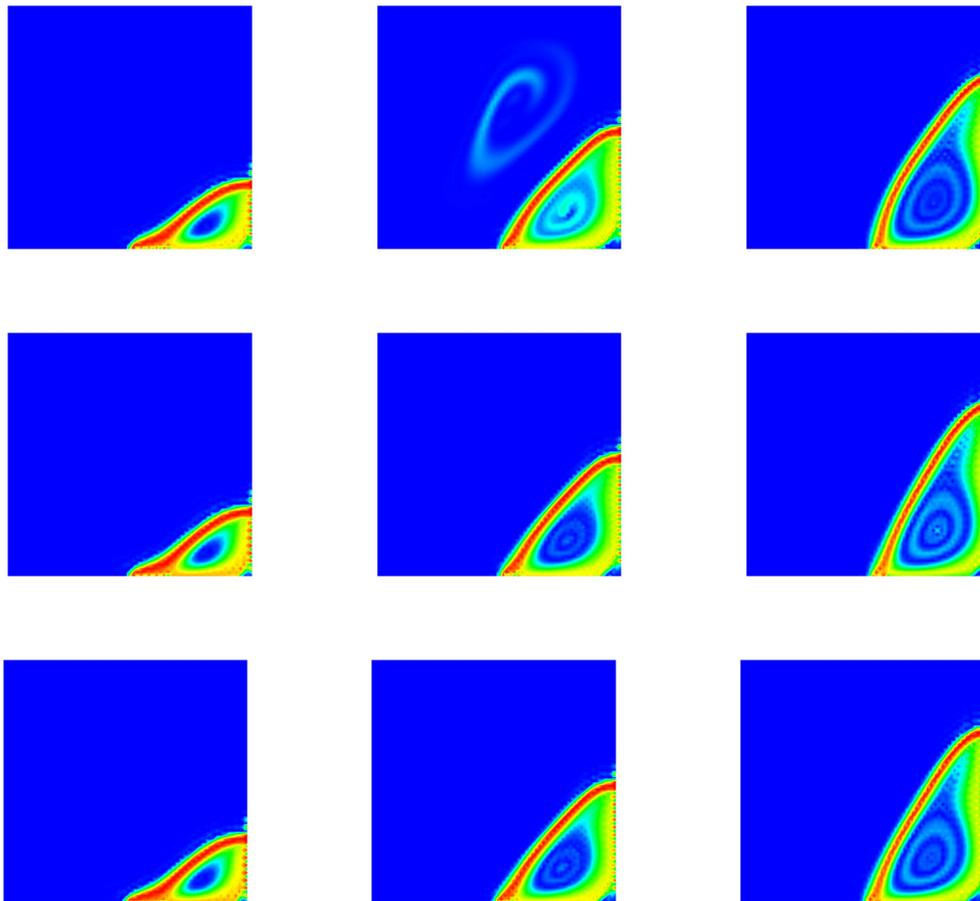


Abbildung IV.7: Konzentrationsfelder des Reaktanten Na_2CO_3 für die verschiedenen Einströmungspositionen

Seitenwände und des großen mittleren Wirbels transportiert.

Die Abbildung IV.8 zeigt die Konzentrationsfelder des gelösten Reaktionsproduktes CaCO_3 . Man sieht deutlich, dass sich die Konzentration hauptsächlich in dem Bereich befindet, der von der rechten Einströmung, der Auströmung und dem großen mittleren Wirbel begrenzt wird. Dies entspricht dem Gebiet, in dem sich auch die beiden Reaktanten am stärksten durchmischen, was sich in den Abbildungen IV.6 und IV.7 widerspiegelt.

Dieser Bereich bildet für die bereits niedergeschlagenen Partikel die Wachstumsregion und daher spielt sich der größte Teil des Wachstumsprozesses in diesem Teil des Reaktors ab. Dabei ist eine lange Verweilzeit im Reaktor entscheidend für die Granulation der Partikel [RDHM01] und bedeutet, dass sie nicht sofort durch die Auströmung ausgeschieden werden, sondern dem Strömungsfeld der Lösung entlang des großen

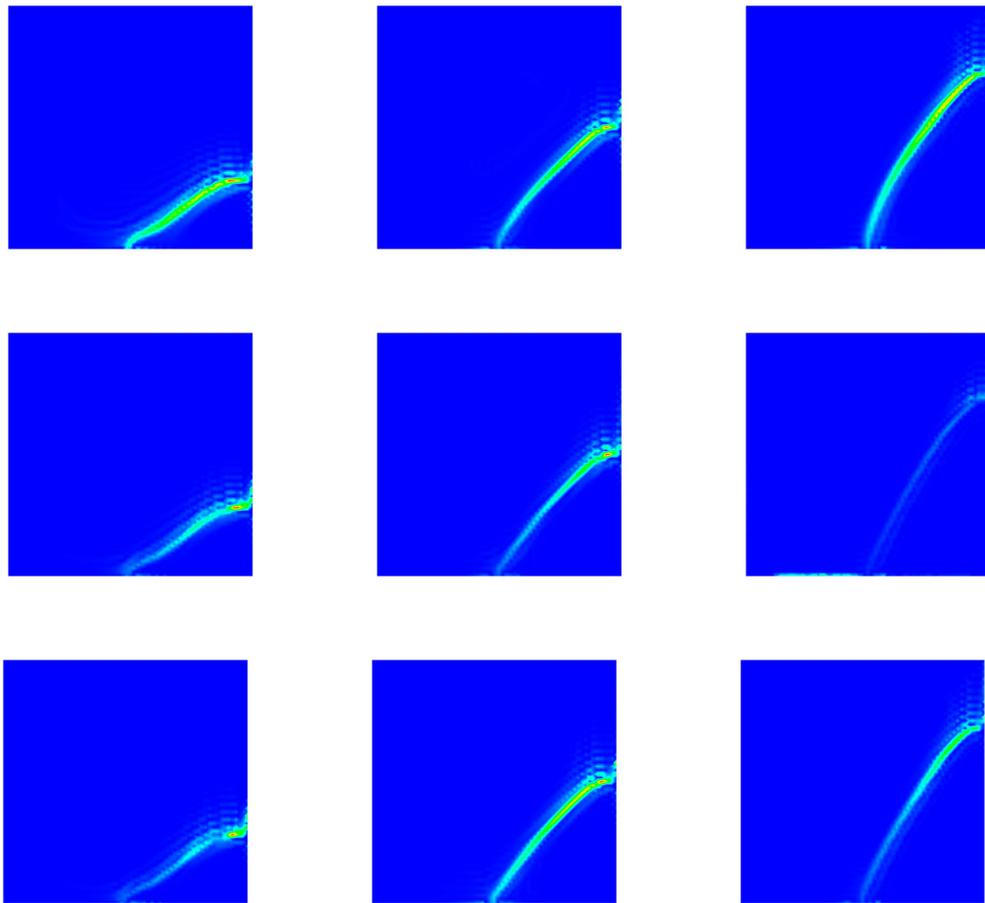


Abbildung IV.8: Konzentrationenfelder des gelösten Produktes CaCO_3 für die verschiedenen Einströmungspositionen

mittleren Wirbels oder des kleineren Wirbels in der rechten unteren Ecken folgen und daher noch einmal in die Wachstumszone eintreten. Dies ermöglicht den Partikeln erneut Moleküle des gelösten CaCO_3 anzulagern. Darüber hinaus ist dies auch das Entstehungsgebiet der Nukleationskerne der Fällungsreaktion. Spätere Untersuchungen der Partikelgrößenverteilung in §3.3 werden die hier gemachten Beobachtungen weiter bestätigen. Dieses Verhalten der Partikel scheint durch eine Positionierung der linken Einströmung im unteren Bereich der Reaktorbegrenzung begünstigt zu werden [JMR⁺].

Der höchste Wert bei den Volumenanteilen und der kleinste Wert des Medians traten bei der linken Einströmung im oberen Bereich und der rechten Einströmung im unteren Bereich der Reaktorbegrenzung auf. In dieser Kombination ist die Region, in der vorrangig das Wachstum stattfindet am Kleinsten und folgerichtig treten hier auch

vermehrt kleine Partikel aus dem Reaktor aus. Platziert man die beiden Einströmungen im mittleren Bereich gegenüberliegend, dann ist die Wachstumsregion am größten und die Verweilzeit in ihr am längsten. Dies zeigt sich auch in den Ergebnissen, da für diesen Fall der Median den höchsten Wert annimmt. Bemerkenswert ist bei diesen Betrachtungen des Volumenanteils der kleine, zweite Hochpunkt im Ergebnis mit der linken Einströmung im mittleren Bereich und der rechten Einströmung im oberen Bereich der Reaktorbegrenzung.

Der Nukleationsprozess der Partikel startet kurz nach dem ersten Kontakt der beiden Reaktanten CaCl_2 und Na_2CO_3 , wenn die Sättigungskonzentration erreicht ist und genügend Nukleationskeime ausgebildet wurden §2. Dies ist hier bei etwa 2700s bis 4900s der Fall, abhängig von der Position der beiden Einströmungen. Danach kann man in allen Varianten der Einströmungen ein oszillatorisches Verhalten des Medians $\tilde{d}_{p,50}$ in den Abbildungen IV.5 erkennen. Nach einer gewissen Zeitspanne stocken die Oszillationen und der Wert des Medians bleibt, mit einem leichten Anstieg, mehr oder weniger auf einem gleichen Level. Allerdings gibt es auch Simulationen, in denen auch zu späteren Zeitpunkten Oszillationen des Medians auftreten [JMR⁺].

An dieser Stelle sei noch auf die Ergebnisse aus [JMR⁺] hingewiesen, da dort die SUPG-Methode und das Samarskij-Upwind-Verfahren zur Stabilisierung der Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen miteinander verglichen wurden. Das Upwind-Verfahren ist, angewandt auf eine stationäre Konvektions-Diffusionsgleichung, eine monotone lineare Stabilisierung erster Ordnung. Aufgrund der Monotonie des Upwind-Schemas zeigen die Lösungen keine störenden Oszillationen, tendieren allerdings dazu, wegen der geringen Ordnung zu verschmieren.

Wenn das Samarskij-Upwind-Verfahren auf zeitabhängige Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen angewandt wird, die von der Größe des Reaktionsterms, der Zeitschrittlänge und der numerischen Quadratur zur Evaluierung der Massenmatrix abhängen, dann verliert das Verfahren seine Monotonie-Eigenschaften [JMR⁺]. Nichtsdestotrotz zeigen die numerischen Ergebnisse immer noch die Tendenz, die Lösungen zu verschmieren. In [JMR⁺] zeigt sich auch, dass die Verschmierungen des Samarskij-Upwind-Verfahrens einen massiven Einfluss auf den Volumenanteil und den Median besitzen. Die durch das Verschmieren größere Verbreitung der Partikel im Reaktor und die damit verbundene längere Verweilzeit, führten in [JMR⁺] zu unphysikalisch großen Partikeln und schließlich zu einem explodieren (engl.: blow-up) der Rechnungen.

Als Fazit kann man sagen, dass die SUPG-Methode zur Stabilisierung der Finite-Element-Methode erheblich bessere Ergebnisse liefert, als das Samarskij-Upwind-Verfahren, dessen Ergebnisse sehr verschmiert und damit nutzlos sind [JMR⁺]. Die Ergebnisse der SUPG-Methode entsprechen stärker den Erwartungen an den Median, den Volumenanteil und an die Verteilung des gelösten Reaktionsproduktes innerhalb des Reaktors. Wegen der auftretenden unphysikalischen Oszillationen sind aber auch diese Ergebnisse nicht befriedigend.

§3.2 Ergebnisse mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren

Da in den Simulationen mit der SUPG–Methode zur Stabilisierung der reaktions- und konvektionsdominierten Gleichungen unphysikalische Oszillationen auftraten und deren Größe zu Schwierigkeiten bei der Stabilität der Simulationen führte, lieferten diese eher unbefriedigende Ergebnisse. Trotz der Anwendung von einigen cut–off–Techniken, die negative und positive Oszillation verhindern sollen, verursachten die Oszillationen ein Aufblasen der numerischen Ergebnisse [JMR⁺]. Wie in §3.1.2 beschrieben, wurden aufgrund dieser Erfahrungen umfangreiche numerische Studien durchgeführt [JS08, JS09], die zu dem Schluss kamen, dass die FEM–FCT–Verfahren für diese Probleme besser geeignet sind. Daher findet im Folgenden eine Konzentration auf numerische Ergebnisse mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren statt. Die Vorteile des FEM–FCT–Verfahrens gegenüber der SUPG–Methode kann man bei einem Vergleich der Abbildungen IV.6, IV.7 und IV.9 gut erkennen. Die Struktur der Konzentrationsfelder ist annähernd gleich, aber in den Ergebnissen mit dem linearen FEM–FCT–Verfahren zeichnen sich keine unphysikalischen Oszillationen ab.

Zusätzlich wird im Weiteren der Einfluss von verschiedenen Diskretisierungen, unterschiedlichen Zeitschrittweiten und verschiedenen Verfeinerungen der inneren Koordinate auf die numerischen Ergebnisse der Populationsbilanz untersucht. Aufgrund der Ergebnisse der Untersuchungen der verschiedenen Einströmungspositionen wird im Folgenden nur der Fall betrachtet, bei dem sich beide Einströmungen im mittleren Bereich gegenüberliegend befinden.

§3.2.1 Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-3}$

Wie man schon in dem Vergleich der verschiedenen Positionen der Einströmungen sehen konnte, führen Simulationen mit $u_\infty = 10^{-3}$ oder $Re = 1000$ zu einem Strömungsfeld dessen Strukturen nur kleine zeitliche Änderungen aufzeigen. Diese Beobachtung lässt sich auch auf die Konzentrationsfelder übertragen. Eine typische Form des Strömungsfeldes der Lösung und der Verteilungen der Konzentrationen sieht man in Abbildung IV.9, während die Abbildungen IV.10 und IV.11 einen charakteristischen Verlauf des Medians des Volumenanteils für die verschiedenen numerischen Verfahren zeigen.

Die Struktur des Strömungsfeldes der Lösung wird durch die Bewegung der oberen Reaktorbegrenzung dominiert, was sich in der Existenz des großen Wirbels in der Mitte des Reaktors widerspiegelt. Am Verlauf des Medians kann man sehen, dass die ersten Partikel die Ausströmung nach etwa 10000 Sekunden erreichen. Kurz nach dem Beginn der Fällungsreaktion zeichnen sich einige Spitzen in der Darstellung des Medians ab. Nach dem lokalen Aufbau der zweiten, dispersen Phase geht der Verlauf des Medians in periodisches Verhalten über, dessen Periodenlänge und Oszillationsamplitude vom verwendeten numerischen Verfahren zur Lösung der Populationsbilanz abhängen. In Tabelle IV.6 sind die Mittelwerte des Medians des Volumenanteils für die verschie-

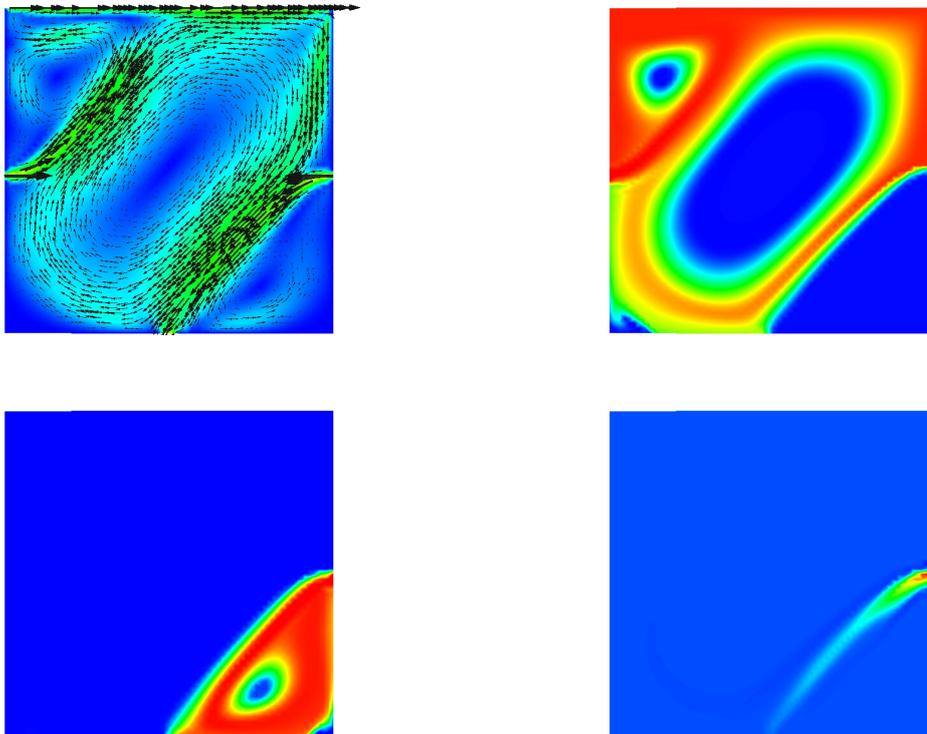


Abbildung IV.9: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-3}$ mit dem FEM-FCT-Verfahren; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 30000\text{s}$; Strömungsfeld (oben links), Konzentrationen CaCl_2 (oben rechts), Na_2CO_3 (unten links) und CaCO_3 (unten rechts)

denen Diskretisierungen, die verwendeten Gitter und verschiedene Zeitschrittweiten dargestellt.

Ein Vergleich der Werte zeigt, dass die Zeitschrittlänge einen großen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Die Ergebnisse mit einer Zeitschrittlänge von $\Delta t = 0.005$ ($\Delta \tilde{t} = 5\text{s}$) weisen starke Unterschiede zu den feineren Zeitschritten auf, insbesondere für die Euler-Verfahren erster Ordnung, FWE-UPW-FDM und BWE-UPW-FDM. Diese geben zu erkennen, dass ihre Ergebnisse zu ungenau sind und der gewählte Zeitschritt $\Delta t = 0.005$ zu groß ist. Auch eine Verfeinerung des Gitters der inneren Koordinate führt noch zu beachtlichen Änderungen in den zeitgemittelten Medianen an der Auströmungsöffnung. Hinsichtlich dieser Kenngröße der Fällungsreaktion, ergeben alle Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz, für hinreichend kleine Zeitschritt-

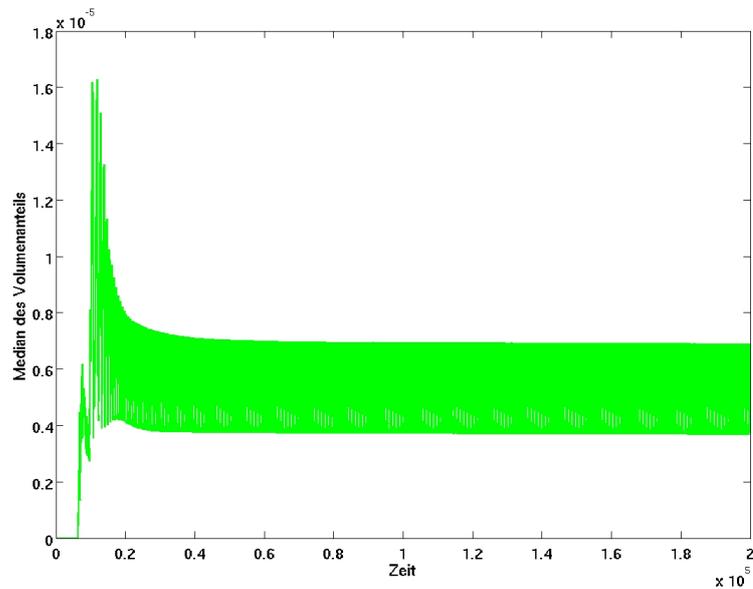


Abbildung IV.10: Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils für $u_\infty = 10^{-3}$; FEM-FCT-Verfahren mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$

weiten, numerische Ergebnisse von gleicher Größenordnung. Ein Konvergenzverhalten der Ergebnisse kann noch nicht beobachtet werden und ein asymptotischer Grenzwert scheint noch nicht erreicht zu sein [JR10].

In Abbildung IV.11 sind die Mediane des Volumenanteils für die drei verschiedenen Diskretisierungen der Populationsbilanz in einem Ausschnitt des Zeitintervalls dargestellt. Dabei sieht man, dass alle Verfahren ein oszillierendes Verhalten zeigen. Allerdings sind die Oszillationen der beiden Euler-Verfahren, FWE-UPW-FDM und BWE-UPW-FDM, kleiner als die des FEM-FCT-Verfahren mit dem Crank-Nicolson-Verfahren. Die Ursache könnte in der höheren Diffusivität der beiden Verfahren erster Ordnung liegen [JR10].

