

Optimierung der Textur granulatdurchströmter Röhren hinsichtlich des Massenflusses

Masterarbeit
vorgelegt von
Felix Verbücheln

Betreuer: Prof. Dr. Thorsten Pöschel
Lehrstuhl für Multiscale Simulations of Particulate Systems
Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

Erklärung

Ich versichere, dass ich die Arbeit ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen angefertigt habe und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegen hat oder von dieser als Teil einer Prüfungsleistung angenommen wurde. Alle Ausführungen, die wörtlich oder sinngemäß übernommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

Erlangen, den 31.03.2014

Felix Verbücheln

Danksagung

Mein Dank gilt zunächst Herrn Prof. Dr. Thorsten Pöschel, der mir diese Arbeit ermöglicht hat. Seine wertvollen Ratschläge und die aufschlussreichen Diskussionen führten zur erfolgreichen Bearbeitung des Themas.

Weiterhin danke ich Dr. Eric J. R. Parteli für die vielen konstruktiven Anregungen und sein stets offenes Ohr für alle meine Fragen. Unser Gedankenaustausch bildete die erfolgreiche Grundlage für die ergebnisreiche Untersuchung des Themas der Arbeit und stellte eine hervorragende Unterstützung dar.

Schließlich möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Lehrstuhls für Multiscale Simulations für die mir entgegengebrachte Offenheit und Hilfsbereitschaft bedanken.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Simulationsmethoden und theoretische Grundlagen	3
2.1	Kraftbasierte Molekulardynamik	3
2.1.1	Molekulardynamik MD	3
2.1.2	Kraftmodell	4
2.2	Alternative Simulationsmethoden	7
2.3	Granularer Massenflusses	8
3	Aufbau der Molekulardynamiksimulation	10
3.1	Grundlegender Aufbau der Simulationen	10
3.2	LIGGGHTS Input Skript	12
4	Rohrströmung im vertikalen Rohr mit rauer Wand und Diskussion	18
4.1	Simulationsverlauf	18
4.2	Flussregime	19
4.3	Verstopfung des Rohres	21
4.4	Packungsdichte	22
4.5	Durchmesserverhältnis	24
4.6	Erhöhung der radialen Startgeschwindigkeit	25
4.7	Massenfluss	28
4.8	Abhängigkeit des Massenflusses vom Rohrdurchmesser	31
5	Rohrströmung mit Modifikation der Rohrwandtextur und Diskussion	36
5.1	Helixförmige Textur	36
5.1.1	Diskussion der Texturgeometrie	36
5.1.2	Parameter der Helix	37
5.1.3	Simulationsverlauf	38
5.1.4	Vergleich zur Rohrströmung im Rohr mit rauen Wänden	39
5.1.5	Abhängigkeit des Massenflusses von der Wellenlänge der Helix	41
5.2	Alternative Texturgeometrien	44
6	Zusammenfassung	47
7	Symbolverzeichnis	49
8	Abbildungsverzeichnis	52
9	Tabellenverzeichnis	54

10 Literaturverzeichnis	55
11 Anhang	58

1 Einleitung

Unter dem Begriff granulare Materie wird ein System von makroskopischen Teilchen verstanden. Die Teilchen sind klein verglichen mit der Dimension des Gesamtsystems und dennoch stets groß gegenüber den Atomen, aus denen sie bestehen [17]. Ein klassisches Beispiel für ein Granulat ist gewöhnlicher Sand. Auch im alltäglichen Leben begegnen wir Granulat in Form von Zucker, Brausepulver, Schotter, Arzneimitteln und vielem mehr.

Die industrielle Verwendung von Granulat reicht von Kohle- und Erzabbau über die Kunststoffverarbeitung bis hin zur Herstellung von pharmazeutischen Produkten. In jedem dieser Bereiche kommt Granulat als Produkt oder als Rohmaterial vor. Aufgrund der vielen Verwendungen in heutigen Anwendungen ist der Bedarf an geeigneten Lagerstätten und auch an Transportsystemen von Granulat sehr hoch. Ein weit bekanntes Problem bei der Förderung von Granulat in Rohrsystemen ist ein stockender Granulatstrom und das Verstopfen des Rohres [1]. Oftmals wird das Granulat im Rohr durch Schläge auf das Rohr wieder fluidisiert.

Im Gegensatz zur Herangehensweise, den stetigen Fluss durch Schläge auf das Rohr zu gewährleisten, wird in dieser Arbeit durch Aufbringen von Partikeln auf der Rohinnenwand der stetige Fluss sichergestellt. Zum einen soll eine Verstopfung des Rohres unterbunden werden und zum anderen sollen die Eigenschaften des Massenflusses, wie Betrag und Homogenität, eingestellt werden. Um die Strömungseigenschaften des Granulates zu verstehen, ist es notwendig die Partikelwechselwirkungen korrekt zu beschreiben.

Das Verhalten von Granulat kann mit dem eines Fluids und mit dem eines Festkörpers verglichen werden. In Abhängigkeit von der Dichte weist Granulat die Eigenschaften des einen oder des anderen Aggregatzustands auf. Lockeres Granulat kann, wie z.B. in einer Sanduhr, wie eine Flüssigkeit fließen. Als Beispiel für den festen Zustand sei der Sandstrand genannt. Wenn wir über den Strand laufen, sinken wir glücklicherweise nicht ein, wie es bei einer Flüssigkeit der Fall wäre. Aufgrund der hohen Packungsdichte weist der Sand die Eigenschaften eines Festkörpers auf [11].

Die zwischen den Partikeln wirkenden Kräfte haben in Abhängigkeit von der Partikelgröße eine unterschiedliche Relevanz. Für Partikel $\leq 80 \mu\text{m}$ hat die van-der-Waals-Kraft einen großen Einfluss auf die Partikelinteraktion [11]. Genauso ist die Luftfeuchtigkeit maßgeblich für die anziehenden Kräfte der Partikel untereinander verantwortlich, da sich zwischen feuchten Partikeloberflächen Flüssigkeitsbrücken ausbilden können [11].

Neben diesen anziehenden Kräften können die Partikeloberflächen durch Reibung elektrisch geladen sein, welches elektrostatische Kräfte zwischen den Partikeln zur Folge hat [11]. Für genügend große Partikel wird die Physik der granularen Materie durch mechanische Stöße und der Reibung beschrieben.

In dieser Arbeit wird der Granulatstrom in einem vertikalen, zylindrischen Rohr durch mechanische Stöße und durch die Reibung mit Hilfe einer Molekulardynamiksimulation beschrieben. Die Partikel sind hinreichend groß, so dass Kohesionskräfte nicht berücksichtigt werden müssen. Zudem werden elektrostatische Kräfte nicht betrachtet und es existiert kein weiteres Medium im Rohr. Die Partikel werden durch die Gravitation angetrieben und fließen durch das Rohr. Aufgrund der Stöße untereinander und mit der Rohrwand treten sowohl Dichtewellen als auch Verstopfungen des Rohres auf. Diese Zustände werden genauer betrachtet und deren Einfluss auf den Massenfluss im Rohr untersucht. Zusätzlich wird der Einfluss von verschiedenen Systemparametern, wie Rohrdurchmesser und Packungsdichte, auf den Massenfluss analysiert. Schließlich wird die innere Rohrwandtextur mit verschiedenen Geometrien aus Partikeln zur Einstellung des Massenflusses im Rohr modifiziert.

Das granulare System beschreibt dabei ein chaotisches System [20]. Bereits kleinste Änderungen der Startbedingungen in der Simulation können zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen führen, welches eine statistische Betrachtung der Ergebnisse erfordert. Für die Simulation wird die auf dem klassischen Molekulardynamiksimulator LAMMPS basierende open source Software LIGGGHTS ("LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations") in der Version 2.3.7 genutzt [13].

2 Simulationsmethoden und theoretische Grundlagen

2.1 Kraftbasierte Molekulardynamik

2.1.1 Molekulardynamik MD

Die Dynamik eines Granulates aus diskreten makroskopischen Partikeln kann durch die klassische Mechanik beschrieben werden. Die gängigste Methode zur Berechnung der Dynamik ist die Molekulardynamiksimulation. Unter dieser versteht man die zeitabhängige numerische Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen für alle Partikel im System [17, 19, 21].

Für das i -te Partikel lauten die Newtonschen Bewegungsgleichungen im Schwerfeld und bei Wechselwirkung mit anderen Partikeln

$$m_i \vec{x}_i = \vec{F}_i + m_i \vec{g}, \quad (1)$$

$$J_i \vec{\omega}_i = \vec{M}_i, \quad (2)$$

wobei m_i die Masse des Partikels i , \vec{x}_i die Beschleunigung des Partikels i , \vec{g} die Erdbeschleunigung und \vec{F}_i die resultierende Kraft aus den Kollisionen mit anderen Partikeln oder einem Objekt (z.B. Rohrwand) bezeichnet. Neben der Translationsbewegung können die Partikel rotieren. Dies erfolgt nach Gleichung 2, in der J_i für das Trägheitsmoment des Partikels i , $\vec{\omega}_i$ für die Winkelbeschleunigung des Partikels i und \vec{M}_i für das Drehmoment, welches auf den Partikel i wirkt, steht. Für einen kugelförmigen Partikel mit dem Radius R_i lautet das Trägheitsmoment $J_i = 2m_i R_i^2/5$.

Die Integration von Gleichung (1) über den Verlauf der Zeit in festen Zeitintervallen Δt für jeden Partikel liefert die Bahn eines jeden Partikels. Dabei muss Δt hinreichend klein gewählt werden, so dass eine Kollision zeitlich aufgelöst werden kann, da die Kraft F_i sich über den zeitlichen Verlauf der Kollision ändert. Zur Bestimmung von Δt wird

$$\Delta t < \frac{t_K}{50}, \quad (3)$$

wobei t_K die Kollisionszeit bezeichnet, verwendet [28]. Diese wird für die Kollision zwischen zwei Partikeln i und j über den Zusammenhang

$$t_K = 3.21 \left(\frac{m_{\text{eff}}}{R_{\text{eff}} k_n} \right)^{\frac{2}{5}} v_{\text{imp}}^{-\frac{1}{5}} \quad (4)$$

mit dem effektiven Radius $1/R_{\text{eff}} = 1/R_i + 1/R_j$, der effektiven Masse $1/m_{\text{eff}} = 1/m_i + 1/m_j$, der Materialkonstante k_n (Definition erfolgt später), der Poissonzahl ν , dem

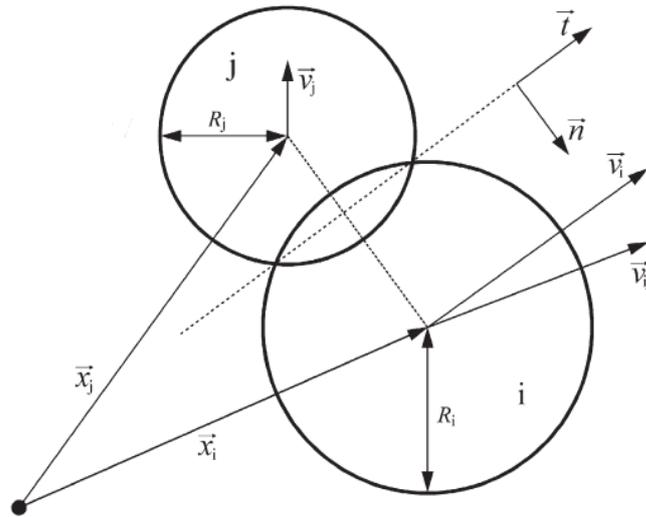


Abbildung 1: Definition der Größen zur Beschreibung der Partikelkollision [14].

Elastizitätsmodul Y und der Kollisionsgeschwindigkeit v_{imp} beschrieben [27].

2.1.2 Kraftmodell

Für die resultierende Kraft F_i auf das i -te Partikel wird in dieser Arbeit ein nicht lineares viskoelastisches Kraftmodell verwendet [6, 30]. Für die Kollision zwischen zwei Partikeln i und j wirkt diese Kraft nur während des direkten Kontaktes der Partikeloberflächen und wird folgend als F_{ij} bezeichnet. Dabei wird F_{ij} in eine normale und tangential Komponente F_n und F_t zerlegt, gefolgt von einer weiteren Unterteilung in eine elastische und dissipative Komponente. Veranschaulicht bildet das Kraftmodell eine nichtlineare Feder mit Dämpfungselement ab [14].

Normale Kraftkomponente

Bei der Kollision zweier Partikel wird eine Deformation der Partikel zugelassen. Als Maß für die Deformation wird, wie in Abbildung 1 dargestellt, die Distanz der Partikeloberflächen in Richtung des normalen Einheitsvektors \bar{n} als Verschiebung ξ definiert [15]. Je weiter die beiden Partikel zueinander verschoben sind, desto größer ist die repulsive Kraft zwischen den beiden Partikeln.

Die Verschiebung ξ kann mit Hilfe der Partikelradien R_i und R_j und der Ortsvektoren \vec{x}_i und \vec{x}_j als

$$\xi = R_i + R_j - |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \quad (5)$$

dargestellt werden. Die Verschiebungsgeschwindigkeit $\dot{\xi}$ lautet unter Verwendung der Geschwindigkeitsvektoren \vec{v}_i und \vec{v}_j der Partikel und des normalen Einheitsvektors $\vec{n} = (\vec{x}_i - \vec{x}_j)/|\vec{x}_i - \vec{x}_j|$

$$\dot{\xi} = (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{n}. \quad (6)$$

Mit den gegebenen Größen und den zusätzlichen elastischen und dissipativen Materialkonstanten k_n und γ_n können die elastische Komponente F_n^{el} und die dissipative Komponente F_n^{diss} der Kraft in normale Richtung nach [6, 12, 14] als

$$F_n^{\text{el}} = k_n \sqrt{R_{\text{eff}}} \cdot \xi^{\frac{3}{2}}, \quad (7)$$

$$F_n^{\text{diss}} = \gamma_n m_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}} \xi \cdot \dot{\xi} \quad (8)$$

geschrieben werden. Die Summe aus beiden Komponenten ergibt die Kraft in normale Richtung:

$$F_n = k_n \sqrt{R_{\text{eff}}} \cdot \xi^{\frac{3}{2}} + \gamma_n m_{\text{eff}} \sqrt{R_{\text{eff}}} \xi \cdot \dot{\xi}. \quad (9)$$

Die Größe k_n ist für ein Partikelsystem aus nur einem Material wie folgt definiert [14]:

$$k_n = \frac{2}{3} \frac{Y}{1 - \nu^2}. \quad (10)$$

Der zweite Materialparameter γ_n beschreibt das Dämpfungsverhalten des Materials:

$$\gamma_n = \frac{3}{2} \frac{A_n k_n}{m_{\text{eff}}}. \quad (11)$$

Hier bezeichnet A_n eine dissipative Konstante und folgt dem Zusammenhang

$$A_n = \frac{2}{3} \frac{v_*^2}{v_{\text{imp}}^{\frac{1}{5}}} \left(\frac{m_{\text{eff}}}{k_n \sqrt{R_{\text{eff}}}} \right)^{\frac{2}{5}}, \quad (12)$$

wobei v_{imp} eine gewählte Kollisionsgeschwindigkeit und v_* ein dimensionsloser Faktor aus der Bestimmung des Restitutionskoeffizienten ϵ darstellt. Der Restitutionskoeffizient gibt das Verhältnis der Geschwindigkeit nach dem Stoß zu der Geschwindigkeit vor dem Stoß an. Aus der Arbeit von Müller und Pöschel [18] ist der funktionale Zusammenhang für ϵ und v_* bekannt. Damit gilt für den Materialparameter γ_n

$$\gamma_n = \left(\frac{k_n}{m_{\text{eff}}} \right)^{\frac{3}{5}} \cdot \frac{v_*^2}{(R_{\text{eff}} v_{\text{imp}})^{\frac{1}{5}}}. \quad (13)$$

Tangentiale Kraftkomponente

Für die elastische tangentielle Kraftkomponente F_t^{el} wird die zeitliche Kraftentwicklung über die Dauer des Kontaktes berücksichtigt. Mit der tangentialen Geschwindigkeit $v_t = \vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}$, wobei \vec{t} für den tangentialen Einheitsvektor steht, und der Materialkonstante k_t wird F_t^{el} als

$$F_t^{\text{el}} = \int_{t_0}^t k_t \sqrt{R_{\text{eff}}} \xi v_t dt', \quad (14)$$

mit der Dauer der Kollision $t - t_0$, angegeben. k_t folgt dem Zusammenhang [12][15]

$$k_t = \frac{2Y}{(2 - \nu)(1 + \nu)}. \quad (15)$$

Die tangentielle dissipative Kraftkomponente F_t^{diss} lautet mit der dissipativen Konstante $\gamma_t = \gamma_n$ [25, 30]

$$F_t^{\text{diss}} = \gamma_t m_{\text{eff}} \sqrt{\xi R_{\text{eff}}} \cdot v_t. \quad (16)$$

Die Addition der Gleichungen (14) und (16) liefert die gesamte tangentielle Kraftkomponente

$$F_t = \int_{t_0}^t k_t \sqrt{R_{\text{eff}}} \xi v_t dt' + \gamma_t m_{\text{eff}} \sqrt{\xi R_{\text{eff}}} \cdot v_t. \quad (17)$$

F_t wird durch die Coulombsche Reibung

$$F_t \leq \mu F_n, \quad (18)$$

mit dem Reibungskoeffizienten μ , limitiert [15, 25].

Die bisher angegebenen Gleichungen sind gültig für die Kollision zwischen Partikeln mit dem gleichen Partikelradius, der gleichen Dichte und den gleichen Materialparametern Y und ν . Für die Kollision eines Partikels mit einer Wand werden für die Wand die gleichen Materialparameter angenommen. Auch wird die Kollision durch Gleichungen (9) und (17) beschrieben. Allerdings werden für die Berechnung der Kräfte die Annahmen

$$R_{\text{eff}} = R_{\text{Partikel}} \quad (19)$$

und

$$m_{\text{eff}} = m_{\text{Partikel}} \quad (20)$$

getroffen.

2.2 Alternative Simulationsmethoden

Der Algorithmus der MD basiert auf der numerischen Lösung von Newton's Bewegungsgleichung. Die Anzahl der Rechenschritte ist von der Schrittweite in der numerischen Lösung abhängig. In einer Simulation, in der nur Kräfte durch Partikelstöße betrachtet werden, kann es vorkommen, dass in einem Zeitschritt oder auch über mehrere Zeitschritte hinweg ein beobachtetes Partikel nicht mit anderen Partikeln wechselwirkt und somit wird in dieser Zeit keine numerische Lösung benötigt. Genau auf diesen Mangel geht die Ereignisgesteuerte Molekulardynamik (eMD) ein.

Unter der Annahme, dass keine weiteren äußeren Kräfte (z.B. Gravitation) auf die Partikel wirken, bewegen sich diese auf einer geraden Bahn. Die Bahngleichung wird analytisch gelöst und daher sind die Positionen und Geschwindigkeiten der Partikel zu jedem Zeitpunkt in einer eMD bekannt. Es werden nur die Zeitpunkte der Partikelkollisionen betrachtet. Für zwei Kollisionspartner werden die Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten nach dem Stoß über Impulserhaltung, Drehimpulserhaltung und den Restitutionskoeffizient ermittelt. Aufgrund dieser Informationen kann der Zeitpunkt der nächsten Kollision bestimmt werden.

In der eMD wird die Anzahl der Rechenschritte durch die Anzahl der Partikelkollisionen bestimmt. Dies führt bei Systemen mit langen Zeiten zwischen Kollisionen zu einem Effizienzvorteil der eMD gegenüber der kraftbasierten MD. Jedoch sinkt der Effizienzvorteil bei Systemen mit kurzen Zeiten zwischen Partikelkollisionen [17]. Zudem ist eine Kollision zwischen zwei Partikeln in der eMD ein instantanes Ereignis. Situationen wie die Verstopfung eines Rohres, in der mehrere Partikel einen dauerhaften Kontakt zueinander haben, können daher durch die eMD nicht abgebildet werden.

Eine alternative Lösung für die Simulation von granularem Fluss durch ein enges Rohr kann über einen statistischen Ansatz für die Partikelwechselwirkung gefunden werden. In der Regel wird Granulat mit Hilfe von Gas oder einer Flüssigkeit transportiert. Den Einfluss von Molekülen des Trägermediums auf die Partikel kann über die Langevin-Dynamik modelliert werden. Diese führt eine statistische Kraftkomponente ein, welche die zufälligen Stöße mit den umgebenden Molekülen beschreibt. Dieser Ansatz basiert auf der Brownschen Bewegung, in der die zufällige Bewegung eines Teilches aufgrund der Stöße mit dem umgebenden Molekülen beschrieben wird. Die Teilchen befinden sich in einem Bad mit der Temperatur T_B . In der Arbeit von Riethmüller et al. [23, 24] wird die Langevin Gleichung zur Beschreibung der Partikelwechselwirkung verwendet:

$$m\ddot{x} = mg - \gamma_R \dot{x} + \sqrt{2k_B T_B \gamma_R} L(t) + Dk_B T_0 n_0. \quad (21)$$

Hier bezeichnet γ_R den mittleren Reibungskoeffizienten aufgrund von Wechselwirkungen zwischen Partikel und Rohrwand, k_B die Boltzmann-Konstante, T_B die Temperatur des Bades, $L(t)$ die Langevin-Kraft, D den effektiven Wirkungsquerschnitt bei Stößen von Partikeln, T_0 die Temperatur der Brownschen Teilchen und n_0 die Anfangsbedingung für die Partikelzahldichte. Der Term $\gamma_R \dot{x}$ stellt eine Dämpfung und der Ausdruck $k_B T_B$ die thermische Energie des Granulates dar [21]. Der letzte Term gibt eine effektive mittlere Kraft an, welche ihre Ursache in den Wechselwirkungen der Partikel hat [23].

