

Vertieferbericht

**Numerische Simulation eines Wirbelschichtreaktors -  
Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit mit und ohne  
Stutzen auf das Strömungs- und Mischungsfeld**

Vorgelegt von:

Florian Maurer

Matrikelnummer: 1637045

Betreuer :

Dr. Matthias Hettel

Prof. Dr. Olaf Deutschmann



## **Erklärung**

Ich versichere hiermit wahrheitsgemäß, die Arbeit bis auf die dem Aufgabensteller bereits bekannten Hilfsmittel selbständig angefertigt, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen übernommen wurde.

Karlsruhe, den

---

(Florian Maurer)

## Inhalt

1	Einleitung.....	1
2	Theoretische Grundlagen.....	2
2.1	Wirbelschichtreaktoren.....	2
2.1.1	Rehdiagramm.....	3
2.1.2	Lockerungspunkt.....	4
2.1.3	Gas-Feststoff-Wirbelschichten.....	5
2.2	Numerische Simulationsmethoden.....	6
2.2.1	CFD.....	6
2.2.2	DEM.....	6
2.2.3	CFD-DEM-Kopplung.....	8
3	CFD-DEM-Simulation.....	9
3.1	Gittererstellung.....	9
3.2	Bestimmung der Betriebsparameter.....	9
3.3	Simulation.....	12
4	Ergebnisse und Diskussion.....	13
4.1	Einfluss des Stützens auf das Strömungsfeld.....	15
4.1.1	Fluidgeschwindigkeit.....	15
4.1.2	Partikelgeschwindigkeit.....	17
4.1.3	Leerraumvolumen.....	19
4.2	Einfluss der Geschwindigkeit auf das Strömungsfeld.....	22
4.2.1	Fluidgeschwindigkeit.....	22
4.2.1	Partikelgeschwindigkeit.....	23
4.3	Betrachtung des Mischungsfelds.....	24
5	Fazit und Ausblick.....	26
	Literaturverzeichnis.....	i
	Danksagung.....	ii

## Abkürzungsverzeichnis

### Allgemeine Abkürzungen

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>DEM</i>	Discrete Element Method
<i>FCC</i>	Fluid Catalytic Cracking
<i>LAMMPS</i>	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
<i>LIGGGHTS</i>	LAMMPS Improved for General Granular and Granular Geat Transfer Simulations

### Physikalische Größen

<i>a</i>	Verhältnis von Oberfläche zu Volumen	$\frac{1}{m}$
<i>A</i>	Querschnitt	$m^2$
<i>d</i>	Durchmesser	$m$
<i>g</i>	Erdbeschleunigung	$\frac{m}{s^2}$
<i>H</i>	Höhe	$m$
<i>u</i>	Geschwindigkeit	$\frac{m}{s}$
<i>V</i>	Volumen	$m^3$
$\Delta p$	Druckverlust	$Pa$
$\varepsilon$	Lückenvolumen	<i>a. u.</i>
$\eta$	Dynamische Viskosität	$Pa \cdot s$

$\nu$	Kinematische Viskosität	$\frac{m^2}{s}$
$\rho$	Dichte	$\frac{kg}{m^3}$

**Dimensionslose Kennzahlen**

$Fr$	Froude-Zahl
$Fr^*$	Modifizierte Froude-Zahl
$Re$	Reynolds-Zahl
$Ar$	Archimedes-Zahl
$\Omega$	Omega-Zahl

### 1 Einleitung

Katalysatoren spielen in der chemischen Industrie und der Schadstoffminimierung eine essenzielle Rolle. Die Entwicklung und Untersuchung neuer Katalysatoren ist häufig mit jahrelanger Forschung und zahlreichen, teils aufwändigen Versuchen verbunden. Neben physischen Experimenten erlangen Simulationen eine steigende Beachtung. Durch den stetigen Anstieg des Rechenpotentials von Prozessoren, können größere oder detailliertere Systeme betrachtet werden. So sind Berechnungen mit komplexen Geometrien und Millionen von Partikeln heutzutage problemlos möglich, während sie noch vor 20 Jahren als undenkbar galten. Dieser steigende Detailgrad ermöglicht Einblicke in das Reaktionsgeschehen, die für ein tieferes Verständnis der Mikro- und Makrokinetik unumgänglich sind, sich aber experimentell schwierig bis gar nicht erfassen lassen. Gerade bei einem stochastischen Prozess wie einer Wirbelschicht mit Mischvorgängen durch aufsteigende Blasen trifft dies zu. Zwar gibt es Kennzahlen, durch welche der Betriebspunkt von Wirbelschichtreaktoren festgelegt werden kann, Aussagen über Mischungs- und Strömungsfelder können durch sie aber nicht getroffen werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, diese Mischungs- und Strömungsfelder eines Wirbelschichtreaktors ohne chemische Umsetzung mit Hilfe einer Simulation zu untersuchen. Der Reaktor dient zur Oxidation von Butan zu Butadien. Der dabei eingesetzte Pt-Sn-Katalysator liegt als feines Granulat vor und besteht aus ca. 5,5 Millionen Partikeln. Da der Zeitraum dieser Vertiefearbeit keine Berechnung mit dieser Anzahl an Teilchen zulässt, wurde die Menge auf etwa 86.000 reduziert. Neben der Simulation ist das Anpassen der Parameter auf den modifizierten Ansatz mit weniger Partikeln Teil der Aufgabe.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Wirbelschichtreaktoren

Wirbelschichtreaktoren werden in der chemischen Industrie vielfältig eingesetzt, da sie eine intensive Vermischung eines Gases oder Flüssigkeit mit einem Feststoff erlauben. Gegenüber Festbettreaktoren haben sie den Vorteil des geringeren Druckabfalls und besserer Temperatursteuerung. Typische Anwendungsfälle sind Oxidationsprozesse (Totaloxidation in Kohlekraftwerken, Acrylnitrilsynthese) oder Cracking (FCC).

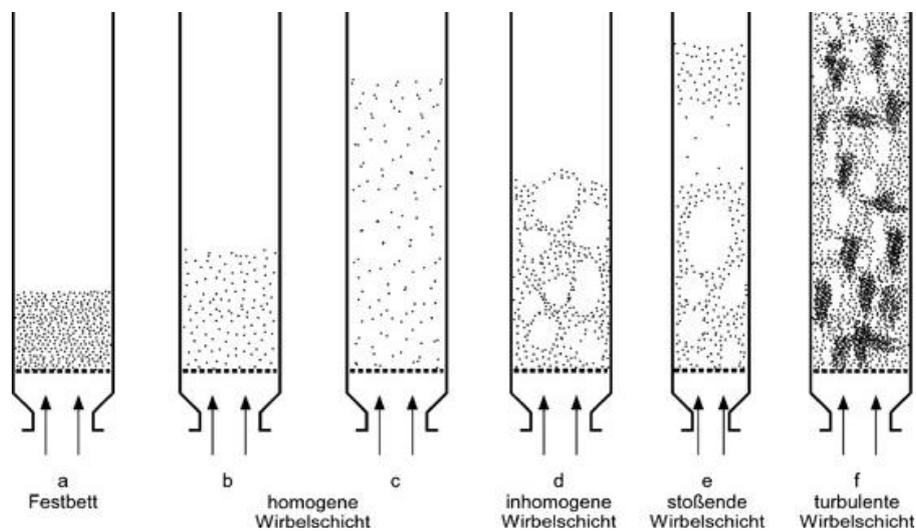


Abbildung 1, a-f: Strömungszustände in Wirbelschichten<sup>[1]</sup>

Abhängig von der Gasgeschwindigkeit und dem Rohrdurchmesser bilden sich verschiedene Strömungszustände aus. Bis zu einem gewissen Volumenstrom, der sogenannten Lockerungsgeschwindigkeit, befinden sich die Partikel in einer Schüttschicht (Abbildung 1, a). Beim Überschreiten dieser Lockerungsgeschwindigkeit bildet sich, falls eine Flüssigkeit als Fluid verwendet wird, eine homogene Wirbelschicht aus (Abbildung 1, b und c). Im Falle eines Gases entsteht in der Regel eine inhomogene Wirbelschicht (Abbildung 1, d). Diese ist durch starke Blasenbildung geprägt. Bei geringem Reaktorquerschnitt können Blasen diesen komplett einnehmen und führen zu einer stoßenden Wirbelschicht (Abbildung 1, e). Bei weiterer Steigerung des Gasflusses wird eine sogenannte turbulente Wirbelschicht ausgebildet (Abbildung 1, f), welche sich durch Feststoffaustrag auszeichnet. Durch Rückführung dieser Partikel entsteht eine zirkulierende Wirbelschicht.<sup>[1]</sup>

### 2.1.1 Rehdigramm

Das Rehdigramm wird zur Auslegung von Wirbelschichtreaktoren genutzt. Es zeigt anhand von dimensionslosen Kennzahlen die stabilen Betriebspunkte und Prozessparameter einer Wirbelschicht. Die Darstellung des Reh-Diagramms erfolgt durch das Auftragen einer modifizierten Froude-Zahl  $Fr^*$  gegen die Partikelreynoldszahl  $Re$  oder der Archimedeszahl  $Ar$  gegen  $\Omega$ .

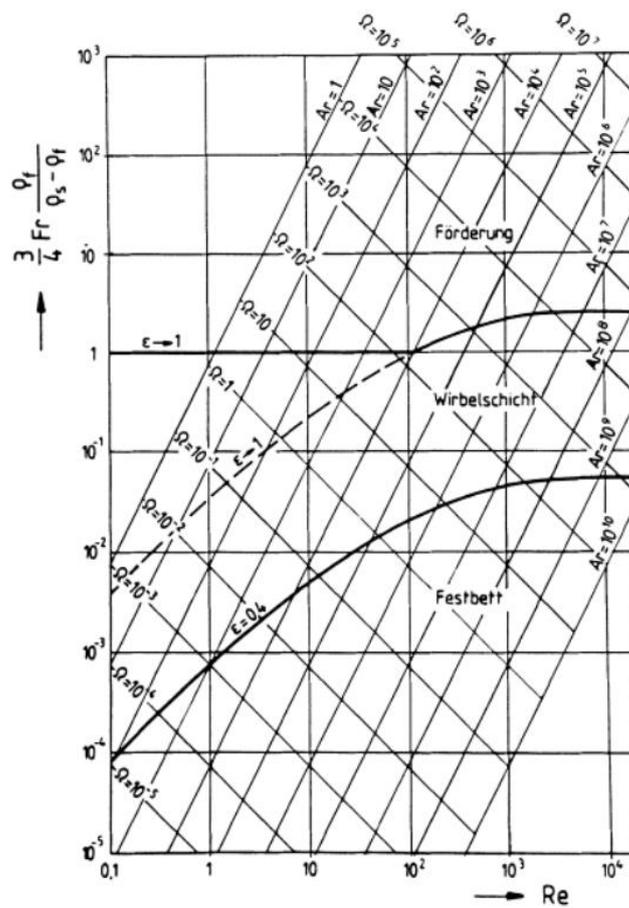


Abbildung 2: Rehdigramm<sup>[2]</sup>

$$Fr^* = \frac{3}{4} Fr \frac{\rho_g}{\rho_s - \rho_g} \quad (2.1)$$

$$Fr = \frac{u^2}{g \cdot d_p} = \frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Schwerkraft}} \quad (2.2)$$

$$Re = \frac{u \cdot d_p}{\nu} = \frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Reibungskraft}} \quad (2.3)$$

$$Ar = \frac{d_p^3 \cdot g \cdot (\rho_s - \rho_g)}{v^2 \cdot \rho_g} = \frac{\text{Auftriebskraft}}{\text{Trägheitskraft}} \quad (2.4)$$

$$\Omega = \frac{u^3 \cdot \rho_g}{v \cdot g \cdot (\rho_s - \rho_g)} \quad (2.5)$$