Tabelle IV.7 zeigt die Rechenzeiten pro Zeitschritt der einzelnen Verfahren, für verschiedene Zeitschrittlängen und die drei unterschiedlich feinen Diskretisierungen der Partikelgröße. Das Euler-Verfahren FWE-UPW-FDM führt hier zu einem geringfügigen Overhead im Vergleich zur Simulation des Strömungsfeldes und der chemischen Reaktion. Die angegebenen Rechenzeiten sind für dieses Verfahren im Wesentlichen die Rechenzeiten, die zum Lösen der Navier-Stokes-Gleichungen und der Reaktionsgleichungen des Populationsbilanzsystems benötigt werden. Die Rechenzeiten der beiden impliziten Verfahren steigen mit der Anzahl der Gitterschichten der inneren Koordinate. Für das BWE-UPW-FDM Verfahren liegt der Overhead hauptsächlich bei der

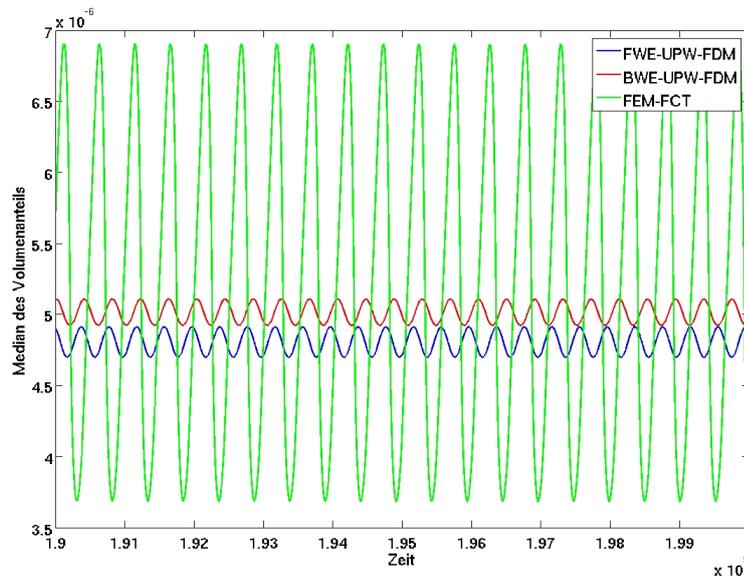


Abbildung IV.11: Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils für $u_\infty = 10^{-3}$; alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.00125$, ($\tilde{\Delta t} = 1.25s$), $L = 64$

Lösung der Populationsbilanzgleichung. Das FEM–FCT–Verfahren benötigt zusätzlich noch Rechenzeit durch das aufwendige Assemblieren der Matrizen und der Berechnung der Flusskorrektur.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die impliziten Verfahren etwas bessere Ergebnisse für den Median des Volumenanteils für den größten Zeitschritt, $\Delta t = 0.005$, liefern. Indessen verkleinern sich die Unterschiede zum FWE–UPW–FDM Verfahren für kleinere Zeitschritte. In diesem Beispiel, mit $u_\infty = 10^{-3}$, ergeben alle Diskretisierungen für hinreichend kleine Zeitschrittweiten qualitativ ähnliche Simulationsergebnisse. Dabei war das explizite Verfahren bei weitem das Schnellste.

§3.2.2 Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-2}$

In diesem Abschnitt werden Simulationsergebnisse mit einem stark zeitabhängigen Strömungsfeld mit wechselnden Strukturen betrachtet. Momentaufnahmen sind in den Abbildungen IV.12 und IV.13 dargestellt. Der Einfluss der sich bewegenden oberen Reaktorbegrenzung auf das Strömungsfeld der Lösung ist hier viel geringer, da, bedingt durch die höhere Reynolds–Zahl, die Strömung durch die beiden gegenüberliegenden Einströmungen dominiert wird. Für $\Delta t = 0.000625$ ($\tilde{\Delta t} = 0.0625s$) war eine Dämpfung für den gekoppelten Mehrgitter–Vorkonditionierer zum Lösen der linearisierten und diskretisierten Navier–Stokes–Gleichungen notwendig. Die Zeitschrittweite

		$\Delta t = 0.005$	$\Delta t = 0.0025$	$\Delta t = 0.00125$
L	Diskretisierung	$\tilde{\Delta t} = 5s$	$\tilde{\Delta t} = 2.5s$	$\tilde{\Delta t} = 1.25s$
32	FWE-UPW-FDM	4.096e-6	6.855e-6	6.365e-6
	BWE-UPW-FDM	5.363e-6	7.061e-6	6.624e-6
	FEM-FCT	5.559e-6	5.611e-6	6.022e-6
48	FWE-UPW-FDM	3.391e-6	5.743e-6	5.296e-6
	BWE-UPW-FDM	4.446e-6	5.983e-6	5.520e-6
	FEM-FCT	4.618e-6	4.974e-6	5.467e-6
64	FWE-UPW-FDM	3.055e-6	5.235e-6	4.809e-6
	BWE-UPW-FDM	4.030e-6	5.487e-6	5.020e-6
	FEM-FCT	4.246e-6	4.672e-6	5.196e-6

Tabelle IV.6: Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-3}$; Mittelwerte des Medians des Volumenanteils

$\Delta t = 0.005$ ($\tilde{\Delta t} = 0.5s$) hat sich als zu groß für eine Anwendung des FEM-FCT-Verfahrens zur Simulation der chemischen Reaktion herausgestellt, da sie die CFL-Bedingung (III.25) verletzt.

In den Tabellen IV.8 und IV.9, sowie in den Abbildungen IV.14 und IV.15 sind die Ergebnisse für die drei verschiedenen Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz dargestellt. Dabei kann man sehen, dass die mittlere Partikelgröße für das Strömungsfeld mit $Re = 10000$ größer ist als in den Simulationen mit $Re = 1000$. Dies liegt zum einen an der höheren Verweildauer der Partikel im Reaktor, die durch das ungleichmäßige Strömungsfeld der Lösung begünstigt wird und zum anderen an der Tatsache, dass bedingt durch die zeitabhängig wechselnden Strukturen des Strömungsfeldes, das gelöste Produkt, $CaCO_3$, viel stärker im Reaktor verteilt wird. Dadurch ist nicht nur eine Wachstumsregion wie in Abbildung IV.9 vorhanden, sondern es findet ein ständiger Wechsel der Reaktorbereiche mit Übersättigung statt. Dies begünstigt die Bildung der Nukleationskeime und das Wachstum der Partikel.

Aus Tabelle IV.8 und den Abbildungen IV.14 und IV.15 geht hervor, dass die Ergebnisse der beiden Euler-Verfahren sehr ähnlich sind. Im Gegensatz zu den Simulationen mit $u_\infty = 10^{-3}$ weichen hier die Ergebnisse des FEM-FCT-Verfahren mit der Crank-Nicolson-Zeitdiskretisierung zur Lösung der Populationsbilanz allerdings stark

L	Diskretisierung	$\Delta t = 0.005$	$\Delta t = 0.0025$	$\Delta t = 0.00125$
		$\Delta \tilde{t} = 5\text{s}$	$\Delta \tilde{t} = 2.5\text{s}$	$\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$
32	FWE–UPW–FDM	4.55	2.89	1.25
	BWE–UPW–FDM	5.51	3.90	2.36
	FEM–FCT	6.87	5.12	3.43
48	FWE–UPW–FDM	4.53	2.97	1.25
	BWE–UPW–FDM	6.74	5.20	2.99
	FEM–FCT	8.17	6.35	4.64
64	FWE–UPW–FDM	4.67	2.92	1.24
	BWE–UPW–FDM	7.86	5.63	3.70
	FEM–FCT	9.33	7.47	5.73

Tabelle IV.7: Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-3}$; mittlere Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden

ab, siehe Abbildungen IV.14 und IV.15. An dieser Stelle sei noch einmal betont, dass die Strömungsfelder in allen Simulationen die gleichen sind, da als Modellannahme eine Rückkopplung der Partikelbilanz auf die Navier–Stokes–Gleichungen nicht erlaubt ist.

In den Simulationen mit dem FEM–FCT–Verfahren erreichen die ersten Partikel die Ausströmung des Reaktors später als in den anderen Simulationen. Diesen Effekt kann man gut in den Darstellungen des Medians des Volumenanteils in den Abbildungen IV.14 und IV.15 erkennen. Der Grund hierfür könnte in dem starken Verschmieren der Euler–Verfahren erster Ordnung mit der Upwind–Stabilisierung erster Ordnung liegen. Die Ergebnisse der FEM–FCT–Verfahren berechnen auch vergleichsweise größere Partikel als die Euler–Verfahren. Dies zeigt sich in den Kurven des Medians, die für das FEM–FCT–Verfahren qualitative Unterschiede zu den anderen Verfahren zeigen. Das Gleiche gilt auch für die zeitgemittelten Medianwerte in Tabelle IV.8. Welche der Lösungen sich als genauer herausstellt, bedarf noch weiterer Untersuchungen. Da eine analytische Darstellung der Lösung der Populationsbilanz nicht bekannt ist und experimentelle Daten nur sehr schwer und oft nur eingeschränkt zu gewinnen sind, wird im nächsten Abschnitt §3.4 ein Modellproblem mit einer vorgeschriebenen Lösung untersucht.

In Tabelle IV.9 sind die Rechenzeiten der einzelnen Verfahren aufgelistet. Die darge-

		$\Delta t = 0.0025$	$\Delta t = 0.00125$	$\Delta t = 0.000625$
L	Diskretisierung	$\tilde{\Delta t} = 0.25\text{s}$	$\tilde{\Delta t} = 0.125\text{s}$	$\tilde{\Delta t} = 0.0625\text{s}$
32	FWE-UPW-FDM	1.328e-5	8.418e-6	9.032e-6
	BWE-UPW-FDM	1.368e-5	8.485e-6	9.064e-6
	FEM-FCT	3.294e-5	2.401e-5	2.833e-5
48	FWE-UPW-FDM	1.151e-5	6.919e-6	7.355e-6
	BWE-UPW-FDM	1.203e-5	6.975e-6	7.386e-6
	FEM-FCT	2.539e-5	1.613e-5	2.108e-5
64	FWE-UPW-FDM	1.125e-5	6.227e-6	6.591e-6
	BWE-UPW-FDM	1.207e-5	6.281e-6	6.621e-6
	FEM-FCT	1.947e-5	1.358e-5	1.850e-5

Tabelle IV.8: Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-2}$; Mittelwerte des Medians des Volumenanteils

stellte Situation ist im Wesentlichen gleich zu der in Tabelle IV.7 für die Simulationen mit $u_\infty = 10^{-3}$. Die längeren Rechenzeiten pro Zeitschritt bei den Rechnungen mit dem Zeitschritt $\Delta t = 0.000625$ im Vergleich mit dem Zeitschritt $\Delta t = 0.00125$ sind dem Einsatz einer Dämpfung bei dem gekoppelten Mehrgitter-Vorkonditionierer geschuldet. Vergleicht man die Rechenzeiten der beiden Euler-Verfahren erhält man in etwa die gleichen Ergebnisse, wobei das explizite Verfahren kürzere Rechenzeiten benötigt.

		$\Delta t = 0.0025$	$\Delta t = 0.00125$	$\Delta t = 0.000625$
L	Diskretisierung	$\Delta \tilde{t} = 0.25\text{s}$	$\Delta \tilde{t} = 0.125\text{s}$	$\Delta \tilde{t} = 0.0625\text{s}$
32	FWE-UPW-FDM	3.66	1.64	2.08
	BWE-UPW-FDM	4.57	2.40	2.79
	FEM-FCT	5.95	3.93	4.15
48	FWE-UPW-FDM	3.57	1.63	2.12
	BWE-UPW-FDM	4.96	2.77	3.10
	FEM-FCT	6.97	5.13	5.14
64	FWE-UPW-FDM	3.68	1.64	2.20
	BWE-UPW-FDM	5.11	3.11	3.37
	FEM-FCT	8.19	6.21	6.12

Tabelle IV.9: Numerische Studien für $u_\infty = 10^{-2}$; mittlere Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden

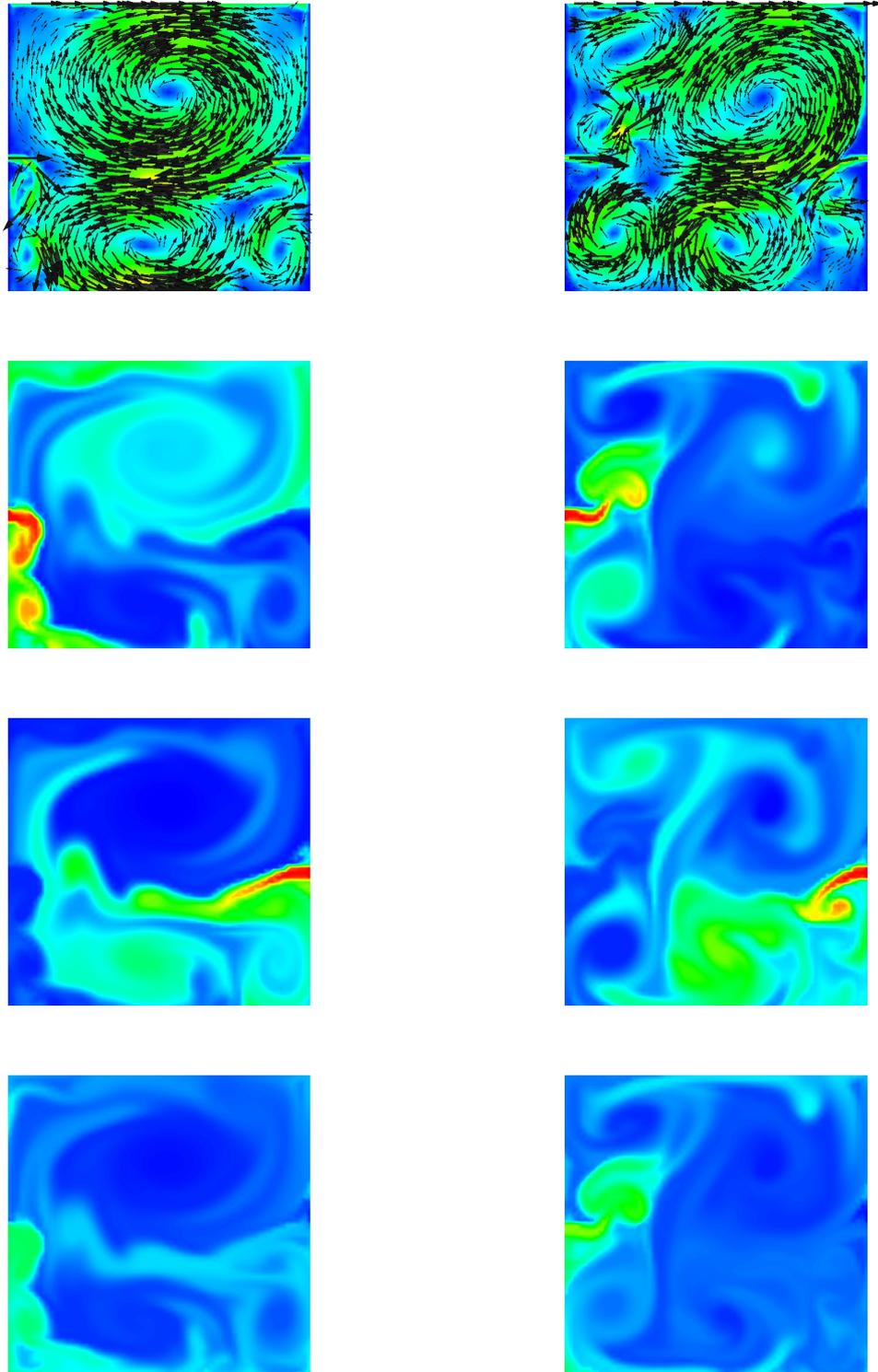


Abbildung IV.12: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ mit dem FWE-UPW-FDM; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zu den Zeitpunkten $\tilde{t} = 5000\text{s}$ (links) und $\tilde{t} = 10000\text{s}$ (rechts); von oben nach unten: Strömungsfeld, Konzentrationen CaCl_2 , Na_2CO_3 und CaCO_3

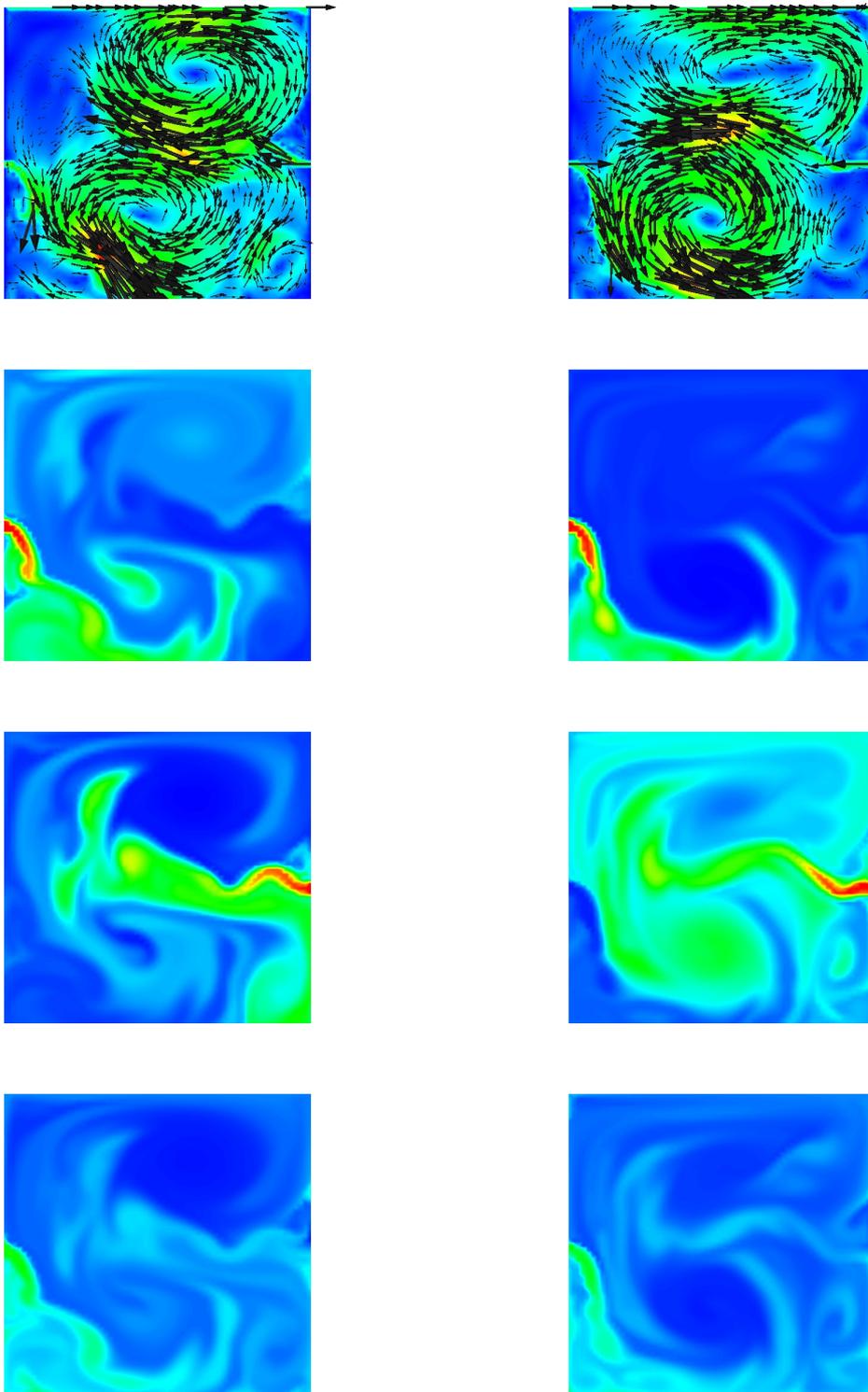


Abbildung IV.13: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ mit dem FWE-UPW-FDM; hier mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 1.25\text{s}$), $L = 64$ zu den Zeitpunkten $\tilde{t} = 15000\text{s}$ (links) und $\tilde{t} = 20000\text{s}$ (rechts); von oben nach unten: Strömungsfeld, Konzentrationen CaCl_2 , Na_2CO_3 und CaCO_3