In dieser Arbeit werden umgebende Medien nicht betrachtet und zusätzlich kann die MD Stöße der Partikel mit einer Wand auswerten. Daher ist die MD der Langevin-Dynamik für die in dieser Arbeit betrachteten Systeme vorzuziehen.

2.3 Granularer Massenflusses

Granulat zeigt sowohl das Verhalten von Festkörpern als auch das von Flüssigkeiten [20]. Daher wird der Massenfluss eines Fluids durch ein zylindrisches Rohr als Vergleichsgröße betrachtet. Der Fluss einer Flüssigkeit kann über die Navier-Stokes Gleichung beschrieben werden. Diese wird für die folgenden Annahmen stark vereinfacht.

1. stationäre Strömung
2. rotationssymmetrische Strömung
3. laminare Strömung
4. inkompressibles Fluid
5. Haftbedingung an Wand - Geschwindigkeit des Fluides an der Wand $v_{\text{FlWand}} = 0$

Es folgt aus der Navier-Stokes Gleichung die Hagen-Poiseuille Gleichung [29]

$$\dot{V} = \frac{\pi R_{\text{Rohr}}^4 \Delta p}{8\eta L_{\text{Rohr}}}, \quad (22)$$

welche den Volumenstrom \dot{V} in einem zylindrischen Rohr beschreibt. Dabei bezeichnet R_{Rohr} den Rohrradius, Δp den Druckunterschied über die betrachtete Rohrlänge, η die dynamische Viskosität der Flüssigkeit und L_{Rohr} die Länge des Rohres. Durch Multiplikation mit der Dichte des Fluids wird der Massenfluss \dot{m}_{Fl} als

$$\dot{m}_{\text{Fl}} = \frac{\rho_{\text{Fl}} \pi R_{\text{Rohr}}^4 \Delta p}{8\eta L_{\text{Rohr}}} \quad (23)$$

erhalten.

Wie in der Arbeit von Bertho et al. [4] gezeigt, kann der Massenfluss für ein Granulat durch ein Rohr über die Querschnittsfläche πR_{Rohr}^2 des Rohres, der Partikelgeschwindigkeit v_{Partikel} und der Partikeldichte ρ_{Partikel} wie folgt beschrieben werden:

$$\dot{m}_{\text{Partikel}} = \pi R_{\text{Rohr}}^2 v_{\text{Partikel}} \rho_{\text{Partikel}}. \quad (24)$$

Wenn man den Granulatstrom durch ein Kontinuum annähert, so kann man die Partikeldichte durch eine Mischdichte ρ_M der Partikel und des umgebenden Mediums ersetzen. Da in den in dieser Arbeit ausgeführten Simulationen kein Medium existiert, folgt für die Mischdichte ρ_M , mit der Packungsdichte V_ϕ , die Beziehung $\rho_M = V_\phi \rho_{\text{Partikel}}$. Des Weiteren wird die Partikelgeschwindigkeit v_{Partikel} durch eine gemittelte axiale Geschwindigkeit \bar{v}_z über alle Partikel im Rohr ersetzt und es folgt

$$\dot{m}_{\text{Partikel}} = \pi R_{\text{Rohr}}^2 \bar{v}_z V_\phi \rho_{\text{Partikel}}. \quad (25)$$

Die in Gleichungen (23) und (25) gezeigten Abhängigkeiten des Massenflusses vom Rohrdurchmesser werden in Kapitel 4.8 untersucht.

3 Aufbau der Molekulardynamiksimulation

3.1 Grundlegender Aufbau der Simulationen

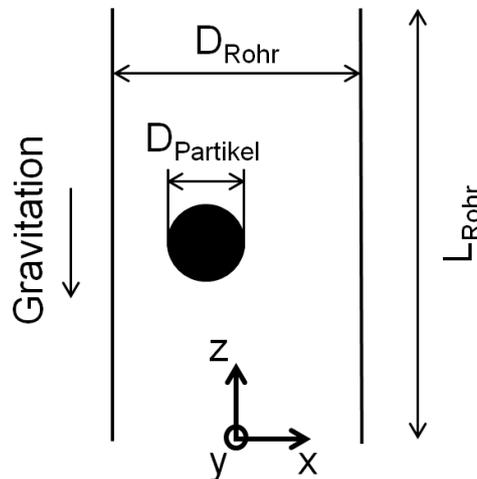


Abbildung 2: Zweidimensionale Darstellung des zylindrischen Rohres. Schnitt entlang der Rohrachse, nicht maßstabsgetreu.

Die Simulationen bilden ein vertikales, zylindrisches, dreidimensionales, von Granulat durchflossenes Rohr ab. Neben dem Granulat existiert kein weiteres Medium im Rohr. Dadurch werden zwei wichtige Größen für die Eigenschaften des Granulatstromes in realen Systemen vernachlässigt. In realen Systemen sind Luftfeuchtigkeit und auch der Luftstrom im Rohr maßgeblich für den Granulatstrom. Eine erhöhte Luftfeuchtigkeit führt zu starken adhäsiven Kräften zwischen den Partikeln [22] und die im Rohr strömende Luft stellt einen Strömungswiderstand dar [4]. Diese beiden Parameter sind hier nicht in den Simulationen einbezogen und die Ergebnisse beschreiben daher das Verhalten granularer Systeme aufgrund von reinen Kraftstößen.

Das Granulat wird durch monodisperse Partikel mit dem Durchmesser $D_{\text{Partikel}} = 0.0012$ m dargestellt. Dadurch sind Kohäsionskräfte zwischen den Partikeln im Vergleich zum Gewicht der Partikel selbst vernachlässigbar und werden in der Simulation somit nicht berücksichtigt. Das Rohr hat eine Länge von $L_{\text{Rohr}} = 1$ m und einen Durchmesser von $D_{\text{Rohr}} = 0.003$ m. Die Partikelanzahl ist so gewählt, dass die summierten Volumina aller Partikel 15% des Rohrvolumens ausmachen. Zusätzlich werden periodische Randbedingungen in z -Richtung angenommen, welche ein unendlich langes Rohr darstellen. Dadurch werden alle diejenigen Partikel, welche das Rohr am unteren Ende verlassen, am oberen Ende des Rohres wieder eingefügt. Bei diesem Vorgang behalten die Partikel die Geschwindigkeit, Winkelgeschwindigkeit und die radiale Position,

die sie am unteren Ende des Rohres hatten, bei. Die periodischen Randbedingungen können in den Simulationen angenommen werden, da Dichteinhomogenitäten auftreten, welche viel kleiner als die Länge des Rohres sind.

Die Partikel und auch die Rohrwand bestehen aus Glas und weisen die Dichte $\rho_{\text{Glas}} = 2650 \text{ kg/m}^3$ auf [8, 19]. Die Materialparameter k_n , γ_n , k_t und γ_t sind für die Wechselwirkungen zwischen Partikel und Partikel, als auch für Wand und Partikel nach Gleichung (10), (13) und (15) bestimmt. Das Elastizitätsmodul und die Poissonzahl für Glas lauten $Y_{\text{Glas}} = 63 \text{ GPa}$ und $\nu = 0.24$ [19].

Bei vorgegebener Packungsdichte V_ϕ beträgt die Partikelanzahl

$$N = \frac{V_\phi V_{\text{Rohr}}}{V_{\text{Partikel}}}, \quad (26)$$

wobei $V_{\text{Rohr}} = \pi R_{\text{Rohr}}^2 L_{\text{Rohr}}$ und $V_{\text{Partikel}} = 4/3 \pi R_{\text{Partikel}}^3$ gilt. Die Partikel werden bei der Initialisierung überlappungsfrei zufällig gleichverteilt im Rohr angeordnet. Die Anfangsgeschwindigkeit der Partikel beträgt $\vec{v}_{\text{Partikel}} = (v_x, v_y, v_z)$, mit $v_z = 0$ und v_x, v_y zufällig gleichverteilt im Intervall $(-0.01, 0.01) \text{ m/s}$.

Mit Hilfe von Gleichung (3) wird der Zeitschritt für die numerische Lösung zu $\Delta t = 8 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ ermittelt. Dieser kleine Zeitschritt für eine Iteration bedeutet eine sehr hohe Rechenzeit für eine Simulation. Zur Verringerung der Rechenzeit wird daher ein kleinerer Zeitschritt gewählt. Dieser ist nach Gleichung (3) von dem Elastizitätsmodul abhängig und durch Verringerung von Y_{Glas} ergibt sich daher ein kleineres Δt . In [28] konnte gezeigt werden, dass ein kleineres Elastizitätsmodul das generelle Verhalten der Glaspartikel beschreibt, insofern die von Y abhängige Konstante k_n nicht kleiner als $k_n = 10^5 \frac{\text{kg}\cdot\text{m}^{1/2}}{\text{s}^2}$ ist. Daher wird das Elastizitätsmodul auf $Y_{\text{Glas}} = 0.1 \text{ GPa}$ herabgesetzt, welches $k_n = 7.07 \cdot 10^7 \frac{\text{kg}\cdot\text{m}^{1/2}}{\text{s}^2}$ zur Folge hat. Dadurch ergibt sich der neue Zeitschritt für die numerische Lösung zu $\Delta t = 6 \cdot 10^{-7} \text{ s}$.

Insofern keine Abweichung von den hier beschriebenen Werten der Parameter für die Simulationen angegeben werden, wurden diese Werte für die Parameter verwendet.

Tabelle 1: Grundlegende Parameter der Simulationen

Parameter	Bez.	Einheit	Wert
Rohrlänge	L_{Rohr}	m	1
Rohrradius	R_{Rohr}	m	0.0015
Partikelradius	R_{Partikel}	m	0.0006
Elastische Konstante in normale Richtung	k_n	$\frac{kg \cdot m^{1/2}}{s^2}$	$7.07 \cdot 10^7$
Elastische Konstante in tangentialer Richtung	k_t	$\frac{kg}{s^2}$	$9.16 \cdot 10^7$
Dissipative Konstante in normale Richtung	γ_n	$\frac{kg}{s}$	$6.64 \cdot 10^8, 3.82 \cdot 10^8$
Dissipative Konstante in tangentialer Richtung	γ_t	$\frac{kg}{s}$	$6.64 \cdot 10^8, 3.82 \cdot 10^8$
Elastizitätsmodul	E	GPa	0.1
Poissonzahl	ν	—	0.24
Reibungskoeffizient	μ	—	0.5
Dichte	ρ	kg/m^3	2650
Volumenverhältnis	V_ϕ	—	0.15
dimensionsloser Faktor Bestimmung ϵ	v^*	—	0.211631
Restitutionskoeffizient	ϵ	—	0.95
Kollisionsgeschwindigkeit	v_{imp}	m/s	1
Zeitschritt	Δt	s	$6 \cdot 10^{-7}$

3.2 LIGGGHTS Input Skript

Zur Ausführung einer Simulation benötigt LIGGGHTS ein Inputskript, in dem die Einstellung der Simulationsparameter vorgenommen wird. Das vollständige Skript ist als Anhang beigefügt. Im folgenden wird jede Zeile erklärt.

<code>atom_style</code>	<code>granular</code>
<code>atom_modify</code>	<code>map array</code>
<code>communicate</code>	<code>single vel yes</code>

Zu Beginn wird die Art der zu simulierenden Teilchen mit dem Befehl `atom_style granular` auf Granulat festgelegt. Granulat wird in LIGGGHTS als Kugel mit festem Radius und Dichte modelliert, deren Radius und Dichte angegeben werden.

Über das Kommando `atom_modify map array` wird für jeden durch die Simulation genutzten Prozessor eine Lookup Tabelle erzeugt, in der jede Partikel ID hinterlegt wird. Anschließend werden die zwischen den Prozessoren zu kommunizierenden Informationen definiert. Bei der Parallelisierung wird der Simulationsraum in gleich große Bereiche entsprechend der Anzahl der ausgewählten Prozessorkerne aufgeteilt. Diese Kerne kommunizieren bei jedem Zeitschritt Informationen über die Partikel untereinander, welche in einem bestimmten Abstand zur jeweiligen Grenze des Simulationsbereiches eines Prozessorkernes positioniert sind. Dieser Abstand wird durch den Befehl `neighbor` bestimmt. Mit `communicate vel yes` wird eingestellt, dass zwischen den Prozessorkernen

die Koordinaten, Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten der Partikel ausgetauscht werden.

boundary	f f p
newton	off

Die Randbedingungen für die Simulation werden mit *boundary f f p* festgelegt. Hier wird die Art der Grenze des globalen Simulationsraumes in jeder Dimension x , y , z definiert. Folglich erhält der Simulationsraum in z -Richtung periodische ($p = \textit{periodic}$) Randbedingungen und in x -, y -Richtung feste ($f = \textit{fix}$) Grenzen. Sollte ein Partikel in x - oder y -Richtung den Rand der Simulationsbox überschreiten, dann verlässt es den Simulationsbereich und wird nicht weiter modelliert. Durch den Befehl *newton off* wird das dritte Newtonsche Gesetz deaktiviert. Dieses besagt, dass für jede Kraft eine entgegengesetzte gleich große Kraft wirkt. Die Deaktivierung ist hier erforderlich, da die in Kapitel 2.1.2 definierte Kraft zwischen zwei Partikeln bereits diesem Gesetz folgt. Die von Partikel 1 auf Partikel 2 wirkende Kraft ist abhängig von der Überlappung ξ der Partikel während des Stoßes. Dabei gilt ξ ebenso für die Kraft von Partikel 2 auf 1 und daraus folgt, dass beide Partikel mit einer gleich großen entgegengesetzten Kraft aufeinander wirken. Würde hier *newton on* gesetzt werden, so würde ein zusätzlicher Kraftterm für Partikel 1 eingeführt werden, der gerade der Kraft des Partikels 2 auf 1 entspricht. Ebenso würde ein zusätzlicher Kraftterm für Partikel 2 eingeführt werden. Dies ist offensichtlich nicht richtig und deswegen wird *newton off* gesetzt.

units	si
processors	1 1 6
read_data	initial.packing

Als nächstes wird das Einheitensystem für die Angaben im Inputskript mit *units si* auf das SI-Einheitensystem festgelegt. Im Anschluss erfolgt die Einteilung des Simulationsbereiches in eine gewünschte Anzahl von Teilbereichen. Die Teilung erfolgt in die drei Raumrichtungen x , y und z . Hier wird der Simulationsbereich z.B. entlang der z -Achse in 6 gleich große Teile geteilt. Dies entspricht einer Parallelisierung der Simulation auf 6 Prozessorkerne. Mit dem Befehl *read_data initial.packing* wird die Datei *initial.packing* eingelesen. Diese enthält die globalen Grenzen des Simulationsbereiches, die Anzahl der in der Simulation enthaltenen Partikel, deren Startpositionen wie auch deren Startgeschwindigkeiten.

group	free_particles type 1
group	textur_particles type 2

Folgend werden Gruppen zur Identifizierung der Partikel und der Wände in der Simulation erzeugt. In die Gruppe *free_particles* gehören folglich alle strömenden Partikel und diese bilden den Typ 1. Zur Gruppe *textur_particles* gehören die Partikel, welche zusätzlich z.B. als dreidimensionale Textur auf der Innenwand aufgebracht werden. Ebenso ist die Rohrwand Teil dieser Gruppe, welche den Typ 2 bildet.

```
neighbor      0.0001 bin
neigh_modify  delay 0 exclude group tekstur_particles
              tekstur_particles
```

Zur Überprüfung der Wechselwirkung der Partikel untereinander werden Listen erzeugt, in denen die Partikel mit einer gewissen Distanz zueinander gespeichert werden. Diese Distanz wird durch den Befehl *neighbor 0.0001 bin* auf 0.0001 m festgelegt. Mit Hilfe des Befehls *neigh_modify* kann die Auswahl der in der Liste zu speichernden Partikel beeinflusst werden. Der Zusatz *delay 0* gibt an, das zu jedem Zeitschritt eine aktualisierte Liste generiert wird. Ebenso können hier Partikel aus der Listenbildung ausgeschlossen werden. Dies geschieht z.B. bei den hier verwendeten dreidimensionalen Texturen auf der Rohrwand aus Partikeln. Diese sind fest positioniert und können nicht bewegt werden. Für diese wird untereinander keine Abfrage auf Wechselwirkung durchgeführt und folglich werden diese Partikel aus der Liste mit der Vorgabe *group exclude tekstur_particles tekstur_particles* ausgeschlossen.

```
fix          m_kn all property/global kn peratomtypepair 2
              7.07e7 7.07e7 7.07e7 7.07e7
fix          m_kt all property/global kt peratomtypepair 2
              9.16e7 9.16e7 9.16e7 9.16e7
fix          m_gamman all property/global gamman peratomtypepair 2
              6.64e8 3.82e8 3.82e8 3.82e8
fix          m_gammat all property/global gammat peratomtypepair 2
              6.64e8 3.82e8 3.82e8 3.82e8
fix          m_friction_coefficient all property/global
              coefficientFriction peratomtypepair 2
              0.5 0.5 0.5 0.5
```

Folgend werden hier die Materialparameter angegeben. Wie in Kapitel 2.1.2 beschrieben wird für jeden Partikel die Kraft, die es erfährt, berechnet. Für die Berechnung der Kraft werden die Materialparameter k_n , k_t , γ_n und γ_t benötigt. Diese werden mit dem Befehl *fix ID Gruppe property/global Materialparameter peratomtypepair 2 Wert1 Wert2 Wert3 Wert4* festgelegt. Über die ID kann auf den hier definierten *fix* zugegriffen werden. Bei der Gruppe wird hier die Gruppe *all* ausgewählt, welches alle Partikel in der Simulation einschliesst. Das Schlüsselwort *property/global* stellt die definierten

Materialparameter für alle weiteren Komponenten von LIGGGHTS zur Verfügung. Im folgenden wird mit *peratomtypepair 2* eine Tabelle erstellt.

Tabelle 2: Auswahlssystem der angegebenen Materialparameter nach den beteiligten Typen einer Kollision

	type 1	type 2
type 1	Materialparameter Wert1	Materialparameter Wert2
type 2	Materialparameter Wert3	Materialparameter Wert4

Dabei wird entsprechend einer Kollision zwischen einem Partikel des Types 1 mit einem Partikel des Types 1 der Wert1 verwendet. Für Kollisionen zwischen anderen Typen wird der Wert entsprechend der Tabelle ausgewählt. Für die Zuweisung des Reibungskoeffizienten wird analog vorgegangen.

<code>pair_style</code>	<code>gran/hertz/history/stiffness tangential_damping on</code>
<code>pair_coeff</code>	<code>* *</code>
<code>timestep</code>	<code>6e-7</code>
<code>fix</code>	<code>gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0</code>

Hier wird das Kraftmodell nach Hertz mit dem Befehl *gran/hertz/history/stiffness* verwendet. *tangential_damping on* gibt an, dass die dissipative tangentielle Kraftkomponente berücksichtigt wird. Zusätzlich muss der obligatorische Befehl *pair_coeff * ** gesetzt werden. Über diesen Befehl können die Argumente für den zuvor gewählten *pair_style* für einzelne Typen geändert werden. Da dies hier nicht erforderlich ist, werden hier keine weiteren Argumente gesetzt.

Als nächstes erfolgt die Definition des Zeitschrittes. Ebenso wird hier über den Befehl *fix gravity* die Gravitation als Beschleunigung für jeden Partikel in z-Richtung eingestellt. Dabei ist *gravi* der Name des fixes und mit *all* werden alle Partikel in der Simulation ausgewählt.