Mit:  $Fr$ : Froude-Zahl,  $\rho_g$ : Dichte des Fluids,  $\rho_s$ : Dichte des Feststoffes,  $u$ : Geschwindigkeit des Gasstroms,  $d_p$ : Durchmesser der Partikel,  $g$ : Erdanziehung,  $v$ : kinematische Viskosität,  $\varepsilon$ : Lückenvolumen

Wie in Abbildung 1 zu erkennen, bewegt sich eine Wirbelschicht zwischen den Grenzfällen des Feststoffaustrags und der Schüttschicht. Die Grenzen zwischen diesen Fällen verlaufen in Realität nicht strikt, da es aufgrund von Restfeuchte oder kleinen Reaktordurchmessern zu Instabilitäten kommen kann, die die Ausbildung der Wirbelschicht entgegenwirken.<sup>[2,3]</sup>

### 2.1.2 Lockerungspunkt

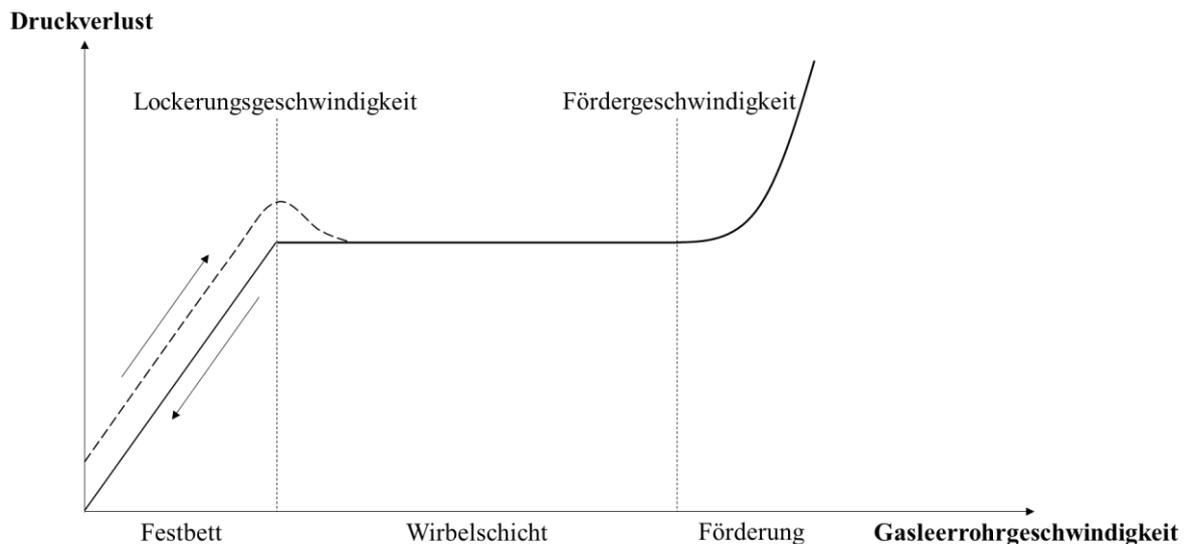
Der Übergang zwischen dem ruhenden Festbett und der Wirbelschicht wird durch den Lockerungspunkt beschrieben. Er beschreibt die minimale Gasgeschwindigkeit, die zum Ausprägen einer Wirbelschicht notwendig ist. Experimentell lässt sich die Lockerungsgeschwindigkeit aus einem Druck-Geschwindigkeitsdiagramm oder theoretisch mithilfe der Ergun-Gleichung (2.6) für Festbetten und dem Strömungsdruckverlust (2.7) bestimmen.

$$\frac{\Delta p}{H} = 4,17 \cdot a_p^2 \cdot \eta_g \cdot v_L \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + 0,29 a_p \cdot \rho_g \cdot v_L^2 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.6)$$

$$\Delta p_{WS} = V_S \cdot g \frac{(\rho_s - \rho_g)}{A} \quad (2.7)$$

Mit:  $\Delta p$ : Druckverlust,  $H$ : Betthöhe,  $a_p$ : Verhältnis Partikeloberfläche zu -volumen,  $\eta_g$ : Dynamische Viskosität des Fluids,  $v_L$ : Lockerungsgeschwindigkeit,  $\varepsilon$ : Lückenvolumen,  $\rho_g$ : Dichte des Fluids,  $V_S$ : Volumen des Feststoffes,  $g$ : Erdanziehung,  $\rho_s$ : Dichte des Feststoffes,  $A$ : Querschnitt des Festbettes

In Abbildung 3 ist der Druckverlust gegen die Gasleerrohrgeschwindigkeit aufgetragen. Die Ergun-Gleichung beschreibt den linearen Druckanstieg im Festbett bei steigender Flussgeschwindigkeit, während der Strömungsdruckverlust den geschwindigkeitsunabhängigen Druckabfall in einer Wirbelschicht wiedergibt. Die Lockerungsgeschwindigkeit fällt per Definition mit dem Schnittpunkt beider Geraden zusammen und kann demnach durch einfache mathematische Umformungen erhalten werden.

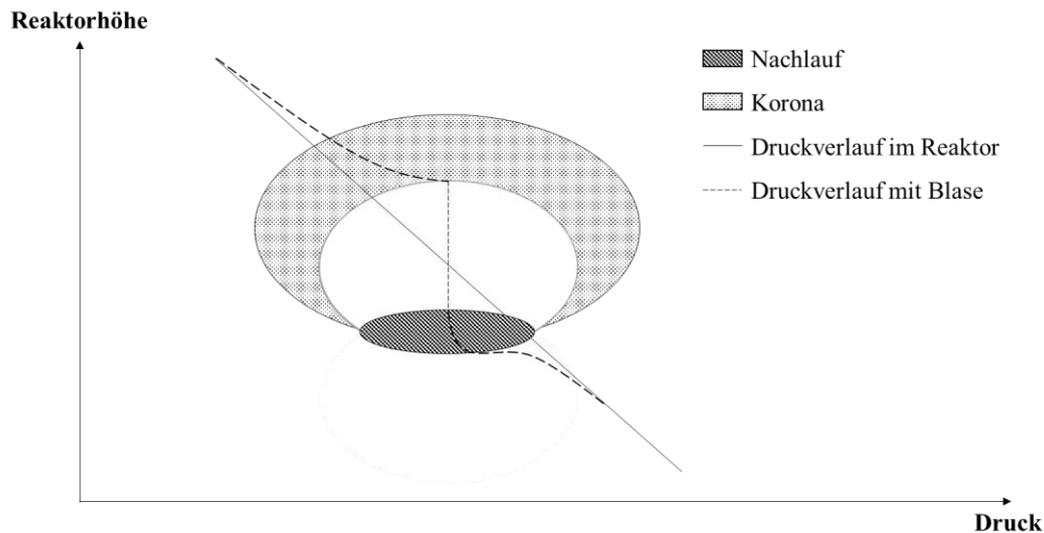


**Abbildung 3:** Auftragung des Druckverlusts gegen die Gasrohrgeschwindigkeit in einem Wirbelschichtreaktor

Bei der experimentellen Bestimmung ist darauf zu achten, dass durch die Ursprungsverfestigung der maximale Druckverlust über dem Druckverlust in der Wirbelschicht liegen kann (s. Abbildung 3). Der Lockerungspunkt wird deshalb nicht bei steigender, sondern sinkender Gasgeschwindigkeit bestimmt. Dennoch ist in der Regel keine scharfe Kante zu beobachten, da sich aufgrund unterschiedlicher Partikelgrößen in einer Probe verschiedene Lockerungsgeschwindigkeiten überlagern und den Schnittpunkt verbreitern.<sup>[1,4]</sup>

### 2.1.3 Gas-Feststoff-Wirbelschichten

Wird als Fluid ein Gas eingesetzt, so bildet sich eine inhomogene Wirbelschicht aus. Nur ein kleiner Teil des Gases tritt in die Suspensionsphase ein. Der Großteil durchläuft den Reaktor in Blasen, welche für die Durchmischung eine wichtige Rolle spielen. Das Druckprofil in und um eine Blase in einem Wirbelschichtreaktor (Abbildung 4) erklärt sowohl ihre Form als auch ihr Vermögen, Partikel mitzuschleppen. Durch den Druckunterschied zwischen Blasenboden und der Umgebung der Blase entsteht ein Unterdruck, welcher Partikel anzieht. Während des Aufstiegs findet an dieser Position ein reger Teilchenaustausch statt, da der Nachlauf nach Sättigung immer wieder abgetrennt wird. Zieht eine Blase auf diese Weise eine andere an, kommt es zur Koaleszenz und Blasenwachstum. Gerade für katalysierte Prozesse ist die mit Blasen einhergehende Bypasswirkung, wodurch ein Teil des Gases nicht in den Kontakt mit den Katalysatorpartikeln kommt, problematisch. Grund hierfür sind Zirkulationen innerhalb der Blasen, welche eine Mischung mit der Umgebung unterbinden.



**Abbildung 4:** *Druckverlauf in der Umgebung und in einer Blase*

Die Feststoffeigenschaften werden nach Geldart in 4 Gruppen unterteilt, die sich in Dichte, Größe und Haftvermögen der Partikel unterscheiden. Gruppe A umfasst Partikel mit einem Durchmesser von ca. 100  $\mu\text{m}$  und geringer Dichte und Kohäsion. Ihre Wirbelschicht zeichnet sich durch kleine, schnell aufsteigende Blasen aus. Gruppe B enthält Partikel im Bereich bis zu 500  $\mu\text{m}$  und mittlerer Dichte. Die Blasen können stark anwachsen durch Koaleszenz. Die feinsten Pulver mit ausgeprägter Kohäsion finden sich in Gruppe C wieder. Die ausgeprägte Neigung zur Kanalbildung anstelle der Blasenbildung ist eine charakteristische Eigenschaft dieser Teilchenklasse. Zur Gruppe D gehören äußerst große und dichte Materialien. Die Steiggeschwindigkeit der Blasen ist langsamer als die Geschwindigkeit des Gases in der Suspensionsphase, weshalb Gasteilchen in den Blasen während des Aufstiegs stetig ausgetauscht werden. Die in der Simulation verwendeten Partikel liegen mit 800  $\mu\text{m}$  im Übergangsbereich der Gruppen B und D<sup>[1,5]</sup>

## 2.2 Numerische Simulationsmethoden

### 2.2.1 CFD

Für eine ausführliche Abhandlung des Themas CFD wird an dieser Stelle auf die Vertieferarbeit von P. Lott [14] verwiesen.