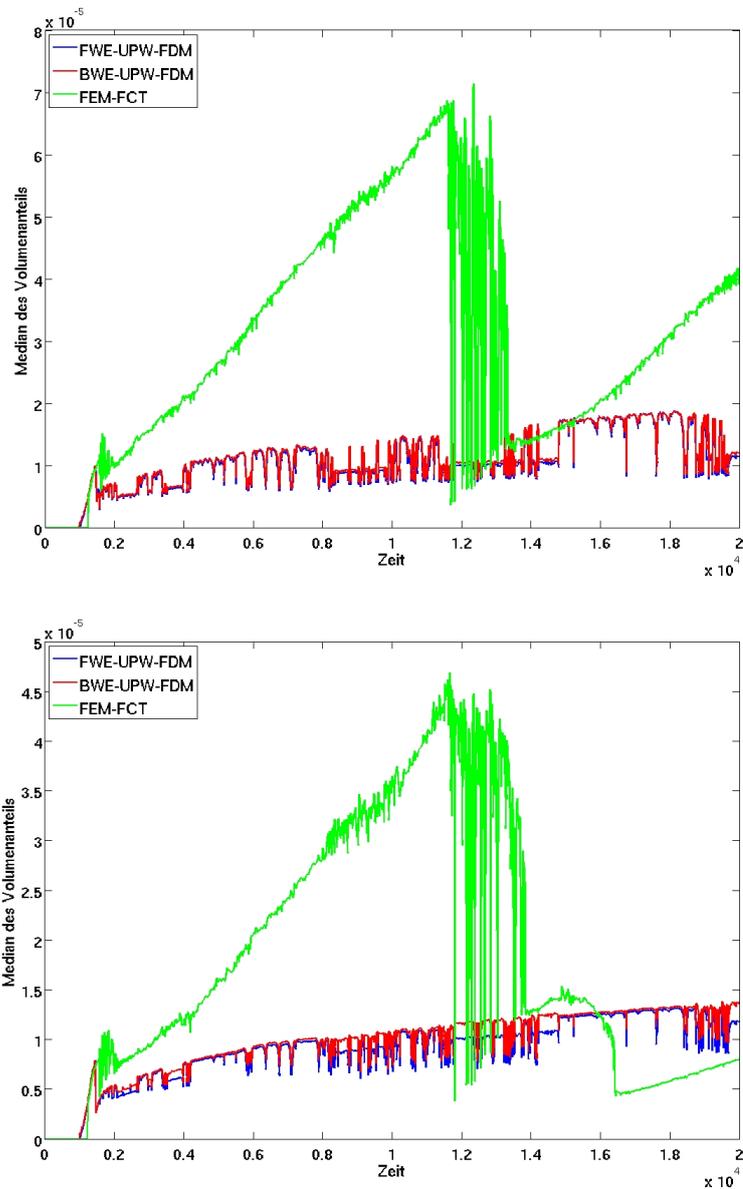


Abbildung IV.14: Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils in der Mitte der Ausströmung für $u_\infty = 10^{-2}$ und für alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.0025$, ($\tilde{\Delta t} = 0.25\text{s}$), $L = 32$ (oben); $\Delta t = 0.0025$, ($\tilde{\Delta t} = 0.25\text{s}$), $L = 64$ (unten)

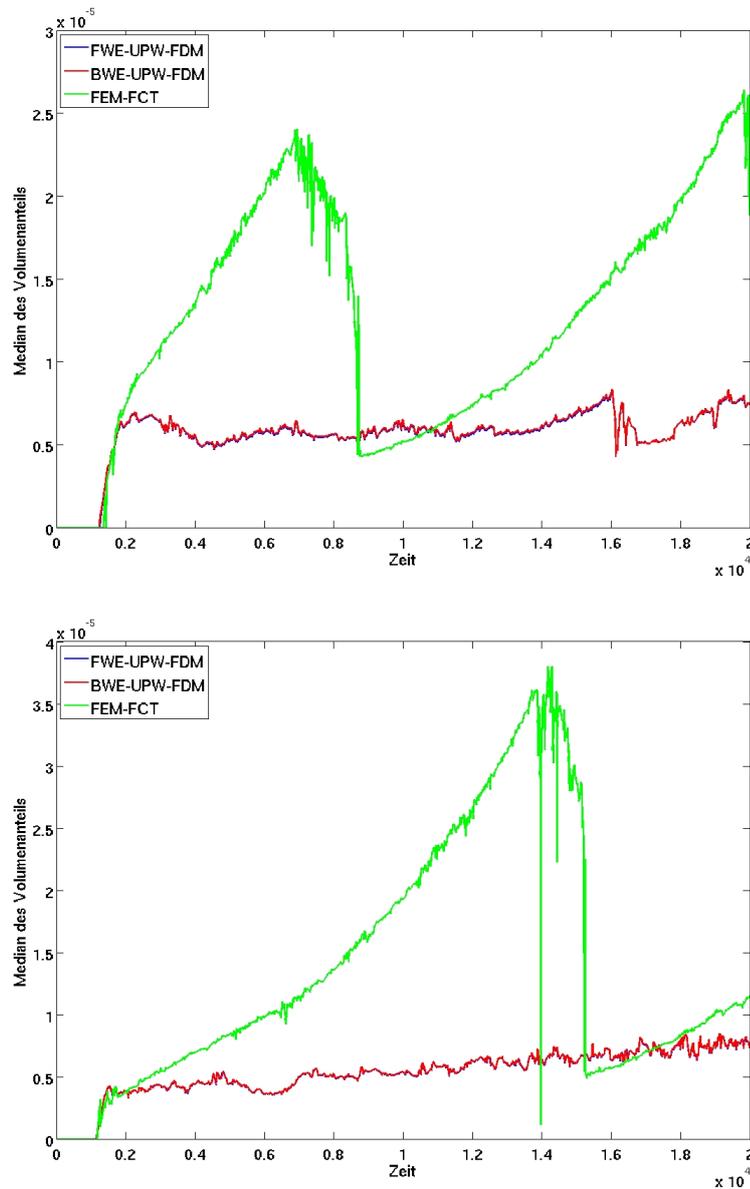


Abbildung IV.15: Typische Simulationsergebnisse für den Median des Volumenanteils in der Mitte der Ausströmung für $u_\infty = 10^{-2}$ und für alle drei Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz mit $\Delta t = 0.00125$, ($\Delta \tilde{t} = 0.125\text{s}$), $L = 64$ (oben); $\Delta t = 0.000625$, ($\Delta \tilde{t} = 0.0625\text{s}$), $L = 64$ (unten)

§3.3 Ergebnisse der Partikelgrößenverteilung

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse der Partikelgrößenverteilung der Fällungsreaktion vorgestellt. Da die Simulationen für einen zweidimensionalen Reaktor durchgeführt wurden, besitzt die Partikelgrößenverteilung hier für einen festen Zeitpunkt eine dreidimensionale Darstellung und kann durch Isoflächen und Schnitte illustriert werden. Die Abbildung IV.16 zeigt Schnitte durch die Partikelgrößenverteilung für feste Partikelgrößen. Die Grundflächen der dreidimensionalen Würfel entsprechen dabei dem zweidimensionalen Reaktor, während die dritte Dimension der einzelnen Würfel die Partikelgröße d_p dargestellt. Die ersten fünf Abbildungen zeigen die Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ für eine Strömung mit $u_\infty = 10^{-3}$ und aufsteigenden Werten für die Partikelgröße ($\tilde{d}_p = 1\mu\text{m}$, $\tilde{d}_p = 1.5\mu\text{m}$, $\tilde{d}_p = 2\mu\text{m}$, $\tilde{d}_p = 2.5\mu\text{m}$ und $\tilde{d}_p = 3\mu\text{m}$).

Die einzelnen Schnitte zeigen die Verteilungsdichte der Partikel von der angegebenen Partikelgröße. Da die Struktur der Strömung mit $u_\infty = 10^{-3}$ nur kleine zeitliche Änderungen aufzeigt, kann man in den einzelnen Schnitten gut die Wachstumsregion der Partikel erkennen. Diese liegt in dem Gebiet, in dem auch die Konzentration des gelösten Reaktionsproduktes am höchsten ist, siehe Abbildung IV.9 unten rechts. Der Schwerpunkt des Partikelwachstums liegt dabei kurz vor der Einströmung auf der rechten Reaktorseite. Das weitere Wachstum der Partikel findet dann hauptsächlich während ihres Transportes entlang des großen mittleren Wirbels in Richtung der Ausströmung statt.

Die Abbildung unten rechts in IV.16 zeigt die Partikelgrößenverteilung für $\tilde{d}_p = 2\mu\text{m}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 3000\text{s}$ in einer Strömung mit $u_\infty = 10^{-2}$. Da in diesem Fall durch das stark zeitabhängige Strömungsfeld die Konzentrationen und die niedergeschlagenen Partikel im Reaktor weiter verteilt werden, entstehen hier auch oberhalb der Einströmung auf der linken Reaktorseite Partikel. Dies kann bei Strömungen mit einer Reynolds-Zahl von $Re = 1000$ nicht beobachtet werden und entspricht den Ergebnissen, die auch die Darstellungen des Medians des Volumenanteils für die unterschiedlichen Strömungsfelder gezeigt haben.

Auf weitere Schnitte für das stark zeitabhängige Strömungsfeld wurde verzichtet, da hier keine Wachstumsregion besonders ausgezeichnet wird und die Abbildungen daher diesbezüglich weniger aussagekräftig sind.

Die Abbildung IV.17 zeigt verschiedene Isoflächen der Partikelgrößenverteilung zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ für eine Strömung mit $u_\infty = 10^{-3}$. Analog zu Abbildung IV.16 entspricht auch hier die Grundfläche der Würfel dem zweidimensionalen Reaktor und die dritte Dimension der Partikelgröße.

Zur Interpretation der einzelnen Isoflächen kann man sagen, dass diese zeigen, an welchen Stellen innerhalb des Reaktors welche Partikelgröße die gewählte Verteilungsdichte erreicht. Die in IV.17 dargestellten Isoflächen zeigen daher die Regionen des

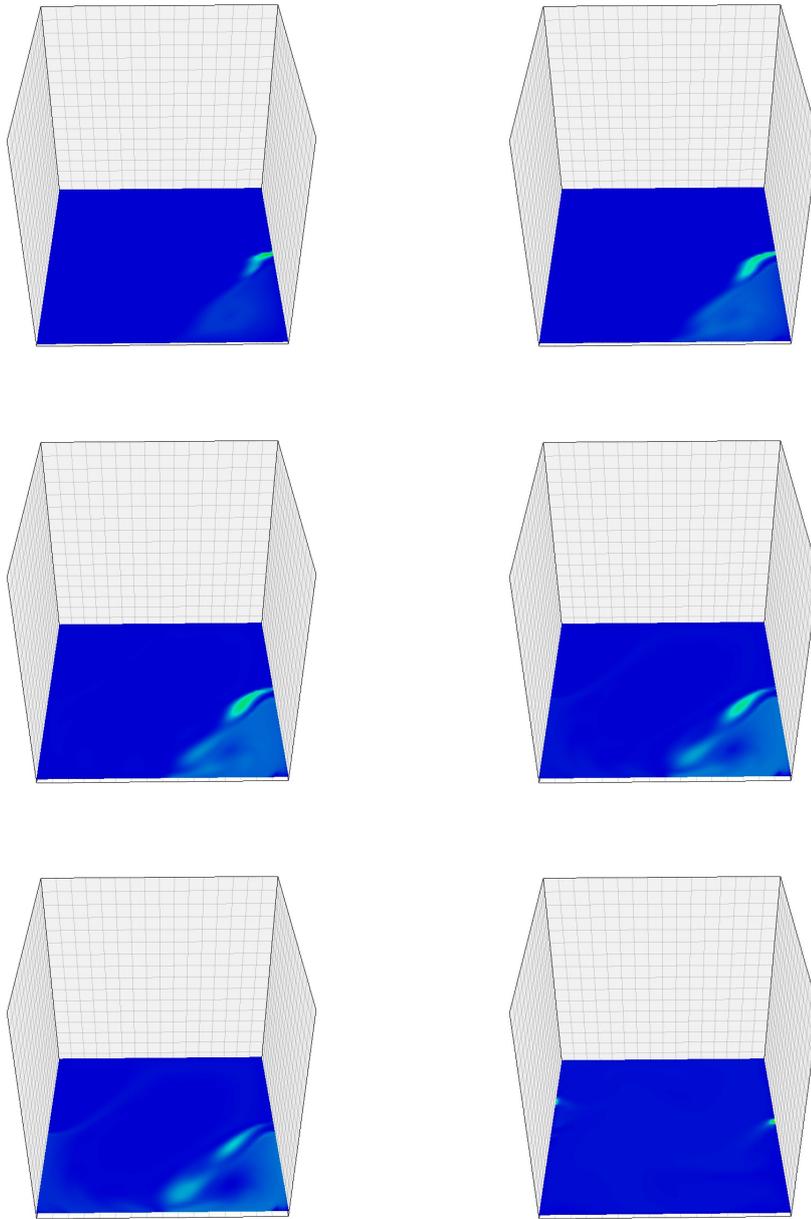


Abbildung IV.16: Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; Schnitt für eine feste Partikelgröße; $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000$ s; $\tilde{d}_p = 1 \mu\text{m}$ (oben links); $\tilde{d}_p = 1.5 \mu\text{m}$ (oben rechts); $\tilde{d}_p = 2 \mu\text{m}$ (Mitte links); $\tilde{d}_p = 2.5 \mu\text{m}$ (Mitte rechts); $\tilde{d}_p = 3 \mu\text{m}$ (unten links); $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 3000$ s; $\tilde{d}_p = 2 \mu\text{m}$ (unten rechts)

Reaktors, in denen genau die angegebene Verteilungsdichte vorherrscht. Durch die Glattheit der Partikelgrößenverteilung [Ram00] kann man sagen, dass an den Stellen, an denen die Isoflächen „Löcher“ zeigen, für jede Partikelgröße die Verteilungsdichte echt kleiner ist als der gewählte Wert.

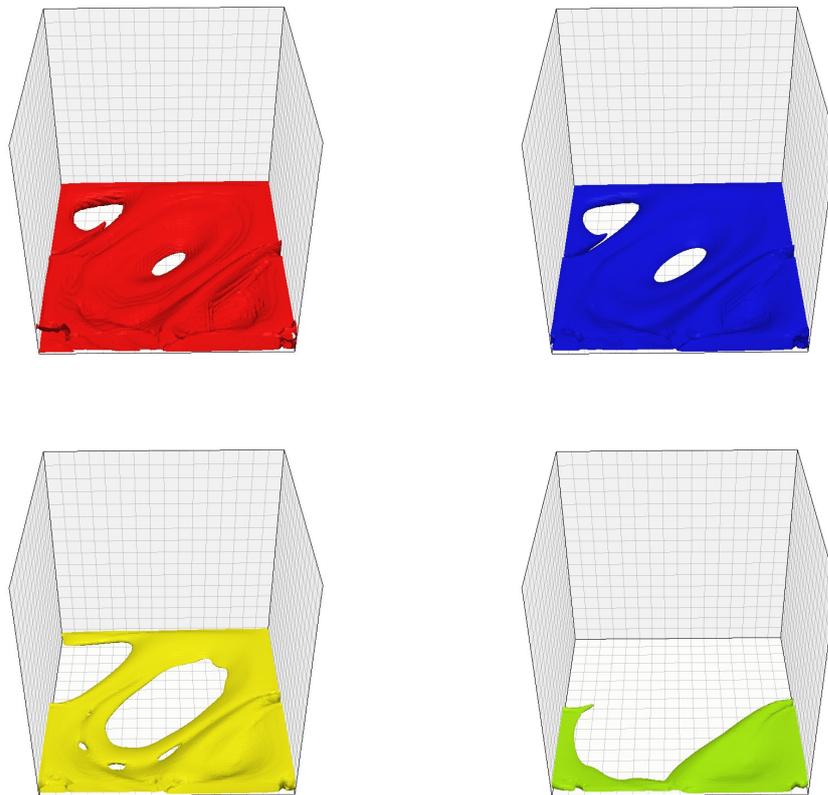


Abbildung IV.17: Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ mit linearem FEM-FCT-Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für $\tilde{f} = 1e2 \cdot f_\infty$ (oben links); $\tilde{f} = 1e3 \cdot f_\infty$ (oben rechts); $\tilde{f} = 1e4 \cdot f_\infty$ (unten links); $\tilde{f} = 1e5 \cdot f_\infty$ (unten rechts)

Die vier verschiedenen Isoflächen, die in Abbildung IV.17 dargestellt sind, zeigen auch, dass mit steigendem Wert der Partikelgrößenverteilung, die Partikelgröße, die diese Verteilungsdichte noch erreicht, abnimmt.

Darüber hinaus spiegelt sich auch in den Isoflächen die Struktur des Strömungsfeldes wider, wobei vor allem der große mittlere Wirbel und die beiden kleineren Wirbel in

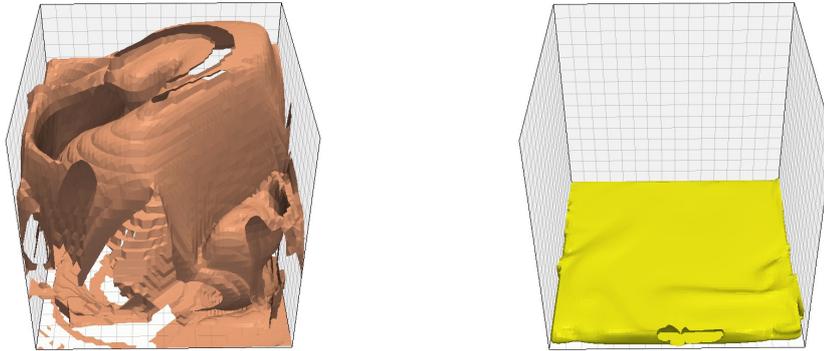


Abbildung IV.18: Typische Simulationsergebnisse für die Partikelgrößenverteilung; lineares FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 50000\text{s}$ und $f = 1e-5 \cdot f_\infty$ (links); $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 3000\text{s}$ und $f = 1e4 \cdot f_\infty$ (rechts)

der linken oberen und der rechten unteren Ecke gut erkennbar sind. Des Weiteren sind auch die beiden Einströmungen und die Ausströmung sichtbar.

Die Isoflächen in Abbildung IV.17 spiegeln die Wachstumsregion, die in Abbildung IV.16 ersichtlich ist, wider. Mit dem Ansteigen des Wertes der Partikelgrößenverteilung beschränkt sich der Bereich des Reaktors, in dem die Partikelgröße diesen Wert erreicht, immer stärker auf die Wachstumsregion der Partikel.

Die Abbildung IV.18 zeigt im linken Bild eine Isofläche für einen sehr geringen Wert der Partikelgrößenverteilung, $f = 1e-5 \cdot f_\infty$. Hier sieht man, dass es auch Regionen innerhalb des Reaktors gibt, in denen große Partikel, auch nahe der maximalen Partikelgröße, auftreten können.

Die rechte Darstellung in Abbildung IV.18 zeigt ein typisches Ergebnis einer Isofläche der Partikelgrößenverteilung in einer Strömung mit einer Reynolds–Zahl von $Re = 10000$. Analog zu Abbildung IV.16 ist auch hier durch die stärkere Durchmischung der Stoffe und die Dominanz der beiden Einströmungen keine Wachstumsregion besonders ausgezeichnet. Die Isofläche ist daher auch über den gesamten Reaktor verteilt und enthält nicht die für die weniger zeitabhängige Strömung charakteristischen Löcher. Auch die Struktur des Strömungsfeldes ist nicht so deutlich erkennbar, nur die beiden Einströmungen zeichnen sich leicht ab. Weitere Isoflächen für dieses Strömungsfeld werden nicht dargestellt, da diese alle eine sehr große Ähnlichkeit zu diesem aufzeigen und sich nur in den erreichten Partikelgrößen unterscheiden.

§3.4 Ein gekoppeltes System einer Konvektions–Diffusionsgleichung in 2D und einer Transportgleichung in 3D mit vorgegebener Lösung

Beim Vergleich der Ergebnisse zwischen den Finite–Differenzen–Verfahren mit dem Upwind–Schema und dem FEM–FTC–Verfahren in §3.2 wurden, in Verbindung mit einem stark zeitabhängigen Strömungsfeld, große qualitative Unterschiede sichtbar. Da für das lineare FEM–FCT–Verfahren bekannt ist, dass es für skalare lineare Probleme gute und genaue Lösungen liefert [JS08, JS09], dies aber nicht einfach auf nichtlineare Probleme, deren Gleichungen zusätzlich noch in verschiedenen Dimensionen definiert sind, übertragbar ist, soll dieser Fall im Folgenden genauer untersucht werden. Dazu wird nun als Testproblem

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \varepsilon \Delta c + \mathbf{b} \cdot \nabla c + \Lambda \max \{0, (c - 1)^5\} + (c - c_0) \int_{d_p,0}^1 z^2 f(z) dz = F_c \quad \text{in } (0, T) \times \Omega, \quad (\text{IV.9})$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{b} \cdot \nabla f + Gc \frac{\partial f}{\partial z} = F_f \quad \text{in } (0, T) \times \Omega \times (d_p, 0, 1) \quad (\text{IV.10})$$

betrachtet.