<code>fix</code>	<code>zcyl all wall/gran/hertz/history/stiffness primitive type 2</code> <code>zylinder 0.0015 0. 0.</code>
------------------	--

Anschließend erfolgt die Definition der Rohrwand. Diese wird über den Befehl *fix wall/gran/hertz/history/stiffness* erzeugt. Zu Beginn wird der Name des Fixes *zcyl* und die Gruppe der Partikel *all* ausgewählt, welche mit der Wand wechselwirken können. Das Schlüsselwort *primitive* gibt an, dass es sich um eine durch LIGGGHTS erzeugte Grenze/Wand für die Partikel handelt. Alternativ kann man an dieser Stelle z.B. eine CAD Geometrie als Wand definieren. Obligatorisch ist hier die Zuweisung der Wand zu einem

bestimmten Typ, damit der Wand die gewünschten Materialeigenschaften zugewiesen werden. In diesem Fall erhält die Wand die Eigenschaften, welche in *type 2* hinterlegt sind. Zum Schluss wird die Art der Geometrie, wessen Ausrichtung und die Position durch *zylinder radius x y* festgelegt. Hier wird ein Zylinder mit der Symmetrieachse auf der z-Achse des Koordinatensystems mit einem festen Radius $R = 0.0015$ m festgelegt. Die Höhe des Zylinders ist durch die Höhe des globalen Simulationsbereiches in z-Richtung vorgegeben und entspricht dieser.

```
fix      cad1 all mesh/surface file twoDmesh.stl type 2
fix      mc free_particles massflow/mesh mesh cad1
         vec_side 0. 0. -0.1 count multiple
```

Im folgenden Abschnitt wird eine CAD Geometrie implementiert. Über den Befehl *fix mesh/surface* wird die CAD Geometrie als Fläche interpretiert. Zu Beginn wird der Fläche der Name *cad1* zugewiesen. Darauf folgt die Auswahl der Partikel *all*, welche mit der Fläche wechselwirken können. Anschließend wird die .stl Datei, welche die CAD Geometrie beinhaltet, mit *file *.stl* ausgewählt. Die Zuweisung eines Types ist obligatorisch. Als nächstes folgt der Befehl *fix massflow/mesh* mit dem die CAD Geometrie nicht als fester Körper in der Simulation interpretiert wird, sondern lediglich als Kontrollfläche zur Partikelzählung verwendet wird. Auch hier wird zuerst der Name des Fixes *mc* und die Partikelgruppe, welche gezählt werden soll (*free_particles*), festgelegt. Nachfolgend wird der fix, der die Kontrollfläche beschreibt, mit *mesh cad1* ausgewählt. Durch das Schlüsselwort *vec_side x y z* wird die Richtung definiert, in der die Partikel die Fläche durchqueren müssen, damit sie gezählt werden.

```
fix      integr free_particles nve/sphere
fix      freeze_walls textur_particles freeze

thermo_style  custom step atoms ke f_mc[2]
thermo      1
thermo_modify  lost ignore norm no
```

Mit dem Befehl *fix nve/sphere* wird mit jedem Zeitschritt eine NVT Integration zur Aktualisierung der Position, Geschwindigkeit, etc. für alle Partikel in der ausgewählten Gruppe *particles_free* durchgeführt. Im nachfolgenden werden alle Partikel der Gruppe *textur_particles* über den Befehl *fix freeze* bewegungsunfähig gemacht.

Zur Ausgabe von Daten auf dem Bildschirm während der Simulation wird *thermo_style custom* verwendet. Es wird durch die Angabe der Größen spezifisch die Ausgabe definiert. Hier wird der aktuelle Zeitschritt (*step*), die Anzahl der Partikel im System

(*atoms*), die kinetische Energie (*ke*) und die bisher durch *cad1* geflossenen Partikel ausgegeben. Es folgt der Befehl *thermo*, mit dem festgelegt wird, wann eine Ausgabe auf dem Bildschirm erfolgt. *thermo 1* führt zu einer Ausgabe bei jedem Zeitschritt. Zum Schluss kann die Ausgabe noch durch *therm_modify* beeinflusst werden. Das Schlüsselwort *lost ignore* gibt an, dass eine Simulation bei Partikelverlust durch Verlassen des Simulationsraumes nicht abgebrochen wird. Durch *norm no* wird eine Normierung der Ausgabegrößen auf die Partikelanzahl unterbunden.

```
run      1
dump     Admp free_particles custom 10000 post/dump.particles.*
         id type density x y z vx vy vz fx fy fz omegax omegay
         omegaz radius
run      20000000
```

Neben der Bildschirmausgabe gibt es noch die Möglichkeit spezifizierte Größen über den Befehl *dump custom* in Dateien abzuspeichern. Zu Beginn wird die Bezeichnung des Fixes *Admp* gefolgt von den Partikeln, für die die Daten gespeichert werden sollen, angegeben. Durch die Angabe von *10000* wird alle 10000 Zeitschritte eine neue Datei erzeugt. Zudem muss noch der Speicherort und der Name der Datei vorgegeben werden. Hier ist dies der Ordner *post* und der Dateiname *dump.particles.** vorgegeben. Für das Zeichen *** wird der aktuelle Zeitschritt eingefügt. In den Dateien wird dann jeweils für jeden Partikel der Gruppe *particles_free* die Partikelnummer, der zugehörige Typ, die Dichte, die *x*-,*y*-,*z*-Koordinate, die Geschwindigkeitskomponenten in *x*-, *y*-, *z*-Richtung, die Kraftkomponenten in *x*-, *y*-, *z*-Richtung, die Winkelgeschwindigkeiten in *x*-, *y*-, *z*-Richtung und der Radius gespeichert. Das Kommando *run* gibt die Dauer der Simulation in Zeitschritten an.

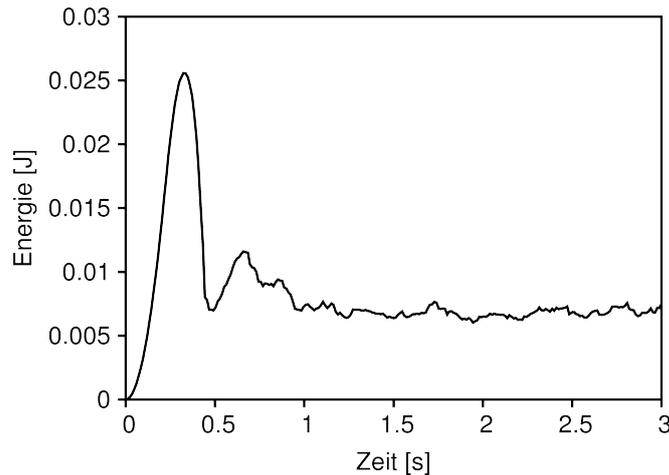


Abbildung 3: Zeitlicher Verlauf der gesamten Energie (Rotationsenergie + Translationsenergie)

4 Rohrströmung im vertikalen Rohr mit rauer Wand und Diskussion

4.1 Simulationsverlauf

Nach der Initialisierung der Simulation werden die erzeugten Partikel durch die Gravitation beschleunigt. Aufgrund der geringen radialen Startgeschwindigkeit stoßen die Partikel nach einer gewissen Zeit untereinander und mit der Wand. In Folge werden die Partikel abgebremst. D.h. bei jedem Stoß wird Energie dissipiert und es stellt sich ein stationärer Wert durch das Wechselspiel von Dissipation und Beschleunigung durch die Gravitation für die kinetische Energie, als auch für den Betrag der Geschwindigkeiten ein. Diese fluktuieren anschließend um einen geringen Wert (Abb. 3).

Im Verlauf der Simulation bilden sich Dichteinhomogenitäten im Rohr aus. Durch Stöße der Partikel untereinander und mit der Wand entsteht ein Geschwindigkeitsgradient zwischen den Partikeln, welcher auf dem durchs Rohr begrenzten Raum eine Ansammlung von Partikeln zu Pfropfen ermöglicht. Schnellere auf einen Pfropfen treffende Partikel können andere Partikel aus der Gruppe heraus stoßen. In Folge beschleunigen diese wieder und treffen zu einem späteren Zeitpunkt auf eine andere Partikelgruppe. Die Bildung von Pfropfen kann über die Clusterbildung in granularen Gasen beschrieben werden [10]. In einer Region mit höherer Packungsdichte treten mehr Stöße unter den Partikeln auf. Da die Stöße inelastisch sind, nimmt die granulare Temperatur in dieser Region ab, welches zu einer Abnahme des Druckes in der Region führt. In Folge wandern noch mehr Partikel entlang des Druckgradienten in die Region mit hoher Packungsdichte.

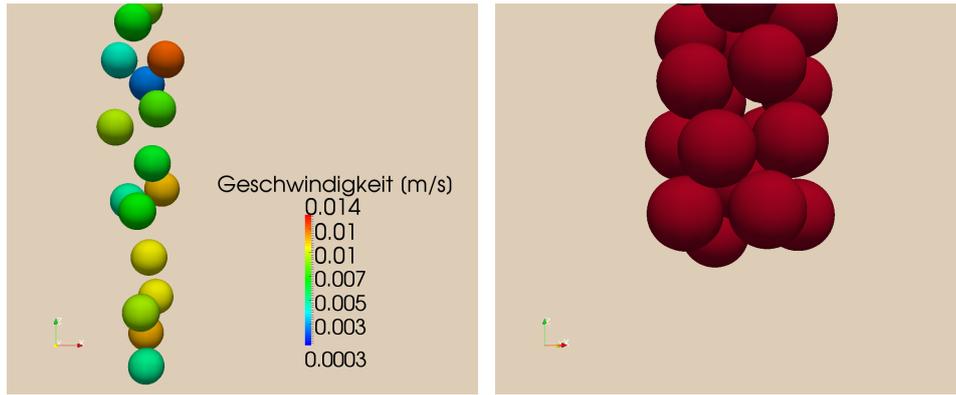


Abbildung 4: Darstellung von Partikeln im Rohr (Rohr in Darstellung nicht enthalten). Links: Partikelpositionen und Startgeschwindigkeit in radiale Richtung. Rechts: Brückenbildung der Partikel im Rohr.

Im Rohr werden also Regionen mit hoher und niedriger Partikeldichte gebildet (siehe Abb. 5 links).

Diese Gruppen werden zum einen während der Simulation durch die oben beschriebenen Effekte gebildet und zum anderen können diese bereits bei der Initialisierung der Partikel durch die zufällige gleichverteilte Auswahl der Startpositionen der Partikel entstehen. In Abbildung 4 links ist eine exemplarische Startposition der Partikel dargestellt. Die Farbe gibt die radiale Startgeschwindigkeit an. Wie zu erkennen ist, liegen bereits nach der Initialisierung einige gruppierte und einige vereinzelte Partikel mit sehr unterschiedlichen radialen Geschwindigkeiten vor.

Ist die Partikelgruppe ausreichend dicht, so dass eine stabile Partikelbrücke über den gesamten Rohrquerschnitt gebildet werden kann, dann verstopft das Rohr an dieser Stelle (Abb. 4 rechts). Die Verstopfung und die Dichteinhomogenitäten werden nachfolgend betrachtet.

4.2 Flussregime

In Experimenten zur Untersuchung von Partikelströmen in Rohren in Bezug auf Dichtewellen von Raafat, Hulin und Herrmann [22] wurde für Glaskugeln beim Durchströmen eines vertikalen Rohres eine Abhängigkeit der Dichteinhomogenitäten vom Verhältnis des Durchmessers des Rohres zum Durchmesser der Partikel gefunden:

$$D_\phi = \frac{D_{\text{Rohr}}}{D_{\text{Partikel}}}. \quad (27)$$

Nach [22] liegt das Durchmesser Verhältnis für das Auftreten von Dichtewellen in einem Bereich von $6 \leq D_\phi \leq 30$. Für $D_\phi < 6$ wird ein Regime gefunden, in dem häufiges Verstopfen des Rohres auftritt. In Abhängigkeit von D_ϕ wurden Simulationen nach

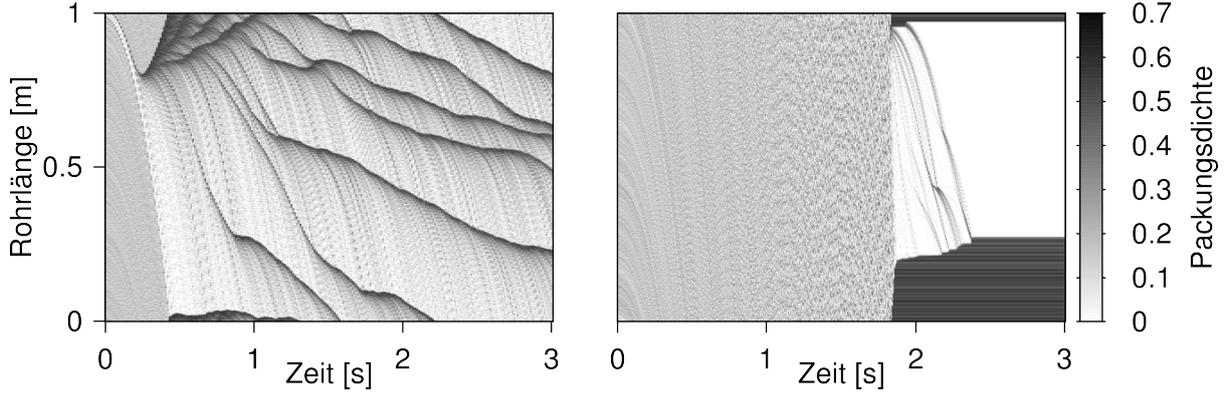


Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Dunkel korrespondiert mit hoher Packungsdichte, hell korrespondiert mit geringer Packungsdichte. Links: Auftreten von Dichtewellen bei $D_\phi = 4$. Rechts: Auftreten einer Verstopfung bei $D_\phi = 2.5$.

dem allgemeinen Aufbau einer Simulation (siehe Kapitel 3.1) mit $D_\phi = 5, 4, 3, 2.5$ ausgeführt. Ab einem Verhältnis von $D_\phi = 3$ konnte nahezu in allen Realisierungen eine Verstopfung des Rohres gefunden werden. Der Unterschied aus den experimentellen Daten nach Raafat et al. und den Ergebnis der Simulation liegt, wie bereits in Kapitel 3.1 diskutiert, an dem Strömungswiderstand der Luft, als auch an dem Auftreten vom adhesiven Kräften durch Luftfeuchtigkeit.

Für die Untersuchung der Verstopfungen des Rohres wird das Durchmesser Verhältnis $D_\phi \leq 3$ gewählt. Dies führt zu einer kleineren Partikelanzahl und die Dauer bis zur Verstopfung ist verringert (siehe Kapitel 4.5), welches zu einer geringeren Rechenzeit führt. Das gewählte Durchmesser Verhältnis ist im Einklang mit bereits durchgeführten Simulationen nach Pöschel [20], in denen ein Verhältnis von $D_\phi = 2.5$ gewählt wurde.

Für größere Rohrdurchmesser ($D_\phi > 3$) kann stets die Bildung von Dichteinhomogenitäten in Form von Pfropfen und schneller fallenden kleinen Partikelgruppen und vereinzelt Partikeln gefunden werden (siehe Abb. 5 links). Zusätzlich treten vereinzelt Verstopfungen im Rohr auf. Durch die stets beobachtete Verstopfung des Rohres für $D_\phi \leq 3$ (siehe Abb. 5 rechts) und auftretenden Dichteinhomogenitäten für $D_\phi > 3$ wird das Flussregime bei $D_\phi \approx 3$ in einen stabilen ($D_\phi > 3$) und in einen instabilen ($D_\phi \leq 3$) Fluss unterteilt.

Die in Abbildung 5 dargestellte Packungsdichte wird wie folgt ermittelt: Das Rohr wird in 500 gleich große Volumenelemente V_e unterteilt. In jedem der Volumenelemente wird über die Partikelanzahl N im jeweiligen Volumenelement, dem Partikelvolumen

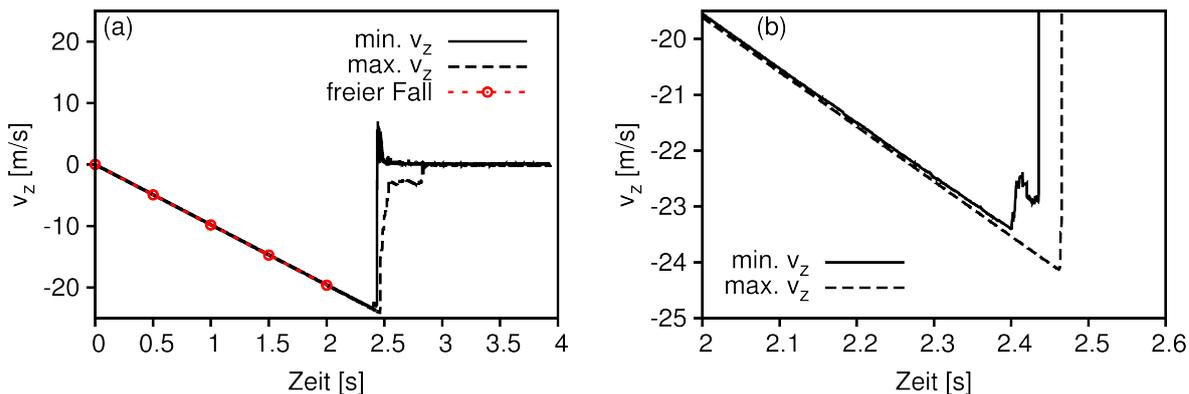


Abbildung 6: (a) Zeitlicher Verlauf der maximalen und minimalen axialen Geschwindigkeit im Rohr, (b) Vergrößerung des Bereichs 2s-2.6s aus (a).

V_{Partikel} und V_e die Packungsdichte $V_\phi = NV_{\text{Partikel}}/V_e$ berechnet. Die Bestimmung der Packungsdichte geschieht für jeden Zeitschritt. Anschließend werden die Packungsdichten als Funktion von Zeitschritt und Rohrlänge abgebildet. Die dunklen Bereiche korrespondieren mit einer höheren Packungsdichte und hellere Bereiche korrespondieren mit einer niedrigeren Packungsdichte. Alle folgenden Darstellungen der Packungsdichte wurden auf diese Weise erzeugt.

4.3 Verstopfung des Rohres

Um die Vorgänge im Rohr vor und zum Zeitpunkt einer Verstopfung des Rohres genauer zu betrachten, sind Simulationen nach dem in Kapitel 3.1 beschriebenen Aufbau mit einem Durchmesser Verhältnis $D_\phi = 2.5$ und der Packungsdichte $V_\phi = 0.175$ durchgeführt worden. Der Prozess der Verstopfung kann wie folgt beschrieben werden.

Der anfängliche Geschwindigkeitsverlauf gleicht dem des freien Falls (siehe Abb. 6 (a)). Während des Simulationsverlaufs wachsen die bereits existierenden Partikelgruppen (siehe Abb. 7 links - vermehrtes Auftreten von dunkleren Bereichen im Verlauf der Zeit) an. Diese Gruppen werden aufgrund von mehr Wechselwirkungen mit der Rohrwand und der Partikel untereinander abgebremst. In Abbildung 6 (b) ist dieser Effekt anhand des Unterschieds zwischen maximaler und minimaler Geschwindigkeit in axiale Richtung zu erkennen. Im Gegensatz dazu gibt es vereinzelte Partikel, welche aufgrund von weniger Wechselwirkungen mit der Umgebung stärker beschleunigen und somit nach einer gewissen Zeit auf eine langsamere Gruppe treffen. Beim Auftreffen der schnellen Partikel auf die Partikelgruppe und den anschließenden Stößen kann es zu einer Brückenbildung im Rohr kommen, welche stabil genug ist, sodass nachfolgende auftretende Partikel diese nicht zerstören können (Abb 4 rechts).

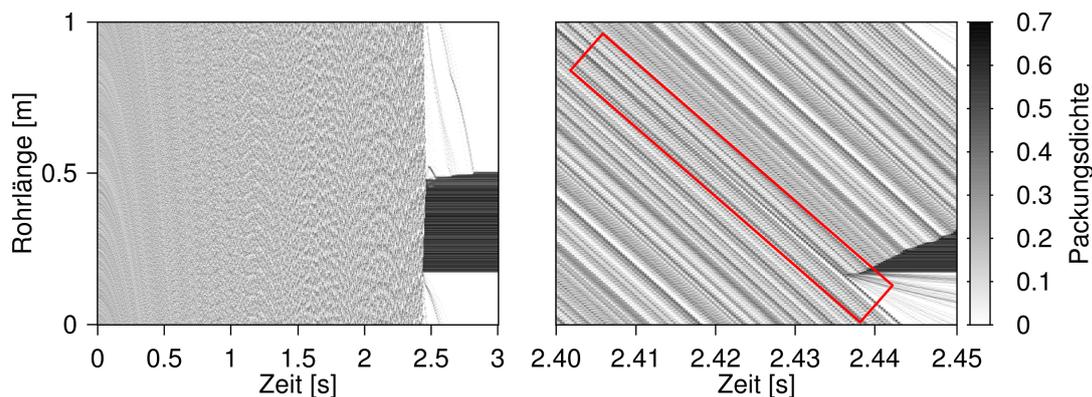


Abbildung 7: Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Links: Gesamte Simulation. Rechts: Ausschnitt zum Zeitpunkt der Verstopfung

In Abbildung 7 rechts ist der Zeitraum um den Beginn der Verstopfung dargestellt. Dunklere Bereiche zeigen eine höhere und hellere Bereiche eine niedrigere lokale Packungsdichte an. Wie man an dem Wechsel von hellen und dunklen Streifen erkennen kann, liegen die Partikel vor der Verstopfung als verschieden dicht gepackte Gruppen vor. In dieser Realisierung stoßen unmittelbar vor der Verstopfung zwei Gruppen aufeinander. Dies ist in Abbildung 7 rechts in dem markierten Bereich durch das Zusammenlaufen zweier dunklen Linien gezeigt.