### 2.2.2 DEM

Bei der „Diskrete Elemente Methode“ (DEM) handelt es sich um ein numerisches Verfahren zur Simulation einer großen Anzahl an Teilchen. Sie besitzt heutzutage ein breites Anwen-

dungsfeld, das von Bergbau bis hin zur Pharmaindustrie reicht. Es behandelt einzelne, diskrete Objekte, die über ihre Kontaktflächen interagieren. Zu Beginn müssen die Startbedingungen der Teilchen wie Position oder Anfangsgeschwindigkeit festgelegt werden. Im nächsten Schritt wird für jedes Partikel ein Kraftfeld berechnet. Dieses ergibt sich aus der Summe aller relevanten Kräfte. Mithilfe geeigneter Algorithmen können schließlich die Newtonschen Bewegungsgleichungen gelöst und die neue Position und Geschwindigkeit der Objekte bestimmt werden. Für eine vollständige Lösung müssten sämtliche Wechselwirkungen der Teilchen untereinander miteinbezogen werden. Die Berücksichtigung von Fernwirkungstermen wie Gravitation oder elektrostatische Wechselwirkung bringen nur geringe Vorteile bezüglich der Genauigkeit, verlangen aber eine stark erhöhte Rechenleistung. Aus diesem Grund werden in gewissen Zeitintervallen die nächsten Nachbarn eines Partikels festgelegt und nur diese berücksichtigt. Der Kontakt zweier Partikel kann entweder über das Hard-Sphere-Modell oder über das Soft-Sphere-Modell stattfinden. Die Güte der Ansätze hängt stark von der Kontaktzeit oder Geschwindigkeit der Partikel ab. Zahlreiche Modelle versuchen diese Einschränkungen durch eine Parallel- und Reihenschaltung verschiedener, imaginärer Dämpfer und Federn zu umgehen (Abbildung 5).<sup>[6-8]</sup>

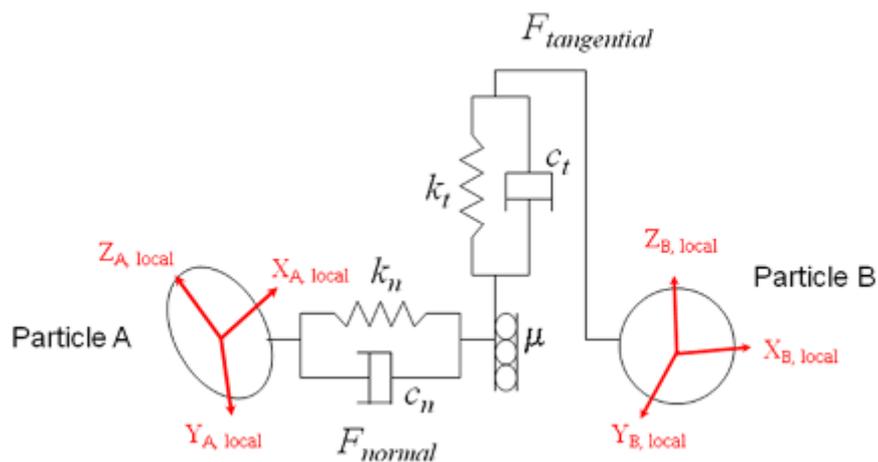


Abbildung 5: Vereinfachtes Hertz-Mindlin-Modell<sup>[6]</sup>

Zur Modellierung der Katalysatorpartikel im Rahmen dieser Vertiefenarbeit wird der Open-Source-Code „LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations“ (LIGGGHTS) verwendet. LIGGGHTS geht aus dem Molekulardynamiksimulator LAMMPS hervor und erweitert diesen mit dem Ziel, industrielle Anwendungsbereiche zu bedienen.

### 2.2.3 CFD-DEM-Kopplung

Um ein System wie einen Wirbelschichtreaktor simulieren zu können, bedarf es einer Methode, welche die Strömung des Fluids sowie die Bewegung der Partikel beschreiben kann. Durch eine CFD-DEM-Kopplung können zwischen der CFD- und der DEM-Rechnung Informationen ausgetauscht werden. Eine zentrale Rolle spielt hierbei die „void fraction“ (dt. „Leerraumvolumen“). Sie gibt den Teil einer Gitterzelle an, welcher nicht von einem Partikel eingenommen wird und korrigiert das Zellvolumen, um daraus entstehende Fehler beim Lösen der Navier-Stokes-Gleichungen zu verhindern.<sup>[7,9]</sup>

Der Code „CFDEM-coupling“ bildet die Schnittstelle zwischen OpenFoam und LIGGGHTS und nutzt das Euler-Lagrange-Verfahren zur Kopplung.

### 3 CFD-DEM-Simulation

Um ein komplexes System wie einen Wirbelschichtreaktor zu simulieren sind mehrere vorbereitende Schritte notwendig. Im Gitter sind neben Volumenelementen auch Informationen über die Grenzen des Bilanzraumes festgelegt. Die Partikel werden über eine Simulation in den Reaktor eingefüllt. Zusammen mit geeigneten Startvorgaben kann schließlich eine Berechnung der Strömung und Partikelbewegung durchgeführt und das Ergebnis mit einem Post-Processing-Programm visualisiert werden.

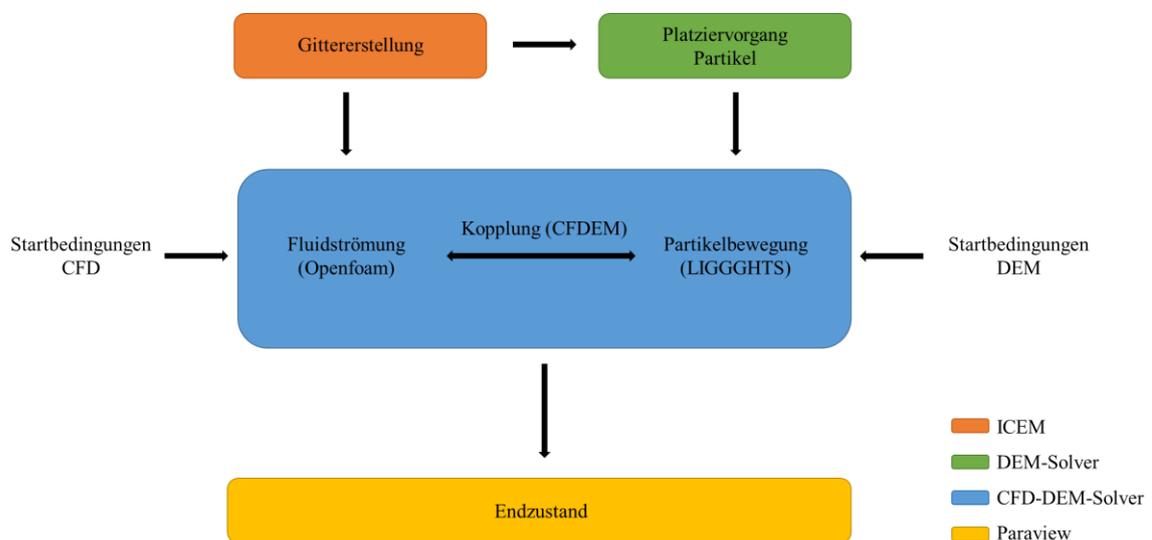


Abbildung 6: Schematischer Ablauf einer Simulation und verwendete Programme

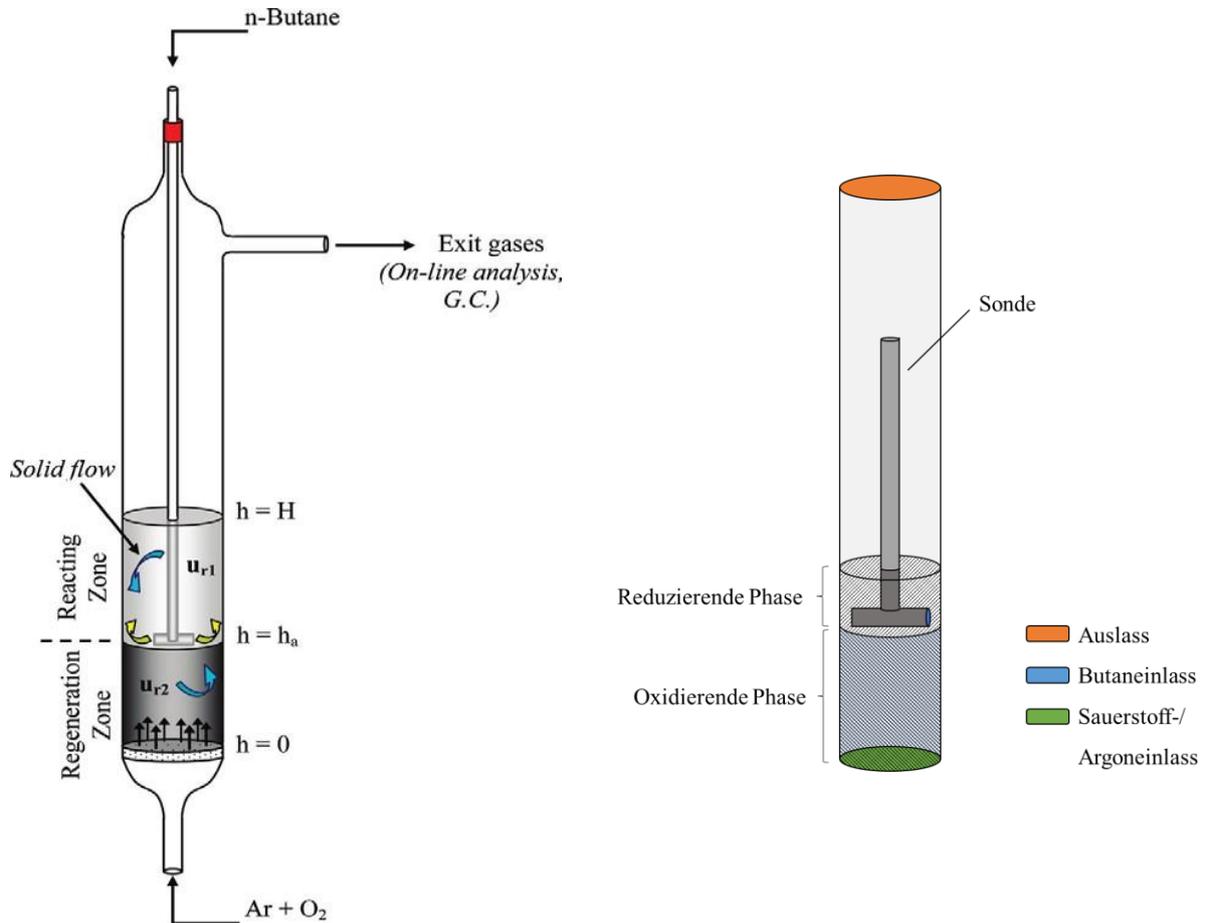
#### 3.1 Gittererstellung

Die Erstellung des Rechengitters erfolgte mit Hilfe des Programms „ANSYS ICEM CFD“ und bestand aus drei Schritten. Zuerst wurde die Geometrie des Reaktors durch Punkte, Linien und Flächen nachgebildet. Anschließend wurden die Flächen definiert und schließlich das Gitter berechnet. Das Vorgehen wird genauer in der Vertieferarbeit von P. Lott [14] beschrieben.

#### 3.2 Bestimmung der Betriebsparameter

Das dieser Simulation zugrunde liegende Experiment ist eine Butanoxidation an einem Platin-Zinn-Katalysator. Der eingesetzte Reaktor wurde von J. Rischard im Rahmen einer Diplom-

arbeit entwickelt und untersucht. Für die Berechnung wurde nicht der gesamte Aufbau vernetzt, sondern nur der für die Reaktion relevante Teil über der Fritte (Abbildung 7).



**Abbildung 7:** Schematischer Aufbau des experimentell untersuchten (links)<sup>[10]</sup> und des simulierten (rechts) Reaktors.

Ein weiterer Unterschied liegt in Partikelgröße und -anzahl, welche gegenüber dem Experiment deutlich verändert wurde, um die nötige Rechenleistung zu senken. Die Anzahl wurde von ca. 5,5 Millionen Teilchen auf 86 Tausend gesenkt, der Durchmesser von 160  $\mu\text{m}$  bis 250  $\mu\text{m}$  auf 0,8 mm vergrößert. Die Schütthöhe lag somit in beiden Fällen bei etwa 6,5 cm.

Der Partikelradius hat direkten Einfluss auf das Verhalten der Wirbelschicht. Wie in 2.1.1 dargelegt, kann eine Wirbelschicht mithilfe dimensionsloser Kennzahlen charakterisiert werden. Wirbelschichten, welche in allen vier Kennzahlen übereinstimmen und deren Partikel in der gleichen Gruppe nach Geldart liegen, sollten sich also bezüglich ihrer Bewegung gleich verhalten. Um den in der Modellierung verwendeten Durchmesser zu kompensieren und die Kennzahlen gleichzuhalten, wurden verschiedene Ansätze getestet. Bei diesen wurden jeweils unterschiedliche Kombinationen an Größen verändert.