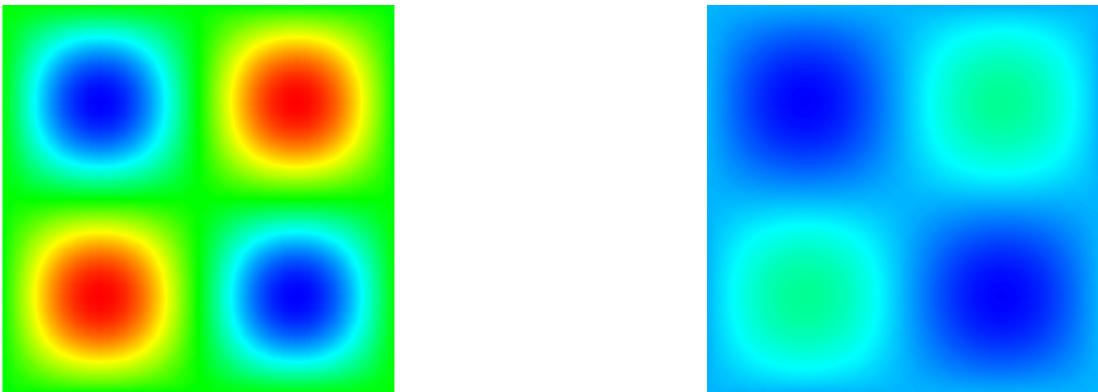


Abbildung IV.19: Simulationsergebnisse für das Testproblem (IV.9), (IV.10); $\Delta t = 0.001$, $N = 64$; FEM–FCT–Verfahren (links); FWE–UPW–FDM (rechts)

Dieses gekoppelte System ist so gewählt, dass es die gleiche Struktur besitzt, wie das ursprüngliche System der Fällungsreaktion in §2. Dabei werden die Parameter in den beiden Gleichungen (IV.9) und (IV.10) so gesetzt, dass sie von der gleichen

		FWE	FCT	FWE	FCT
	α	0.05		0.05	
N	β	1		20	
	$\ c - c_h\ _0$	1.13e-2	7.18e-3	1.05e-2	6.88e-3
32	$ c - c_h _1$	2.01e-1	1.97e-1	1.99e-1	1.92e-1
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	8.62	1.97	5.77	2.00
	$\ c - c_h\ _0$	4.42e-3	2.18e-3	4.02e-3	2.10e-3
64	$ c - c_h _1$	9.85e-2	9.54e-2	9.77e-2	9.27e-1
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	5.33	5.78e-1	3.87	5.76e-1
	$\ c - c_h\ _0$	2.33e-3	9.97e-4	2.13e-3	9.80e-4
128	$ c - c_h _1$	5.82e-2	5.23e-2	5.80e-2	5.07e-2
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	3.60	1.79e-1	2.86	1.78e-1

Tabelle IV.10: Gekoppeltes Testproblem mit vorgegebener Lösung, $\Delta t = 0.001$; Fehler zum Zeitpunkt $T = 1$

Größenordnung sind wie die Parameter in den eigentlichen Simulationen,

$$\varepsilon = 10^{-7}, \quad \Lambda = 5 \cdot 10^{-4}, \quad c_0 = 10^{-3}, \quad G = 0.02, \quad d_{p,0} = 10^{-5}.$$

Als divergenzfreies Konvektionsfeld wird

$$\mathbf{b} = \alpha \sin(\beta\pi t) \begin{pmatrix} 2(2y-1)(1-(2x-1)^2) \\ -2(2x-1)(1-(2y-1)^2) \end{pmatrix}$$

gewählt. Dabei kontrolliert der Parameter α die Größenschwankungen des Konvektionsfeldes, während der Parameter β die Oszillationen steuert. Um möglichst gut vergleichbare Ergebnisse zu bekommen, werden die Simulationen von (IV.9) und (IV.10) im Gebiet $\Omega = (0, 1)^2$ und dem Zeitintervall $(0, 1)$ durchgeführt. Des Weiteren werden die beiden rechten Seiten F_c und F_f und die Anfangs- und die Randwerte so gesetzt,

		FWE	FCT	FWE	FCT
	α	1		1	
N	β	1		20	
	$\ c - c_h\ _0$	4.67e-2	1.67e-3	3.17e-2	1.32e-2
32	$ c - c_h _1$	3.72e-1	2.88e-1	2.88e-1	2.59e-1
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	124.88	7.24	77.52	4.83
	$\ c - c_h\ _0$	2.27e-2	4.51e-3	1.48e-2	3.66e-3
64	$ c - c_h _1$	1.82e-1	1.30e-1	1.38e-1	1.19e-1
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	69.12	1.91	42.27	1.31
	$\ c - c_h\ _0$	1.16e-2	1.56e-3	7.59e-3	1.36e-3
128	$ c - c_h _1$	9.64e-1	6.69e-2	7.44e-2	6.22e-2
	$\ f - f_h\ _{l^2}$	37.04	5.34e-1	22.71	3.78e-1

Tabelle IV.11: Gekoppeltes Testproblem mit vorgegebener Lösung, $\Delta t = 0.001$; Fehler zum Zeitpunkt $T = 1$

dass

$$c(t, x, y) = 0.6t \sin\left(\frac{\pi t}{2}\right) (\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) + 1),$$

$$f(t, x, y, d_p) = 1000 \sin\left(\frac{\pi t}{2}\right) (2 - d_p^3 - d_p) (\sin(\pi x) \sin(\pi y) + 1),$$

eine vorgegebene Lösung von (IV.9) und (IV.10) ist. Da die gleichen numerischen Verfahren, die in §3.2 beschrieben wurden, auf das Testproblem angewendet werden sollen, ermöglicht dies eine Abschätzung der Genauigkeit dieser verschiedenen Diskretisierungen.

Aufgrund der Tatsache, dass die beiden Finite-Differenzen-Verfahren, FWE-UPW-FDM und BWE-UPW-FDM, in [JR10] ähnliche Ergebnisse lieferten, wird sich hier bei den Untersuchungen des Testproblems auf das FWE-UPW-FDM Verfahren beschränkt.

Bei den Simulationen wurde das Gebiet Ω in ein $N \times N$ Gitter, mit $N \in \{32, 64, 128\}$

zerlegt. Da das Gebiet der Bilanzgleichung, $\Omega \times (d_{p,0}, 1)$, zusätzlich noch über eine innere Koordinate verfügt, wird dieses in ein $N \times N \times N$ Gitter unterteilt, wobei das Intervall der Eigenschaftskordinate analog zu (IV.1) diskretisiert wird. Darüber hinaus werden auch verschiedene Zeitschrittweiten getestet.

Allerdings zeigte sich in den Rechnungen, dass der Fehler in den Lösungen vom räumlichen Fehler dominiert wird und die verschiedenen Zeitschrittweiten nur eine untergeordnete Rolle spielten. Daher sind die nachfolgenden Tabellen IV.10 und IV.11 auf Simulationsergebnisse mit der Zeitschrittweite $\Delta t = 0.001$ beschränkt. In den Tabellen wird der Fehler der Konzentration c zum Endzeitpunkt $T = 1$ in der $H^1(\Omega)$ -Halbnorm und der $L^2(\Omega)$ -Norm angegeben. Da auch hier ein Finite-Differenzen-Verfahren zur Simulation einer Partikelgrößenverteilung f angewendet wurde, wird der Fehler von f in der diskreten l^2 -Norm,

$$\|f\|_{l^2} = \left(\frac{1}{(N+1)^3} \sum_{i=1}^{(N+1)^3} f_i^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

angegeben.

In den beiden Tabellen kann man ablesen, dass der Fehler abnimmt, wenn die Gitter verfeinert werden. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass keine Fehleranalyse für das lineare FEM-FCT-Verfahren bekannt ist, selbst für den Fall einer skalaren linearen Gleichung. Darüber hinaus ist das Testproblem ein gekoppeltes, nichtlineares System mit einem anisotropen Gitter in einer Richtung. Daher gibt es hier keine Erwartungswerte für die Konvergenzordnung, die auf einer mathematischen Analyse basieren. Dennoch scheint die angegebene Ordnung in den Tabellen IV.10 und IV.11 plausibel, da bei einer einmaligen Verfeinerung des Gitters und einer Halbierung des Zeitschrittes für das Finite-Differenzen-Verfahren, FWE-UPW-FDM, alle Fehler etwa um den Faktor 2 kleiner werden, wobei der Fehler $\|c - c_h\|_0$ der Konzentration sogar meist noch stärker abfällt.

Im Vergleich der Methoden kann man in den Tabellen sehr gut erkennen, dass die Ergebnisse mit dem FEM-FCT-Verfahren in jedem Fall genauer waren und die beobachtbaren Konvergenzordnungen für dieses Verfahren im Allgemeinen höher liegen. Die Unterschiede der Fehler sind, im Vergleich zum FWE-UPW-FDM-Verfahren, sehr viel größer, wenn die Variationen im Konvektionsfeld zunehmen. Daher werden im Fall $\alpha = 1$ für das FWE-UPW-FDM-Verfahren die Effekte der ungenauen Simulation der Partikelgrößenverteilung auf die Fehler der Konzentration gut sichtbar. Vergleichsweise geringe Auswirkungen auf die Fehler hat dagegen eine Veränderung der Oszillationen im Konvektionsfeld, $\beta = 20$, auch in Verbindung mit dem Parameter α . Diese Beobachtungen spiegeln sich ebenfalls in der Visualisierung der Simulation in Abbildung IV.19 wider.

Die Ergebnisse dieses Testbeispiels spiegeln die gemachten Beobachtungen und Er-

fahrungen in den Simulationen der Fällungsreaktion sehr gut wider. Ebenfalls wie im letzten Abschnitt §3.2.1, führen große Veränderungen in der Größe des Konvektionsfeldes zu größeren Unterschieden in den Ergebnissen mit den Finite-Differenzen-Verfahren und dem linearen FEM-FCT-Verfahren. Die dabei auftretenden Ungenauigkeiten beeinflussen die Finite-Differenzen-Verfahren mit einem Upwind-Schema sehr viel stärker als das lineare FEM-FCT-Verfahren und können daher für diese zu qualitativ anderen Ergebnissen in der Gleichung der Populationsbilanz führen.

§4 Ergebnisse der Simulationen in einem dreidimensionalen Gebiet

Analog zu der Konfiguration der numerischen Simulationen der Fällungsreaktion in einem zweidimensionalen Reaktor, die zu einer dreidimensionalen Beschreibung der Partikelgrößenverteilung führte, werden nun die Simulationsergebnisse in einem dreidimensionalen chemischen Reaktor vorgestellt. Hier tritt allerdings, als zusätzliche Schwierigkeit, die Problematik der Darstellung einer vierdimensionalen Größe auf. Da jede innere Koordinate einer zusätzlichen Dimension des Problems entspricht, stößt die Prozessvisualisierung schon bei der Betrachtung eines dreidimensionalen und damit realitätsnahen Reaktors an ihre Grenzen.

Der chemische Reaktor entspricht nun, analog zu Abschnitt §2.3, einem dreidimensionalen Rechteckgebiet, das in Abbildung IV.20 dargestellt ist.

Dabei werden hier die gleichen Modellannahmen getroffen wie für die Simulationen in dem zweidimensionalen Gebiet. Es wird also die gleiche isothermische Fällungsreaktion betrachtet, die durch das gekoppelte Populationsbilanzsystem aus Kapitel III beschrieben wird.

Im Unterschied zu den Simulationen in einem zweidimensionalen Reaktor, ist die hier in drei Dimensionen ablaufende Strömung allerdings turbulent und bedarf daher der Anwendung eines Turbulenzmodells. Dies wird im Folgenden mit der, in Kapitel II vorgestellten, projektions-basierten Finite-Element VMS-Methode realisiert, da diese für die turbulente Kanalströmung quantitativ und qualitativ gute Ergebnisse erzielte.

§4.1 Die numerische Methode

Die Zeit wird auch im dreidimensionalen Fall mit dem Crank-Nicolson-Verfahren mit äquidistanten Zeitschrittlängen diskretisiert. Die Navier-Stokes-Gleichungen, die den Ausgangspunkt des gekoppelten Systems bilden, werden hier analog zu den Simulationen über die Kanalströmungen gelöst. Das heißt, die Geschwindigkeit wird mit dem Q_2 Finite-Element und der Druck mit dem P_1^{disc} Finite-Element approximiert. Da die Strömung der Lösung innerhalb des chemischen Reaktors in drei Dimensionen turbulent

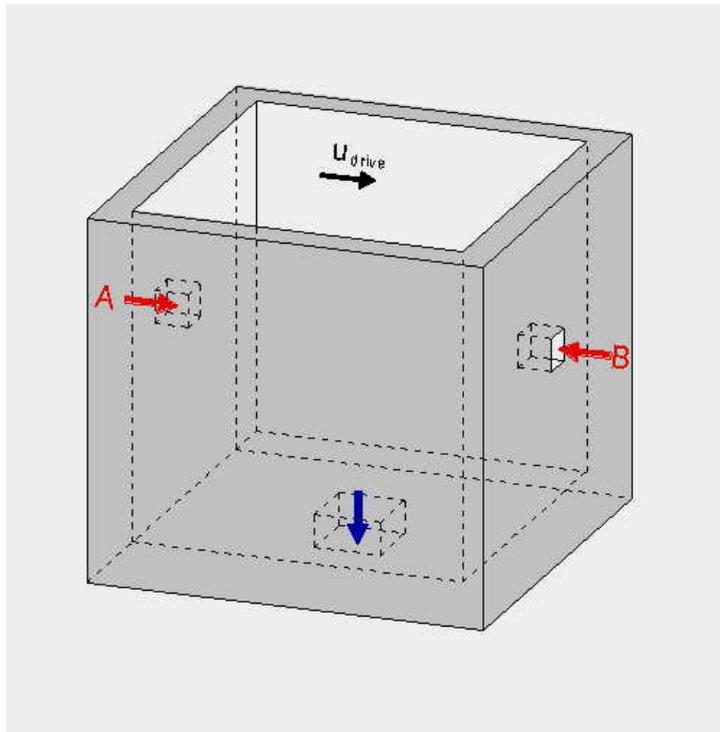


Abbildung IV.20: Simulationsgebiet des dreidimensionalen Reaktors

ist, wird, wie bereits erwähnt, die projektions-basierte FEVMS-Methode als Turbulenzmodell verwendet. Als Definition des Raumes der großen Skalen wird $L^H = P_0$, also stückweise konstante Tensoren, gewählt.

Mit Hilfe des Geschwindigkeitsfeldes können dann die Konzentrationsfelder c_A und c_B der Reaktanten, wie im zweidimensionalen Fall, mit einer Fixpunktiteration berechnet werden. Die linearisierten Gleichungen werden dabei mit dem Q_1 Finite-Element diskretisiert. Da auch diese Gleichungen konvektions- und reaktionsdominant sind, werden sie analog zu Abschnitt §3.2 mit dem linearen FEM-FCT-Verfahren stabilisiert.

Nach der Berechnung der Konzentrationsfelder werden noch die gekoppelten Gleichungen für das gelöste Produkt c_C und die Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung gelöst. Die Entkopplung und die Linearisierung sind hier, wie in Kapitel III, Abschnitt §3.2 beschrieben, realisiert. Daraus resultiert für jeden Zeitschritt eine lineare Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichung, die mit dem linearen FEM-FCT-Verfahren mit dem Q_1 Finite-Element gelöst wird.

Zur Modellierung der Fällungsreaktion in dem dreidimensionalen Reaktor werden die gleichen Modellparameter und Kenngrößen verwendet, die schon in §2.3 beschrieben wurden. Der chemische Reaktor und damit das Strömungsgebiet der Lösung, ist hier ein würfelförmiges Gebiet, $\Omega = (0, 1)^3$, was im Englischen als *driven cavity problem*

bezeichnet wird.

Der Reaktor hat auf seiner rechten und auf seiner linken Seite je eine Einströmungsöffnung der Größe $1/8 \times 1/8$. Ihre Positionen entsprechen auch im dreidimensionalen Fall der T-Mixer Konfiguration. Die linke und die rechte Öffnung befinden sich jeweils in einer y - z -Ebene bei $\{0\} \times (0.4375, 0.5625) \times (0.4375, 0.5625)$ und bei $\{1\} \times (0.4375, 0.5625) \times (0.4375, 0.5625)$. Die Ausströmungsöffnung, aus der die ausgefallenen Partikel abgeschieden werden, befindet sich in der Mitte des Reaktorbodens in der x - y -Ebene bei $(0.4375, 0.5625) \times (0.4375, 0.5625) \times \{0\}$.

Der Zufluss für die Einströmungen wird als vorberechnetes Profil gegeben. Dazu wird die Lösung der Poisson-Gleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen und einer rechten Seite gleich Eins verwendet. Eine zusätzliche Durchmischung der an der Reaktion beteiligten Stoffe wird auch in diesem Fall durch eine Antriebsbewegung der oberen Reaktorbegrenzung erzeugt. Die Antriebsgeschwindigkeit beträgt $\mathbf{u}_{\text{drive}} = (u_{1,\text{drive}}/u_\infty, 0, 0)^T$ und entspricht durch die geeignete Wahl der Modellparameter dem Vektor $(1, 0, 0)^T$. An der Öffnung zur Abscheidung der Partikel werden Ausströmungs-Randbedingungen angenommen und an den restlichen Reaktorwänden gelten die Haft-Randbedingungen (engl.: no slip).

Zu Beginn befindet sich die Lösung innerhalb des Reaktors in Ruhe und führt dann einen impulsiven Start aus. In den Simulationen werden Strömungen mit den Reynolds-Zahlen, $Re = 1000$ und vor allem $Re = 10000$, betrachtet. Der untersuchte Reaktor mit seinen Ein- und Ausströmungen stellt für $Re = 10000$ eine turbulente Strömung dar [GWR05, IJL+03].

Alle Konzentrationen im Inneren des Reaktors sind zum Anfangszeitpunkt auf Null gesetzt. Auf dem Rand sind die Konzentrationen der Reaktanten, CaCl_2 an der linken und Na_2CO_3 an der rechten Einströmung, für das gesamte Zeitintervall gleich 1,

$$c_A = 1 \quad \text{auf} \quad [0, T] \times [0] \times [0.4375, 0.5625] \times [0.4375, 0.5625],$$

$$c_B = 1 \quad \text{auf} \quad [0, T] \times [1] \times [0.4375, 0.5625] \times [0.4375, 0.5625].$$

Außerhalb dieser Öffnungen sind für die beiden Konzentrationen homogene Neumann-Randbedingungen gesetzt. Für die Konzentration des gelösten Reaktionsprodukts CaCO_3 werden homogene Neumann-Randbedingungen auf dem gesamten Rand gesetzt. Die Randbedingungen für die Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung wer-

den folgendermaßen gewählt,

$$\begin{aligned} f(t, x_1, x_2, x_3, d_{p,\min}) &= \frac{B_{\text{nuc}}(c_C)}{f_{\infty} G(c_C)}, & \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2, x_3)) > 0, \\ f(t, x_1, x_2, x_3, d_{p,\min}) &= 0, & \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2, x_3)) = 0, \\ f(t, x_1, x_2, x_3, d_{p,\max}) &= 0, & \text{wenn } G(c_C(t, x_1, x_2, x_3)) < 0, \end{aligned}$$

wobei auch hier

$$B_{\text{nuc}}(c_C(t, x_1, x_2, x_3)) = k_{\text{nuc}} c_{C,\infty}^5 \max\{0, (c_C - 1)^5\}$$

ist. Im Bezug auf die räumlichen Koordinaten ist die Partikelgrößenverteilung auf dem Abschluss der Einströmungsöffnungen auf Null gesetzt, da keine Partikel durch die Einströmungen in den Reaktor transportiert werden.