Zur Überprüfung, ob die Bildung der verschieden dicht gepackten Gruppen durch die periodischen Randbedingungen gefördert wird, wurde eine Simulation mit einem Rohr der Länge $L_{\text{Rohr}} = 10$ m mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Auch hier zeigte sich für das gleiche Durchmesser-Verhältnis und der gleichen Packungsdichte eine ähnliche Ausbildung dieser Gruppen mit einer folgenden Verstopfung des Rohres. Folglich ist die Länge des Rohres von $L_{\text{Rohr}} = 1$ m ausreichend groß, so dass die Entstehung der Verstopfung des Rohres nicht durch die periodischen Randbedingungen bedingt ist.

4.4 Packungsdichte

Damit eine Brückenbildung aus Partikeln in einem Rohr stattfinden kann, sind mehrere Partikel in unmittelbarer Nähe zueinander notwendig. Solche Anordnungen können zum einen durch Startpositionen und zum anderen durch verschiedene Partikelgeschwindigkeiten entstehen. Bei unterschiedlichen Geschwindigkeiten können schnellere Partikel zu langsameren Partikeln aufholen und somit eine dichte Region bilden. Es folgt die Annahme, dass eine höhere Partikelanzahl im Rohr die Bildung solcher Gruppen beeinflusst und somit den Zeitpunkt T_j der Verstopfung bestimmt.

Zur Überprüfung wird die gesamte Partikelanzahl N variiert und über die Packungsdichte vorgegeben:

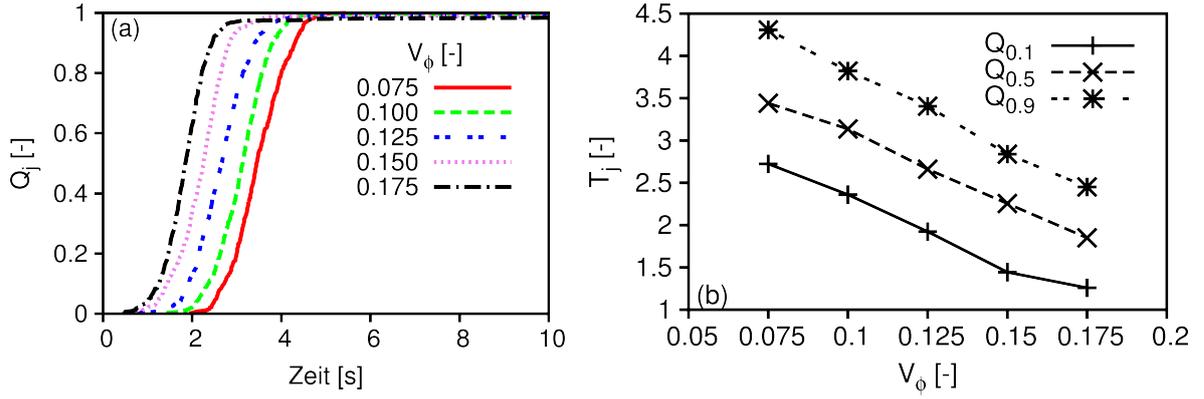


Abbildung 8: (a) Normierte Summenverteilung Q_j über den Zeitpunkt der Verstopfung von jeweils 500 Simulationen mit verschiedenen Volumenverhältnissen V_ϕ . (b) Zeitpunkt T_j der Verstopfung in Abhängigkeit vom Volumenverhältnis V_ϕ . Darstellung der $Q_{0.1}$ -, $Q_{0.5}$ - und $Q_{0.9}$ -Quantile.

$$N = \frac{V_\phi V_{\text{Rohr}}}{V_{\text{Partikel}}}. \quad (28)$$

Bereits in der Arbeit von Brand et al. [5] wurde die Abhängigkeit des Zeitpunktes der Verstopfung von der Packungsdichte für Systeme mit $V_\phi > 0.5$ untersucht. Dabei konnte dort bereits eine frühere Verstopfung des Rohres für höhere V_ϕ im Bereich $V_\phi > 0.5$ gezeigt werden. In dieser Arbeit wird für eine kleinere Packungsdichte $V_\phi \leq 0.175$ die Abhängigkeit des Zeitpunktes der Verstopfung von V_ϕ überprüft. Dazu wurden jeweils 500 Simulationen $V_\phi = 0.075, 0.1, 0.125, 0.15, 0.175$ durchgeführt. Die Werte der Parameter der Simulationen entsprechen den in Kapitel 3.1 festgelegten Werten. In nahezu jeder der Realisierungen verstopft das Rohr in der betrachteten Realzeit (120 s). Der Zeitpunkt T_j der Verstopfung ist in Abbildung 8 (a) in einer normierten Summenverteilung dargestellt.

Für eine höhere Packungsdichte ist die Summenverteilung nach links verschoben. Dies zeigt, dass mehr Partikel zu einer schnelleren Verstopfung des Rohres führen. Zusätzlich ist die Zeit bis zur Verstopfung für einige wenige Fälle erheblich größer ($\approx 100s$) als für den Großteil der Simulationen.

In Abbildung 8 (b) sind die $Q_{0.1}$ -, $Q_{0.5}$ - und $Q_{0.9}$ -Quantile dargestellt. Diese geben an, zu welchem Zeitpunkt das Rohr bereits in 10%/50%/90% der Realisierungen verstopft ist. Bei Betrachtung der einzelnen Quantile wird ersichtlich, dass diese eine Abhängigkeit von V_ϕ aufweisen. So ändert sich z.B. die $Q_{0.9}$ -Quantile um 43.08% über den gesamten untersuchten Bereich der Packungsdichte. Der Effekt einer höheren Anzahl von Partikeln auf den Zeitpunkt der Verstopfung wird somit bestätigt.

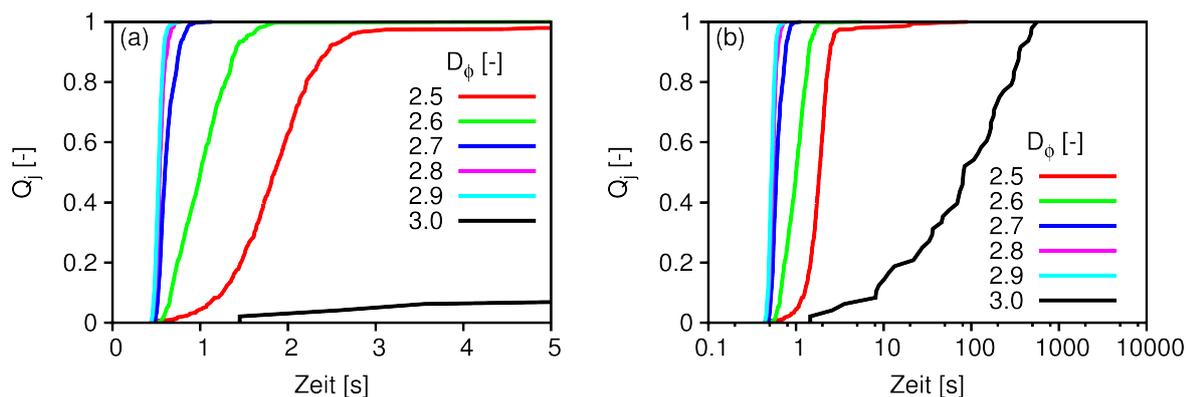


Abbildung 9: (a) Normierte Summenverteilung des Zeitpunktes der Verstopfung T_j aus 500 Simulationen für verschiedene Durchmesserhältnisse D_ϕ . (b) Logarithmische Darstellung.

4.5 Durchmesser Verhältnis

Wie in Kapitel 4.2 gezeigt wurde, tritt eine Verstopfung erst ab einem hinreichend kleinen Verhältnis D_ϕ auf. Dies impliziert allerdings nicht, dass ein kleineres D_ϕ zu einem schnelleren Verstopfen des Rohres führt. Für den Bereich $2.4 \leq D_\phi \leq 2.9$ konnte ein entgegengesetztes Verhalten gezeigt werden. Dazu wurden jeweils 500 Simulationen nach dem allgemeinen Aufbau (siehe Kapitel 3.1) für $D_\phi = 2.4, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8, 2.9, 3.0$ mit der Packungsdichte von $V_\phi = 0.175$ durchgeführt. In nahezu allen Simulationen trat eine Verstopfung des Rohres auf. In Abbildung 9 (a) und (b) sind die normierten Summenverteilungen über alle Simulationen für den Zeitpunkt der Verstopfung dargestellt. So nimmt der Median von T_j mit einem zunehmenden Durchmesser Verhältnis ab. Auch wird die Verteilung enger, sodass für ein hohes Durchmesser Verhältnis das Rohr in allen Realisierungen zu sehr ähnlichen Zeitpunkten verstopft.

Dieser Effekt kann über eine zweidimensionale Betrachtung des Rohres erklärt werden. In Abbildung 10 (a)-(c) sind drei mögliche Konfigurationen für die Positionen von Partikeln im Rohr bei verschiedenen Rohrdurchmessern dargestellt. Für das Durchmesser Verhältnis $D_\phi = 2.5$ können nur zwei Partikel nebeneinander im Rohr angeordnet werden. Damit das Rohr verstopft, muss eine stabile Brücke aus Partikeln im Rohr entstehen, welche in diesem Fall nicht gegeben ist. Im Vergleich dazu wird $D_\phi = 2.9$ betrachtet. Hier kann das dritte Partikel nahezu in der gleichen Ebene wie die beiden anderen Partikel angeordnet werden. Es entsteht eine Keilwirkung, welche zu einer stabilen Konfiguration führen kann. Demnach begünstigt ein erhöhtes Durchmesser Verhältnis zwischen zwei ganzzahligen Verhältnissen den Zeitpunkt einer Verstopfung. Bei einem ganzzahligen Durchmesser Verhältnis von $D_\phi = 3$ gibt es keine möglichen zweidimensionalen Partikelanordnungen, welche zu einer Verstopfung des Rohres führen können, da hier drei Partikel in einer Ebene positioniert werden können.

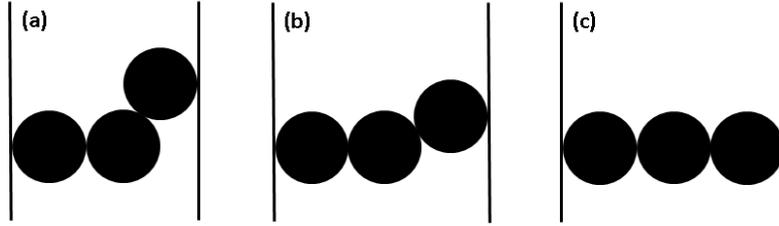


Abbildung 10: Anordnungen dreier Partikel in einer zweidimensionalen Betrachtung des Rohres bei verschiedenen Rohrdurchmessern und konstanten Partikeldurchmessern. (a) $D_\phi = 2.5$, (b) $D_\phi = 2.9$, (c) $D_\phi = 3$.

Diese Erklärung legt den Grund für verschieden lange Zeiten bis zum Eintreten der Verstopfung bei unterschiedlichen Rohrdurchmessern nahe. Jedoch ergeben sich bei der Betrachtung von dreidimensionalen Anordnungen deutlich mehr mögliche Anordnungsmöglichkeiten, welche die Bildung einer stabilen Partikelbrücke im Rohr erschweren. Dadurch nimmt die Breite der Summenverteilung zu. Folglich nimmt für größere Rohrdurchmesser die Bedeutung der zweidimensionalen Anordnung zunehmend ab und der Zeitpunkt der Verstopfung wird fast ausschließlich durch dreidimensionale Anordnungen bestimmt.

4.6 Erhöhung der radialen Startgeschwindigkeit

Bisher wurde als Startbedingung für die radialen Komponenten der Geschwindigkeit v_x und v_y jeweils eine zufällig gleichverteilte Geschwindigkeit im Intervall $(-0.01, 0.01)$ m/s gewählt. Durch Erhöhung der radialen Startgeschwindigkeit

$$v_r = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \quad (29)$$

kann die Dauer bis zur Verstopfung deutlich verlängert werden. Um diesen Einfluss nachzuweisen, sind Simulationen nach dem im Kapitel 3.1 beschriebenen Aufbau für verschiedene radiale Startgeschwindigkeiten bei $V_\phi = 0.15$ durchgeführt worden. Da die Gravitation als einzige äußere Kraft auf die Partikel wirkt, wird die radiale Startgeschwindigkeit für jeden Partikel in Abhängigkeit von der Erdbeschleunigung und dem Partikeldurchmesser angenommen. Die maximale Geschwindigkeit der radialen Komponenten beträgt demnach

$$v_r^{\max} = a_0 \cdot \sqrt{gD_{\text{Partikel}}} \quad (30)$$

Wobei a_0 einen dimensionslosen Faktor zu Festlegung der maximalen Geschwindigkeit bezeichnet. Die Geschwindigkeitskomponenten v_x und v_y sind zufällig gleichverteilt im Intervall $(-v_r^{\max}, v_r^{\max})$.

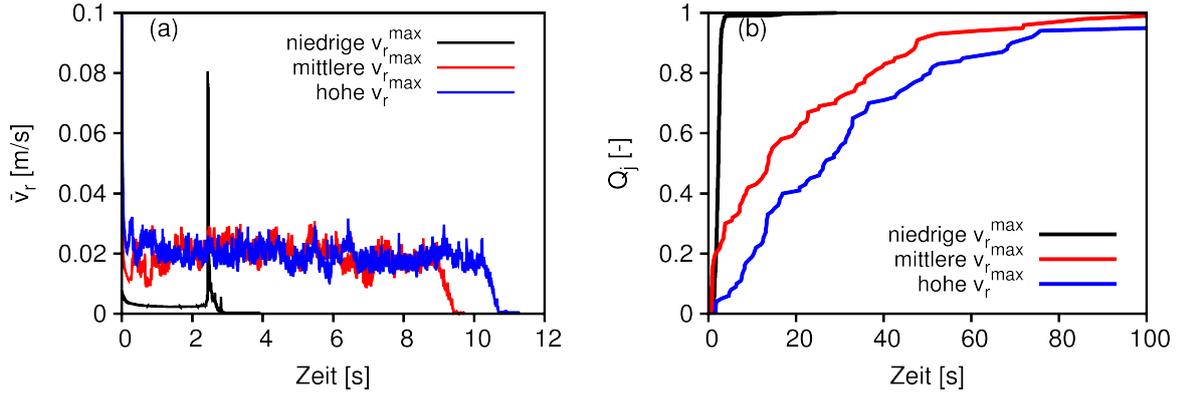


Abbildung 11: (a) Mittlere radiale Geschwindigkeit $\bar{v}_r = (\sum_{i=1}^{n_P} \sqrt{v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2})/n_P$ für verschiedene radiale Startgeschwindigkeiten. Hohe: $v_r^{\max} = 1.085$ m/s, mittlere: $v_r^{\max} = 0.1085$ m/s, niedrige: $v_r^{\max} = 0.01$ m/s (b) Normierte Summenverteilung für verschiedene initiale radiale Startgeschwindigkeiten.

Zur Untersuchung des Effektes wurden für a_0 die Werte 1 und 10 angenommen. Diese entsprechen Geschwindigkeiten von 0.1085 m/s und 1.085 m/s. In Relation zum Rohrdurchmesser $D_{Rohr} = 0.003$ m sind dies sehr hohe Geschwindigkeiten.

In Abbildung 11 (a) sind die Verläufe der mittleren radialen Geschwindigkeit \bar{v}_r für die Simulationen mit verschiedenen radialen Startgeschwindigkeiten aufgetragen. Zu Beginn kann ein Abfall von \bar{v}_r auf $\bar{v}_r \approx 0.02$ m/s beobachtet werden. Dieses Level ist unabhängig von der radialen Startgeschwindigkeit, insofern diese über einen bestimmten Startwert hinausgeht. Dies wird daran deutlich, dass sich für die Simulation mit den Standardgeschwindigkeitskomponenten v_x und v_y zufällig gleichverteilt im Intervall $(-0.01, 0.01)$ m/s, ein anderes niedrigeres Level einstellt. Der Unterschied der beiden Level beträgt ungefähr eine Zehnerpotenz. Auch ist der Zeitpunkt der Verstopfung für die erhöhte radiale Startgeschwindigkeit verzögert. Diese Beobachtung kann für eine Vielzahl von Realisierungen gemacht werden. In Abbildung 11 (b) ist die normierte Summenverteilung aus 100 Simulationen für die drei Startbedingungen dargestellt. Wie zu erkennen ist, führt eine erhöhte Startgeschwindigkeit zu einem späterem Eintreten der Verstopfung des Rohres. Die Summenverteilung gibt den Anteil der Realisierungen an, in denen zu diesem Zeitpunkt das Rohr bereits verstopft ist.

Dabei konnte für jede dieser Simulation mit erhöhter v_r gezeigt werden, dass im Rohr Dichtewellen auftreten und es in jedem Fall zur Verstopfung des Rohres kommt. Durch die vermehrten Stöße der Partikel untereinander und mit der Wand scheint die stabile Brückenbildung erschwert. Die Ausprägung der Dichtewellen ist in Abbildung 12 dargestellt. Wie zu erkennen ist, bilden sich unterschiedlich dichte Regionen über die gesamte Länge des Rohres. Dabei bilden sich mehrere variable Pfropfen hoher Par-

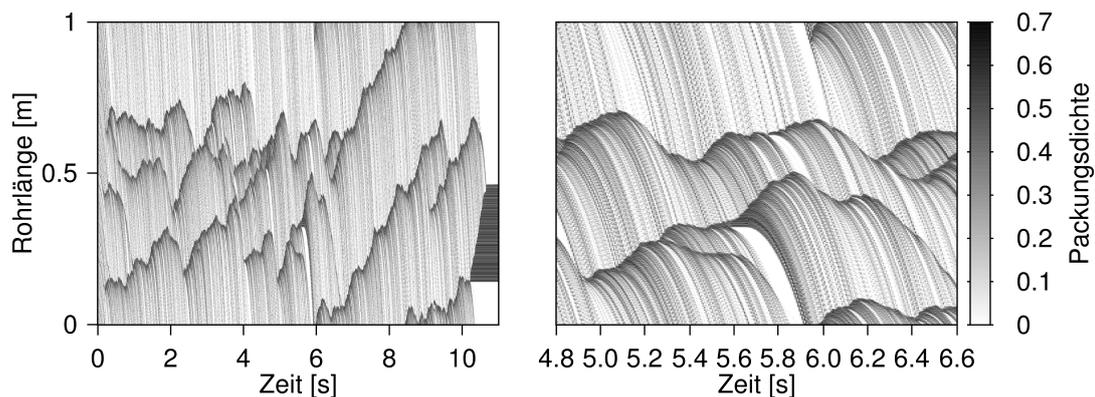


Abbildung 12: Radiale Startgeschwindigkeit $v_r^{max} = 0.1085 \text{ m/s}$, Links: Übersicht gesamte Simulation. Rechts: Vergrößerung aus Bereich einer temporären Blockade.

tikeldichte aus. Diese Pfropfen können im Rohr sowohl wechselnd aufwärts wie auch abwärts wandern. Dies kann in Abbildung 12 durch die Bewegung der dunklen Regionen mit der Zeit beobachtet werden. Wandern diese mit Verlauf der Zeit nach oben, so bewegt sich der Pfropfen aufwärts. Bei einer Bewegung nach unten entspricht dies der Wanderung des Pfropfens abwärts. Der Wechsel der Bewegungsrichtung bedeutet eine temporäre Geschwindigkeit von $v_z = 0 \text{ m/s}$. In diesen Situationen kann es zum kurzen Stopp des Partikelflusses kommen (siehe Abb. 12 rechts 5.7 s).

Die Partikel in den Pfropfen werden stetig ausgetauscht. Auch wenn der Pfropfen nahezu stationär in seiner Position ist, sind es über zeitlichen Verlauf nicht die gleichen Partikel, welche den Pfropfen bilden. D.h. die bisherigen Pfropfenpartikel werden durch den Aufprall anderer Partikel nach unten beschleunigt und verlassen die Partikelgruppe. Die von oben auf die Gruppe treffenden Partikel werden durch den Stoß derartig abgebremst, dass sie in der Partikelgruppe verbleiben.