Physikalische Größe		Experiment	Modell A	Modell B	Modell C
Durchmesser Partikel	[mm]	0,16	0,8	0,8	0,8
Anzahl der Partikel	[a.u.]	$5,5 \cdot 10^6$	$8,6 \cdot 10^4$	$8,6 \cdot 10^4$	$8,6 \cdot 10^4$
Gasgeschwindigkeit	$\left[\frac{\text{m}}{\text{s}}\right]$	0,023	0,0046	0,023	0,023
Dichte Partikel	$\left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right]$	2013	16,10	2013	402,6
Dichte Gas*	$\left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right]$	0,577	0,577	0,577	0,577
Erdbeschleunigung	$\left[\frac{\text{m}}{\text{s}^2}\right]$	9,81	9,81	1,962	9,81
kin. Viskosität**	$\left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right]$	$7,91 \cdot 10^{-5}$	$7,91 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-4}$	$3,96 \cdot 10^{-4}$
Masse eines Partikels	[kg]	$3,45 \cdot 10^{-8}$	$3,58 \cdot 10^{-8}$	$4,32 \cdot 10^{-6}$	$8,63 \cdot 10^{-7}$

**Tabelle 1:** Vergleich der experimentellen Größen mit für die Simulation modifizierte Ansätze; \* berechnet aus idealem Gasgesetz,  $T=570^\circ\text{C}$ ; \*\* aus VDI-Wärmeatlas,  $T=570^\circ\text{C}$

Alle Kombinationen führen zu denselben Kennzahlen. Der resultierende Betriebspunkt liegt an der Grenze zur Schüttschicht. Für die Untersuchung des Strömungs- und Mischungsfeldes wäre es am günstigsten, keine Veränderung an der Geschwindigkeit und Viskosität vorzunehmen. Da dies aber mit keinem der Ansätze vereinbar ist, wurde Modell C gewählt, um den Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit leichter auf das Experiment übertragen zu können. In diesem Ansatz wurde die Viskosität erhöht und die Dichte der Partikel verringert.

Die Ermittlung der experimentellen Daten stellte neben der Umrechnung der Größen auf die Bedingungen der Simulation einen wichtigen Schritt dar. Während sich viele Werte aus Tabellenwerken oder dem experimentellen Aufbau ergaben, konnten manche Daten nicht direkt übertragen werden. Der Durchmesser der Katalysatorpartikel war im Realfall eine Siebfraktion von  $160 \mu\text{m}$  bis  $250 \mu\text{m}$ . Da in der Simulation keine Verteilung angegeben werden konnte, wurden zuerst Rechnungen ausgehend von  $200 \mu\text{m}$  durchgeführt, welche aber qualitativ keine Wirbelschicht ausbildeten. Mit einem Partikeldurchmesser von  $160 \mu\text{m}$  wurde ein ähnliches

Verhalten wie im Experiment erreicht. Dies entspricht den Erwartungen, da kleine Teilchen nach Geldart eher zur Blasenbildung neigen.

Kennzahlen	Wert [a. u.]
$Fr^* \sim \frac{1}{(\rho_s - \rho_g) \cdot d_P}$	$7,24 \cdot 10^{-5}$
$Re \sim \frac{d_P}{\nu}$	$2,68 \cdot 10^{-2}$
$Ar \sim \frac{d_P^3 \cdot (\rho_s - \rho_g)}{\nu^2}$	22.4
$\Omega \sim \frac{1}{\nu \cdot (\rho_s - \rho_g)}$	$4,49 \cdot 10^{-6}$

**Tabelle 2:** Kennzahlen der Wirbelschicht und ihre Abhängigkeiten von den abgeänderten Größen

### 3.3 Simulation

Vor dem Beginn der eigentlichen CFD-DEM-Rechnung muss der Anfangszustand der Partikel festgelegt werden. Die Teilchen wurden am oberen Ende des Reaktors eingegeben und ordneten sich am unteren Ende des Reaktors zu einer Schüttschicht an. Ausgehend von diesem Zustand und den oben genannten Bedingungen wurde eine CFD-DEM-Simulation gestartet. Nach einer Zeit von 35 s, etwa die fünffache hydrodynamische Verweilzeit des Reaktors, wurde schließlich über einen Zeitraum von weiteren 35 s gemittelt. Die verwendeten numerischen Parameter sind in Tabelle 3 aufgelistet.

Numerische Parameter	DEM	CFD
Integrationszeitschritt [ms]	0,01	1
Kopplungsintervall	100	1
Kollisionsmodell	Hertz	
Anzahl Partikel/Zellen	$\sim 8,6 \cdot 10^4$	$\sim 8,0 \cdot 10^4$
Solver		DPMFoam

**Tabelle 3:** Übersicht über die verwendeten numerischen Parameter

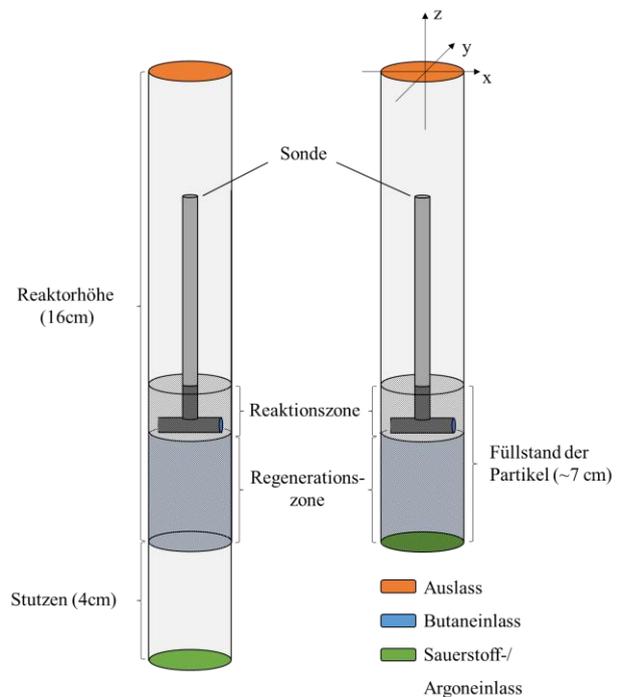
## 4 Ergebnisse und Diskussion

Im Rahmen dieser Arbeit wurde neben dem Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit auch eine veränderte Geometrie untersucht. Letztere zeichnet sich durch einen Stutzen vor der Fritte aus (Abbildung 8). Durch diese Anordnung kann das Fluid ein Strömungsprofil ausbilden, bevor es auf die Partikelschicht trifft. Im Fall ohne Stutzen wird das Gas homogen über die gesamte Einlassfläche in den Reaktor zugegeben. Das Gitter mit Stutzen bietet dem Fluid die Möglichkeit, ein Strömungsprofil vor dem Kontakt mit den Partikeln auszubilden.

Im zweiten Teil der Auswertung wird diskutiert, wie sich das Strömungs- und Mischungsfeld bei Erhöhung der Geschwindigkeit verhält.

Im Referenzfall wurde die Gasgeschwindigkeit des Experiments benutzt, während im Fall mit erhöhter Geschwindigkeit der Gasstrom am Butaneinlass und am Sauerstoffeinlass um 50 % vergrößert wurde (Tabelle 4).

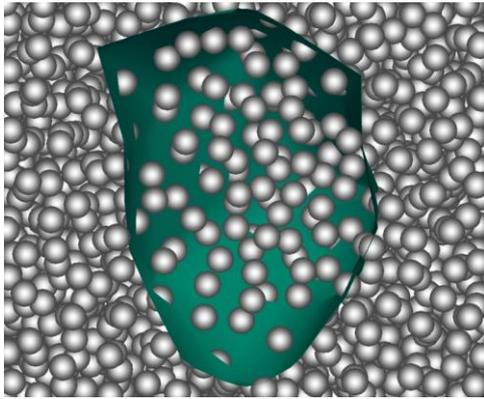
Im letzten Teil wurde das Mischungsfeld aller vier simulierten Fälle gegenübergestellt.



**Abbildung 8:** Vergleich des Gitters mit Stutzen (links) mit dem Gitter ohne Stutzen (rechts).

Fläche	Normale Geschwindigkeit	Höhere Geschwindigkeit
Einlass (Butan)	$0,0215 \frac{m}{s}$	$0,03225 \frac{m}{s}$
Einlass (Sauerstoff, Argon)	$0,065 \frac{m}{s}$	$0,0975 \frac{m}{s}$
Auslass	$0,023 \frac{m}{s}$	$0,0345 \frac{m}{s}$

**Tabelle 4:** Übersicht über die Geschwindigkeiten des Referenzfalls und des Falls mit erhöhter Geschwindigkeit.



**Abbildung 9:** Beispiel einer Isofläche (grün) mit einer voidfraction von 0,4; Partikel sind in grau dargestellt.

Die Auswertung erfolgte, wie zuvor bereits erwähnt, durch Mittelung über einen gewissen Zeitraum. Größen, die im Folgenden näher betrachtet werden, sind die Erwartungswerte („Mean“) und Varianzen („Prime2Mean“) der Fluidgeschwindigkeit  $U$ , Partikelgeschwindigkeit  $U_s$  und Leerraumvolumen voidfraction. Der Erwartungswert entspricht dem ersten Moment

(4.1), die Varianz dem zweiten Moment (4.2).

$$\text{Mean: } \bar{E} = \int_0^{\infty} E \cdot \rho(t) dt \quad (4.1)$$

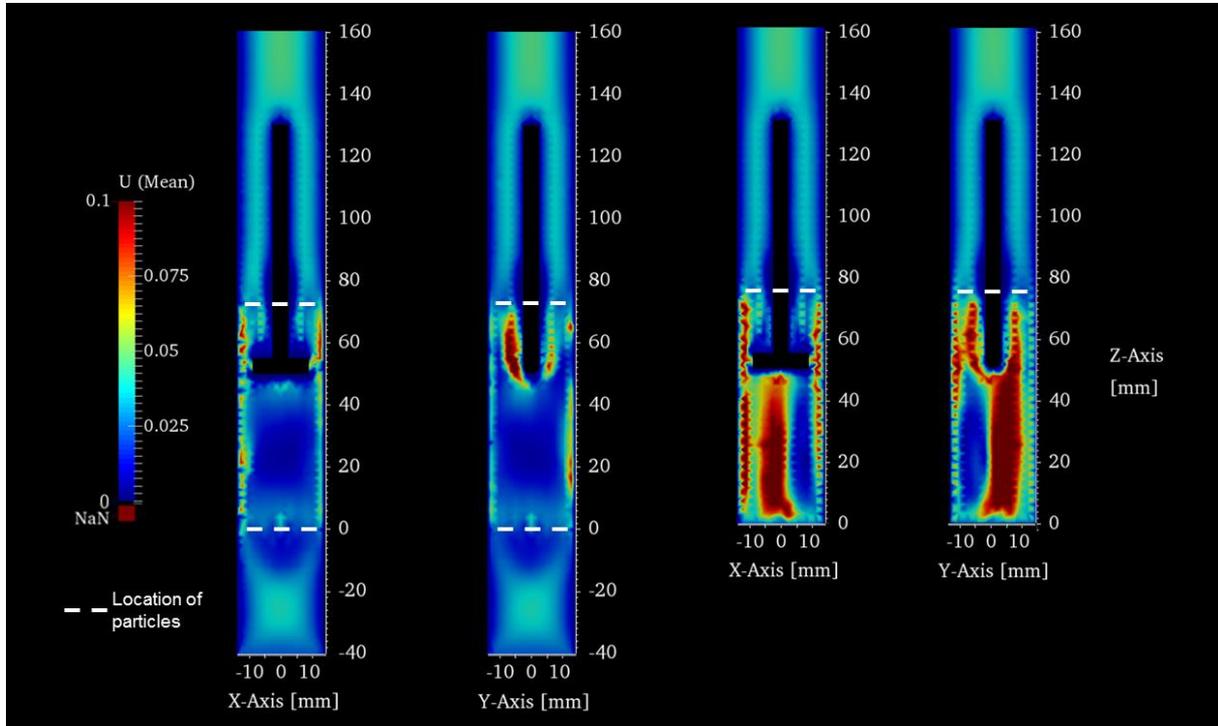
$$\text{Prime2Mean: } \sigma^2 = \int_0^{\infty} (E - \bar{E})^2 \cdot \rho(t) dt \quad (4.2)$$

Mit:  $E$ : Wert;  $\bar{E}$ : Erwartungswert von  $E$ ;  $\rho(t)$ : Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion;  $\sigma$ : Standardabweichung

Bei den Geschwindigkeiten des Gases bzw. der Partikel handelt es sich um den Betrag der Vektoren. Das Leerraumvolumen gibt das Volumen des Fluids zum Volumen einer Zelle wieder und wird der Übersicht halber zusätzlich als Isofläche angegeben (Abbildung 9). Zur anschaulichen Darstellung wird der Reaktor in der Mitte entlang der x- bzw. y-Achse geschnitten.