Die Länge des Zeitschritts ist für alle Simulationsrechnungen $\Delta t = 0.001$. Im Raum wird ein gleichförmiges Gitter aus $16 \times 16 \times 16$ Würfeln verwendet. Die innere Koordinate wird mit einem Gitter aus 64 Knoten diskretisiert, die, analog zum zweidimensionalen Fall, ebenfalls mit der Formel (IV.1) berechnet werden, um mehr Gitterpunkte im Bereich der kleinen Äquivalentdurchmesser zu haben. Tabelle IV.12 zeigt die Anzahl der Freiheitsgrade für die einzelnen Größen der Simulation.

simulierte Größe	Anzahl der Freiheitsgrade
Geschwindigkeitsfeld	107811
Druck	16384
Konzentrationsfelder	4913
Partikelgrößenverteilung	319345

Tabelle IV.12: Anzahl der Freiheitsgrade für die Simulationsrechnungen mit einem dreidimensionalen Reaktor

Wie bei den vorangegangenen Simulationen werden auch im dreidimensionalen Fall für die Diskretisierung der Populationsbilanz sowohl das lineare FEM–FCT–Verfahren als auch das implizite und das explizite Euler–Verfahren mit Upwind–Finite–Differenzen–Verfahren verwendet und verglichen.

Die Abbildung IV.21 zeigt ein Ergebnis für Simulationen mit einer Reynolds–Zahl von $Re = 1000$. Die erste Grafik zeigt das Strömungsfeld der Lösung und die drei anderen die Isoflächen der jeweiligen Konzentration. Allerdings erfolgt im Weiteren

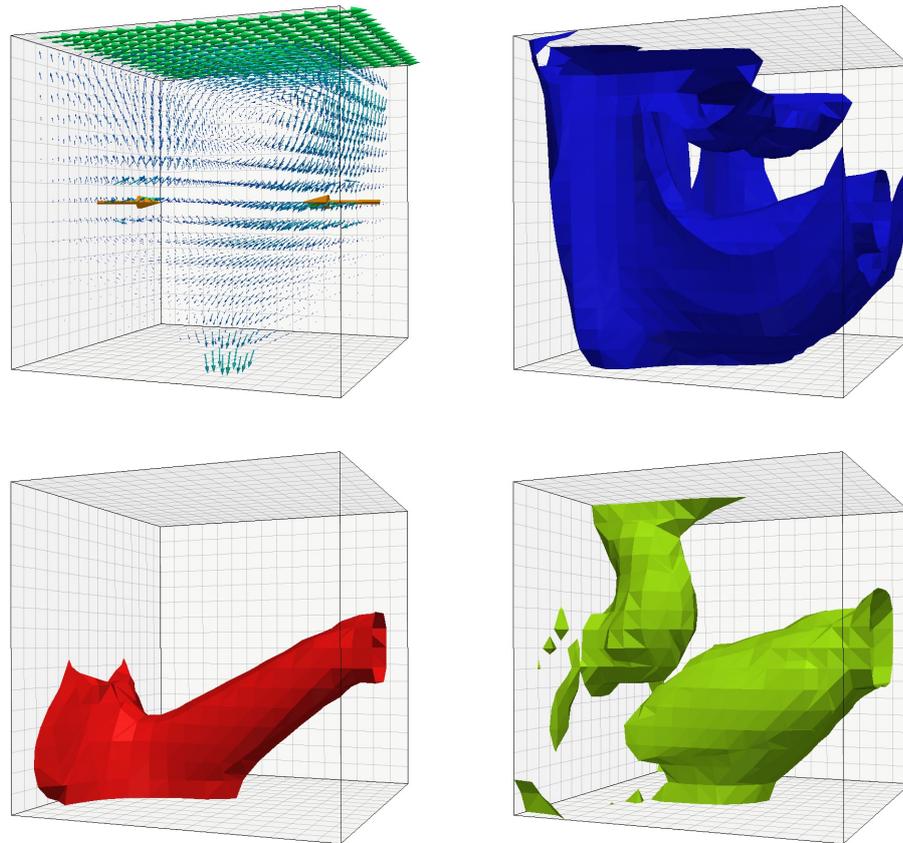


Abbildung IV.21: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 40000\text{s}$; skaliertes Strömungsfeld (oben links); Isofläche für CaCl_2 , mit $c_A = 0.25$ (oben rechts); Isofläche für Na_2CO_3 , mit $c_B = 0.25$ (unten links); Isofläche für CaCO_3 , mit $c_C = 0.01$ (unten rechts)

eine Beschränkung auf Simulationen mit einer Reynolds-Zahl von $Re = 10000$. Diese Restriktion auf den interessanteren Fall einer Strömung mit turbulenterem Charakter ist hauptsächlich den langen Rechenzeiten geschuldet.

In Abbildung IV.22 ist das Strömungsfeld der Lösung im chemischen Reaktor dargestellt. Im Unterschied zur Strömung aus Abbildung IV.21 kann man die höhere Intensität der Turbulenz gut erkennen. Die beiden Einströmungen prägen auch hier die Strömung deutlich stärker als die Antriebsbewegung der oberen Reaktorbegrenzung. Dies erhöht die Verweilzeit der Partikel in den Wachstumsregionen und führt zu größeren Partikeln.

Die Abbildungen IV.23 und IV.24 zeigen typische Ergebnisse für die Konzentrationen der Reaktanten zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$. Jeweils oben links sind Isoflächen der

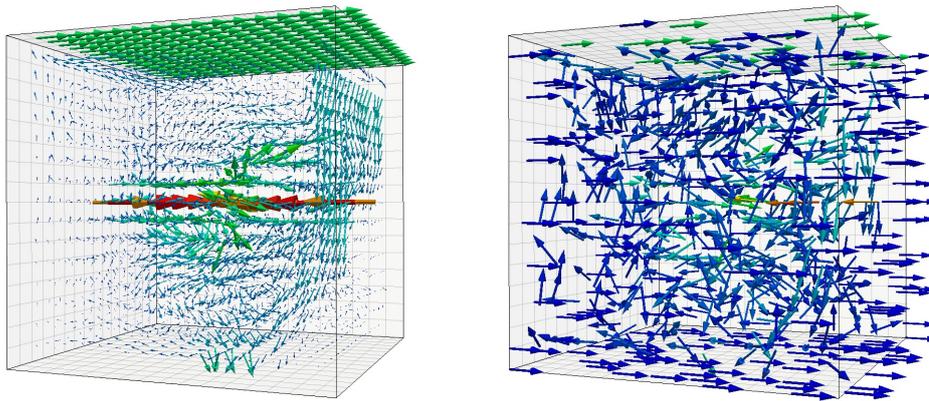


Abbildung IV.22: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; skaliertes Strömungsfeld (links); unskaliertes Strömungsfeld (rechts)

Konzentrationen mit $c_A = 0.25$ und $c_B = 0.25$ dargestellt, anhand derer man auch die Dominanz der Einströmungen im Vergleich zu Abbildung IV.21 erkennen kann. An der Verteilung der Konzentrationen, die auf den verschiedenen Schnitten durch den Reaktor zu erkennen ist, sieht man, dass sich die Edukte der Reaktion vor allem im Bereich ihrer Einströmungen befinden und sich im Fall des Schnittes durch die x - z -Ebene ähnlich wie in den zweidimensionalen Simulationen verhalten. Auf den Schnitten in der y - z -Ebene sind auch die Öffnungen der Einströmungen gut zu erkennen. Diese Resultate sind für alle drei Diskretisierungsansätze der Populationsbilanz gleich, da hier keine Kopplung zur Gleichung der Partikelgrößenverteilung vorhanden ist.

Die Abbildung IV.25 zeigt verschiedene Isoflächen für die Konzentration des gelösten Produktes zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$. Die beiden oberen Grafiken zeigen die Isofläche von $c_C = 0.25$ für die beiden Euler-Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz der Partikelgrößenverteilung. Diese beiden Isoflächen sind sowohl qualitativ als auch quantitativ annähernd gleich. Vergleicht man diese allerdings mit der Grafik der Isofläche des linearen FEM-FCT-Verfahrens für $c_C = 0.25$, die unten rechts abgebildet ist, kann man sehr deutliche Unterschiede erkennen. Hier führen die verschiedenen numerischen Verfahren durch die Kopplung der Gleichungen zu ausgeprägten Abweichungen. Die linke Grafik in der Mitte der Abbildung zeigt eine qualitativ ähnliche Isofläche zu dem linearen FEM-FCT-Verfahren unten rechts, zeigt aber mit $c_C = 0.50$ eine höhere Konzentration. Die Ergebnisse des linearen FEM-FCT-Verfahrens zeigen hier eine geringere Konzentration des gelösten Produktes als die beiden Euler-Verfahren. Insgesamt sind die Isoflächen des linearen FEM-FCT-Verfahrens zu denen der Euler-Verfahren ähnlich, wenn man eine geringere Größenordnung der Konzentration betrachtet.

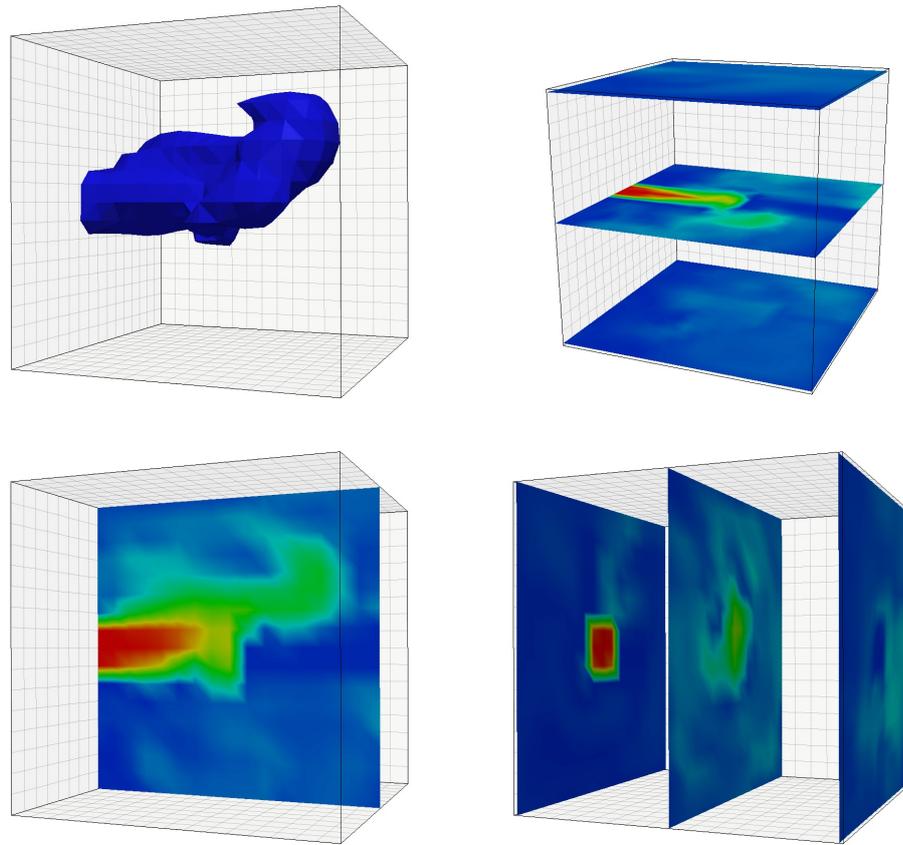


Abbildung IV.23: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000s$ mit linearen FEM-FCT-Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für CaCl_2 , mit $c_A = 0.25$ (oben links); Schnitt in der x - y -Ebene für CaCl_2 (oben rechts); Schnitt in der x - z -Ebene für CaCl_2 (unten links); Schnitt in der y - z -Ebene für CaCl_2 (unten rechts)

Dies zeigt sich auch in Abbildung IV.26, in der verschiedene Schnitte durch den Reaktor dargestellt sind. Hier sind auf der linken Seite die Ergebnisse des beispielhaft gewählten BWE-UPW-FDM Verfahrens und auf der rechten Seite die gleichen Visualisierungen mit dem linearen FEM-FCT-Verfahren. Wie in Abbildung IV.25 sind auch hier die Ergebnisse der beiden Methoden qualitativ ähnlich, aber die Werte des linearen FEM-FCT-Verfahrens sind quantitativ geringer.

Dieser Zusammenhang geht aus Abbildung IV.27 besonders deutlich hervor. Diese Histogramme stellen die Verteilung des gelösten Produktes c_C dar. Auf deren x -Achsen ist die Höhe der Konzentration aufgetragen und auf ihren y -Achsen die Anzahl der Gitterzellen, in denen diese maximal erreicht wird. Man sieht auch in dieser Darstellung,

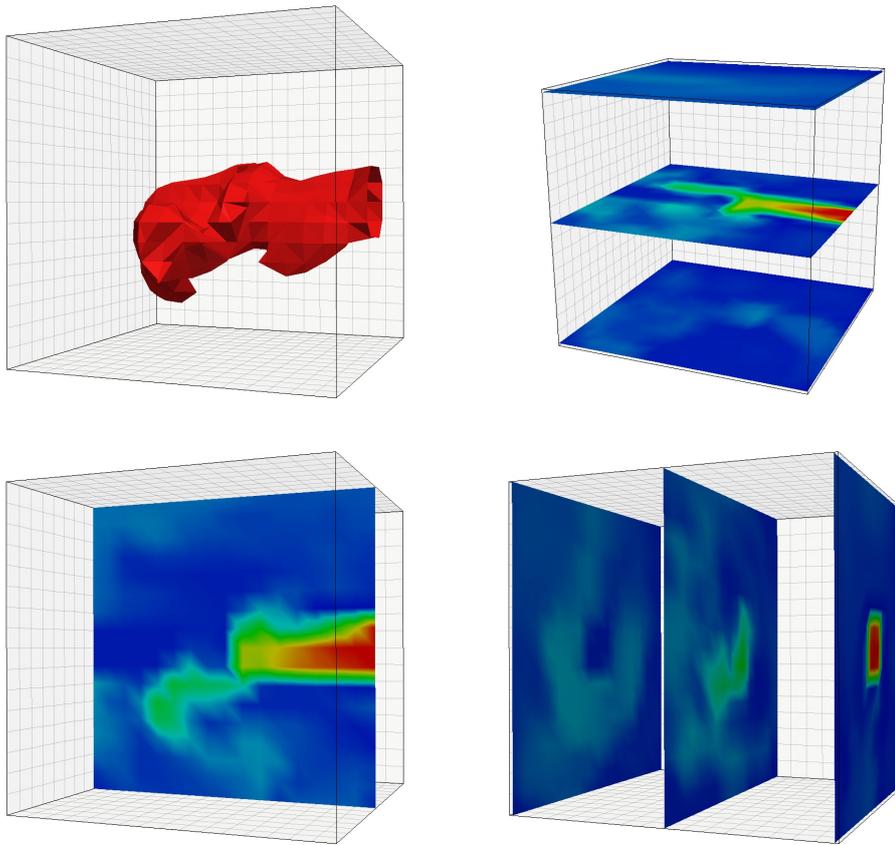


Abbildung IV.24: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$ mit linearen FEM–FCT–Verfahren für die Populationsbilanz; Isoflächen für Na_2CO_3 , mit $c_B = 0.25$ (oben links); Schnitt in der x – y –Ebene für Na_2CO_3 (oben rechts); Schnitt in der x – z –Ebene für Na_2CO_3 (unten links); Schnitt in der y – z –Ebene für Na_2CO_3 (unten rechts)

dass die beiden Euler–Verfahren sehr ähnlich sind und erkennt, dass das lineare FEM–FCT–Verfahren eine geringere Konzentration beim Reaktionsprodukt ergibt.

Die wichtigsten Kenngrößen zur Analyse und Evaluierung von Fällungsreaktionen sind auch für den dreidimensionalen Reaktor der Volumenanteil an der Mitte der Auströmung und die sich daraus berechneten Größen kumulativer Volumenanteil und Median des Volumenanteils. Der Volumenanteil an der Mitte der Auströmung ist analog zu (IV.6) definiert,

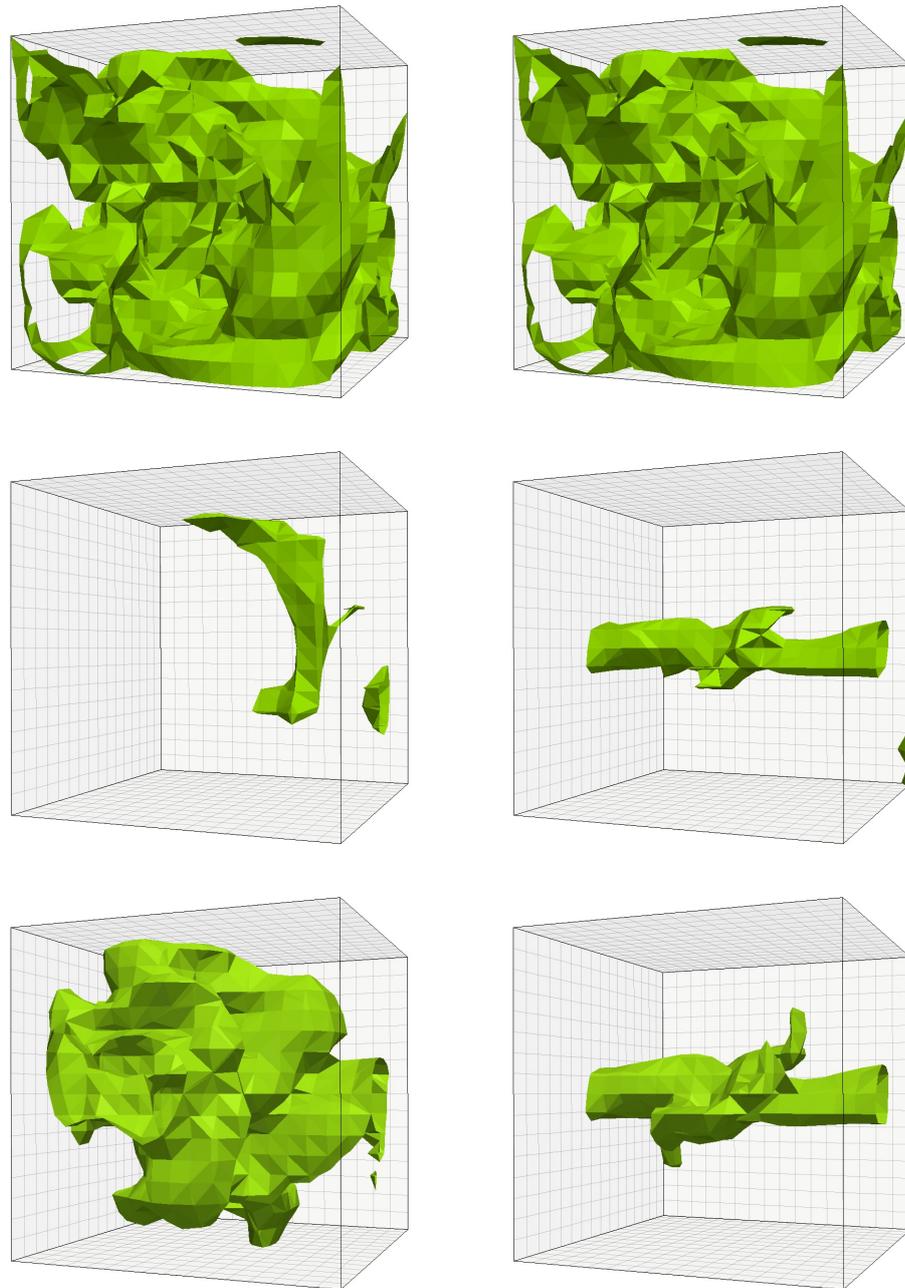


Abbildung IV.25: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000s$; BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (oben links); FWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (oben rechts); BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.10$ (Mitte links); BWE-UPW-FDM, CaCO_3 , mit $c_C = 0.50$ (Mitte rechts); lineares FEM-FCT-Verfahren, CaCO_3 , mit $c_C = 0.10$ (unten links); lineares FEM-FCT-Verfahren, CaCO_3 , mit $c_C = 0.25$ (unten rechts)