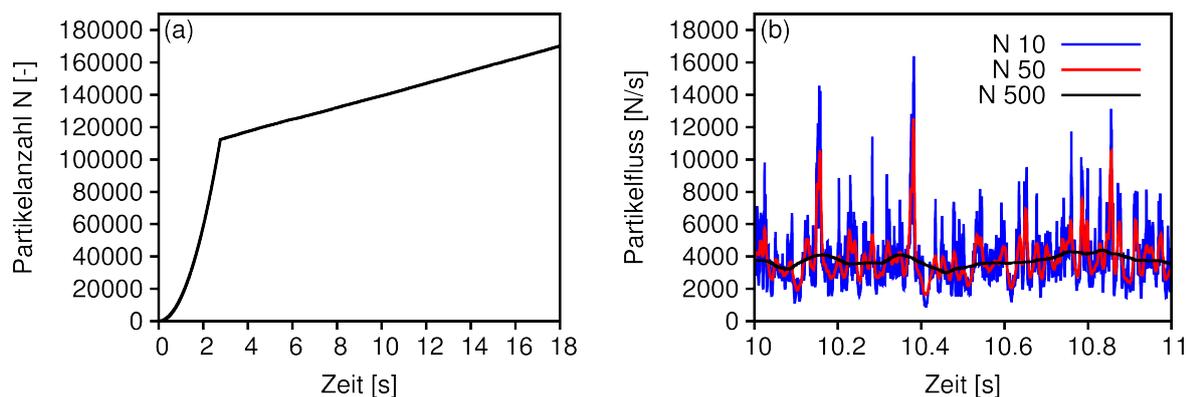


Abbildung 13: (a) Kumulative Partikelanzahl am Ende des Rohres (b) Unterschiedliche Partikelanzahl N_{LN} bei der linearen Regression zur Berechnung des Massenflusses.

4.7 Massenfluss

Die Rohrströmungen granularer Materie weisen in der Regel einen inhomogenen Massenfluss \dot{m} auf. Durch die Ausbildung von Dichteinhomogenitäten in Form von langsam durchs Rohr wandernden Pfropfen und schneller fallenden Partikeln, kann kein konstanter Massenfluss beobachtet werden.

Zur genauen Analyse des Massenflusses wird der Partikelfluss am unteren Ende des Rohres betrachtet. Dort wird eine Fläche in Form einer CAD Geometrie durch den Rohrquerschnitt gelegt, welche von LIGGGHTS zur Zählung des Partikelflusses benötigt wird. Die Partikel können mit dieser Fläche nicht Wechselwirken und passieren diese ohne Interaktion. Immer wenn ein Partikel die Fläche passiert, wird dieser Zeitpunkt in einer Liste abgespeichert. Aus dieser Liste wird die kumulative Partikelanzahl über den Verlauf der Simulationszeit erstellt (siehe Abb. 13 (a)). Anhand des nicht linearen Verlaufes der kumulativen Partikelanzahl und der zunehmenden Steigung der Kurve erkennt man die Beschleunigungsphase zu Beginn der Simulation. Der lineare Verlauf stellt den nahezu stationären Zustand des Systems dar. Aus dieser Darstellung wird über die Methode der linearen Regression auf den Massenfluss geschlossen. Dazu wird eine bestimmte Partikelanzahl N_{LR} ausgewählt, auf die die lineare Regression angewendet werden soll. Die Anzahl soll beispielsweise 10 betragen. D.h. es wird auf die ersten 10 Partikel des stationären Zustands aus der Liste mit Hilfe der linearen Regression eine Ausgleichsgerade erstellt. Die Steigung der Ausgleichsgeraden gibt den Partikelfluss, im durch die 10 Partikel festgelegten Zeitintervall, an. Folgend wird eine Ausgleichsgerade über Partikel 2 bis 11 aus der Liste erstellt und die Steigung als Partikelfluss abgespeichert. Auf die Weise wird bis zum Ende der Liste vorgegangen und somit der Partikelfluss über die Dauer der Simulation bestimmt. Durch Multiplikation des Partikelflusses mit Volumen und Dichte eines Partikels wird auf den Massenfluss

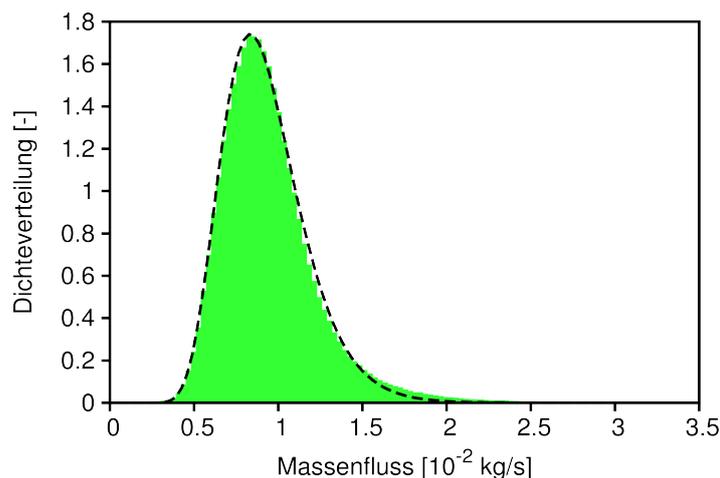


Abbildung 14: Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses für $D_\phi = 4$.

geschlossen.

Die Anzahl der Partikel auf die eine lineare Regression angewandt wird, ist so zu wählen, dass nicht durch eine zu hohe Partikelanzahl zu stark gemittelt wird. Im Gegensatz dazu führt eine zu geringe Partikelanzahl zu sehr großen Schwankungen des Partikelflusses. In Abbildung 13 (b) sind drei Verläufe des Partikelflusses aus der selben Simulation mit einem Durchmesserhältnissen von $D_\phi = 4$ mit unterschiedlichen Partikelanzahlen bezüglich der linearen Regression dargestellt. Man erkennt, dass eine geringe Anzahl von 10 Partikeln zu starken Schwankungen führt. Eine sehr hohe Anzahl wie 500 Partikel führt hingegen zu einer starken Glättung der Kurve. Schlussfolgernd wurde für diese Simulation eine Anzahl von 50 Partikel gewählt. Dies entspricht $12.5 \cdot D_\phi$ und dieser Faktor wird für Rohre mit anderen Durchmesserhältnissen beibehalten.

Aus der Darstellung des Massenflusses wird ein Histogramm gebildet, in dem die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines bestimmten Massenflusses angegeben ist. Die Histogramme sind normiert, das bedeutet, die Wahrscheinlichkeit wird durch die Fläche eines Histogrammbalkens dargestellt. Zudem werden die Histogrammverläufe durch Wahrscheinlichkeitsfunktionen angenähert.

Wie im Histogramm (Abb. 14) zu sehen ist, folgt der Massenfluss einer logarithmischen Normalverteilung mit dem Erwartungswert E_w bei $E_w = 0.62 \text{ kg/s}$, welcher den am häufigsten eintretenden Massenfluss angibt. Über die Form der logarithmischen Normalverteilung wird die Inhomogenität des Massenflusses deutlich. Durch Dichteeinhomogenitäten entstehen Fluktuationen des Massenflusses um den Erwartungswert herum, welche oberhalb des Erwartungswerts stärker als unterhalb des Erwartungswerts von diesem abweichen.

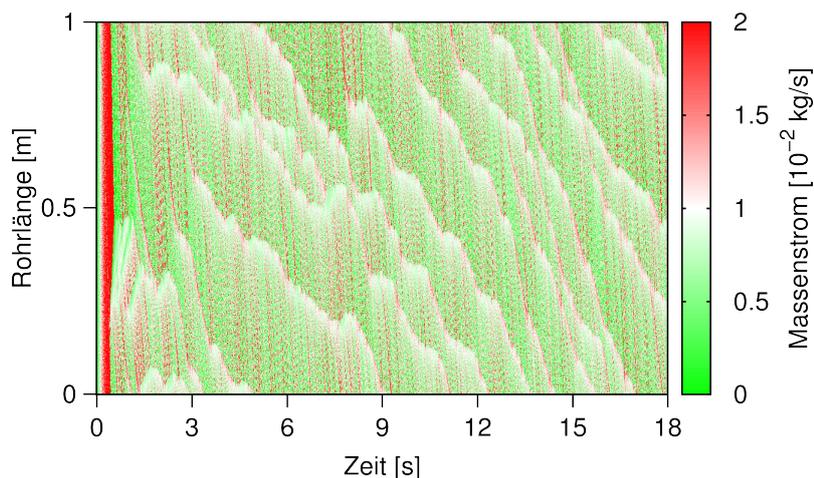


Abbildung 15: Massenfluss in Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort. Rot entspricht hohem, Weiß mittlerem und Grün niedrigem Massenfluss. Darstellung erzeugt durch: Einteilen des Rohres in 500 Volumenelemente und Berechnung der Packungsdichte und der mittleren axialen Geschwindigkeit \bar{v}_a in jedem Element. Über $\dot{m} = V_\phi \bar{v}_a A_{\text{Rohr}} \rho_{\text{Partikel}}$, mit der Querschnittsfläche A_{Rohr} des Rohres, wird der Massenfluss angegeben.

In Abbildung 15 ist der zeitliche Verlauf des Massenflusses einer Simulation im Rohr aufgetragen. Die Farbe gibt dabei den Wert des Massenflusses an. Grün steht für geringe, Weiß für mittlere und Rot für hohe Massenströme. Wenn man diese Information auf die Wahrscheinlichkeitsdichte (Abb. 14) anwendet, so sieht man, dass die Pfropfen den am häufigsten vorkommenden Massenfluss (Erwartungswert) darstellen (Weiß). Geringere Massenflüsse (Grün), als auch höhere Massenflüsse (Rot) sind durch einzelne Partikel oder sehr kleine Partikelgruppen zwischen den Pfropfen bedingt.

In Abbildung 16 ist die Packungsdichte im Rohr über den zeitlichen Verlauf der Simulation dargestellt. Bei der Betrachtung der Bereiche zwischen den Pfropfen sieht man sowohl dunkle als auch hellere, nach unten gerichtete, nahezu parallele Linien. Diese stellen Partikelgruppen dar, welche im Rohr nach unten fallen. Dass heißt zwischen den Pfropfen existieren unterschiedlich große Partikelgruppen, welche allerdings ähnlich schnell durchs Rohr bewegt werden. Bezogen auf den Massenfluss, welcher größer als der Erwartungswert ist, bedeutet dies aufgrund der ähnlichen Geschwindigkeit in diesem Bereich, dass es mehr größere Partikelgruppen in diesem Bereich geben muss und diese den rechten Teil der logarithmischen Normalverteilung des Massenflusses ausmachen. Kleine Gruppen hingegen bilden somit den niedrigen Teil des Massenflusses.

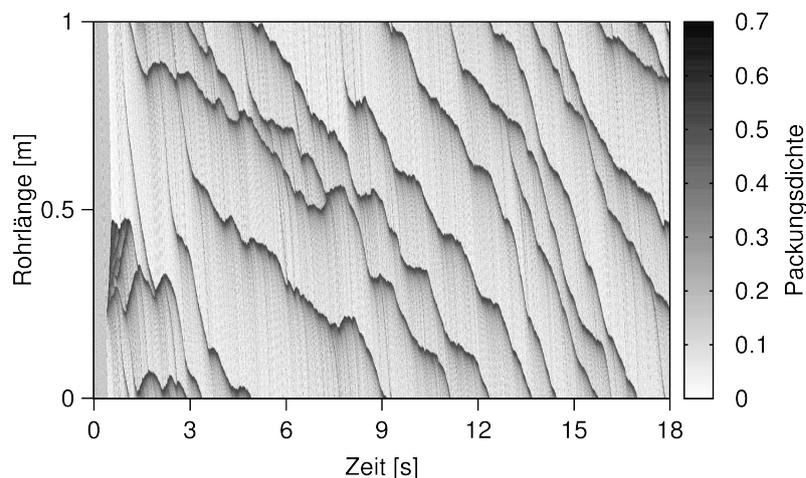


Abbildung 16: Packungsdichte in Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort. Dunkle Bereiche entsprechen hoher Dichte und helle Bereiche entsprechen niedriger Dichte.

4.8 Abhängigkeit des Massenflusses vom Rohrdurchmesser

Der granulare Massenfluss nimmt mit zunehmenden Rohrradius zu. Der Anstieg des Massenflusses in Abhängigkeit vom Rohrradius wird in Simulationen nach dem grundlegenden Aufbau (siehe Kapitel 3.1) mit verschiedenen Rohrradien und mit der Packungsdichte $V_\phi = 0.15$ untersucht. Dabei wurde der Rohrradius anhand des Durchmesser-Verhältnisses D_ϕ auf die in Tabelle 3 dargestellten Werte festgelegt.

Tabelle 3: Rohrradius

D_ϕ [-]	R_{Rohr} [m]
3.5	0.0021
4.0	0.0024
4.5	0.0027
5,0	0.0030
5,5	0.0033
6.0	0.0036
6.5	0.0039
7.0	0.0042

In Abbildung 17 sind die Massenflüsse zu den einzelnen Durchmesser-Verhältnissen als normierte Wahrscheinlichkeitsdichte aufgetragen. Zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichten werden die Zeitpunkte der Partikel beim Verlassen des Rohres notiert und daraus der Partikelfluss im Verlauf der Simulation bestimmt. Durch Multiplikation von Partikeldichte und Partikelvolumen mit dem Partikelfluss wird der Massenfluss gebildet. Die Massenflüsse werden als normierte Histogramme dargestellt und diese werden durch Verteilungsfunktionen angenähert und in einer Abbildung dargestellt.

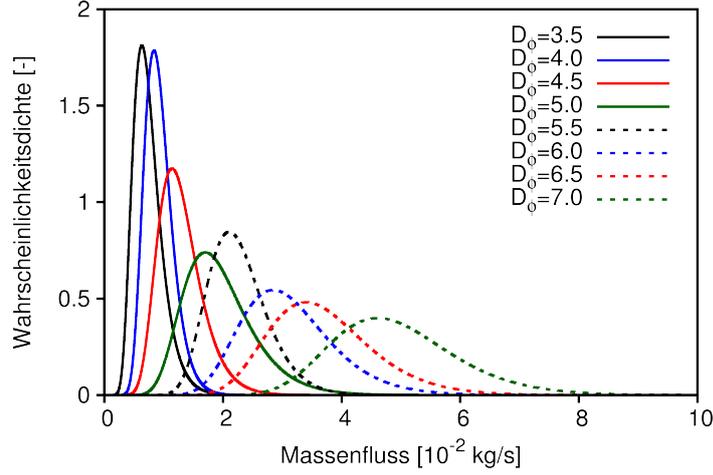


Abbildung 17: Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses bei verschiedenen Durchmesser-Verhältnissen D_ϕ

Das genaue Verfahren zur Ermittlung der Wahrscheinlichkeitsdichten wird in Kapitel 4.7 beschrieben.

Die Verteilungen folgen einer logarithmischen Normalverteilung und die Erwartungswerte und die Breite der Verteilungen werden mit zunehmenden Durchmesser-Verhältnis größer. Dieses Verhalten ist durch die höhere Partikelanzahl und einer schnelleren Fließgeschwindigkeit mit steigendem Rohrradius bedingt. Der Abstand der Pfropfen im Rohr nimmt ebenfalls mit steigendem Rohrradius zu und so können die Partikel zwischen den Pfropfen länger beschleunigen.

In Abbildung 18 sind die Erwartungswerte der Wahrscheinlichkeitsdichten aus Abbildung 17 dargestellt. Zum Vergleich des empirisch gefundenen Massenflusses mit der Literatur, wird der granulare Massenfluss nach der folgenden Gleichung aus Kapitel 2.3 berechnet:

$$\dot{m} = \pi R_{\text{Rohr}}^2 \bar{v}_z \rho_{\text{Partikel}} V_\phi. \quad (25)$$

Die gemittelte axiale Geschwindigkeit \bar{v}_z wird aus den Geschwindigkeiten der Partikel beim Ausfluss aus dem Rohr bestimmt. Dazu wird am Ende des Rohres das Volumenelement $V_e = \pi R_{\text{Rohr}}^2 \cdot 0.005 \text{ m}$ betrachtet. Zu jedem Zeitschritt wird für alle Partikel in diesen Volumen der Mittelwert der axialen Geschwindigkeit v_z bestimmt und die Packungsdichte $V_\phi = NV_{\text{Partikel}}/V_e$ berechnet. Anschließend werden für die gemittelten axialen Geschwindigkeiten und Packungsdichten von jedem Zeitschritt die Mittelwerte gebildet und mit diesen der Massenfluss nach Gleichung (25) berechnet. Wie am Verlauf der Datenpunkte in Abbildung 18 zu erkennen ist, kann der Massenfluss eines Granulates annähernd durch Gleichung (25) beschrieben werden.

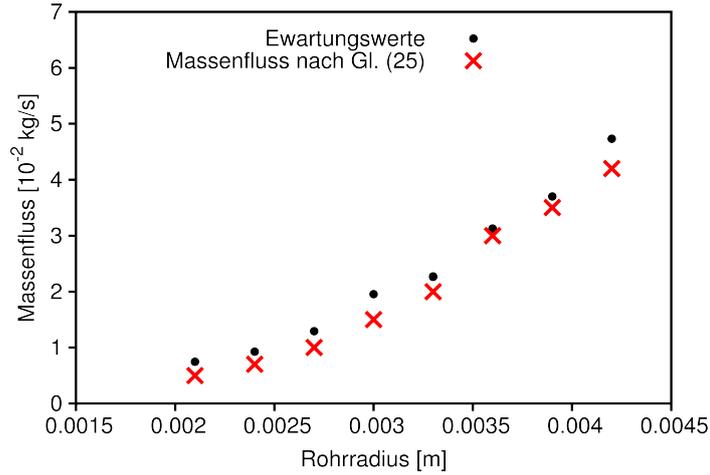


Abbildung 18: Erwartungswerte des Massenflusses in Abhängigkeit vom Rohrradius und berechneter Massenfluss nach Gleichung (25).

Um die Abhängigkeit des granularen Massenfluss vom Rohrradius zu beschreiben, wird eine Dimensionsanalyse durchgeführt. Es wird angenommen, dass der Massenfluss von der Gravitation g , der Querschnittsfläche des Rohres A_{Rohr} und der Dichte der Partikel ρ_{Partikel} abhängt:

$$\dot{m} \sim g^{p_g} A_{\text{Rohr}}^{p_A} \rho_{\text{Partikel}}^{p_\rho} \quad (31)$$

Dies führt zu der Gleichung

$$\left[\frac{kg}{s} \right] = \left[\frac{m}{s^2} \right]^{p_g} [m^2]^{p_A} \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{p_\rho} \quad (32)$$

für die Einheiten der Größen. Daraus lässt sich das folgende Gleichungssystem für die Potenzen aufstellen:

$$\begin{aligned} 1 &= p_\rho \\ -1 &= -2p_g \\ 0 &= p_g + 2p_A - 3p_\rho \end{aligned} \quad (33)$$

Das Gleichungssystem wird mit $p_\rho = 1$, $p_g = 0.5$ und $p_A = 5/4$ gelöst und es folgt der Zusammenhang

$$\dot{m} = \sqrt{g} \rho_{\text{Partikel}} A_{\text{Rohr}}^{5/4} \quad (34)$$

Einsetzen der Kreisfläche für die Rohrquerschnittsfläche A_{Rohr} und Einführung einer dimensionslosen Skalierungskonstante C liefert den granularen Massenfluss in Abhängigkeit vom Rohrradius:

$$\dot{m} = C\sqrt{g}\rho_{\text{Partikel}}\pi^{5/4}R_{\text{Rohr}}^{5/2}. \quad (35)$$

Aus der Dimensionsanalyse folgt demnach eine Abhängigkeit des Massenflusses von $R_{\text{Rohr}}^{5/2}$ und dieses Ergebnis entspricht Berverloo's Gesetz [16], welches den Massenfluss von Granulat aus einem Behälter durch eine kleine kreisförmige Öffnung beschreibt (z.B. Siloaussfluss):

$$\dot{m} = C\sqrt{g}\rho_{\text{Partikel}}(D_O - kD_{\text{Partikel}})^{5/2}. \quad (36)$$

Wobei k eine dimensionlose Konstante und D_O den Durchmesser der Öffnung bezeichnet. Die Abhängigkeit des Massenflusses von den in Berverloo's Gesetz vorkommenden Größen kann über folgende Überlegung begründet werden: Die Partikel bilden über der Öffnung eine instabile Brücke. Unter dieser wird ein Bereich gebildet, in dem aus der Brücke fallende Partikel frei fallen können. Die Brücke wird durch Partikel im Behälter aufrechterhalten. Es wird angenommen, dass die Höhe der Brücke proportional zum Durchmesser der Öffnung ist. D.h. wenn ein Partikel aus der Brücke in die Öffnung fällt, so gilt für dessen Geschwindigkeit $v_{\text{Partikel}} \sim \sqrt{gD_O}$. Über die Flussdichte $j = \rho_{\text{Partikel}}v_{\text{Partikel}}$, einer Konstante K und der Querschnittsfläche der Öffnung $A_O = 1/4\pi D_O^2$ folgt der Zusammenhang aus Gleichung (36)

$$\dot{m} = K\sqrt{g}\rho_{\text{Partikel}}(D_O)^{5/2}. \quad (37)$$

Das Ergebnis der Dimensionsanalyse gibt folglich einen Massenfluss an, der durch frei fallende Partikel geprägt ist. Im Vergleich dazu wird der Fluss einer Flüssigkeit über die Hagen-Poiseuille Gleichung (Gl. 23) betrachtet. Wie in Kapitel 2.3 gezeigt wurde, hängt der Volumenstrom und somit auch der Massenfluss einer Flüssigkeit von R_{Rohr}^4 ab. Ausserdem wurde von Bertho et al. [4] (siehe Kapitel 2.3) eine Abhängigkeit von R_{Rohr}^2 für den Massenfluss eines Granulates durch Multiplikation der Flussdichte $j = \rho_{\text{Partikel}}v_z$ mit der Rohrquerschnittsfläche A_{Rohr} angegeben (Gl. (25)). Abbildung 19 zeigt die Meßdaten aus Abbildung 18 zusammen mit den Fits der oben genannten Abhängigkeiten vom Rohrradius.