## 4.1 Einfluss des Stutzens auf das Strömungsfeld

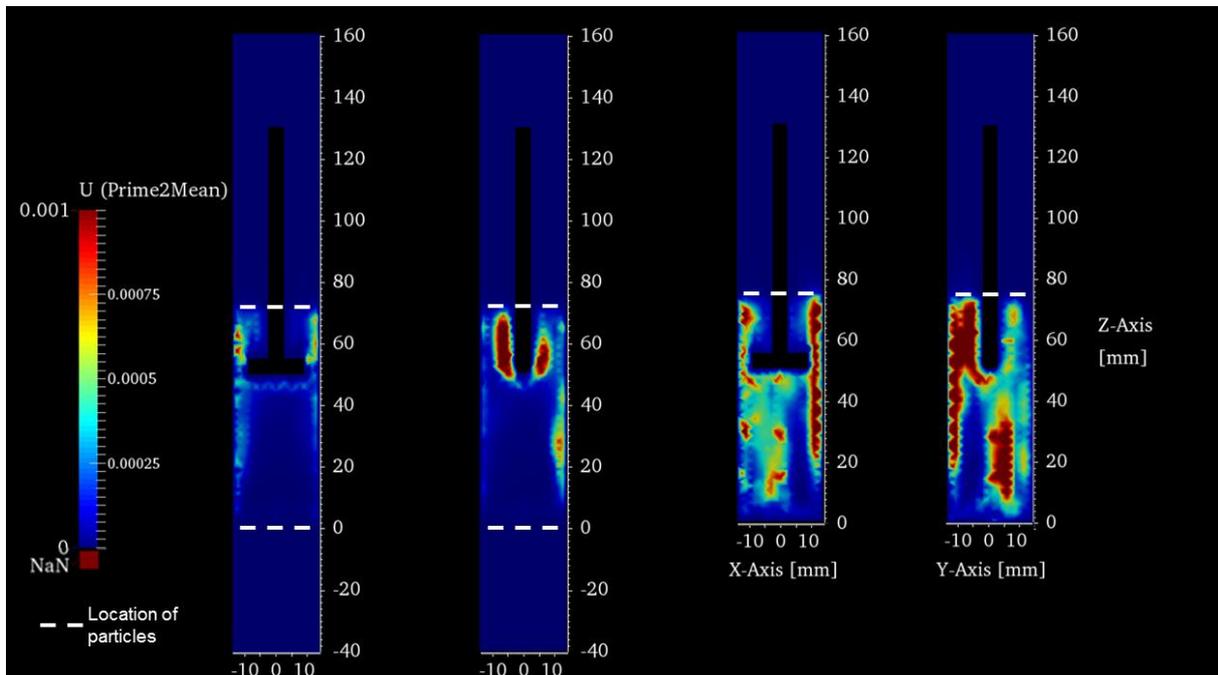
### 4.1.1 Fluidgeschwindigkeit



**Abbildung 10:** Erwartungswert der Fluidgeschwindigkeit. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

Bei der Betrachtung der mittleren Gasgeschwindigkeitswerte der Gitter mit und ohne Stützen (Abbildung 10) fällt auf, dass sich im Fall mit Verlängerung unter- und oberhalb des Bereichs mit Partikel ein laminares Strömungsprofil ausbildet. Die Geschwindigkeit geht an den Rändern gegen null, während sich in der Mitte das Maximum ausbildet. Im Bereich der Partikel zeigt sich ein anderes Bild. Die Gasgeschwindigkeit ist am Reaktorrand erhöht, im Zentrum stark verringert, was auf eine Randgängigkeit hinweist.

Im Fall ohne zusätzlichen Stützen ist die Geschwindigkeit in der Wirbelschicht asymmetrisch. In der Mitte und am Rand sind Bereiche erhöhter Fluidströmung zu identifiziert.



**Abbildung 11:** Varianz der Fluidgeschwindigkeit. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

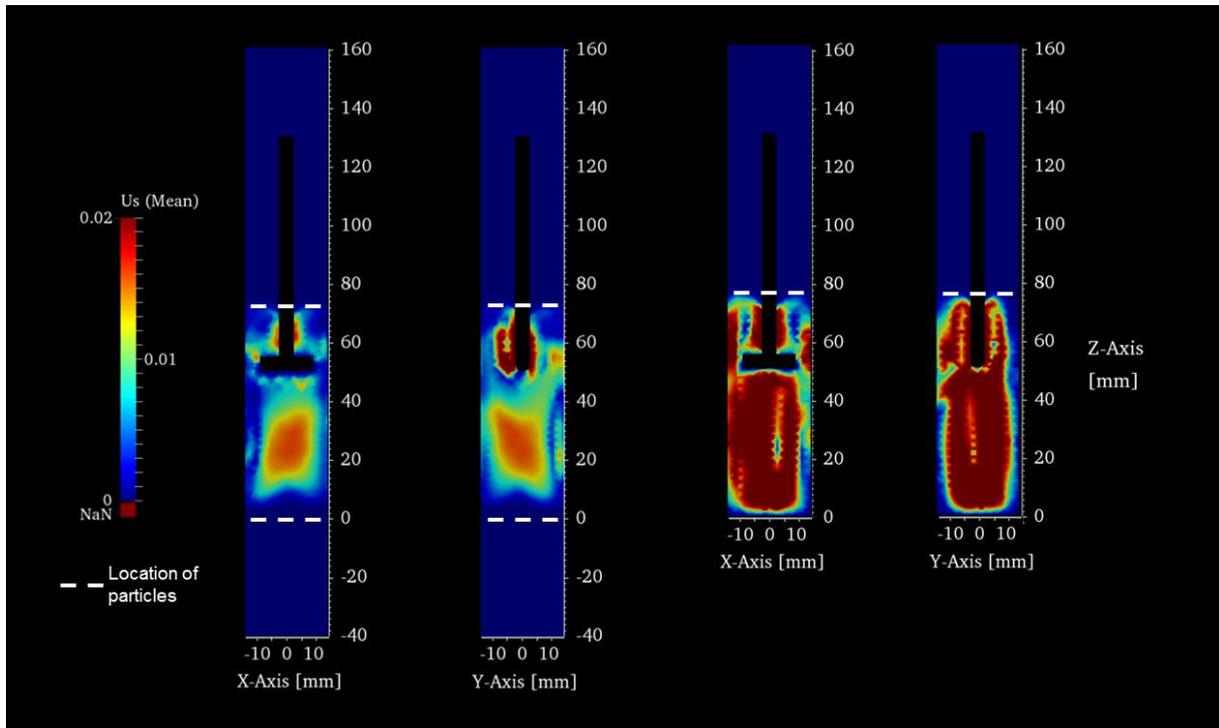
Die Varianz der Fluidgeschwindigkeit (Abbildung 11) gibt Aufschluss über Bereiche mit starken Strömungs-Fluktuationen im Reaktor. In Regionen ohne Partikel sind keine Schwankungen vorhanden, was die Ausbildung eines stationäres Zustandes zeigt. Im Gegensatz hierzu gibt es größere Veränderungen in der Wirbelschicht.

Im Rechengitter mit Verlängerung zeigt sich eine relativ symmetrische Verteilung der Varianz. Der Schnitt entlang der X-Achse zeigt eine erhöhte Varianz an den Rändern, während der Blick auf die Y-Achse starke Schwankungen im Bereich der Sonde offenbart.

Ohne Stützen gibt es starke Schwankungen über den gesamten Aufenthaltsraum der Partikel. Auch hier zeigt sich ein deutlich inhomogeneres Bild als im Fall mit Stützen.

In beiden Anordnungen treten in den gleichen örtlichen Zonen sowohl eine hohe Varianz als auch großer Erwartungswert der Geschwindigkeit auf.

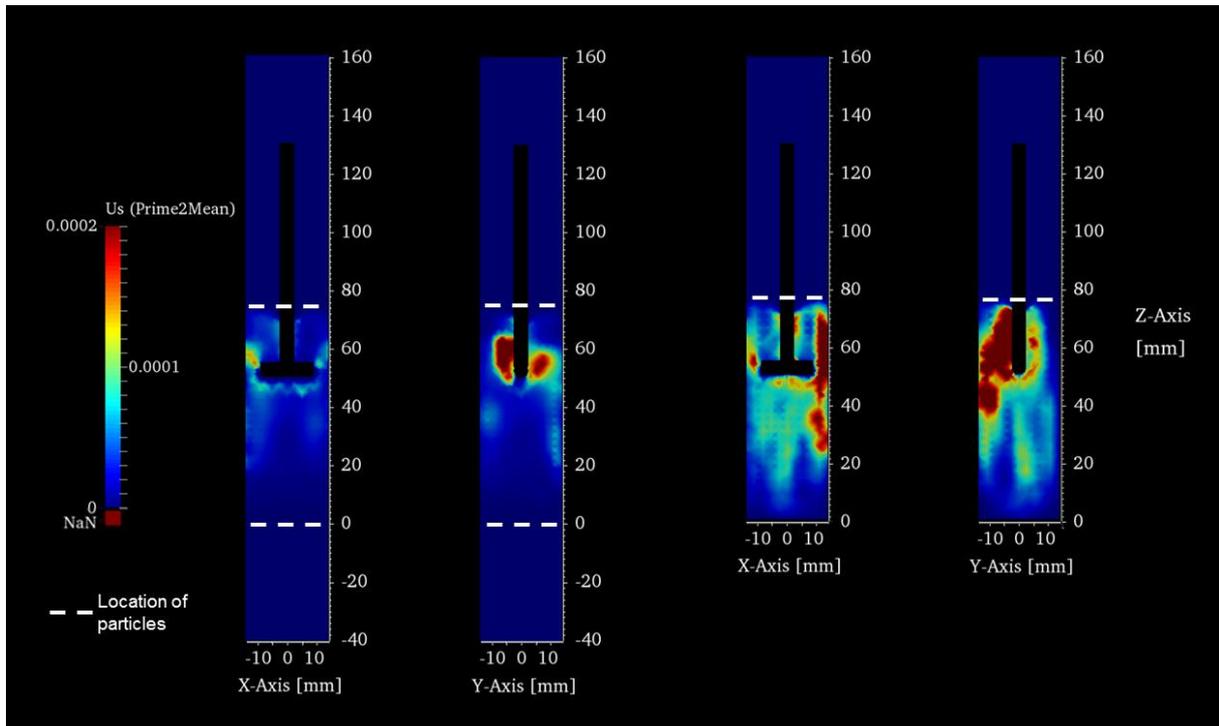
## 4.1.2 Partikelgeschwindigkeit



**Abbildung 12:** Erwartungswert der Partikelgeschwindigkeit. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

Die mittlere Partikelgeschwindigkeit  $U_s$  (Abbildung 12) im Rechengitter mit Stützen zeigt ein grundlegend anderes Bild als die Fluidgeschwindigkeit. Erhöhte Werte finden sich in der Mitte des Reaktors, nach außen hin nehmen sie ab. Stellen mit hohem Gasdurchsatz haben folglich eine geringe mittlere  $U_s$  und umgekehrt. Die einzige Ausnahme findet sich im Bereich der Sonde. Hier sind beide Erwartungswerte stark erhöht.