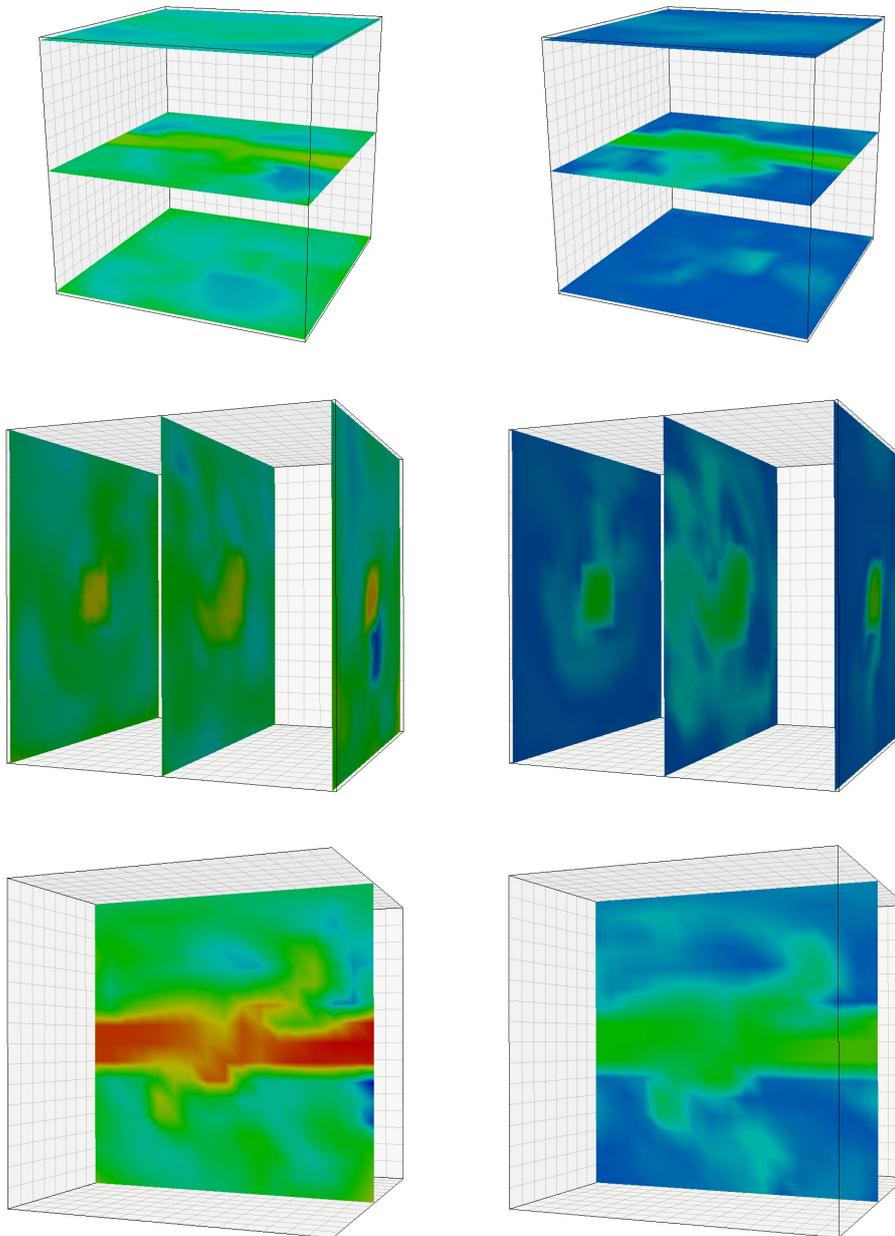


Abbildung IV.26: Typische Simulationsergebnisse für $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000s$; BWE-UPW-FDM, Schnitte in der x - y -Ebene für CaCO_3 (oben links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitte in der x - y -Ebene für CaCO_3 (oben rechts); BWE-UPW-FDM, Schnitte in der y - z -Ebene für CaCO_3 (Mitte links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitte in der y - z -Ebene für CaCO_3 (Mitte rechts); BWE-UPW-FDM, Schnitt in der x - z -Ebene für CaCO_3 (unten links); lineares FEM-FCT-Verfahren, Schnitt in der x - z -Ebene für CaCO_3 (unten rechts)

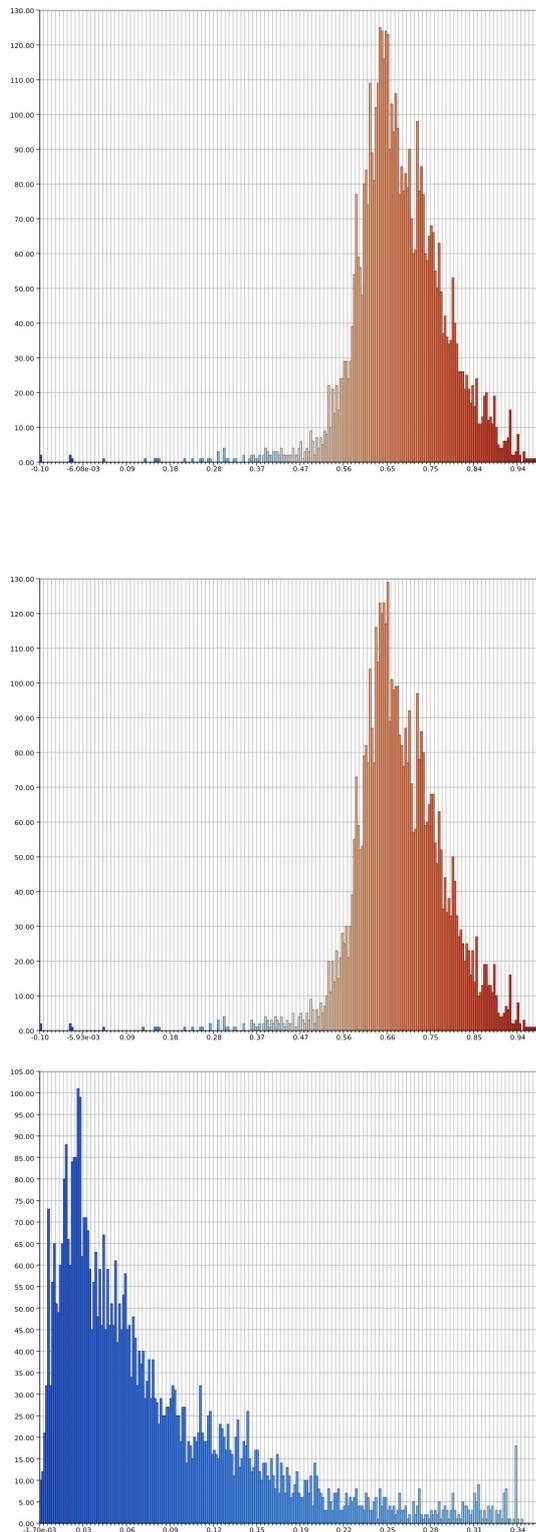


Abbildung IV.27: Histogramm-Darstellung der Konzentration des gelösten Produktes CaCO_3 ; $u_\infty = 10^{-2}$ zum Zeitpunkt $\tilde{t} = 5000\text{s}$; FWE-UPW-FDM (oben); BWE-UPW-FDM (Mitte); lineares FEM-FCT-Verfahren (unten)

$$q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) := \frac{d_p^3 \tilde{f}(\tilde{t}, 0.5, 0.5, 0, \tilde{d}_p)}{\int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_{p,\max}} d_p^3 \tilde{f}(\tilde{t}, 0.5, 0.5, 0, \tilde{d}_p) d(d_p)}. \quad (\text{IV.11})$$

Der kumulative Volumenanteil ergibt sich wie in Gleichung (IV.7) zu

$$Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) := \int_{\tilde{d}_{p,0}}^{\tilde{d}_p} q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) d(d_p) \quad (\text{IV.12})$$

und der Median ist auch hier die Partikelgröße, für die $Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p)$ den Wert 0.5 annimmt,

$$\tilde{d}_{p,50}(\tilde{t}) := \left\{ \tilde{d}_p : Q_3(\tilde{t}, \tilde{d}_p) = 0.5 \right\}. \quad (\text{IV.13})$$

In den Abbildungen IV.28 und IV.29 ist die zeitliche Entwicklung des Medians $\tilde{d}_{p,50}(\tilde{t})$ für die verschiedenen Diskretisierungen der Populationsbilanz dargestellt. Man sieht, dass die ersten Partikel nach ungefähr 3200s das Zentrum der Ausströmung erreichen. Die Kurven der verschiedenen numerischen Verfahren spiegeln die in den Abbildungen IV.25 und IV.26 erkennbaren Eigenschaften wider. Die beiden Euler-Verfahren liefern auch hier de facto gleiche Resultate, während die geringere Konzentration des gelösten Produktes bei den Simulationen mit dem linearen FEM-FCT-Verfahren auch zu einem geringeren Abscheiden von Partikeln führt. Die Mediane der beiden Euler-Verfahren erreichen bei etwa 7500s Werte im Bereich von $23\mu\text{m}$, was etwa dem doppelten Wert des Medians mit dem linearen FEM-FCT-Verfahren entspricht.

Allerdings zeigen die beiden Abbildungen auch ein starkes Abfallen der Mediane der Euler-Verfahren zwischen 10500s und 11000s. In Abbildung IV.29 ist der weitere zeitliche Verlauf des explizite Euler-Verfahrens FWE-UPW-FDM und des lineare FEM-FCT-Verfahren dargestellt. Hier sieht man, dass der Median des expliziten Euler-Verfahrens nach dem Abfall im Bereich zwischen $10\mu\text{m}$ und $16\mu\text{m}$ verbleibt, während der Median des linearen FEM-FCT-Verfahrens einen kontinuierlichen Anstieg verzeichnet und ab etwa 10800s über dem Median des expliziten Euler-Verfahrens verläuft.

Da in den numerischen Vergleichen für den zweidimensionalen Reaktor in §3.2 und §3.4 gezeigt wurde, dass das lineare FEM-FCT-Verfahren zu besseren und genaueren Ergebnissen führt als die beiden Euler-Verfahren, ist zu erwarten, dass es auch in diesem Fall verlässlichere Ergebnisse liefert. Da die Resultate der Rechnungen in 3D/4D den Ergebnissen in 2D/3D gleichen, könnte der Ursprung der qualitativen Unterschiede an dem turbulenten Strömungsfeld liegen.

Die mittleren Rechenzeiten pro Zeitschritt sind in Tabelle IV.13 aufgeführt. Diese wurden auf einem Computer mit einer Intel(R) Xeon(R) CPU mit 2.4GHZ gemessen und gemittelt. Man sieht, dass die beiden Euler-Verfahren ungefähr um den Faktor 3

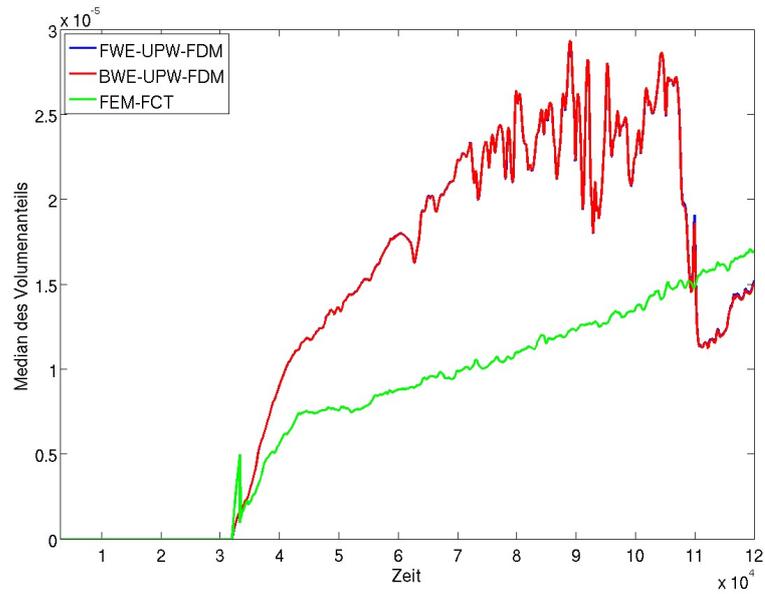


Abbildung IV.28: Median des Volumensanteils in der Mitte der Ausströmung; $u_\infty = 10^{-2}$

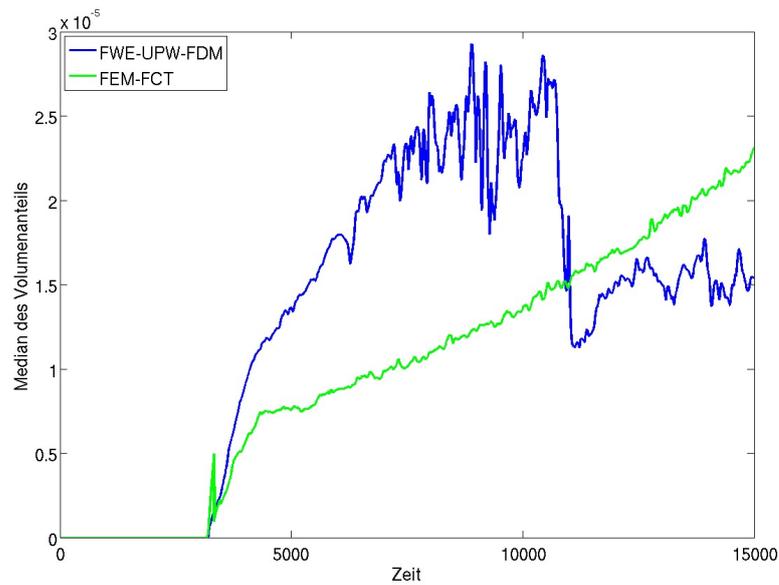


Abbildung IV.29: Median des Volumensanteils in der Mitte der Ausströmung; $u_\infty = 10^{-2}$

schneller sind, als das lineare FEM–FCT–Verfahren, wobei das explizite Euler–Verfahren das Schnellste war.

numerisches Verfahren	Rechenzeit in Sekunden
FWE–UPW–FDM	19.1
BWE–UPW–FDM	23.2
Crank–Nicolson FEM–FCT	60.3

Tabelle IV.13: Mittlere Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden für die Simulationen in 3D/4D

Zusammenfassend kann man sagen, dass die weniger teuren, aber ungenaueren numerischen Verfahren im Vergleich zu dem genaueren und dafür teureren Verfahren zu qualitativ verschiedenen Ergebnissen führen. Diese Beobachtungen konnten auch im Fall der Simulationen in 2D/3D mit einem stark zeitabhängigen Strömungsfeld gemacht werden und haben sich hier erneut bestätigt. Die vorgestellten Rechnungen zeigten abermals, dass die Ergebnisse von Simulationen komplexer Prozesse stark von den verwendeten numerischen Verfahren abhängen.

Kapitel V

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit ist ein Beitrag zur Numerik von Populationsbilanzsystemen, am Beispiel von Fällungsreaktionen, die durch ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen, definiert in verschieden-dimensionalen Räumen, beschrieben werden.

Im ersten Teil der Arbeit wurde die numerische Simulation einer turbulenten und inkompressiblen Kanalströmung betrachtet, wobei die vorgestellte projektions-basierte Finite-Element VMS-Methode (FEVMS) den Schwerpunkt bildete. Die Simulationen wurden mit inf-sup stabilen Finite-Elementen erster Ordnung für den Druck und zweiter Ordnung für die Geschwindigkeit auf sehr groben Gittern durchgeführt. Die projektions-basierte FEVMS-Methode lieferte im Allgemeinen gute Approximationen des Profils der mittleren Geschwindigkeit und erzielte auch für die Turbulenzintensitäten und die Reynolds-Spannungen qualitativ gute Ergebnisse, die allerdings bei den absoluten Werten etwas über den Referenzdaten lagen. Beim Vergleich mit dem Smagorinsky-LES-Modell mit van Driest-Dämpfung wies die projektions-basierte FEVMS-Methode eine deutlich geringere Sensitivität gegenüber der Parameterwahl der Wirbelviskositätsmodelle auf. Diese positiven Erfahrungen motivierten die Einschätzung, dass die projektions-basierte FEVMS-Methode sich gut zur Simulation von Fällungsreaktionen eignen würde.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde das gekoppelte System zur Beschreibung der Fällungsreaktion hergeleitet und verschiedene numerische Methoden, sowohl für die Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichungen der Reaktanten und ihres gelösten Produktes als auch für die Bilanzgleichung der ausgefällten Partikel, beschrieben. Zur Stabilisierung der konvektions- und reaktionsdominierten Gleichungen zur Beschreibung der chemischen Reaktion wurden zwei Ansätze vorgestellt: Einmal die SUPG-Methode, das zur Zeit populärste Verfahren zur Stabilisierung solcher Gleichungen und zweitens das lineare FEM-FCT-Verfahren, welches sich in Studien als sehr effektive Methode gezeigt hat und ein gutes Verhältnis zwischen Genauigkeit und Effizienz besitzt. Die verschiedenen Verfahren, die zur Diskretisierung der Populationsbilanz vorgestellt wurden, das lineare FEM-FCT-Verfahren, das explizite und das implizite Euler-Verfahren mit einem Upwind-Finite-Differenzen-Verfahren, sollten eine Untersuchung des Einflusses der Verfahren auf die Lösung der höher-dimensionalen Gleichung des gekoppelten

Systems ermöglichen.

Im letzten Teil der Arbeit wurden die verschiedenen Verfahren zur Diskretisierung der Gleichungen des gekoppelten Systems anhand numerischer Studien mit unterschiedlichen Konfigurationen evaluiert. Zuerst wurden Simulationen in einem zweidimensionalen Reaktor durchgeführt, um den Einfluss der Positionen der beiden Einströmungen auf die Partikelfällung zu untersuchen. Beim Vergleich der Ergebnisse des kumulativen Volumenanteils und des Medians des Volumenanteils in der Mitte der Ausströmung zeigte sich, dass die verschiedenen Positionen der Einströmungen einen beachtlichen Einfluss auf diese beiden Größen haben und eine Positionierung der beiden Einströmungen im mittleren Bereich der seitlichen Reaktorbegrenzungen als sinnvoll erachtet werden kann.

Danach wurde das lineare FEM–FCT–Verfahren für zwei verschiedene Strömungsfelder der Hintergrundlösung betrachtet: Einmal ein strukturiertes Strömungsfeld mit kleinen zeitlichen Veränderungen und einmal ein stark zeitabhängiges Strömungsfeld. Verbunden mit diesen beiden Konfigurationen wurden auch die drei verschiedenen Diskretisierungen der Populationsbilanz der niedergeschlagenen Partikel getestet und untersucht.

Es zeigte sich, dass die verschiedenen Strömungsfelder zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen führten und damit auch abweichende Schlussfolgerungen erlauben. Für das strukturierte Strömungsfeld waren die Resultate für den Median des Volumenanteils qualitativ gleich für alle drei Diskretisierungen. Da das explizite Euler–Verfahren mit dem Upwind–Finite–Differenzen–Verfahren bei weitem die schnellste Methode war, empfiehlt sich deren Anwendung in dieser Situation.

Betrachtet man allerdings die Ergebnisse der untersuchten Größen für das stark zeitabhängige Strömungsfeld, verändert sich diese Einschätzung augenblicklich. Die numerischen Resultate der beiden Euler–Verfahren wichen stark von den Ergebnissen des linearen FEM–FCT–Verfahrens mit der Crank–Nicolson–Zeitdiskretisierung ab. Verbunden mit den Ergebnissen des gekoppelten Modellproblems, können die Resultate des linearen FEM–FCT–Verfahrens als akkurater betrachtet werden. Diese Einschätzung erlaubt die Schlussfolgerung, dass die Einbußen an Genauigkeit durch die Verwendung der Verfahren von geringerer Ordnung nicht akzeptabel sind. Darüber hinaus nutzte die Implementierung der Finite–Differenzen–Verfahren die Eigenschaft der rechteckigen Form des Reaktors. Für beliebigere Formen, wie sie Reaktoren aufzeigen, die in der Verfahrenstechnik verwendet werden, verlieren diese Verfahren etwas an Effizienz, während das FEM–FCT–Verfahren nicht durch die Form des Strömungsgebietes beeinflusst wird.

Abschließend wurde noch der Fall eines dreidimensionalen chemischen Reaktors untersucht, der zu einer vierdimensionalen Bilanzgleichung für die Partikelpopulation führte. Da dieser Fall für eine Reynolds–Zahl von $Re = 10000$ ein turbulentes Strömungsfeld besitzt, wie es auch in realen Anwendungen auftritt, wurde hier die projektions–

basierte FEVMS-Methode für die Navier–Stokes–Gleichungen verwendet.

Die Untersuchungen der Konzentrationsfelder und des Medians des Volumenanteils im Zentrum der Ausströmung zeigten auch hier, dass weniger teure Verfahren, die allerdings auch ungenauer sind, qualitativ andere Ergebnisse liefern, als genauere und damit verbunden auch teurere Verfahren. Diese Ergebnisse sind ähnlich zu den Beobachtungen im Fall eines zwei- bzw. dreidimensionalen Populationsbilanzsystems mit einem stark zeitabhängigen Strömungsfeld.

Die vorgestellten Simulationen veranschaulichen, dass für komplexe Prozesse die Ergebnisse der betrachteten Größen stark von den verwendeten numerischen Verfahren abhängen. Dies hebt noch einmal die Notwendigkeit von genauen Verfahren hervor und stellt die Erfordernis ihrer effizienten Implementierung heraus. Ein Punkt, an dem zukünftige Arbeiten in diesem Bereich anzusetzen sind. Zusammenfassend kann man sagen, dass im Fall eines stark zeitabhängigen Strömungsfeldes das lineare FEM–FCT–Verfahren bevorzugt werden sollte.