Die Näherung mit $f(R_{\text{Rohr}}) = a_0R_{\text{Rohr}}^{5/2}$ gibt den Verlauf der Erwartungswerte am genauesten wieder. Sowohl die Ausgleichsfunktion $f(R_{\text{Rohr}}) = a_1R_{\text{Rohr}}^2$ und $f(R_{\text{Rohr}}) = a_2R_{\text{Rohr}}^4$ weisen größere Abweichungen auf. In Tabelle 4 sind die Fitparameter a_0 , a_1 , und a_2 und die Standardabweichung als Güte der Näherung angegeben. Die Standardabweichung σ wird über

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n_M} (f(R_{\text{Rohr}}) - y_i)^2}{n_M}}, \quad (38)$$

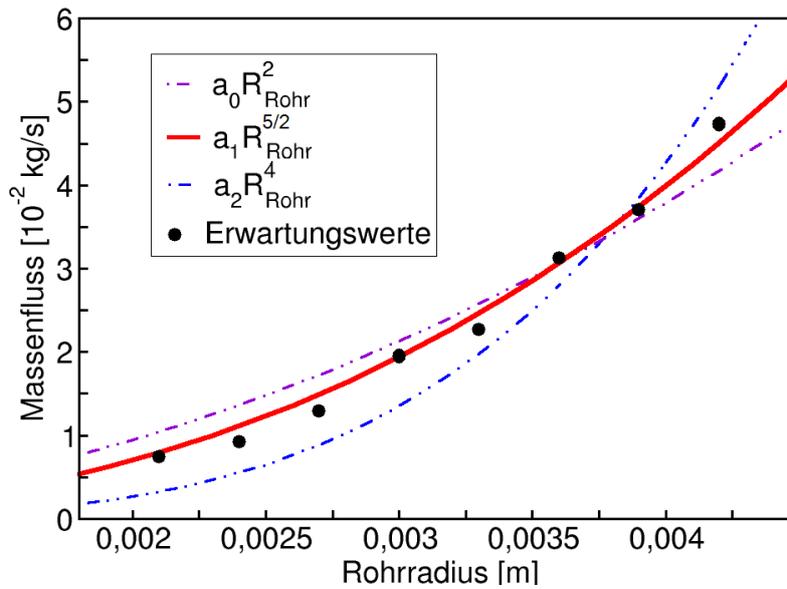


Abbildung 19: Darstellung der Erwartungswerte des Massenflusses in Abhängigkeit vom Rohrradius. Näherung durch verschiedene Ausgleichsfunktionen.

Tabelle 4: Ausgleichsfunktionen, Fitparameter und Standardabweichung

Funktion	Fitparameter	Standardabweichung
$a_0 R_{\text{Rohr}}^2$	2338.4	0.00356
$a_1 R_{\text{Rohr}}^{5/2}$	39129	0.00163
$a_2 R_{\text{Rohr}}^4$	$1.684 \cdot 10^8$	0.00409

mit den Messwerten y_i und der Messpunktanzahl n_M berechnet. Auch hier zeigt sich, dass die Näherung durch Gleichung (35) den Massenfluss in Abhängigkeit vom Rohrradius am genauesten wiedergibt.

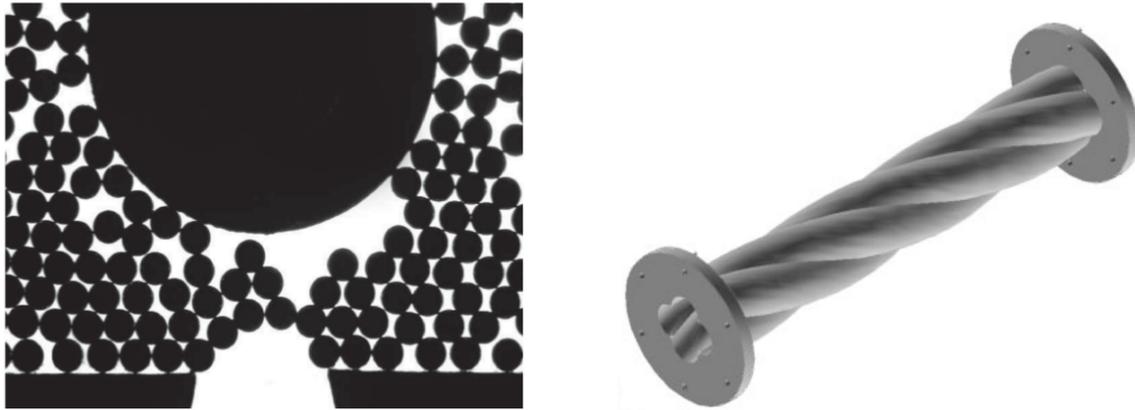


Abbildung 20: Links: Ausfluss von Granulat aus einem Silo mit Hindernis über der Öffnung [3]. Rechts: Geometrie eines Swirl Pipes [31].

5 Rohrströmung mit Modifikation der Rohrwandtextur und Diskussion

5.1 Helixförmige Textur

5.1.1 Diskussion der Texturgeometrie

In der Literatur sind bereits Ansätze zur Optimierung des Granulatflusses durch Einführung von dreidimensionalen Hindernissen im Strömungsbereich vertreten. Als ein Beispiel sei die Verminderung von Klumpenbildung des Granulatstromes beim Ausfluss aus einem Silo durch Einführung eines Hindernisses über der Siloausflussöffnung genannt. Zurigel et al. [31] zeigten in einer zweidimensionalen Betrachtung eines Siloausflusses, dass ein kreisförmiges Hindernis direkt über der Siloöffnung den Granulatstrom bis zu 10% erhöhen kann (siehe Abb. 20 links).

Für den Granulatfluss in Rohren soll ein Beispiel für Suspensionen angeführt werden. Für den Transport von Suspensionen in Rohren ist die Problematik der Sedimentation von Festkörpern und auch die Blockade des ganzen Rohres durch Festkörper bereits ausführlich diskutiert [2, 9, 26]. Um diesen Effekten entgegen zu wirken, wird der Suspension eine zur Rohrachse gerichtete radiale Geschwindigkeit aufgeprägt. In der Arbeit von Ariyaratne et al. [3] konnte gezeigt werden, dass durch die Geometrie eines in sich verdrehten Rohres (siehe Abb. 20 rechts) mit Ausbuchtungen die Aufprägung einer radialen Geschwindigkeit möglich ist und zu einer Homogenisierung der Partikelverteilung in der Suspension führt.

Wie in Kapitel 4.6 bereits gezeigt, begünstigt eine höhere radiale Geschwindigkeit den Fluss im Rohr und vermeidet, bzw. verzögert, die Verstopfung des Rohres. Die Geome-

Tabelle 5: Helixpartikelradien als Funktion des Rohrradius

D_ϕ	R_{Rohr}	R_H	n_{PT}
[-]	[m]	[m]	[-]
2.5	0.0015	0.00014703	32
3.0	0.0018	0.00014864	38
3.5	0.0021	0.00014812	44
4.0	0.0024	0.00014775	51
4.5	0.0027	0.00014874	57
5.0	0.0030	0.00014954	63
5.5	0.0033	0.00014805	70
6.0	0.0036	0.00014888	76
6.5	0.0039	0.00014938	82
7.0	0.0042	0.00014908	88

trie des Swirl Pipes ähnelt einer Vierfachhelix und diese Struktur wird in dieser Arbeit in Form einer Einfachhelix aus Partikeln auf der Rohrwand aufgebracht (siehe Abb. 21).

5.1.2 Parameter der Helix

Die Helix ist aus kugelförmigen Partikeln aufgebaut und in die Rohrwand gelegt. Die Helixpartikel bestehen aus dem gleichen Material wie die strömenden Partikel. Der Helixpartikelradius R_H entspricht dem Vielfachen des in Kapitel 3.1 festgelegten Standardrohrradius: $R_H = 1/10 \cdot R_{\text{Rohr}} = 0.00015$ m. Dieser absolute Wert für den Helixpartikelradius wird auch bei einem geänderten Rohrradius beibehalten. Die Wellenlänge λ_H der Helix ist verschieden gewählt und eine Änderung von λ_H hat eine Änderung der gesamten Helixpartikelanzahl zur Folge. Die Helixtextur erfüllt stets die Bedingung, dass der erste Partikel der Helix am Rohreingang die Fortführung des Helixendes am Ende des Rohres bildet. Die Fortführung der Helix über die periodischen Randbedingungen hinweg ist erforderlich, da ein unendlich langes Rohr mit einer regelmäßigen Textur simuliert wird.

Die Partikelanzahl n_{PT} einer Periode wird nur durch den Rohrdurchmesser bestimmt. Es wird die Anzahl der Partikel ermittelt, die bei einem vorgegebenen Partikelradius überlappungsfrei, aber mit Kontakt zu den Nachbarpartikeln, auf dem Umfang des Rohres angeordnet werden können. In der Regel kann nicht der gesamte Umfang mit Partikeln belegt werden, sondern es bleibt ein kleiner Teil des Umfangs frei, auf den kein ganzes Partikel passt. Daher wird der Partikelradius solange verringert, bis ein zusätzliches Partikel den freien Teil des Umfangs belegen kann. Dies führt zu einer maximalen Abweichung vom gewünschten Partikelradius von 2%. Der vertikale Abstand Δz der Helixpartikel wird durch die Anzahl n_T der vorgegebenen Perioden, der

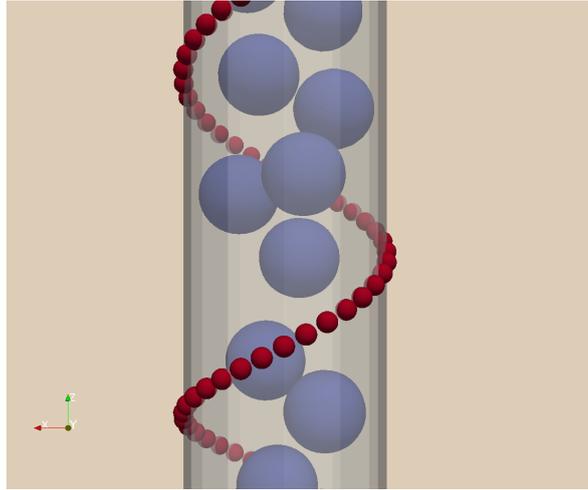


Abbildung 21: Geometrie einer Helix aus Partikeln.

Rohrlänge und der Partikelanzahl einer Periode definiert:

$$\Delta z = \frac{L_{\text{Rohr}}}{n_T \cdot n_{P_T}}. \quad (39)$$

Durch die Anzahl der Perioden und der festen Rohrlänge von $L_{\text{Rohr}} = 1$ m ist zudem die Wellenlänge der Helix $\lambda_H = L_{\text{Rohr}}/n_T$ festgelegt. Eine kleinere Wellenlänge entspricht einer größeren Anzahl von Perioden und einer größeren Anzahl von Helixpartikeln. Die maximale Wellenlänge entspricht $\lambda_H = L_{\text{Rohr}}$.

In Abbildung 21 ist eine Helix und das Rohr dargestellt. Obwohl die Helixpartikel kugelförmig sind, ragen diese aufgrund ihrer Positionierung in der Rohrwand nur bis zur Hälfte in das Innere des Rohres. Somit besteht die helixförmige Textur aus halbkugelförmigen Partikeln.

5.1.3 Simulationsverlauf

Die Simulationen mit einer helixförmigen Textur wurden nach dem in Kapitel 3.1 beschriebenen Aufbau von Simulationen durchgeführt. Damit keine Kollisionen der Partikel mit der Textur bei der Initialisierung auftreten, wurde der Bereich, in denen die Partikel im Rohr erzeugt werden, eingeschränkt.

Die nachfolgenden Beobachtungen beziehen sich auf das in Tabelle 6 zusammengefasste System.

Die Partikel werden durch die Gravitation beschleunigt. Aufgrund der Stöße der Partikel untereinander, mit der Wand und mit der Helixtextur stellt sich ein stationärer Wert der kinetischen Energie ein. Die Partikel sind über das gesamte Rohr im Verlauf der Zeit sehr gleichmäßig verteilt (Abb. 22). Dennoch sind Dichteunterschiede (dunkle

Tabelle 6: Parameter der Simulation

Parameter	Bezeichnung	Einheit	Wert
Rohrlänge	L_{Rohr}	m	1
Rohrradius	R_{Rohr}	m	0.0015
Packungsdichte	V_ϕ	-	0.15
Periodenanzahl	n_T	-	300
Wellenlänge	λ_H	m	0.0033
Partikelanzahl Periode	n_{P_T}	-	32
Partikelanzahl Helix gesamt	n_{P_H}	-	9600
Partikel frei	n_P	-	1172

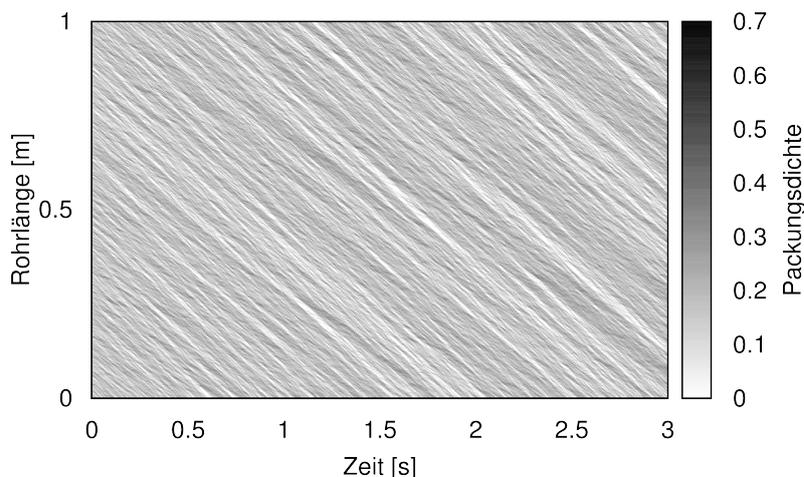


Abbildung 22: Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Rohr mit Helixtextur aus 9600 Partikeln auf der Innenwand.

und helle Bereiche) zu erkennen. Auch verlaufen die verschiedenen dichten Bereiche nicht parallel zueinander, sondern es liegen Geschwindigkeitsunterschiede vor, welche zu Zusammenflüssen von Partikeln und Auftrennen von Partikelgruppen führen. Insgesamt findet eine stetige Abwärtsbewegung aller Partikel zu jedem Zeitpunkt statt.

5.1.4 Vergleich zur Rohrströmung im Rohr mit rauen Wänden

Die Einführung einer helixförmigen Textur auf der Rohrinnenwand führt zu einer Vermeidung von Verstopfungen des Rohres und zu einer homogeneren Verteilung der Partikel im Rohr. Für ein Rohr mit dem Durchmesserhältnis $D_\phi = 2.5$ und ohne Helixtextur ist stets eine Verstopfung des Rohres eingetreten. Durch Erhöhung der radialen Startgeschwindigkeit konnte die Verstopfung herausgezögert, aber nicht vermieden werden (vergl. Kapitel 4.6). Im Gegensatz dazu kann bei Simulationen mit integrierter Helixtextur in Abhängigkeit von der Wellenlänge der Helix ein gleichmäßiger Fluss eingestellt werden. Durch Simulationen mit verschiedenen Wellenlängen im Bereich $0.0033 \text{ m} \leq \lambda_H \leq 1 \text{ m}$ konnte gezeigt werden, dass ab einer Wellenlänge von $\lambda_H \leq 0.0556 \text{ m}$ in

Tabelle 7: Parameter der Simulation

Parameter	Bezeichnung	Einheit	Wert
Rohrlänge	L_{Rohr}	m	1
Rohrradius	R_{Rohr}	m	0.0015
Durchmesserverhältnis	D_{ϕ}	-	2.5
Packungsdichte	V_{ϕ}	-	0.15
Periodenanzahl	n_T	-	18
Wellenlänge	λ_H	m	0.0556
Partikelanzahl Periode	n_{P_T}	-	32
Partikelanzahl Helix gesamt	n_{P_H}	-	576
Partikel frei	n_P	-	1172

einem Rohr mit $D_{\phi} = 2.5$ keine Verstopfung im Rohr auftritt. Je weiter λ_H in diesem Bereich verringert wird, desto gleichmäßiger wird der Partikelfluss. Um den Fluss in Rohrsystemen mit und ohne Helixtextur zu vergleichen, wird die Simulation eines Rohres mit einer 18-periodigen Helix ($\lambda_H = 0.556$ m) und eine Simulation mit dem gleichen Rohr ohne Helixtextur und erhöhter radialer Startgeschwindigkeit $v_r^{\text{max}} = 0.1085$ m/s verwendet. Durch die erhöhte radiale Startgeschwindigkeit wird eine Verstopfung des Rohres aufgeschoben und es kann bis zur Verstopfung ein stationärer Zustand der kinetischen Energie beobachtet werden. Die Parameter sind in Tabelle 7 hinterlegt. Alle nicht aufgeführten Parameter sind dem allgemeinen Aufbau aus Kapitel 3.1 entnommen.

In Abbildung 23 wird die Packungsdichte in Abhängigkeit von Zeit und Ort für die beiden Rohrsysteme gegenübergestellt. Während für das System ohne Helixtextur (links) starke Dichtewellen auftreten, wird für das System mit Helixtextur (rechts) eine homogenere Verteilung der Partikel gefunden. Dennoch werden die Partikel im Rohr mit Helixtextur immer wieder durch Stöße abgebremst, so dass viele Partikelgruppen entstehen. Diese werden durch die dunkelsten Bereiche in Abbildung 23 rechts dargestellt. Durch Erniedrigung der Wellenlänge, und somit der Erhöhung der Anzahl der Helixpartikel, können diese Gruppenbildungen weiter unterbunden werden (siehe Abb. 22).

Mit der Homogenisierung geht eine Änderung der Geschwindigkeit der Partikel einher. Die Partikel stoßen mit den Helixpartikeln und werden in radiale Richtung beschleunigt. Demnach haben die Partikel eine erhöhte radiale Geschwindigkeit, welche allerdings auch zu weiteren Kollisionen mit der Wand und anderen Partikeln führt (Abb. 24 (a)). In Folge ist die durchschnittliche Zeit zwischen den Stößen der Partikel verringert, welches zu kürzeren ungehinderten Beschleunigungsphasen durch die Gravitation zwischen den Stößen führt. Zusammenfassend wird durch den Einfluss der Helixtextur die Geschwindigkeit in axiale Richtung im Vergleich zu einem Rohr ohne Helixtextur ver-

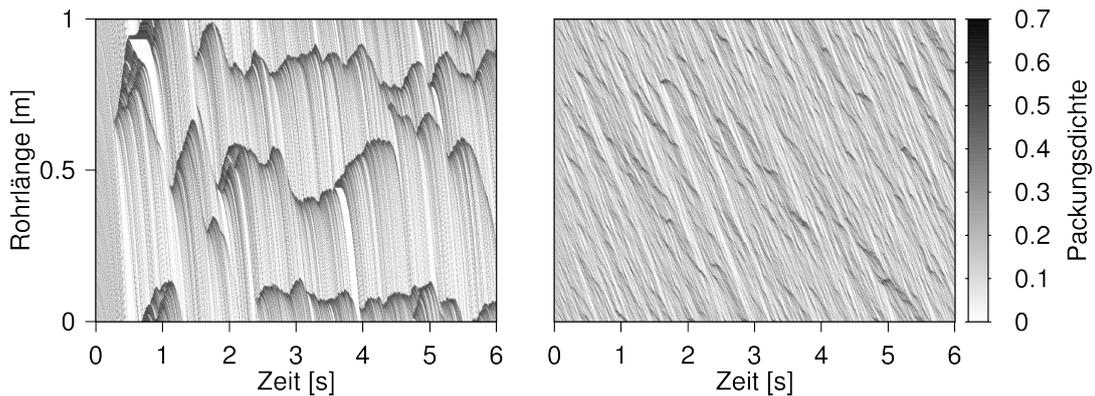


Abbildung 23: Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Links: Simulation ohne Helixstruktur, Rechts: Simulation mit Helixstruktur aus 640 Texturpartikel.