Im Vergleich hierzu ist die Partikelbewegung im Fall ohne Stützen prinzipiell schneller und verteilt sich über den gesamten Reaktor. Bei Betrachtung des Schnitts entlang der Y-Achse finden sich am rechten Rand aber auch Bereiche mit geringer Partikelgeschwindigkeit.

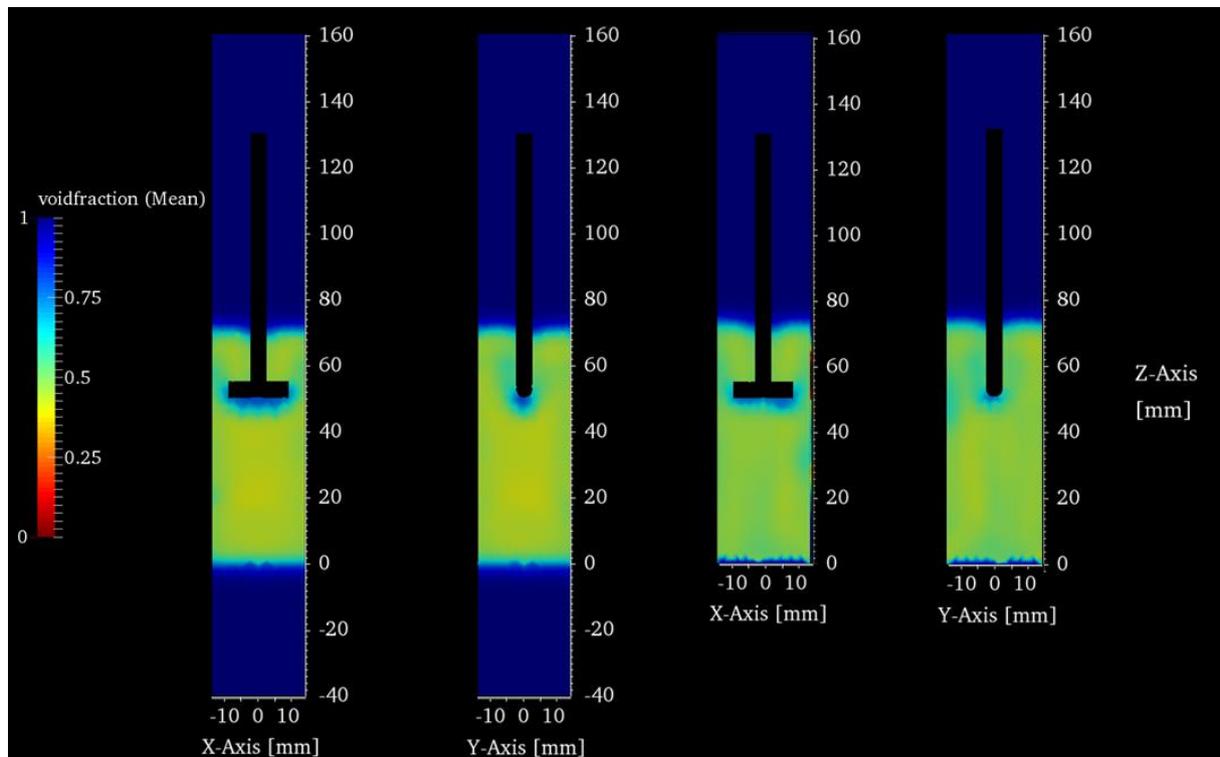


**Abbildung 13:** Varianz der Partikelgeschwindigkeit. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

Für den Fall mit Stützen gibt es ausschließlich in der Nähe der Sonde Zellen mit erhöhter Varianz der Partikelgeschwindigkeit (Abbildung 13). Während bei der Fluidgeschwindigkeit Erwartungswert und Varianz in gewisser Weise zusammenhängen, gibt es bei  $U_s$  Bereiche, in denen erstes und zweites Moment voneinander abweichen. Unterhalb der Sonde gibt es kaum Schwankungen, während die Partikelgeschwindigkeit relativ hoch ist (Abbildung 12). In diesem Bereich scheinen sich die Partikel also konstant zu bewegen.

Im Fall der Geometrie ohne Stützen zeigt sich wieder eine deutliche Asymmetrie der Varianz. Sowohl der Schnitt durch die X-Achse als auch der Schnitt durch die Y-Achse zeigen einseitige Abweichungen von  $U_s$ .

### 4.1.3 Leerraumvolumen



**Abbildung 14:** Erwartungswert des Leerraumvolumens. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

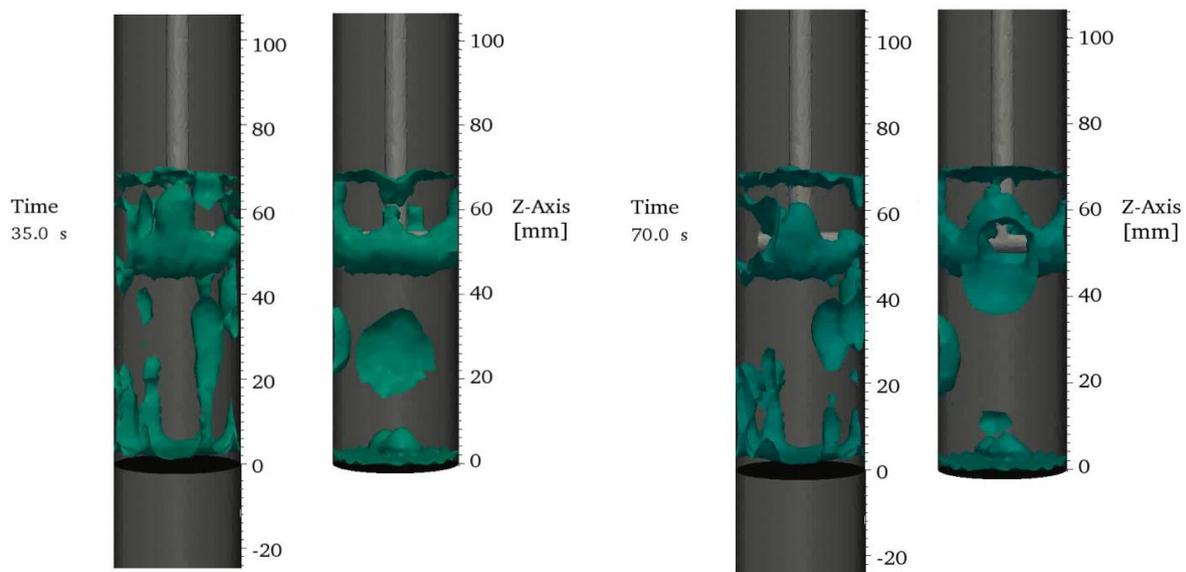
Der Erwartungswert des Leerraumvolumens (Abbildung 14) gibt Aufschluss über Zellen des Rechengitters, die im Mittel einen erhöhten Gasdurchfluss haben. Durch den Stützen ergibt sich ein sehr homogenes Bild. An den Rändern liegt das Leerraumvolumen im Durchschnitt über dem in der Mitte, was auf eine Randgängigkeit deutet, die sich auch schon bei der mittleren Fluidgeschwindigkeit gezeigt hat.

Die Schnitte durch den Reaktor im Fall ohne Stützen zeigen, dass der Anteil an Gas in den Zellen über die ganze Breite des Reaktors größer ist. Das obere Ende der Wirbelschicht liegt dementsprechend auch minimal höher. In beiden Geometrien bildet sich unterhalb des Butaneinlasses ein Bereich mit geringer Feststoffdichte aus. Der Grund hierfür könnten Wandeffekte sein.

Neben den Erwartungswerten ist die zeitliche Veränderung des Leerraumvolumens ein Indikator für die Ausprägung der Wirbelschicht. In Abbildung 15 sind Isoflächen ( $\text{voidfraction} = 0,5$ ) für die Gitter mit und ohne Stützen zu jeweils zwei Zeitpunkten dargestellt. Auffällig ist die unterschiedliche Form und Anzahl der „Blasen“, die ausgebildet werden. Im Rechengitter

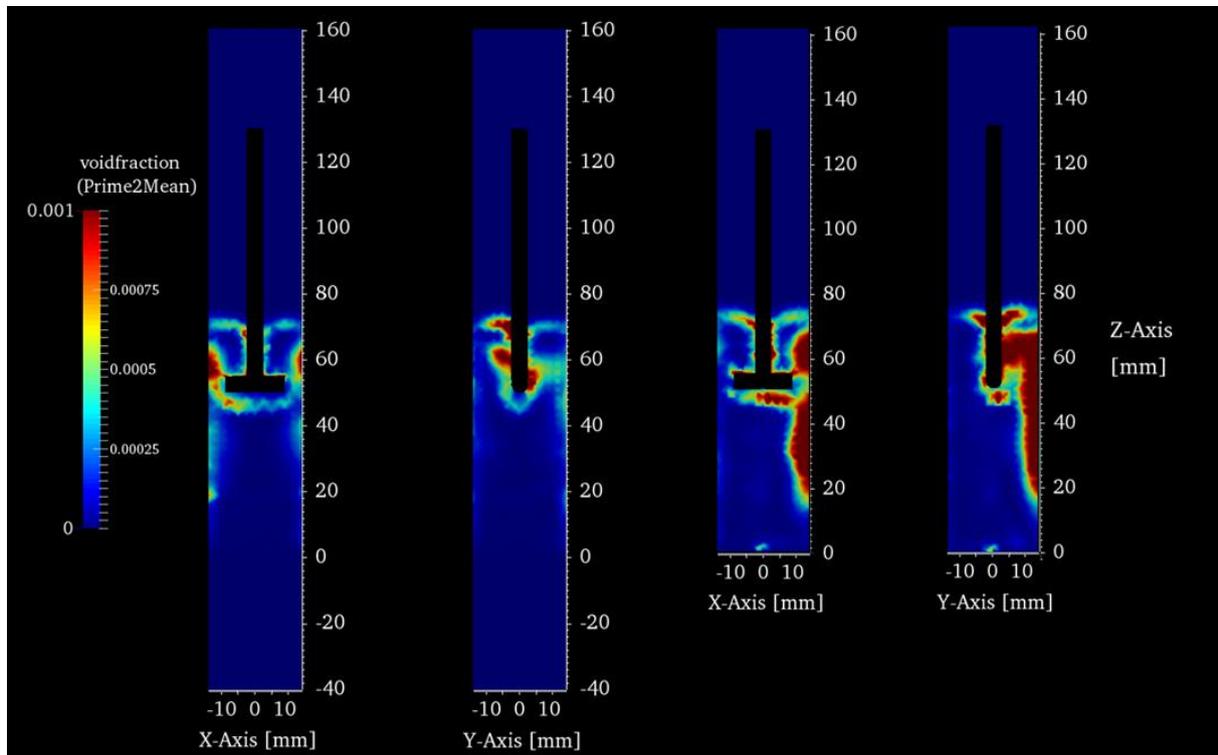
ohne Stutzen nehmen die Isoflächen die Form von großen Kugeln an, die an den Reaktorwänden, aber auch in der Mitte des Reaktors aufsteigen. Mit Stutzen sind die Bereiche geringerer Partikeldichte länglicher und verlaufen ausschließlich entlang der Wand. In beiden Fällen scheinen die Blasen immer wieder an den gleichen Stellen zu entstehen, was der Grund für die zuvor erwähnten Asymmetrien sein könnte.