Vom Standpunkt der Modellierung aus betrachtet, berücksichtigt das vorgestellte Modell einer Fällungsreaktion noch nicht alle in einem Reaktor ablaufenden Prozesse. Beispielsweise findet keine Untersuchung der Temperatur statt, obwohl sich die hier als Edukte auftretenden chemischen Substanzen exotherm in Flüssigkeiten lösen können und dabei ein stark hygroskopisches Verhalten zeigen. Des Weiteren könnte man bei der Modellierung des Partikelwachstums dieses auch von der inneren Koordinate abhängen lassen und damit verschieden großen Partikeln unterschiedliche Wachstumsgeschwindigkeiten zuschreiben. Der Zustandsraum der Partikelpopulation könnte in diesem Zusammenhang auch mit zusätzlichen inneren Koordinaten erweitert werden und damit ein größeres Spektrum an Partikeleigenschaften beschreiben. Dies würde die Untersuchung weiterer chemischer Stoffeigenschaften erlauben. Darüber hinaus gäbe es auch die Möglichkeit, die Kopplung der Konvektions–Diffusions–Reaktionsgleichungen zu erweitern und damit Rückreaktionen, etwa ein Zerfließen von Nukleationskernen, in die Simulation mit aufzunehmen.

Vom mathematischen Standpunkt aus wäre es wünschenswert, weitere numerische Verfahren zur Diskretisierung der Populationsbilanz zu untersuchen, da die Ergebnisse der verschiedenen Verfahren, beispielsweise für den Median des Volumenanteils, zuweilen große Unterschiede aufzeigten. Hier könnte man die Implementierung möglicherweise um das nichtlineare FEM–FCT–Verfahren erweitern. Ebenso könnten auch andere anisotrope Gitter zur Diskretisierung der Bilanzgleichung der Partikelpopulation und Nicht–Tensor–Gitter für den Reaktor getestet und untersucht werden. Überdies wäre es als zusätzliche Erweiterung möglich, alle Terme des Konzentrationsfeldes des gelösten Produktes implizit zu behandeln. Um die Effizienz weiter zu erhöhen, könnte man für das FEM–FCT–Verfahren die sogenannte *group finite element formulation* aus [Fle83] implementieren und damit die Rechenzeiten senken.

Literaturverzeichnis

- [Abr74] F. Abraham. *Homogeneous Nucleation Theory*. Academic Press, 1974.
- [AdP07] P. Atkins und J. de Paula. *Physikalische Chemie*. Wiley-VCH, 2007.
- [AF92] M. Alonso und E. Finn. *Physics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1992.
- [Atk00] P. Atkins. *Physical Chemistry*. Oxford University Press, 2000.
- [Atk06] P. Atkins. *Kurzlehrbuch physikalische Chemie*. Wiley-VCH, 2006.
- [Bat67] G. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- [BB73] J. Boris und D. Book. "Flux-corrected transport I. SHASTA, A fluid transport algorithm that works." *J. Comput. Phys.*, 11: S. 38 – 69, 1973.
- [BBB⁺06] M. Baerns, A. Behr, A. Brehm, J. Gmehling, H. Hofman, U. Onken und A. Renken. *Technische Chemie*. Wiley-VCH, 2006.
- [BBJL07] M. Braack, E. Burman, V. John und G. Lube. "Stabilized finite element methods for the generalized oseen problem." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196: S. 853 – 866, 2007.
- [BCJ07] L. Berselli, C. Crisanti und V. John. "Analysis of commutation errors for functions with low regularity." *J. Comp. Appl. Math.*, 206: S. 1027 – 1045, 2007.
- [BGH03] S. Börm, L. Grasedyck und W. Hackbusch. "Introduction to hierarchical matrices with applications." *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 27: S. 405 – 422, 2003.
- [BH82] A. Brooks und T. Hughes. "Streamline upwind/Petrov–Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 32: S. 199 – 259, 1982.

- [BIL05] L. Berselli, T. Iliescu und W. Layton. *Mathematics of Large Eddy Simulation of Turbulent Flows*. Springer-Verlag, 2005.
- [BJ06] L. Berselli und V. John. "Asymptotic behavior of commutation errors and the divergence of the Reynolds stress tensor near the wall in the turbulent channel flow." *Math. Methods Appl. Sci.*, 29: S. 1709 – 1719, 2006.
- [BMW99] K. Büchel, H.-H. Moretto und P. Woditsch. *Industrielle Anorganische Chemie*. Wiley-VCH, 1999.
- [Brd90] R. Brdicka. *Grundlagen der physikalischen Chemie*. Wiley-VCH, 1990.
- [BS97] R. Becher und E. Schlünder. "Agglomeration von partikeln bei der wirbelschicht-sprühgranulation." *Chemie Ingenieur Technik*, 69: S. 805 – 808, 1997.
- [CB96] D. Chakraborty und K. Bhatia. "Formation and Aggregation of Polymorphs in Continuous Precipitation. 2. Kinetics of CaCO₃ Precipitation." *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35: S. 1995 – 2006, 1996.
- [Chr06] D. Christen. *Praxiswissen der chemischen Verfahrenstechnik*. Springer-Verlag, 2006.
- [Cia78] P. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland Publishing Company, 1978.
- [CM94] H. Choi und P. Moin. "Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow." *J. Comp. Phys.*, 113: S. 1 – 4, 1994.
- [CN47] J. Crank und E. Nicolson. "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type." *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 43: S. 50 – 67, 1947.
- [Cod00] R. Codina. "On stabilized finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 188: S. 61 – 82, 2000.
- [Col01] S. Collis. "Monitoring unresolved scales in multiscale turbulence modeling." *Physics of Fluids*, 13(6): S. 1800 – 1806, 2001.
- [Cra64] J. Crank. *The Mathematics of Diffusion*. Oxford University Press, 1964.
- [Czi08] H. Czichos. *Hütte, das Ingenieurwissen*. Springer-Verlag, 2008.

- [Dam57] G. Damköhler. *Einfluss von Diffusion, Strömung und Wärmetransport auf die Ausbeute bei chemisch-technischen Reaktionen*, (S. 359 – 485). 1957. Der Chemie-Ingenieur, Bd 3, 1. Tl., 1937.
- [Dav04] T. Davis. "Algorithm 832: UMFPACK V4.3-an unsymmetric-pattern multifrontal method." *ACM Trans. Math. Software*, 30: S. 196 – 199, 2004.
- [Dem94] W. Demtröder. *Experimentalphysik 1*. Springer-Verlag, 1994.
- [DZ97] R. Dawe und Y. Zhang. "Kinetics of calcium carbonate scaling using observations from glass micromodels." *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 18: S. 179 – 187, 1997.
- [EK06] G. Emig und E. Klemm. *Technische Chemie*. Springer-Verlag, 2006.
- [ER06] T. Engel und P. Reid. *Physikalische Chemie*. Pearson Studium, 2006.
- [Fle83] C. Fletcher. "The group finite element formulation." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 37: S. 225 – 244, 1983.
- [FP80] C. Felippa und K. Park. "Staggered transient analysis for coupled mechanical systems." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 24: S. 61 – 111, 1980.
- [FP02] J. Ferziger und M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 2002.
- [FR00] J. Fröhlich und W. Rodi. "Introduction to Large Eddy Simulation of Turbulent Flows." In B. Launder und N. e. Sandham (Hg.), "Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows," Cambridge University Press, 2000.
- [Fri95] U. Frisch. *Turbulence*. Cambridge University Press, 1995.
- [FV00] L. Franca und F. Valentin. "On an improved unusual stabilized finite element method for the advection–reactive–diffusive equation." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190: S. 1785 – 1800, 2000.
- [GDN95] M. Griebel, T. Dornseifer und T. Neunhoeffler. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg Lehrbuch, 1995.
- [GH03] L. Grasedyck und W. Hackbusch. "Construction and arithmetics of h-matrices." *Computing*, 70: S. 295 – 334, 2003.
- [Gil97] E. Gilles. "Netzwerktheorie verfahrenstechnischer Prozesse." *Chemie Ingenieur Technik*, 69: S. 1053 – 1063, 1997.

- [Goe58] H. Goering. *Statistische Theorie der Turbulenz*. Akademie-Verlag-Berlin, 1958.
- [Goe75] H. Goertler. *Dimensionsanalyse*. Springer-Verlag, 1975.
- [GPMC91] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin und W. Cabot. "A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model." *Phys. Fluids A*, 3: S. 1760 – 1765, 1991.
- [Gra03] V. Gravemeier. *The variational multiscale method for laminar and turbulent incompressible flow*. Dissertation, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, 2003.
- [Gra06a] V. Gravemeier. "A consistent dynamic localization model for large eddy simulation of turbulent flows based on a variational formulation." *J. Comp. Phys.*, 218: S. 677 – 701, 2006.
- [Gra06b] V. Gravemeier. "Scale-separating operators for variational multiscale large eddy simulation of turbulent flows." *J. Comp. Phys.*, 212: S. 400 – 435, 2006.
- [Gre03] R. Greve. *Kontinuumsmechanik*. Springer-Verlag, 2003.
- [GS00] P. Gresho und R. Sani. *Incompressible Flow and the Finite Element Method*. Wiley, 2000.
- [Gue99] J. Guermond. "Stabilization of Galerkin approximations of transport equations by subgrid modeling." *M2AN*, 33: S. 1293 – 1316, 1999.
- [GW00] W. Göpel und H.-D. Wiemhöfer. *Statistische Thermodynamik*. Spektrum-Verlag, 2000.
- [GWR05] V. Gravemeier, W. Wall und E. Ramm. "Large eddy simulation of turbulent incompressible flows by a three-level finite element method." *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 48: S. 1067 – 1099, 2005.
- [Hau02] G. Hauke. "A simple subgrid scale stabilized method for the advection-diffusion-reaction equation." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 191: S. 2925 – 2947, 2002.
- [HB79] T. Hughes und A. Brooks. "A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion." In T. Hughes (Hg.), "Finite Element Methods for Convection Dominated Flows," Bd. 34, (S. 19 – 35). ASME, 1979.
- [HB06] M. Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Teubner Verlag, 2006.

- [HFS⁺07] W. Heinen, D. Flockerzi, C. Steyer, A. Voigt und K. Sundmacher. "Non-linear dynamics with hydrodynamics through direct numerical simulation." *Chem. Eng. Sci.*, 62: S. 4896 – 4902, 2007.
- [Hir99] H. Hirschberg. *Handbuch der Verfahrenstechnik und Anlagenbau*. Springer-Verlag, 1999.
- [HMJ00] T. Hughes, L. Mazzei und K. Jansen. "Large eddy simulation and the variational multiscale method." *Computing and Visualization in Science*, 3: S. 47 – 59, 2000.
- [HOM01] T. Hughes, A. Oberai und L. Mazzei. "Large eddy simulation of turbulent channel flows by the variational multiscale method." *Physics of Fluids*, 13: S. 1784 – 1799, 2001.
- [Hug95] T. Hughes. "Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid-scale models, bubbles and the origin of stabilized methods." *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 127: S. 387 – 401, 1995.
- [HW96] E. Hairer und G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and differential-algebraic problems*. Springer-Verlag, 1996.
- [IDH⁺07] J. Ingham, I. Dunn, E. Heinzle, J. Prenosil und J. Snape. *Chemical Engineering Dynamics*. Wiley-VCH, 2007.
- [IF03] T. Iliescu und P. Fischer. "Large eddy simulation of turbulent channel flows by the rational LES model." *Physics of Fluids*, 15: S. 3036 – 3047, 2003.
- [IJL⁺03] T. Iliescu, V. John, W. Layton, G. Matthies und L. Tobiska. "A numerical study of a class of LES models." *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, 17: S. 75 – 85, 2003.
- [JB02] G. Jander und E. Blasius. *Lehrbuch der analytischen und präparativen anorganischen Chemie*. Hirzel-Verlag, 2002.
- [JK05] V. John und S. Kaya. "A finite element variational multiscale method for the Navier–Stokes equations." *SIAM J. Sci. Comput.*, 26: S. 1485 – 1503, 2005.
- [JK07] V. John und P. Knobloch. "A comparison of spurious oscillations at layers diminishing (sold) methods for convection–diffusion equations: Part I - a review." *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 196: S. 2197 – 2215, 2007.

- [JK08a] V. John und S. Kaya. "Finite Element error analysis of a variational multiscale method for the Navier–Stokes equations." *Adv. Comput. Math.*, 28: S. 43 – 61, 2008.
- [JK08b] V. John und A. Kindl. "Variations of projection-based finite element variational multiscale methods for the simulation of turbulent flows." *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56: S. 1321 – 1328, 2008.
- [JK08c] V. John und P. Knobloch. "A comparison of spurious oscillations at layers diminishing (sold) methods for convection–diffusion equations: Part II - analysis for P_1 and Q_1 finite elements." *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 197: S. 1997 – 2014, 2008.
- [JK09] V. John und A. Kindl. "Numerical studies of finite element variational multiscale methods for turbulent flow simulations." *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, in press, 2009.
- [JK10] V. John und A. Kindl. "A variational multiscale method for turbulent flow simulation with adaptive large scale space." *J. Comp. Phys.*, 229: S. 301 – 312, 2010.
- [JKL06] V. John, S. Kaya und W. Layton. "A two-level variational multiscale method for convection-diffusion equations." *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 195: S. 4594 – 4603, 2006.
- [JM04] V. John und G. Matthies. "MoonNMD – a program package based on mapped finite element methods." *Computing and Visualization in Science*, 15: S. 163 – 170, 2004.
- [JMR⁺] V. John, T. Mitkova, M. Roland, K. Sundmacher, L. Tobiska und A. Voigt. "Simulations of population balance systems with one internal coordinate using finite element methods." *Chemical Engineering Science*, 64: S. 733 – 741.
- [JMR06] V. John, G. Matthies und J. Rang. "A comparison of time-discretization / linearization approaches for the time-dependent incompressible Navier–Stokes equations." *Comput. Methods Appl. Mech. and Engrg.*, 195: S. 5995 – 6010, 2006.
- [JMT97] V. John, J. Maubach und L. Tobiska. "Nonconforming streamline-diffusion-finite-element-methods for convection-diffusion problems." *Numer. Math.*, 78: S. 165 – 188, 1997.

- [Joh04a] V. John. "Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows. Analytical and Numerical Results for a Class of LES Models." *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 34, 2004.
- [Joh04b] V. John. "Reference values for drag and lift of a two-dimensional time dependent flow around a cylinder." *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 44: S. 777 – 788, 2004.
- [Joh06a] V. John. "On Large Eddy Simulation and Variational Multiscale Methods in the Numerical Simulation of Turbulent Flows." *Applications of Mathematics*, 51: S. 321 – 353, 2006.
- [Joh06b] V. John. "On the Efficiency of Linearization Schemes and Coupled Multigrid Methods in the Simulation of a 3D Flow Around a Cylinder." *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 50: S. 845 – 862, 2006.
- [JR07] V. John und M. Roland. "Simulations of turbulent channel flow at $Re_\tau=180$ with projection-based finite element variational multiscale methods." *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 55: S. 407 – 429, 2007.
- [JR09] V. John und M. Roland. "Simulations of 3d/4d precipitation processes in a turbulent flow field." WIAS preprint, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, 2009.
- [JR10] V. John und M. Roland. "On the impact of the scheme for solving the higher-dimensional equation in coupled population balance systems." *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, in press, 2010.
- [JS98] J. Jose und E. Saletan. *Classical Dynamics: A Contemporary Approach*. Cambridge University Press, 1998.
- [JS08] V. John und E. Schmeyer. "Finite element methods for time-dependent convection-diffusion-reaction equations with small diffusion." *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 198: S. 475 – 494, 2008.
- [JS09] V. John und E. Schmeyer. "On finite element methods for 3d time-dependent convection-diffusion-reaction equations with small diffusion." In A. Hegarty, N. Kopteva, E. O'Riordan und M. Stynes (Hg.), "BAIL 2008 - Boundary and Interior Layers, Proceedings of the International Conference on Boundary and Interior Layers - Computational and Asymptotic Methods, Limerick, July 2008," Bd. 69, (S. 173 – 181). *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 2009.

- [JT06] V. John und A. Tambulea. "On finite element variational multiscale methods for incompressible turbulent flows." In "Proceedings of ECCOMAS CFD 2006," 2006. ISBN 90-9020970-0.
- [KA00] P. Knabner und L. Angermann. *Numerik partieller Differentialgleichungen - eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer-Verlag, 2000.
- [Kae06] W.-M. Kaehler. *Statistische Datenanalyse*. Vieweg, 2006.
- [KHS99] T. Kodas und M. Hampden-Smith. *Aerosol Processing of Materials*. Wiley-VCH, 1999.
- [KLR02] T. Knopp, G. Lube und G. Rapin. "Stabilized finite element methods with shock capturing for advection–diffusion problems." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 191: S. 2997 – 3013, 2002.
- [KM05] D. Kuzmin und M. Möller. "Algebraic flux correction I. Scalar conservation laws." In R. Löhner, D. Kuzmin und S. Turek (Hg.), "Flux–Corrected Transport: Principles, Algorithms and Applications," (S. 155 – 206). Springer-Verlag, 2005.
- [KMK98] G. Krüger, L. Mörl und H. Künne. "Wirbelschicht–Sprühgranulation von Lösungen im überhitzten Wasserdampf." *Chemie Ingenieur Technik*, 70: S. 980 – 983, 1998.
- [KMT04] D. Kuzmin, M. Möller und S. Turek. "High–resolution FEM–FCT schemes for multidimensional conservation laws." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193: S. 4915 – 4946, 2004.
- [Kol41] A. Kolmogorov. "The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers." *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30: S. 299 – 303, 1941. (in russisch, in deutsch siehe [Goe58]).
- [Kra67] R. Kraichnan. "Inertial ranges in two dimensional turbulence." *Phys. Fluids*, 10: S. 1417 – 1423, 1967.
- [Kre05] U. Krengel. *Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik*. Vieweg, 2005.
- [Kuz09] D. Kuzmin. "Explicit and implicit FEM–FCT algorithms with flux linearization." *J. Comput. Phys.*, 228: S. 2517 – 2534, 2009.
- [Lam79] H. Lamb. *A treatise on the mathematical theory of the motion of fluids*. Cambridge University Press, 1879.

- [Lam31] H. Lamb. *Lehrbuch der Hydrodynamik*. B.G. Teubner, 1931.
- [Leo74] A. Leonhard. "Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flow." *Advances in Geophysics A*, 18: S. 237 – 248, 1974.
- [Les87] K. Leschonski. "Partikelmessstechnik, gegenwärtige und zukünftige Entwicklungen." *Erzmetall*, 40: S. 83 – 90, 1987.
- [LeV92] R. LeVeque. "Numerical methods for conservation laws." Lecture notes in mathematics, ETH Zürich, 1992.
- [LeV96] R. LeVeque. "High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow." *SIAM J. Numer. Anal.*, 33: S. 627 – 665, 1996.
- [Lil92] D. Lily. "A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method." *Phys. Fluids A*, 4: S. 633 – 635, 1992.
- [LJSB03] T. Lehre, B. Jungfleisch, R. Suntz und H. Bockhorn. "Development of a measuring technique for simultaneous in-situ detection of nanoscaled particle size distributions and gas temperatures." *Chemosphere*, 51(10): S. 1055 – 1061, 2003.
- [LK02] H. Latscha und H. Klein. *Anorganische Chemie*. Springer-Verlag, 2002.
- [LL66] L. Landau und E. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI Hydrodynamik*. Akademie-Verlag Berlin, 1966.
- [LR06] G. Lube und G. Rapin. "Residual-based stabilized higher-order FEM for advection-dominated problems." *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195: S. 4124 – 4138, 2006.
- [LS96] K. Link und E. Schlünder. "Wirbelschicht-Sprühgranulation – Untersuchung des Coatingvorganges am frei schwebenden Einzelpartikel." *Chemie Ingenieur Technik*, 68: S. 1139, 1996.
- [LSH95] J. Litster, D. Smit und M. Hounslow. "Adjustable discretized population balance for growth and aggregation." *AIChE J.*, 41: S. 591 – 603, 1995.
- [MKM99] D. Moser, J. Kim und N. Mansour. "Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$." *Phys. Fluids*, 11: S. 943 – 945, 1999.
- [MM98] P. Moin und K. Mahesh. "Direct Numerical Simulation: A Tool in Turbulence Research." *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30: S. 539 – 578, 1998.