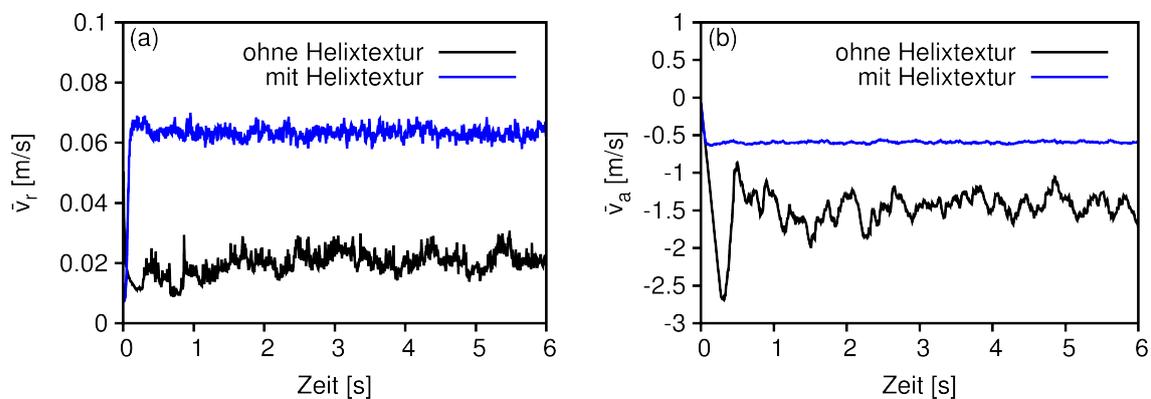


Abbildung 24: Vergleich zwischen Simulationen mit erhöhter radialer Startgeschwindigkeit ohne Helixstruktur und einer Simulation mit Helixstruktur. (a) Mittlere radiale Geschwindigkeit $\bar{v}_r = (\sum_{i=1}^{n_P} \sqrt{v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2})/n_P$, (b) Mittlere axiale Geschwindigkeit \bar{v}_a .

ringert (Abb. 24 (b)). Auf Kosten einer noch geringeren axialen Geschwindigkeit kann der Partikelfluss durch weitere Erhöhung der Helixpartikelanzahl weiter homogenisiert werden.

5.1.5 Abhängigkeit des Massenflusses von der Wellenlänge der Helix

Durch die Wellenlänge wird die Anzahl der Perioden und somit die gesamte Helixpartikelanzahl vorgegeben. Die Partikelanzahl der Helixstruktur hat einen großen Einfluss auf die Geschwindigkeit der strömenden Partikel. Durch Stöße der Partikel mit der Helixstruktur wird Energie dissipiert und die Partikel werden abgebremst. Zur Erhöhung der Partikelanzahl der Helixstruktur wird die Wellenlänge bei gleichbleibender Helixpartikelgröße, Helixpartikelanzahl pro Periode und Rohrlänge erniedrigt. Zum Beispiel wird im Vergleich zwischen einer Helixstruktur mit einer Wellenlänge von $\lambda_H = 1$ m und einer Helixstruktur mit $\lambda_H = 0.5$ m die Helixpartikelanzahl verdoppelt.

Tabelle 8: Partikelkonfigurationen der Simulationen mit unterschiedlichen Helixstrukturen

			λ_H 1 m	λ_H 0.05 m	λ_H 0.025 m	λ_H 0.0125 m	λ_H 0.00625 m
Parameter	Bez.	[]					
Rohrlänge	L_{Rohr}	m	1	1	1	1	1
Rohrradius	R_{Rohr}	m	0.0021	0.0021	0.0021	0.0021	0.0021
Packungsdichte	V_ϕ	-	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15
Periodenanzahl	n_T	-	1	20	40	80	160
N Partikel Periode	n_{P_T}	-	44	44	44	44	44
N Partikel Helix ges.	n_{P_H}	-	44	880	1760	3520	7040
N Partikel frei	n_P	-	2297	2297	2297	2297	2297

In diesem Zusammenhang sind Simulationen nach dem allgemeinen Aufbau aus Kapitel 3.1 mit einem Durchmesser Verhältnis $D_\phi = 3.5$ und mit helixförmigen Texturen mit unterschiedlichen Wellenlängen durchgeführt worden. Die weiteren Parameter sind in Tabelle 8 nachzulesen.

In Abbildung 25 ist die Packungsdichte über den zeitlichen Verlauf im Rohr für vier Simulationen mit verschiedenen Helixstrukturen dargestellt. In Abbildung 25 (a) ist die Packungsdichte einer Simulation ohne Helixstruktur abgebildet. Nach einer Beschleunigungsphase kommt es zu einer Ausbildung von ausgeprägten Dichteinhomogenitäten. Im Vergleich dazu ist in (b) die Packungsdichte für eine Simulation mit einer Helixstruktur mit $\lambda_H = 1$ m dargestellt. Es liegen auch hier noch viele Dichteinhomogenitäten vor, welche allerdings kleiner sind und an mehr axialen Positionen gleichzeitig auftreten. Die Packungsdichte im Raum zwischen den dichten Regionen ist zudem gleichmäßiger als in (a).

In Abb. 25 (c) wurde eine Helixstruktur $\lambda_H = 0.05$ m verwendet. Hier treten vereinzelt sehr kleine, temporäre Pfropfen auf und die Packungsdichte ist deutlich homogener verteilt. Dennoch ist ein Wechsel von hellen und dunklen Bereichen erkennbar, welcher aus einer inhomogenen Verteilung der Partikel im Rohr hervorgerufen wird.

Wie in (d) zu sehen ist, können Pfropfen durch eine weitere Erniedrigung der Wellenlänge auf $\lambda_H = 0.125$ m vermieden werden. Zudem sind die Übergänge zwischen hellen und dunklen Regionen weicher, was auf eine gleichmäßigere Verteilung der Partikel schließen lässt. Diese Beobachtung kann durch die Auswertung der Massenflüsse bestätigt werden (siehe Abb. 26).

In Abbildung 26 sind die Wahrscheinlichkeitsdichten für den Massenfluss aus den Si-

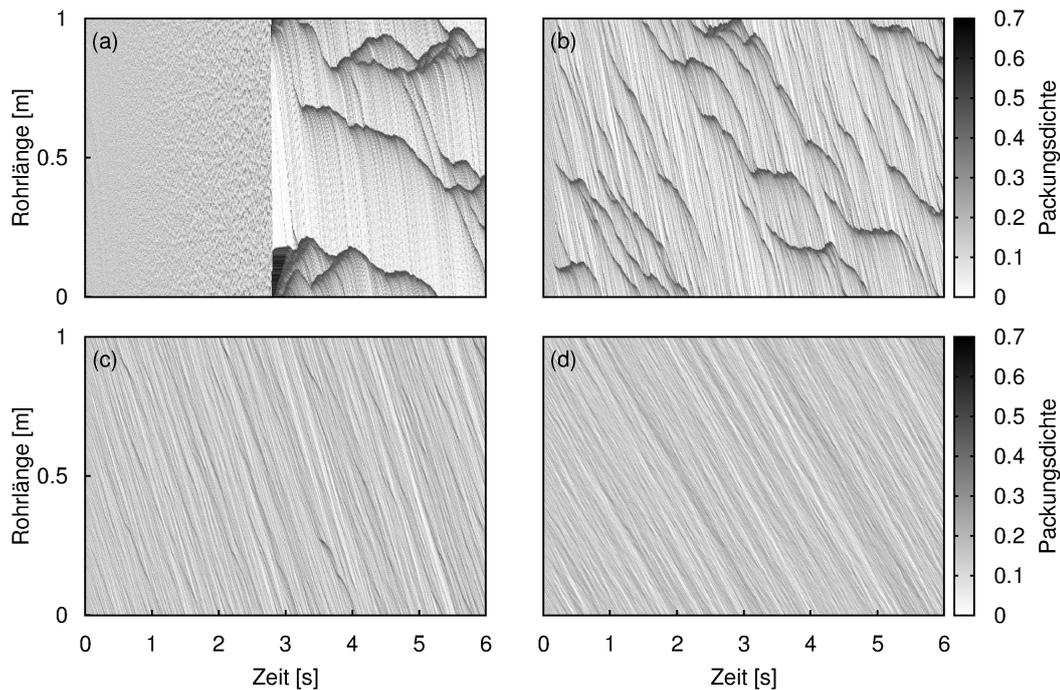


Abbildung 25: Packungsdichte im Rohr in Abhängigkeit von Zeit und Ort bei verschiedenen Rohrsystemen. (a) Keine Helixtextur, (b) $\lambda_H = 1$ m, (c) $\lambda_H = 0.5$ m, (d) $\lambda_H = 0.125$ m.

mulationen mit verschiedenen Wellenlängen dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Massenfluss für das gleiche Rohr ohne helixförmige Textur eingetragen. Die Daten zum Erstellen der Graphen werden wie in Kapitel 4.7 beschrieben ermittelt. Die Verwendung von nur einer Periode ($\lambda_H = 1$ m) führt zu einer breiteren Verteilung und einer Verringerung des Erwartungswertes für den Massenfluss. Das heißt, die bloße Anwesenheit einiger weniger Partikel als Textur reicht nicht aus, um den Partikelfluss zu verbessern. Wenn nun die Wellenlänge erniedrigt wird, werden die Verteilungen für den Massenfluss zunehmend schmaler. Zusätzlich gehen die Verteilungen von der anfänglichen logarithmischen Normalverteilung in eine Gaußverteilung über und der Erwartungswert wird stetig verringert. D.h. der Massenfluss wird gleichmäßiger und niedriger durch eine kleinere Wellenlänge der Helix.

Die Bildung von sehr dichten Partikelgruppen wird durch die Stöße mit der Helixtextur unterbunden. Wenn ein Partikel am Rand einer Partikelgruppe auf die Helixtextur trifft, so kann dieses Partikel so abgelenkt werden, dass es verstärkt mit der Partikelgruppe stößt. Dadurch wiederum werden die Partikel in der Gruppe abgelenkt und stoßen ihrerseits mit der Helixtextur. Eine Formierung von Partikeln in einer sehr dichten Gruppe wird dadurch deutlich unterbunden.

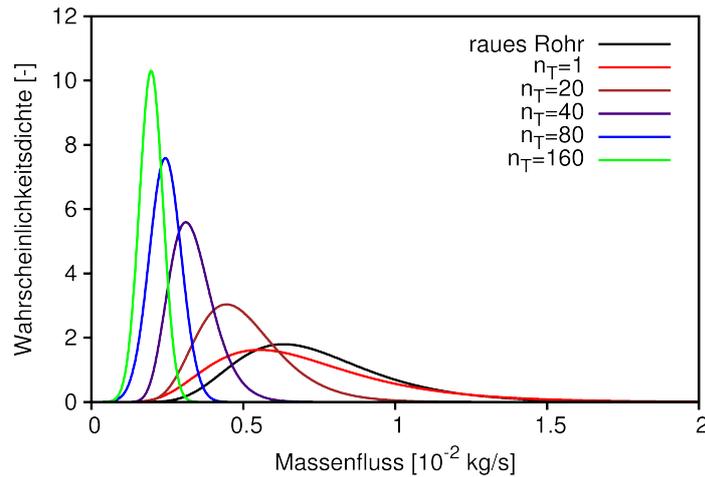


Abbildung 26: Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses bei verschiedenen Durchmesser-Verhältnissen D_ϕ

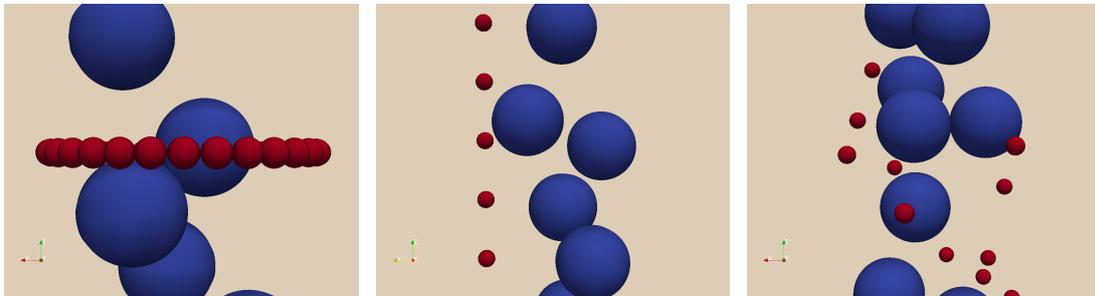


Abbildung 27: Verschiedene Texturen aus Partikeln (Rot), (Links) ringförmige Textur, (Mitte) linienförmige Textur, (Rechts) zufällige Anordnung der Partikel.

Schlussfolgernd kann über die Wellenlänge die Eigenschaft des Massenflusses im Rohr beeinflusst werden. Es kann zwischen einem niedrigen homogenen Massenfluss und einem hohen inhomogenen Massenfluss gewählt werden. Je nach Anwendungsbedarf kann somit ein möglichst hoher Massenfluss oder ein möglichst genau dosierter Massenfluss eingestellt werden. Zudem wird bei der Verwendung der Helix eine Verstopfung des Rohres vermieden.

5.2 Alternative Texturgeometrien

Im Vergleich zur helixförmigen Textur sollen noch weitere mögliche Geometrien kurz als alternative Lösung untersucht werden. Die helixförmigen Geometrie lässt sich in weitere Formen wie Ringe in einem festen vertikalen Abstand zueinander oder aber eine vertikale Linie aus Partikeln überführen. Die Ringe werden durch die Anordnung aller Partikel einer Helixperiode auf einem Ring auf der Höhe des ersten Partikels der Helixperiode erhalten (Abb. 27 links). Der horizontale Abstand zwischen den Partikeln

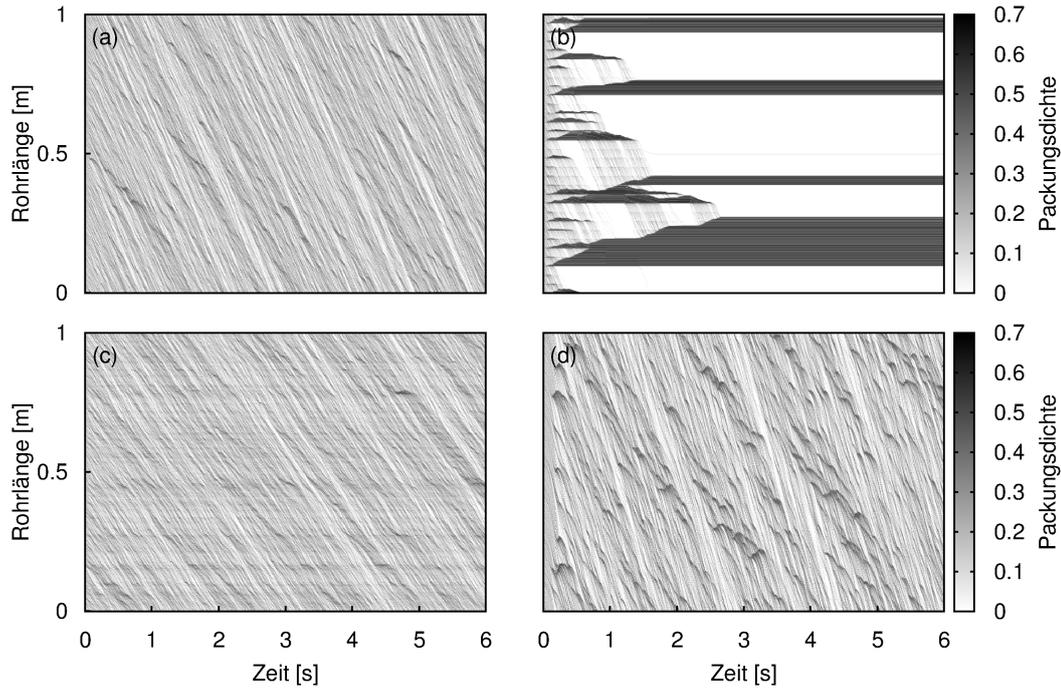


Abbildung 28: Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr bei verschiedenen Texturen. (a) helixförmige Textur, (b) ringförmige Textur, (c) zufällige Textur, (d) linienförmige Textur.

bleibt dabei erhalten.

Für die Liniengeometrie werden alle Partikel einer Helixperiode auf einer vertikalen Linie angeordnet und dabei wird der vertikale Abstand zwischen den Partikeln von der Helix beibehalten (Abb. 27 mitte). Die Partikelanzahl der Textur wird für die unterschiedlichen Geometrien konstant gehalten. Zur Vergleichbarkeit wird auch der Helixpartikelradius $R_H \approx 0.00015$ m bei jeder Textur verwendet. Als dritte Variation soll die entsprechende Partikelanzahl zufällig auf der Rohrrinnenwand verteilt werden (Abb. 27 rechts).

Für den Vergleich der Texturen sind Simulationen nach dem allgemeinen Aufbau (siehe Kapitel 3.1) mit $V_\phi = 0.15$ und $D_\phi = 2.5$ für jede der Texturen durchgeführt worden. Die zu vergleichende Helixtextur besteht aus 31 Perioden, welches einer Wellenlänge von $\lambda_H = 0.023$ m und einer Partikelanzahl der Helix von $n_{P_H} = 992$ entspricht.

In Abbildung 28 sind die Packungsdichten der Simulationen über den zeitlichen Verlauf dargestellt. In (a) ist die Packungsdichte im Rohr für die Vergleichsimulation mit der entsprechenden Helixtextur gezeigt. Hier sind Wechsel von dicht und weniger dichten

Regionen, als auch die Entstehung von temporären Pfropfen erkennbar. Im Vergleich dazu erweist sich die Anordnung der Texturpartikel in 31 Ringen als keine geeignete Lösung. Es bilden sich direkt über den Ringen dichte Regionen, in denen die Packungsdichte so weit ansteigt, dass eine stabile Brückenbildung stattfindet. Wie in (b) zu sehen ist, tritt dieser Effekt nahezu bei jedem Ring auf und führt an mehreren Abschnitten im Rohr zur Verstopfung des Rohres.

Im Gegensatz dazu bietet die zufällige Anordnung der 992 Texturpartikel eine bessere Lösung. In (c) ist ein durchgehender Partikelfluss zu sehen. Dabei treten keine Dichtewellen, wie sie in Rohren ohne Textur beobachtet wurden, auf. Wenn man entlang der Dichtemuster eine Gerade anlegt, so gibt die Steigung die Geschwindigkeit der Partikel an. Im Vergleich zwischen der Helixtextur und der zufälligen Textur zeigt sich, dass die Partikel im Rohr mit Helixtextur schneller ($v_z \approx 0.71$ m/s) als im Rohr mit zufälliger Textur ($v_z \approx 0.39$ m/s) fließen. Zudem kann über die Parameter der Helixtextur der Partikelfluss gezielt gesteuert werden.

In (d) ist die Packungsdichte im Rohr der Simulation mit einer linienförmigen Textur gezeigt. Trotz der gleichen Texturpartikelanzahl, wie in den anderen Texturen, treten vermehrte Partikelansammlungen im Rohr auf. Sowohl im Rohr mit Helixtextur, als auch im Rohr mit zufälliger Textur, ist der Partikelfluss homogener.

6 Zusammenfassung

Die Lagerung und Förderung von Granulat ist aufgrund der hohen Verbreitung von Granulat als Produkt oder Rohmaterial in den verschiedensten industriellen Bereichen ein gegenwärtiges Thema. Ein Problem bei der Förderung von Granulat durch Rohre ist das Auftreten von Dichteinhomogenitäten in Form von Pfropfen bis hin zur permanenten Verstopfung des Rohres [1]. Zum besseren Verständnis sind bereits viele Untersuchungen zu granularen Rohrströmungen in der Wissenschaft durchgeführt worden [1, 5, 7, 20, 22].

In dieser Arbeit wurde der Massenfluss eines Granulates in einem vertikalen Rohr mit Hilfe von MD Simulationen untersucht und eine Optimierung des Massenflusses durch Modifizierung der Rohrwandtextur erreicht. Dabei wurde zuerst anhand des Durchmesserverhältnisses $D_\phi = D_{\text{Rohr}}/D_{\text{Partikel}}$ der granulare Partikelstrom in zwei Bereiche eingeteilt. Für $D_\phi \leq 3$ tritt eine Verstopfung des Rohres nach einer gewissen Zeit ein. Für $D_\phi > 3$ werden Dichtewellen mit vereinzelt Verstopfungen des Rohres gefunden (Kapitel 4.2). Des Weiteren ist der Einfluss der Packungsdichte V_ϕ im Rohr, im Bereich $0.05 \leq V_\phi \leq 0.15$, auf die Dauer des ungehinderten Partikelflusses im Rohr untersucht worden. Es wurde gezeigt, dass für größere Packungsdichten das Rohr schneller verstopft (Kapitel 4.4).