Das Aussehen der Isoflächen stimmt mit den vorherigen Beobachtungen der Fluid- und Partikelgeschwindigkeiten überein. Ein hohes Leerraumvolumen geht mit einer erhöhten Gasgeschwindigkeit einher. Durch den zusätzlichen Stutzen ist die Partikelbewegung am Rand gering. Das Gas scheint die Wirbelschicht eher in Form von Kanälen zu durchlaufen. Im Gegenzug werden ohne Verlängerung tendenziell Blasen ausgebildet, was durch die starke Varianz von  $U_s$  am Rand des Reaktors unterstrichen wird.



**Abbildung 15:** Isofläche des Leerraumvolumens bei einem Wert von 0,5. Von links nach rechts: Fall mit Stutzen zum Zeitpunkt  $t = 35$  s; Fall ohne Stutzen,  $t = 35$  s; Fall mit Stutzen,  $t = 70$  s; Fall ohne Stutzen,  $t = 70$  s.

Zwischen den mittleren Geschwindigkeiten, ihren Varianzen und dem Leerraumvolumen gibt es Abhängigkeiten. Der größte Gasdurchsatz findet sich in Bereichen mit hohen Erwartungswerten für die Gasgeschwindigkeit und das Leerraumvolumen. Hierbei können sich entweder Kanäle oder Blasen ausbilden. Letztere zeichnen sich durch eine hohe Varianz des Leerraumvolumens und der Gasgeschwindigkeit aus. Außerdem ist die Partikelgeschwindigkeit erhöht infolge des Partikelschweifs (vgl. „2.1.3 Gas-Feststoff-Wirbelschichten“). Im Gegenzug dazu sind bei Kanälen die Varianzen sowie die Feststoffgeschwindigkeit niedriger.

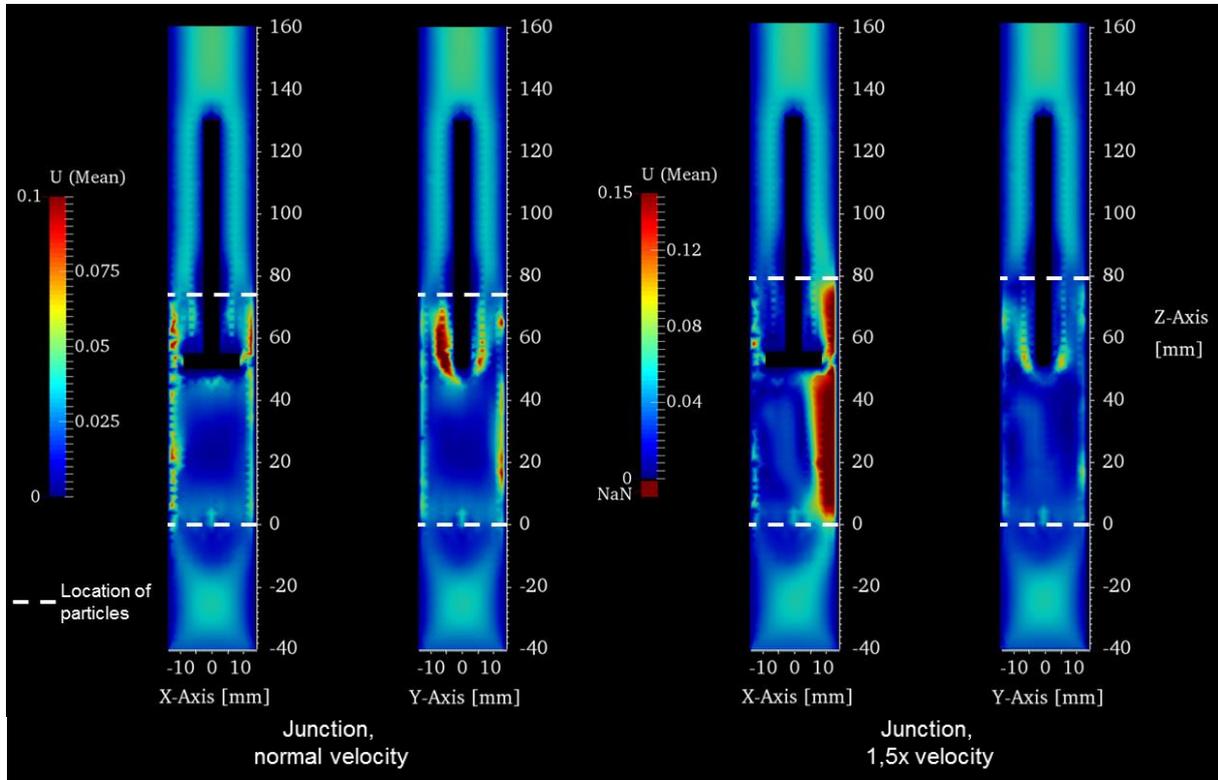


**Abbildung 16:** Varianz des Leerraumvolumens. Von links nach rechts: Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter mit Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der X-Achse; Gitter ohne Stützen, Schnitt entlang der Y-Achse.

Die Varianz des Leerraumvolumens bestätigt das zuvor erarbeitete Bild (Abbildung 16). Mit der Verlängerung des Reaktors durchläuft das Fluid kontinuierlich die Wirbelschicht, sodass sich die Partikeldichte im Laufe der Zeit kaum verändert. Ohne Stützen gibt es starke Varianzen in Wandnähe (positive X- und Y-Achsen-Werte), was den inhomogenen Charakter mit Blasen unterstreicht.

## 4.2 Einfluss der Geschwindigkeit auf das Strömungsfeld

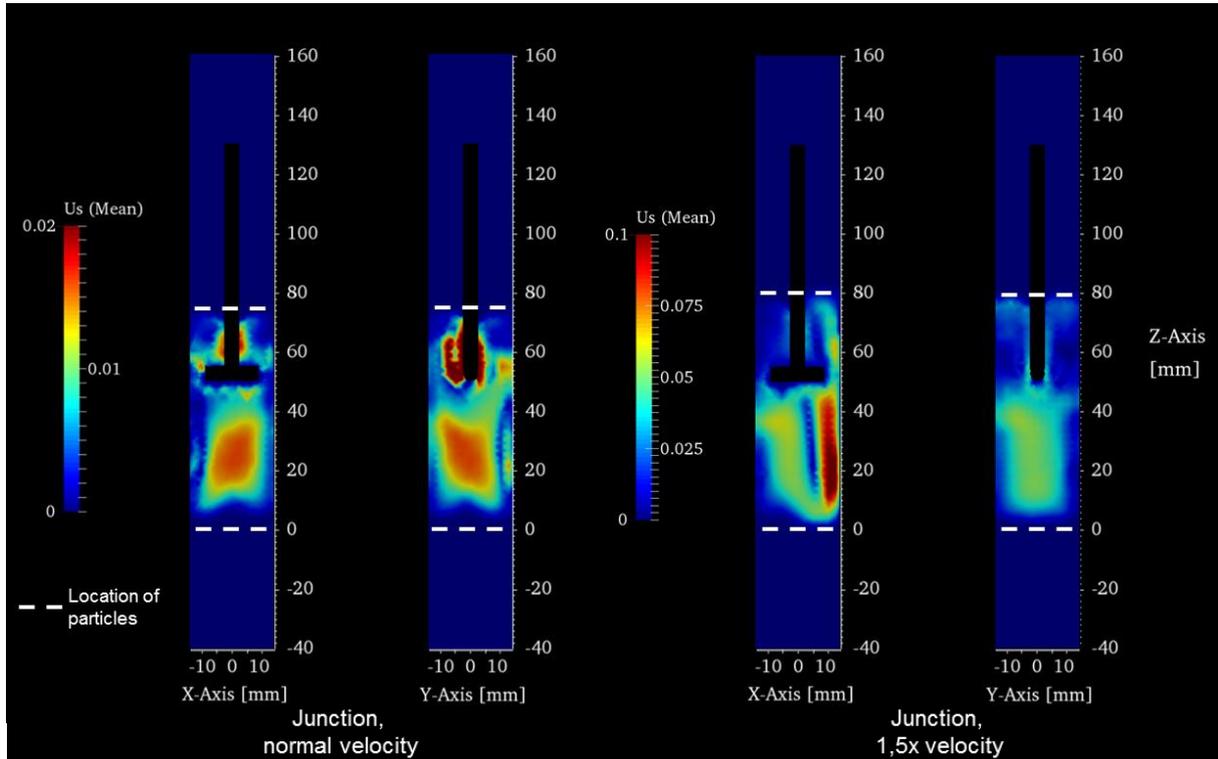
### 4.2.1 Fluidgeschwindigkeit



**Abbildung 17:** Erwartungswert der Fluidgeschwindigkeit. Gitter mit Stützen, von links nach rechts: Normale Geschwindigkeit, Schnitt entlang der X-Achse; Erhöhte Geschwindigkeit, Schnitt entlang der Y-Achse; Normale Geschwindigkeit, Schnitt entlang der X-Achse; Erhöhte Geschwindigkeit, Schnitt entlang der Y-Achse.

Durch den erhöhten Gasdurchsatz im Reaktor ist das Strömungsfeld trotz Stützen nicht mehr achsensymmetrisch (Abbildung 17). Bei 1,5-facher Geschwindigkeit gibt es analog zum Fall ohne Stützen wenige Stellen mit stark erhöhter Fluidgeschwindigkeit. Den Schnitten entlang den Achsen kann entnommen werden, dass der Erwartungswert von  $U$  in der gesamten Wirbelschicht äußerst gering ist. Nur am Rand des Reaktors (positive Werte auf der X-Achse) ist  $U$  im Mittel groß. Auch im Stützen und oberhalb der Wirbelschicht ist diese Stelle stark bevorzugt, weshalb unmittelbar davor und danach kein symmetrisches Strömungsprofil erreicht wird.