- [OJ58] A. Obuchow und A. Jaglom. "Die Mikrostruktur einer turbulenten Strömung." In "Statistische Theorie der Turbulenz," (S. 97 – 125). 1958. Siehe [Goe58].
- [Ott06] M. Otto. *Analytische Chemie*. Wiley-VCH, 2006.
- [PMR93] R. Polke und N. S. M. Rädle. "Partikelmeßtechnik – Status, Trend – Bedarf." *Chemie Ingenieur Technik*, 65: S. 1191 – 1199, 1993.
- [Pop00] S. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [Pop04] S. Pope. "Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows." *New Journal of Physics*, 6(35), 2004.
- [QV94] A. Quarteroni und A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, 1994.
- [Ram85] D. Ramkrishna. "The status of population balances." *Reviews in Chem. Eng.*, 3: S. 49 – 95, 1985.
- [Ram00] D. Ramkrishna. *Population Balances*. Academic Press, 2000.
- [RDHM01] J. Rangalova, J. Dalichau, S. Heinrich und L. Mörl. "Zerfallsverhalten von Partikeln in Wirbelschichten – Anwendung eines konstanten massenbezogenen Abriebskoeffizienten." *Chemie Ingenieur Technik*, 73: S. 1124 – 1130, 2001.
- [Ric22] L. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, 1922.
- [Ros02] B. Ross. *Physikalische Chemie*. Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH Stuttgart, 2002.
- [RST08] H. Roos, M. Stynes und L. Tobiska. *Robust Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations*, Bd. 24 von *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 2008.
- [Sag02] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer-Verlag, 2002.
- [Sha03] R. Shaw. "Particle-turbulence interactions in atmospheric clouds." *Annu. Rev. Mech.*, 35: S. 183 – 227, 2003.
- [Sma] J. Smagorinsky. "General circulation experiments with the primitive equations: I. The basis equations, journal = Mon. Weather Rev., year = 1963, volume = 91, pages = 99 - 164."

- [SP02] H. Schwarzer und W. Peukert. "Steuerung der Partikelgröße bei der Fällung – Kopplung von Populationsbilanz und Hydrodynamik." *Chemie Ingenieur Technik*, 74: S. 575, 2002.
- [Spu04] J. Spurk. *Strömungslehre*. Springer-Verlag, 2004.
- [Sti09] M. Stieß. *Mechanische Verfahrenstechnik – Partikeltechnologie 1*. Springer-Verlag, 2009.
- [Tay35] G. Taylor. "Statistical Theory of Turbulence." *Proceedings of the Royal Society London A*, 151: S. 421 – 478, 1935.
- [TB00] O. Triesch und M. Bohnet. "Einfluss von Partikeln auf die Fluidturbulenz in einer verzögerten Gas/Feststoffströmung." *Chemie Ingenieur Technik*, 72: S. 1062 – 1063, 2000.
- [Teg04] F. Tegethoff. *Calciumcarbonat*. Springer-Verlag, 2004.
- [TG95] N. Tavaré und J. Garside. *Industrial Crystallization: Process Simulation Analysis and Design*. The Plenum Chemical Engineering Series. Plenum Press New York and London, 1995.
- [Tur99] S. Turek. *Efficient Solvers for Incompressible Flow Problems: An Algorithmic and Computational Approach*, Bd. 6 von *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag, 1999.
- [vD56] E. van Driest. "On Turbulent Flow Near a Wall." *J. Aerospace Sci.*, 23: S. 1007 – 1011, 1956.
- [VKvR92] D. Verdoes, D. Kashchiev und G. van Rosmalen. "Determination of nucleation and growth rates from induction times in seeded and unseeded precipitation of calcium carbonate." *Journal of Crystal Growth*, 118: S. 401 – 413, 1992.
- [Wed04] G. Wedler. *Lehrbuch der Physikalischen Chemie*. Wiley-VCH, 2004.
- [WGN01] M. Wulkow, A. Gerstlauer und U. Nieken. "Modeling and simulation of crystallization processes using PARSIVAL." *Chem. Eng. Sci.*, 56: S. 2575 – 2588, 2001.
- [Win99] K. Wintermantel. "Process and product engineering - achievements, present and future challenges." *Chem. Eng. Sci.*, 54: S. 1601 – 1620, 1999.

- [WJC02] G. Winckelmans, H. Jeanmart und D. Carati. "On the comparison of turbulent intensities from large eddy simulation with those from experiment or direct numerical simulation." *Physics of Fluids*, 14: S. 1809 – 1811, 2002.
- [WK04] K. Winnacker und L. Küchler. *Chemische Technik*. Bände 1–8. Wiley-VCH, 2004.
- [Zal79] S. Zalesak. "Fully multi-dimensional flux corrected transport algorithms for fluid flow." *J. Comput. Phys.*, 31: S. 335 – 362, 1979.
- [ZC88] O. Zienkiewicz und A. Chan. "Coupled problems and their numerical solution." In I. Doltsinis (Hg.), "Advances in Computational Non-Linear Mechanics," Springer-Verlag, 1988.
- [Zie71] J. Zierep. "Ein Ähnlichkeitsgesetz für Strömungen mit Relaxation." *Acta Mechanica*, 11: S. 313 – 318, 1971.
- [Zie84] O. Zienkiewicz. "Coupled Problems and Their Numerical Solution." In R. Lewis, P. Bettess und E. Hinton (Hg.), "Numerical Methods in Coupled Systems," (S. 35 – 58). John Wiley and Sons, 1984.
- [ZKS00] J. Zank, M. Kind und E. Schlünder. "Partikelwachstum und Tropfenabscheidung bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation." *Chemie Ingenieur Technik*, 72: S. 1020 – 1021, 2000.

Index

- Abschließungsproblem, 26
- Ähnlichkeit, 12
 - vollständige, 13
- Ähnlichkeitstheorie, 12
- Akkumulation, 57, 60
- Algorithmus von Zalesak, 75
- Anfangs–Geschwindigkeitsfeld, 89
- Anfangsbedingung, 35
- Ansatzraum, 29
- Antriebsbewegung, 89, 130
- Antriebsgeschwindigkeit, 96
- Anzahldichte, 94
- Äquivalentdurchmesser, 59, 64, 95, 129
- Assemblierung, 34
- Ausfällung, 58
- Ausfällungsreaktion, 53, 57, 60
- Ausströmung, 95, 128
- Auströmung, 133

- Basisgröße, 14
- Blasenfunktion, 31
- Buckingham'sches II–Theorem, 16

- Calciumcarbonat, 85, 86
- Calciumchlorid, 84, 85
- Cauchy–Spannungstensor, 7, 11
- CFL–Bedingung, 76
- Chaos
 - deterministisches, 17
- charakteristische Geschwindigkeit, 13
- charakteristische Konzentration, 66
- charakteristische Länge, 13
- charakteristische Maßzahlen, 66

- charakteristische Zeit, 13
- Crank–Nicolson–Verfahren, 37, 41, 68, 72, 77, 78, 108, 111, 126

- Damköhler–Zahl
 - dritter Art, 92
 - erster Art, 92
 - turbulente, 92
 - vierter Art, 92
 - zweiter Art, 91
- Deformationstensor, 12, 32, 42, 77
- Dichte, 5, 6, 15
- Diffusion, 31, 61, 65, 68
 - künstliche, 70
 - numerische, 60, 74
- Diffusionskoeffizient, 61, 62
- Dimensionsanalyse, 14
- dimensionslos, 15
- Dimensionsmatrix, 15
- direkte numerische Simulation (DNS), 22
- Dirichlet–Randbedingung, 68, 128
- Diskretisierung, 37, 67, 78, 79, 107
- Dispersionsmittel, 58
- Dissipation, 18, 41
- Dissipationsrate, 19
- dissipatives System, 18
- Divergenz
 - eines Tensors, 11
- Durchgang, 96
- dynamische Anpassung, 36

- Edukt, 84

- Eigenschaftskordinate, 54, 80
- Eigenschaftsraum, 59, 80
- eigenschaftsverteiltes System, 54
- Einströmung, 89, 96, 98, 106, 128
- Einströmungsöffnung, 129
- Einströmungsprofil, 88, 128
- Energiekaskade von Richardson, 18, 30
- Entdimensionierung, 13, 65, 90
- Entstehungsprozess, 56
- Erhaltungsgesetz, 6
- gleichung, 9
- prinzip, 6
- Erwartungswert, 54
- Euler
 - Ableitung, 9
 - Ansatz, 7
- Euler-Verfahren, 77, 131, 133, 139
 - explizites, 80–82, 107, 109, 124
 - implizites, 80–82, 107, 109, 124
- Fällungsprozess, 69
- Fällungsreaktion, 58, 59, 63, 64, 71, 72, 83, 88, 122, 126
- Faltung, 25
- Feld
 - isotropes, 19
 - statistisch homogenes, 19
 - statistisch stationäres, 19
- Fick
 - erstes Gesetz von, 61
 - zweites Gesetz von, 61
- Filter, 24, 28
- Filterweite, 24, 25
- Finite-Differenzen-Verfahren, 77, 125
- Finite-Element-Diskretisierung, 72
- Finite-Element-Funktion, 36
- Finite-Element-Methode (FEM), 31, 38, 69, 71, 77, 79
 - stabilisierte, 71
- Finite-Element-Methode mit Flux-Corrected-Transport (FEM-FCT), 71, 74, 75, 79, 82, 106, 109, 125, 127, 131, 133, 139
- Finite-Element-Raum, 31–33, 38, 42, 69, 77
- Finite-Elemente
 - konforme, 69
- Fluid
 - ideales, 11
- Fluiddynamik, 6–8
- Fluktuationsanteile, 24
- Freiheitsgrad, 22, 38, 39, 73, 92, 129
- Frequenz, 25
- Friktionsgeschwindigkeit, 35, 39
- Fundamentalsystem, 14
- Galerkin-Finite-Element-Methode, 38, 41, 69, 72, 75
- Geschwindigkeit, 6–8, 14, 17–19, 24, 35, 82, 96
 - innere, 55
 - mittlere, 39, 42, 43
 - physikalische, 55
- Geschwindigkeitsprofil
 - mittleres, 36
- Gesetz von der Erhaltung der Masse, 6
- Gitter, 32, 42, 45, 92, 129
 - Element, 38
 - gleichmäßige, 38
 - nicht-gleichmäßige, 38, 92, 125
- Gitterfeinheit, 22, 25, 45, 96
- Gitterweite, 24
- GMRES-Verfahren, 45
 - flexibles, 93
- Granulation, 65, 104
- Grundgröße, 14
- Haft-Randbedingung, 35, 128
- Implementierung, 32, 34, 78, 93
- Impuls, 6, 9, 10

- Impuls-
 - bilanz, 11, 42
 - erhaltung, 6, 11, 12
- Inertialbereich, 18
- inf-sup Stabilitätsbedingung, 31, 42, 77
- inkompressibel, 6, 12, 13, 15, 25, 36, 59, 62
- Isofläche, 131

- Kanalströmung, 35, 126
- Kennzahl, 13, 66, 90, 94
- kinetische Residuumsenergie, 26
- kolloiddisperses System, 58
- Kolmogorov
 - Ähnlichkeitshypothese, 20, 23
 - Skalen, 20, 22, 37
- Kontaminant, 68
- Kontinuitätsgleichung, 5, 6, 12, 59, 61
- Kontroll-
 - masse, 6
 - volumen, 6, 9, 11
- Konvektion, 9, 57, 60, 68, 80, 123
- Konvektions-Diffusions-Reaktionsgleichung, 59, 62, 66, 69, 79
- konvektionsdominant, 69, 71, 106, 127
- Konvektionsterm, 77
- Konzentration, 59, 61, 62, 79
- Koordinate
 - innere, 54, 59, 80, 92
- Korrekturvektor, 74
- Kraftdichte, 7

- L -Matrix, 73
- Löslichkeitsgrenze, 63
- Lösung
 - dünne, 57
 - kolloide, 58
- Lösungsansatz
 - monolithischer, 77
 - partitionierter, 77
 - sequentieller, 77

- Lagrange
 - Ansatz, 7
- Large Eddy Simulation (LES), 23, 24, 28
- Leonard-Spannungstensor, 27
- Leonard-Zerlegung, 27
- local projection stabilization (LPS) schemes, 71

- M -Matrix, 73
- mass lumping, 73
- Massendichte, 94
- Massengeschwindigkeit, 36
- Massenmatrix, 33, 72, 105
- Materialableitung, 7–9
- Maximumprinzip, 73, 76
- Median des Volumenanteils, 95, 98, 100, 105–107, 118, 133, 137
- Median des Volumensanteils, 138
- Messtechnik, 87
- Mittelung, 40
 - arithmetische, 39
- Mittelwert, 54
- Modalwert, 98, 100
- Modellierung, 53
- Modellparameter, 127
- Modellvalidierung, 87
- MooNMD, 93

- Natriumcarbonat, 84
- Natriumchlorid, 85, 86
- Navier-Stokes-Gleichungen, 13–15, 18, 21, 28, 35, 37, 42, 59, 65, 77, 88, 108, 111, 126
 - gefilterte, 25
 - variationelle Form, 29
- Neumann-Randbedingung, 68, 89, 128
- Newton
 - Ähnlichkeitsgesetz, 13
- Newton-
 - zweites Gesetz, 6

- Newtonsche Fluide, 11
 Niederschlag, 58, 59, 61, 65, 79, 95
 Normalspannung, 11
 Nukleation, 56
 heterogen, 63
 homogene, 63
 Nukleationskeime, 64, 105, 110
 Nukleationskerne, 64
 Nukleationskonstante, 64
 Nukleationsprozess, 63, 105
 Nukleationsrate, 64
 Nukleationszentren, 63, 64
 numerische Stabilisierung, 30, 33, 69

 Oberflächendichte, 94
 Oberflächenkräfte, 7
 Oseen–Gleichungen, 37, 77
 Oxidationsstufe, 84, 85

 Parameterfamilie, 70
 Partikel, 7, 53
 Vereinigung von, 57
 Zerteilung von, 57
 Partikelgrößenverteilung, 125
 Partikelanzahldichte, 55
 Partikeldurchmesser, 64
 Partikeleigenschaft, 54, 79
 Partikelfluss, 60
 Partikelgröße, 58
 maximale, 98
 mittlere, 100
 Partikelgrößenintervall, 96
 Partikelgrößenverteilung, 65, 77, 81, 89,
 93, 118, 121, 126, 128
 Partikelkonzentration, 60
 Partikelpopulation, 54, 95
 Partikelraum–Kontinuum, 56
 Partikelumfangdichte, 94
 Partikelverteilungsdichte, 63
 Partikelwachstum, 61, 64, 118
 Phase
 disperse, 59, 106
 homogene, 87
 kontinuierliche, 53, 56, 57, 59
 Phasenbilanz, 56
 Populationsbilanz, 53, 57, 60, 65, 67,
 79, 81, 88, 89, 106, 108, 126,
 128, 137
 positivitätserhaltend, 72
 Potenzprodukt, 14
 dimensionsloses, 15
 projektions–basierte Finite–Element
 VMS–Methode, 32, 35, 44, 51,
 126
 semi-diskrete, 31
 vollständig implizite, 41
 Prozessparameter, 87, 89

 Quadratur, 80, 105
 Querspannungstensor, 27

 Rückreaktion, 63
 Rückstand, 97
 Reaktant, 84
 Reaktion, 68
 chemische, 62, 83, 87, 94, 108
 reaktionsdominant, 69, 71, 106, 127
 Reaktionsgeschwindigkeit, 61, 62
 Reaktionsgleichung, 85
 Reaktionsprodukt, 79
 Reaktionsprozess, 54, 68
 Reaktionsrate, 62
 Reaktor, 61, 62, 77, 81, 83, 88, 90, 96,
 105, 118, 126, 129, 137
 Rechenzeit, 80, 82, 109, 111, 139
 Referenzgröße, 95, 98, 127
 dimensionslose, 13, 66, 90
 Reibungskräfte, 11
 Residuums–Spannungstensor, 26
 anisotroper, 26
 Residuumsflüsse, 74
 Residuumsvektor, 74

- Reynolds–Operator, 27
Reynolds–Spannungen, 17, 41
Reynolds–Spannungstensor, 27, 30, 40, 42
Reynolds–Zahl, 13, 16, 35
Reynolds–Zerlegung, 17
- Sättigung, 63
Sättigungskonzentration, 63, 64, 105
Sattelpunktproblem, 33, 34
Satz von Gauß, 5, 6, 10
Schergefälle, 11
Scherspannung, 11
Schubspannung, 11
Simulationsgebiet, 88, 126
Skalen
 große, 24, 28, 30, 32, 127
 kleine, 24, 28, 30, 32
 nicht aufgelöste, 22, 28, 30
Skalenseparation, 32, 42
 a posteriori, 28
 a priori, 28
Skalenspektrum, 22
Smagorinsky–Modell, 30, 31, 41, 42
Solutkonzentration, 85
Spannweitenrichtung, 35
Spurious Oscillations at Layers Diminishing (SOLD) Verfahren, 71
Stabilisierungsmethode, 69, 71
Stopp–Kriterium, 79
Strömung, 106, 110
 laminare, 78
 turbulente, 23
Strömungsgeschwindigkeit, 5, 68
Strömungsrichtung, 35, 40
Stromdichte, 6
Strouhal–Zahl, 13, 16
Strukturformel, 85
SUPG–Methode, 71
SUPG–Stabilisierung, 70, 79, 96
SvD–Methode, 44, 51
- System
 gekoppeltes, 76, 79, 88, 131
Systemmartix, 82
Systemmatrix, 73
- T–Mixer, 88, 128
Teilchenstromdichte, 61
Testproblem, 122, 125
Testraum, 29, 69
Tiefpass–Filter, 24
Transportgleichung, 62, 72, 79, 122
Transportphänomen, 54, 84, 87
Transportprozess, 61, 81, 84
Transporttheorem von Reynolds, 7, 9
Triangulierung, 69
turbulente Intensität, 17, 40, 42, 44, 130
- Turbulenz, 16
 Definition, 16
 Element, 18, 23
 isotrope, 19
 Modell, 23, 27, 28, 30–32, 37, 42, 44, 78
Turbulenzmodell, 126, 127
- Übersättigung, 59, 63
 absolute, 64
 relative, 64
- UMFPACK, 93
Umsatzgleichung, 85
Upwind–Finite–Differenzen–Verfahren, 80–82, 126
Upwind–Schema, 71, 80
- van Driest–Dämpfungsfaktor, 41, 42
Varianz, 17
variationelle Formulierung, 37, 69
variationelle Mehrskalen–Methoden (VMS), 28, 30, 32, 44
variationelle Projektion, 28
Verfahrenstechnik, 57
Verminderungsrate, 63

- Vernichtungsprozess, 56
- Vertauschungsfehler, 25, 26
- Verteilungsdichte, 118
- Verteilungsdichtefunktion, 54, 56
- Verweilzeit, 100, 105, 110, 130
- viskose Unterschicht, 41
- Viskosität, 30
 - dynamische, 11
 - turbulente, 31, 32, 42
- Volumenanteil, 95, 96, 133
 - kumulativer, 55, 95–98, 133, 137
 - totaler, 55
- Volumendichte, 94
- Volumenkräfte, 7
- Vorwärts–Euler–Verfahren, 75

- Wachstumsprozess, 104, 105, 118
- Wachstumsrate, 67
- Wachstumsregion, 104, 118, 130
- Wirbel, 18, 96
- Wirbeldehnung, 21
- Wirbeldichte, 21

- Zeitdiskretisierung, 37, 77, 79, 92, 107, 126
- Zellengröße, 22
- Zentralwert, 95
- Zerstreuungsbereich, 18
- Zugspannung, 11
- Zustandsraum, 54, 93
- Zustandsvektor, 54
- Zwischenschritt– θ –Verfahren, 33, 68, 77

Curriculum Vitae

Michael Roland

geboren am 28.01.1975 in Homburg/Saar

1981 bis 1985: Besuch der Grundschule in Limbach

1985 bis 1994: Besuch des Christian von Mannlich Gymnasium Homburg

1994 bis 1995: Zivildienst

1995 bis 2004: Studium der Mathematik an der Technischen Universität

Kaiserslautern

Seit 2005: Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität des Saarlandes

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere an Eides statt, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbstständig angefertigt habe und alle benutzten Hilfsmittel und Quellen vollständig angegeben habe. Die Zusammenarbeit mit anderen Wissenschaftlern habe ich kenntlich gemacht. Diese Personen haben alle bereits ihr Promotionsverfahren abgeschlossen.

Eine Anmeldung der Promotionsabsicht habe ich an keiner anderen Fakultät oder Hochschule beantragt.

Michael Roland