Der granulare Massenfluss durch ein Rohr wurde im Bereich $3.5 \leq D_\phi \leq 7$ auf Homogenität und Abhängigkeit vom Rohrdurchmesser untersucht. Der Massenfluss wird durch eine logarithmische Normalverteilung beschrieben und diese wird mit zunehmendem Rohrdurchmesser breiter. Der Erwartungswert der Verteilung kommt durch die Pfropfen der im Rohr auftretenden Dichtewellen zustande (Kapitel 4.7). Insgesamt nimmt der granulare Massenfluss proportional zu $R_{\text{Rohr}}^{5/2}$ zu, welches fließendes Granulat deutlich von einem laminaren, stationären Flüssigkeitsstrom unterscheidet, da dessen Massenfluss nach Hagen-Poiseuille von der vierten Potenz des Rohrdurchmessers abhängt (Kapitel 4.8)[29].

In Kapitel 5 wurden zur Optimierung des Massenflusses Partikel auf die Innenwand des Rohres in Form einer Helix aufgebracht. Der Massenfluss kann durch die Wellenlänge der Helix in Bezug auf Durchsatz und Homogenität eingestellt werden. Je kleiner die Wellenlänge der Helix bei gleicher Länge des Rohres, desto homogener wird der Massenfluss und desto kleiner wird der Durchsatz. Das Auftreten von Dichtewellen und auch die Verstopfung des Rohres kann dadurch vermieden werden.

Zusammenfassend wurde das Auftreten von Verstopfungen im Rohr und der Einfluss

der Dichtewellen auf den Massenfluss untersucht. Zusätzlich wird eine Möglichkeit für die Einstellung des Massenflusses und der Vermeidung von Dichtewellen und der Verstopfung des Rohres geliefert.

7 Symbolverzeichnis

Abkürzung	Einheit	Bedeutung
t_K	s	Kollisionszeit
\vec{x}_i	m/s ²	Beschleunigungsvektor des Partikels i
\vec{x}	m/s	Geschwindigkeitsvektor
m_i	kg	Masse des Partikels i
\vec{g}	m/s ²	Erdbeschleunigung, Vektordarstellung
g	m/s ²	Erdbeschleunigung
F_i	N	Summierte Kräfte auf den Partikel i
F_{ij}	N	Wirkende Kraft zwischen den Partikeln i und j
F_t	N	tangentiale Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
F_n	N	normale Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
F_n^{el}	N	elastische normale Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
F_n^{diss}	N	dissipative normale Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
F_t^{el}	N	elastische tangentielle Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
F_t^{diss}	N	dissipative tangentielle Kraftkomponente der Kraft F_{ij}
J_i	kgm ²	Trägheitsmoment des Partikels i
$\vec{\omega}_i$	1/s ²	Winkelbeschleunigung des Partikels i
\vec{M}_i	Nm	Wirkendes Drehmoment auf den Partikel i
R_i	m	Radius des Partikels i
R_j	m	Radius des Partikels j
R_{Partikel}	m	Partikelradius
R_{Rohr}	m	Rohrradius
R_H	m	Helixpartikelradius
m_i	kg	Masse des Partikel i
m_j	kg	Masse des Partikel j
m_{Partikel}	kg	Masse eines Partikels
m	kg	Masse
Δt	s	Zeitschritt für die numerische Lösung in der MD
R_{eff}	m	Effektiver Radius zweier Partikel
m_{eff}	kg	Effektive Masse zweier Partikel
k_n	kgm ^{1/2} /s ²	elastische Materialkonstante in normale Richtung
A_n	kg/(sm ^{1/2})	dissipative Materialkonstante
k_t	kg/s ²	elastische Materialkonstante in tangentielle Richtung
γ_n	kg/s	dissipative Materialkonstante in normale Richtung
γ_t	kg/s	dissipative Materialkonstante in tangentielle Richtung
ν	-	Poissonzahl

Fortführung auf nächster Seite

Abkürzung	Einheit	Bedeutung
Y	GPa	Elastizitätsmodul
Y_{Glas}	GPa	Elastizitätsmodul von Glas
v_{imp}	m/s	Kollisionsgeschwindigkeit
v_x	m/s	Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung
v_y	m/s	Geschwindigkeitskomponente in y-Richtung
v_z	m/s	Geschwindigkeitskomponente in z-Richtung
v_r	m/s	radiale Geschwindigkeit
v_r^{max}	m/s	maximale radiale Geschwindigkeitskomponente
\bar{v}_r	m/s	mittlere radiale Geschwindigkeit
\bar{v}	m/s	mittlere Geschwindigkeit
\bar{v}_z	m/s	mittlere axiale Geschwindigkeit
v^*	-	dimensionsloser Faktor zur Berechnung von ϵ
ϵ	-	Restitutionskoeffizient
ξ	m	Verschiebung der Partikel i und j
\vec{x}_i	m	Ortsvektor des Partikels i
\vec{x}_j	m	Ortsvektor des Partikels j
\vec{n}	-	normalen Einheitsvektor
\vec{t}	-	tangentialer Einheitsvektor
$\dot{\xi}$	m/s	Verschiebungsgeschwindigkeit der Partikel i und j
\vec{v}_i	m/s	Geschwindigkeitsvektor des Partikels i
\vec{v}_j	m/s	Geschwindigkeitsvektor des Partikels j
$\vec{v}_{i,j}$	m/s	relativer Geschwindigkeitsvektor der Partikel i und j
v_t	m	tangentiale Verschiebung
μ	-	Reibungskoeffizient
k_B	J/K	Boltzmann-Konstante
C	-	dimensionsloser Faktor
γ_R	kg/s	Dämpfungskonstante bei Stößen zwischen Partikeln und Rohrwand
$v_{Fl_{Wand}}$	m/s	Geschwindigkeit einer Flüssigkeit an Rohrwand
$v_{Partikel}$	m/s	Partikelgeschwindigkeit
\dot{V}	m ³ /s	Volumenstrom
L_{Rohr}	m	Rohrlänge
Δp	N/m ²	Druckdifferenz zwischen Rohrein/-ausgang
η	Pas	dynamische Viskosität
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
\dot{m}_{F1}	kg/s	Massenstrom einer Flüssigkeit

Fortführung auf nächster Seite

Abkürzung	Einheit	Bedeutung
A_{Rohr}	m^2	Rohrquerschnittsfläche
ρ_{Partikel}	kg/m^3	Partikeldichte
ρ_M	kg/m^3	Mischdichte aus Partikel und Medium
ρ_{Glas}	kg/m^3	Dichte Glas
D_{Rohr}	m	Rohrdurchmesser
D_{Partikel}	m	Partikeldurchmesser
N	-	Partikelanzahl
N_{LR}	-	Partikelanzahl der linearen Regression
V_{Rohr}	m^3	Rohrvolumen
V_{Partikel}	m^3	Partikelvolumen
V_ϕ	-	Packungsdichte
D_ϕ	-	Durchmesser Verhältnis Rohr zu Partikel
T_j	s	Zeitpunkt der Verstopfung
t_s	s	Durch eine Simulation abgebildete Zeit
a_0	-	dimensionsloser Skalierungsfaktor, Fitparameter
E_w	kg/s	Erwartungswert des Massenstromes
n_{PT}	-	Partikelanzahl pro Periode
n_T	-	Periodenanzahl
n_P	-	Anzahl strömende Partikel
j	$\text{kg}/(\text{m}^2\text{s})$	Flussdichte
D_O	m	Durchmesser einer Öffnung
A_O	m^2	Querschnittsfläche einer Öffnung
k	-	dimensionslose Konstante
t	s	Zeit
t_0	s	Startzeitpunkt einer Kollision

8 Abbildungsverzeichnis

1	Definition der Größen zur Beschreibung der Partikelkollision [14].	4
2	Zweidimensionale Darstellung des zylindrischen Rohres. Schnitt entlang der Rohrachse, nicht maßstabsgetreu.	10
3	Zeitlicher Verlauf der gesamten Energie (Rotationsenergie + Translationsenergie)	18
4	Darstellung von Partikeln im Rohr (Rohr in Darstellung nicht enthalten). Links: Partikelpositionen und Startgeschwindigkeit in radiale Richtung. Rechts: Brückenbildung der Partikel im Rohr.	19
5	Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Dunkel korrespondiert mit hoher Packungsdichte, hell korrespondiert mit geringer Packungsdichte. Links: Auftreten von Dichtewellen bei $D_\phi = 4$. Rechts: Auftreten einer Verstopfung bei $D_\phi = 2.5$	20
6	(a) Zeitlicher Verlauf der maximalen und minimalen axialen Geschwindigkeit im Rohr, (b) Vergrößerung des Bereichs 2s-2.6s aus (a).	21
7	Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Links: Gesamte Simulation. Rechts: Ausschnitt zum Zeitpunkt der Verstopfung	22
8	(a) Normierte Summenverteilung Q_j über den Zeitpunkt der Verstopfung von jeweils 500 Simulationen mit verschiedenen Volumenverhältnissen V_ϕ . (b) Zeitpunkt T_j der Verstopfung in Abhängigkeit vom Volumenverhältnis V_ϕ . Darstellung der $Q_{0.1}$ -, $Q_{0.5}$ - und $Q_{0.9}$ -Quantile.	23
9	(a) Normierte Summenverteilung des Zeitpunktes der Verstopfung T_j aus 500 Simulationen für verschiedene Durchmesserhältnisse D_ϕ . (b) Logarithmische Darstellung.	24
10	Anordnungen dreier Partikel in einer zweidimensionalen Betrachtung des Rohres bei verschiedenen Rohrdurchmessern und konstanten Partikeldurchmessern. (a) $D_\phi = 2.5$, (b) $D_\phi = 2.9$, (c) $D_\phi = 3$	25
11	(a) Mittlere radiale Geschwindigkeit $\bar{v}_r = (\sum_{i=1}^{n_P} \sqrt{v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2})/n_P$ für verschiedene radiale Startgeschwindigkeiten. Hohe: $v_r^{\max} = 1.085$ m/s, mittlere: $v_r^{\max} = 0.1085$ m/s, niedrige: $v_r^{\max} = 0.01$ m/s (b) Normierte Summenverteilung für verschiedene initiale radiale Startgeschwindigkeiten. 26	
12	Radiale Startgeschwindigkeit $v_r^{\max} = 0.1085$ m/s, Links: Übersicht gesamte Simulation. Rechts: Vergrößerung aus Bereich einer temporären Blockade.	27

13	(a) Kumulative Partikelanzahl am Ende des Rohres (b) Unterschiedliche Partikelanzahl N_{LN} bei der linearen Regression zur Berechnung des Massenflusses.	28
14	Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses für $D_\phi = 4$	29
15	Massenfluss in Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort. Rot entspricht hohem, Weiß mittlerem und Grün niedrigem Massenfluss. Darstellung erzeugt durch: Einteilen des Rohres in 500 Volumenelemente und Berechnung der Packungsdichte und der mittleren axialen Geschwindigkeit \bar{v}_a in jedem Element. Über $\dot{m} = V_\phi \bar{v}_a A_{\text{Rohr}} \rho_{\text{Partikel}}$, mit der Querschnittsfläche A_{Rohr} des Rohres, wird der Massenfluss angegeben.	30
16	Packungsdichte in Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort. Dunkle Bereiche entsprechen hoher Dichte und helle Bereiche entsprechen niedriger Dichte.	31
17	Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses bei verschiedenen Durchmesserhältnissen D_ϕ	32
18	Erwartungswerte des Massenflusses in Abhängigkeit vom Rohrradius und berechneter Massenfluss nach Gleichung (25).	33
19	Darstellung der Erwartungswerte des Massenflusses in Abhängigkeit vom Rohrradius. Näherung durch verschiedene Ausgleichsfunktionen.	35
20	Links: Ausfluss von Granulat aus einem Silo mit Hindernis über der Öffnung [3]. Rechts: Geometrie eines Swirl Pipes [31].	36
21	Geometrie einer Helix aus Partikeln.	38
22	Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Rohr mit Helixstruktur aus 9600 Partikeln auf der Innenwand.	39
23	Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr. Links: Simulation ohne Helixstruktur, Rechts: Simulation mit Helixstruktur aus 640 Texturpartikel.	41
24	Vergleich zwischen Simulationen mit erhöhter radialer Startgeschwindigkeit ohne Helixstruktur und einer Simulation mit Helixstruktur. (a) Mittlere radiale Geschwindigkeit $\bar{v}_r = (\sum_{i=1}^{n_P} \sqrt{v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2})/n_P$, (b) Mittlere axiale Geschwindigkeit \bar{v}_a	41
25	Packungsdichte im Rohr in Abhängigkeit von Zeit und Ort bei verschiedenen Rohrsystemen. (a) Keine Helixstruktur, (b) $\lambda_H = 1$ m, (c) $\lambda_H = 0.5$ m, (d) $\lambda_H = 0.125$ m.	43
26	Wahrscheinlichkeitsdichte des Massenflusses bei verschiedenen Durchmesserhältnissen D_ϕ	44
27	Verschiedene Texturen aus Partikeln(Rot), (Links) ringförmige Textur, (Mitte) linienförmige Textur, (Rechts) zufällige Anordnung der Partikel.	44

28	Zeitlicher Verlauf der Packungsdichte im Rohr bei verschiedenen Texturen. (a) helixförmige Textur, (b) ringförmige Textur, (c) zufällige Textur, (d) linienförmige Textur.	45
----	--	----

9 Tabellenverzeichnis

1	Grundlegende Parameter der Simulationen	12
2	Auswahlsystem der angegebenen Materialparameter nach den beteiligten Typen einer Kollision	15
3	Rohrradius	31
4	Ausgleichsfunktionen, Fitparameter und Standardabweichung	35
5	Helixpartikelradien als Funktion des Rohrradius	37
6	Parameter der Simulation	39
7	Parameter der Simulation	40
8	Partikelkonfigurationen der Simulationen mit unterschiedlichen Helix- texturen	42

10 Literaturverzeichnis

- [1] J. Aider, N. Sommer, T. Raafat und J. Hulin: *Experimental study of a granular flow in a vertical pipe: A spatiotemporal analysis*. Physical Review E, 59:778–786, 1999.
- [2] C. Ariyaratne: *Design and optimisation of swirl pipes and transition geometries for slurry transport*. Dissertation, University of Nottingham, 2005.
- [3] C. Ariyaratne und T. F. Jones: *Design and optimization of Swirl Pipe geometry for particle-laden liquids*. American Institute of Chemical Engineers Journal, 53:757–768, 2007.
- [4] Y. Bertho, F. Giorgiutti-Dauphine, T. Raafat, E. J. Hinch, H. J. Herrmann und J. P. Hulin: *Powder flow down a vertical pipe: The effect of air flow*. Journal of Fluid Mechanics, 459:317–345, 2002.
- [5] S. Brand, R. C. Ball und M. Nicodemi: *Stochastic transitions and jamming in granular pipe flow*. Physical Review Letters, 83:031309, 2011.
- [6] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. Hertzsch und T. Pöschel: *Model for collisions in granular gases*. Physical Review E, 53:5382–5392, 1996.
- [7] S. L. Conway und Benjamin J. Glasser: *Density waves and coherent structures in granular Couette flows*. Physics of Fluids, 16:509–529, 2004.
- [8] P. Eshuis, K. van der Weele, D. van der Meer, R. Bos und D. Lohse: *Phase diagram of vertically shaken granular matter*. Physics of Fluids, 19:123301, 2007.
- [9] R. G. Gillies, K. B. Hill, M. J. McKibben und C. A. Shook: *Solids transport by laminar Newtonian flows*. Power Technology, 104:269–277, 1999.
- [10] I. Goldhirsch und G. Zanetti: *Clustering Instability in Dissipative Gases*. Physical Review Letters, 70:1619–1622, 1993.
- [11] H. J. Herrmann: *Granular Matter*. Physica A, 213:188–210, 2002.
- [12] E. J. R. Parteli: *DEM simulation of particles of complex shapes using the multisphere method: Application for additive manufacturing*. In: *Powder and Grains, American Institute of Physics Conference Proceedings*, Band 1542, Seiten 185–188, 2013.

-
- [13] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger und S. Pirker: *Models, algorithms and validation for opensource DEM and CDF-DEM*. Progress in Computational Fluid Dynamics, 12:140–152, 2012.
- [14] H. Kruggel-Emden, E. Simsek, S. Rickelt, S. Wirtz und V. Scherer: *Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method*. Power Technology, 171:157–173, 2006.
- [15] H. Kruggel-Emden, S. Wirtz und V. Scherer: *A study of tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior*. Chemical Engineering Science, 63:1523–1541, 2008.
- [16] C. Mankoc, A. Janda, R. Arevalo, J. M. Pastor, I. Zuriguel, A. Garcimartin und D. Maza: *The flow rate of granular materials through an orifice*. Granular Matter, 9:407–414, 2007.
- [17] P. Müller: *Multiskaleneigenschaften Granularer Systeme in Hartkugelnäherung*. Dissertation, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, 2014.
- [18] P. Müller und T. Pöschel: *Collision of viscoelastic spheres: Compact expressions for the coefficient of normal restitution*. Physical Review E, E 84:021302, 2011.
- [19] E. J. R. Parteli, J. Schmidt, C. Blümel, K. Wirth, W. Peukert und T. Pöschel: *Attractive particle interaction forces and packing density of fine glass powders*. unveröffentlicht, 2014.
- [20] T. Pöschel: *Recurrent clogging and density waves in granular material flowing through a narrow pipe*. Journal de Physice I, 4:499–506, 1994.
- [21] T. Pöschel: *Dynamik Granularer Systeme*. Logos Verlag Berlin, 2000.
- [22] T. Raafat, J. P. Hulin und H. J. Herrmann: *Density waves in granular media falling through a vertical pipe*. Physical Review E, 53(5):4345–4350, 1996.
- [23] T. Riethmüller: *Theoretische Modellierung granularer Ströme in dünnen Röhren mit Langevin-Gleichung*. Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin, 1995.
- [24] T. Riethmüller, L. Schimansky-Geier, D. Rosenkranz und T. Pöschel: *Langevin equation approach to granular flow in a narrow pipe*. Journal of Statistical Physics, 86:421–430, 1997.
- [25] C. H. Rycroft, A. V. Orpe und A. Kudrolli: *Physical test of a particle simulation model in a sheared granular system*. Physical Review E, 80:031305, 2009.

-
- [26] A. Sarimeseli: *Sedimentation of particles in developed turbulent flow in rough pipes*. Power Technology, 127:144–148, 2002.
- [27] J. Schäfer, S. Dippel und D. E. Wolf: *Force schemes in simulations of granular materials*. Journal de Physice I, 6:5–20, 1996.
- [28] L. E. Silbert, D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine und S. J. Plimpton: *Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology*. Physical Review E, 64:051302, 2001.
- [29] J. H. Spurk und N. Aksel: *Strömungslehre Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer, 2010.
- [30] H. A. Zhang, H. P. and Makse: *Jamming transition in emulsions and granular materials*. Physical Review E, 72:011301, 2005.
- [31] I. Zuriguel, A. Janda, A. I. Garcimartin, C. Lozano, R. Arevalo und D. Maza: *Silo clogging reduction by the presence of an obstacle*. Physical Review Letters, 107:278001, 2011.

11 Anhang

Anhang I - Inputskript LIGGGHTS

```

atom_style      granular
atom_modify    map array
communicate     single vel yes

boundary        f f p
newton          off

units          si
processors      1 1 6

read_data      initial.packing

group          free_particles type 1
group          textur_particles type 2

neighbor       0.0001 bin
neigh_modify   delay 0 exclude group textur_particles
               textur_particles

##### MATERIAL PROPERTIES #####

fix            m_kn all property/global kn peratomtypepair 2
               7.07e7 7.07e7 7.07e7 7.07e7
fix            m_kt all property/global kt peratomtypepair 2
               9.16e7 9.16e7 9.16e7 9.16e7
fix            m_gamman all property/global gamman peratomtypepair
               2 6.64e8 3.82e8 3.82e8 3.82e8
fix            m_gammat all property/global gammat peratomtypepair
               2 6.64e8 3.82e8 3.82e8 3.82e8
fix            m_friction_coefficient all property/global
               coefficientFriction peratomtypepair 2
               0.5 0.5 0.5 0.5

```

```

##### FORCE MODEL, GRAVITY, TIMESTEP #####

pair_style      gran/hertz/history/stiffness tangential_damping on
pair_coeff      * *

timestep        6e-7
fix             gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0

##### WALLS #####

fix            zcyl all wall/gran/hertz/history/stiffness
              primitive type 1 zcylinder 0.0015 0. 0.

##### CAD GEOMETRY, MASSFLOW COUNT #####

fix            cad1 all mesh/surface file twoDmesh.stl typeZum
fix            mc free_particles massflow/mesh mesh cad1
              vec_side 0. 0. -0.1 count multiple

##### FIX & THERMO #####

fix            integr free_particles nve/sphere
fix            freeze_walls textur_particles freeze

thermo_style    custom step atoms ke f_mc[2]
thermo          1
thermo_modify   lost ignore norm no

##### DUMP FILES #####

run 1
dump           Admp free_particles custom 10000
              post/dump.particles.* id type density x y z
              vx vy vz fx fy fz omegax omegay omegaz radius

run 2000000

```