## 4.2.1 Partikelgeschwindigkeit

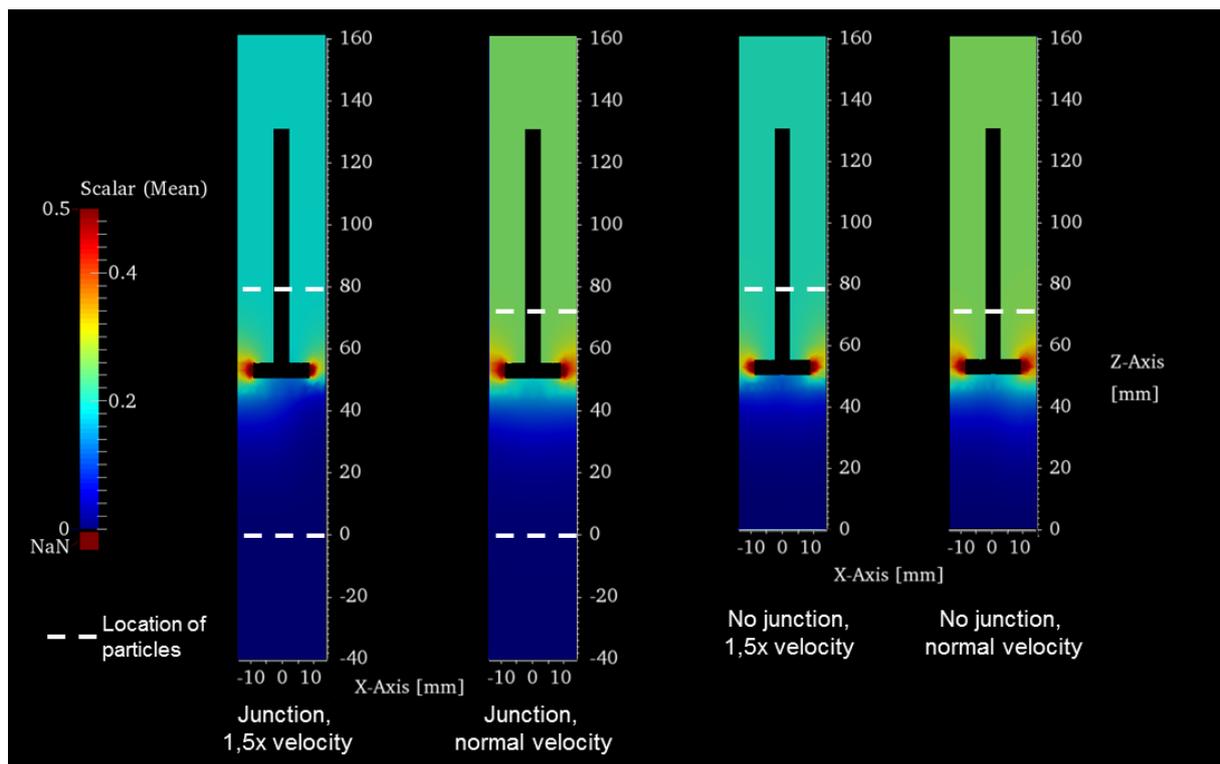


**Abbildung 18:** Erwartungswert der Partikelgeschwindigkeit. Gitter mit Stützen, von links nach rechts: Normale Geschwindigkeit, Schnitt entlang der X-Achse; Erhöhte Geschwindigkeit, Schnitt entlang der Y-Achse; Normale Geschwindigkeit, Schnitt entlang der X-Achse; Erhöhte Geschwindigkeit, Schnitt entlang der Y-Achse.

Der Erwartungswert der Partikelgeschwindigkeit (Abbildung 18) wird durch die größere Gasgeschwindigkeit asymmetrischer. Die höchsten Werte finden sich wie für die Fluidgeschwindigkeit auch entlang des Randes bei positiven X-Achsen-Werten. Die Kombination aus hohem  $U$  und  $U_s$  im gleichen Bereich spricht dafür, dass die Wirbelschicht im Fall mit größerem Gasdurchsatz zu Blasenbildung und nicht zu Kanalbildung neigt.

### 4.3 Betrachtung des Mischungsfeldes

Zur Untersuchung des Mischungsfeldes wurde eine Transportgleichung für ein Skalar in den Solver implementiert. Am Sauerstoff- und Argoneinlass am unteren Ende des Reaktors wurde das Skalar auf den Wert 0 gesetzt, während es am Einlass an der Sonde, durch welche im Experiment das Butan strömt, als 1 definiert wurde. Anschließend wurde auch hier der Erwartungswert durch Mittelung über 35 s gebildet.



**Abbildung 19:** Erwartungswert des Skalars. Fälle von links nach rechts: Stutzen und erhöhte Geschwindigkeit; Stutzen und niedrige Geschwindigkeit; Kein Stutzen, erhöhte Geschwindigkeit; Kein Stutzen, niedrige Geschwindigkeit. Schnitt durch die X-Achse.

In allen vier Anordnungen zeigt sich im Grunde das gleiche Bild. Rückdiffusion findet statt, spielt jedoch eine untergeordnete Rolle. In allen Fällen wird noch innerhalb der Wirbelschicht ein homogenes Mischungsfeld erreicht. Die dunkelblaue Zone entspricht der experimentellen Regenerationszone, oberhalb und um den Butaneinlass bildet sich die hellere Reaktionszone aus. Es lassen sich kleine Unterschiede zwischen dem mit niedrigen und hohen Volumenstrom berechneten Mischungsfeld feststellen. Da der Konvektionsterm durch die höhere Geschwindigkeit gegenüber dem Diffusionsterm an Bedeutung gewinnt, wandert die Regenerationszone näher an die Sonde. Im Fall mit höherem Volumenfluss und Stutzen findet sich zudem die unter 4.2 erwähnte Asymmetrie wieder. An der Reaktorwand bei positiven X-Achsen-Werten ist die Gasgeschwindigkeit erhöht, weswegen hier der Skalar niedriger ist.

Bei der Gegenüberstellung der vier Fälle sind die unterschiedlichen Mittelwerte des Skalars am Reaktorausgang auffällig. Diese zeigen ein Problem der gewählten Startbedingungen auf. Um den Betriebsparameter des experimentellen Vorbilds zu erhalten, wurde die Viskosität um den Faktor fünf angehoben. Da der Diffusionskoeffizient über die Schmidt-Zahl mit der Viskosität im direkten Zusammenhang steht, wurde dieser folglich auch mit fünf multipliziert.

$$Sc = \frac{v}{D} \quad (4.3)$$

Hierdurch konnte zwar das Strömungsfeld sinnvoll wiedergegeben werden, die Reproduktion des Mischungsfelds ist aber fragwürdig, da der Diffusionsterm gegenüber dem Konvektionsterm an Gewicht gewinnt.

### 5 Fazit und Ausblick

Ziel der Arbeit war neben der Untersuchung des Mischungs- und Strömungsfeldes die Festlegung der Betriebsparameter für das Modell mit weniger Partikeln. Die Betriebsparameter wurden mit Hilfe von dimensionslosen Kennzahlen, welche als Referenz für den experimentellen Fall galten, bestimmt. Hierdurch ist es gelungen, eine stabile und qualitative Simulation des Wirbelschichtreaktors durchzuführen.

Die Betrachtung des Strömungsfeldes und des Mischungsfeldes lieferten unterschiedliche Ergebnisse. Anhand des Strömungsfeldes konnte gezeigt werden, dass das Fluid in Bereichen geringerer Partikeldichte den Reaktor durchläuft. Diese „Blasen“ sind verantwortlich für das asymmetrische Erscheinungsbild der Wirbelschicht, da sie immer an denselben Positionen entstehen. Der Vergleich der Gitter mit und ohne Stutzen zeigt gravierende Unterschiede. Es ist somit sinnvoll für zukünftige Rechnungen eine Geometrie mit Vorlauf vor der Fritte zu verwenden, da hier die experimentelle Anordnung mit Fritte besser berücksichtigt wird.

Im Bereich des Mischungsfeldes besteht noch weiterer Untersuchungsbedarf. Der in Folge der Anpassungen große Diffusionskoeffizient könnte zu unphysikalischen Ergebnissen führen und sollte testweise in weiteren Versuchen reduziert werden. Nach momentanem Stand scheint eine vollständige Vermischung der verschiedenen Gase noch innerhalb der Wirbelschicht zu erfolgen. Unabhängig von der Geschwindigkeit des Gases oder Anwesenheit des vorangestellten Stutzens wird dieser Zustand in allen vier Fällen erreicht.

Für die nahe Zukunft wären neben weiteren experimentellen Daten, anhand derer die Rahmenbedingungen für die Simulation verbessert werden können, auch Simulationen mit der vollständigen Anzahl an Partikeln wünschenswert. Durch diese Rechnungen ließe sich die Legitimität der Annahmen, die zur Skalierung des Systems auf eine geringere Anzahl an Partikeln verwendet wurden, überprüfen.

Neben diesen Ansätzen zur Validierung der Rechnung böte es sich an, den Gründen für die Asymmetrie des Strömungsfeldes nachzugehen. Eine deutlich erhöhte Mittelungsdauer von mehreren Minuten bis Stunden, ein symmetrisches Gitter oder verschiedene Schüttschichten nach dem Einfüllen wären Möglichkeiten, die Entstehung der Blasen in der Wirbelschicht näher zu untersuchen. Durch Messung der Verweilzeit einzelner Partikel in Reaktions- und Regenerationszone kann die Güte der Partikelvermischung beurteilt werden, welche für die Erhaltung der Katalysatoraktivität unabdingbar ist.

Langfristig ist es das Ziel, einen kompletten chemischen Reaktor wiederzugeben. Nicht nur die physikalisch korrekte Wiedergabe einer Wirbelschicht, sondern auch die an den Partikeln stattfindende chemische Reaktion - die Butanoxidation zu Butadien. Die generelle Möglichkeit, chemische Umsätze in einer CFD-DEM-Simulation zu berücksichtigen, soll durch das Add-on „ParScale“ (Particle Scale Models) ermöglicht werden, welches im Moment unter Stefan Radl an der TU Graz entwickelt wird. Mithilfe eines geeigneten Mechanismus könnte so die chemische Reaktion implementiert werden.

## Literaturverzeichnis

- [1] M. Kraume, *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik. Grundlagen und apparative Umsetzungen*, 2. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, **2012**.
- [2] K. Wirth, *Zirkulierende Wirbelschichten: Strömungsmechanische Grundlagen, Anwendung in der Feuerungstechnik*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, **1990**.
- [3] M. Baerns, A. Behr, A. Brehm, J. Gmehling, H. Hofmann, U. Onken, A. Renken, *Technische Chemie*, 1. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.
- [4] P. Ruschke, "Fluidisierungsverhalten von Schüttgütern", zu finden unter [http://www-mvt.iw.uni-halle.de/forschung/forschungsleistung/schuettgutlabor/fluidisierverhalten\\_schuettgueter/](http://www-mvt.iw.uni-halle.de/forschung/forschungsleistung/schuettgutlabor/fluidisierverhalten_schuettgueter/), **2015**.
- [5] F. Babick, "Strömungsprobleme der MVT. Folien zur Vorlesung", zu finden unter [https://tu-dresden.de/die\\_tu\\_dresden/fakultaeten/fakultaet\\_maschinenwesen/ifvu/mvt/downloads/seminar\\_strpr/folien\\_strpr\\_mvt\\_7.pdf](https://tu-dresden.de/die_tu_dresden/fakultaeten/fakultaet_maschinenwesen/ifvu/mvt/downloads/seminar_strpr/folien_strpr_mvt_7.pdf), **2014**.
- [6] "EDEM for Teaching. DEM Solutions Announces Launch of EDEM Classroom Edition", zu finden unter <http://www.dem-solutions.com/edem-for-teaching-dem-solutions-announces-launch-of-edem-classroom-edition/>, **2010**.
- [7] M. Börner, "Discrete Elemente Method (DEM)", zu finden unter [http://www.ovgu.de/ivt/tvt/media/6a3a9decbbafe2b/dem\\_skript\\_englisch.pdf](http://www.ovgu.de/ivt/tvt/media/6a3a9decbbafe2b/dem_skript_englisch.pdf), **2011**.
- [8] "CFDEM@coupling Open Source CFD-DEM Framework", zu finden unter <http://www.cfdem.com/cfdemrcoupling-open-source-cfd-dem-framework>, **2011**.
- [9] "Discrete element method", zu finden unter [https://en.wikipedia.org/wiki/Discrete\\_element\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Discrete_element_method), **2015**.
- [10] J. M. Rischar, *Diplomarbeit*, KIT, Karlsruhe, **2013**.
- [11] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington New York London, **1980**.
- [12] B. Noll, *Numerische Strömungsmechanik. Grundlagen*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, **1993**.
- [13] S. Lecheler, *Numerische Strömungsberechnung*, 1. Aufl., Vieweg+Teubner, Wiesbaden, **2009**.
- [14] P. Lott, Vertieferarbeit, Karlsruher Institut für Technologie, 2016.

## **Danksagung**

Ich danke Prof. Dr. Olaf Deutschmann für die Möglichkeit, die Vertieferarbeit zu diesem interessanten Thema in seinem Arbeitskreis anfertigen zu dürfen.

Mein Dank gilt zudem Dr. Matthias Hettel für die hervorragende Betreuung, für konstruktive Anregungen und die anschauliche Einführung in den Bereich der Numerik.