Transport und Abscheidung submikroner Partikel

Frank Schmidt

Transport und Abscheidung submikroner Partikel

Vom Fachbereich Maschinenbau der

Gerhard- Mercator- Universität Duisburg

zur Erlangung der Lehrbefähigung im Lehrgebiet Umwelttechnik

genehmigte Habilitationsschrift

von

Dr.- Ing. Frank Schmidt

aus

Duisburg

22. Januar 2001

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Fachgebiet Verfahrenstechnik/ Umwelttechnik, Fachbereich Maschinenbau, an der Gerhard- Mercator- Universität Duisburg.

Mein besonderer Dank gilt dem Leiter des Fachgebietes, Herrn Prof. Dr.-Ing. K.G. Schmidt, für die langjährige wohlwollende Unterstützung und die Möglichkeit, meine Forschungsrichtung als das zentrale Thema des Fachgebietes zu verfolgen. Im Zusammenhang mit dieser Arbeit verdanke ich ihm viele Anregungen und Hinweise insbesondere im Hinblick auf die industriellen Anwendungsbeispiele.

Recht herzlich möchte ich auch Herrn Prof. Dr.-Ing. F. Ebert und Herrn Prof. Dr.-Ing. R. Weichert danken, die als Korreferenten der Arbeit sehr großes Interesse entgegengebracht haben.

Herrn Prof. Dr.-Ing. H. Fißan danke ich für zahlreiche fachliche Diskussionen, die wir seit meiner Diplomarbeit im Jahre 1988 geführt haben. Herr Prof. Fißan hat mein Interesse für die kleinen Partikel geweckt, und durch die Projektbetreuung innerhalb des SFB 209 *Stoff- und Energietransport in Aerosolen* maßgeblich zu der Arbeit und zu meinem Werdegang beigetragen.

Ferner möchte ich Herrn Dipl.- Ing. K. Gartz, Herrn Dipl.- Ing. T. Engelke und den anderen Mitarbeitern meiner Forschungsgruppe am Fachgebiet Verfahrenstechnik für ihre langjährige Unterstützung und das freundschaftlich/ kollegiale Arbeitsverhältnis danken.

Besonderer Dank gebührt auch meiner Frau Sabrina, die bei der Fertigstellung dieser Arbeit erneut große Geduld aufgebracht und mir so den notwendigen Rückhalt gegeben hat.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung und Aufgabenstellung										
2	Tra	nsport	mechanismen im Mehrphasensystem Aerosol	5						
	2.1	Fluidr	nechanik	6						
	2.2	Aeros	oldynamik	6						
		2.2.1	Diffusion	8						
		2.2.2	Konvektion	9						
		2.2.3	Trägheit	10						
		2.2.4	Externe Kräfte	10						
			Schwerkraft	10						
			Elektrostatischen Kräfte	11						
			Kräfte aufgrund eines Temperaturgradienten	12						
3	Mo	dellier	ung der turbulenten Transportprozesse	14						
	3.1	Impul	serhaltungsgleichungen	19						
	3.2	Energ	ieerhaltungsgleichung	19						
	3.3	Partik	eltransport	20						
	3.4	Effekt	ive Transportgrößen- Turbulenzmodelle	21						
	3.5	5 Numerisches Lösungsverfahren zur Modellierung rotationssymmetrischer								
		Trans	portprozesse	26						
		3.5.1	SIMPLER- Algorithmus	26						
		3.5.2	Numerische Modellierung	28						

4	Turbulente Rohrströmungen3							
	4.1	Geschwindigkeitsprofil für glatte Rohre	31					
	4.2	Turbulente Strömungen in rauhen Rohren	39					
	4.3	Temperaturfeld	44					
	4.4	Wirbelviskosität	47					
5	Par	Partikelabscheidung in turbulent durchströmten Rohren						
	5.1	Konvektiv- diffusive Partikelabscheidung	53					
	5.2	Partikelabscheidung aufgrund von Temperaturgradienten und Wirbel-						
		trägheit	62					
6	Par	Partikelabscheidung auf turbulent angeströmte Oberflächen						
	6.1	Laminar angeströmte Kreisscheiben	68					
	6.2	Senkrecht angeströmte horizontale Oberflächen	74					
	6.3	Partikeltransport auf die turbulent angeströmte Kreisscheibe	77					
7	Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen							
	7.1	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83					
	7.1 7.2	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100					
	7.1 7.2 7.3	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100 106					
8	7.17.27.3Par	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele Modellierung der Partikelabscheidung in industriellen Anlagen Zusammenfassung des Kapitels tikeltransport im Aktivkohlefilter einer Müllverbrennungsanlage	83 100 106 108					
8	 7.1 7.2 7.3 Par 8.1 	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100 106 108 108					
8	 7.1 7.2 7.3 Par 8.1 8.2 	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele Modellierung der Partikelabscheidung in industriellen Anlagen Zusammenfassung des Kapitels tikeltransport im Aktivkohlefilter einer Müllverbrennungsanlage Experimentelle Bestimmung der Partikelanzahlkonzentration Berechnung der Partikelabscheidung in einem Aktivkohlefilter	83 100 106 108 108 111					
8	 7.1 7.2 7.3 Par 8.1 8.2 	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100 106 108 108 111 112					
8	 7.1 7.2 7.3 Par 8.1 8.2 	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	 83 100 106 108 111 112 118 					
8	 7.1 7.2 7.3 Par 8.1 8.2 Zus 	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100 106 108 108 111 112 118 122					
8 9 No	7.1 7.2 7.3 Par 8.1 8.2 Zus	Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele	83 100 106 108 111 112 118 122 125					

\mathbf{A}	Anhang 14									
	A.1	Herleitung der Impulserhaltungsgleichungen								
		A.1.1	Axiale Impuls	149						
		A.1.2	Radiale Impuls	150						
	A.2	Rohrre	eibungskoeffizient	151						
	A.3	Low-Re- k - ε -Modelle								
		A.3.1	Low-Re- k - ε -Modell nach Lam-Bremhorst	153						
		A.3.2	Low-Re- k - ε -Modell nach Chien	154						

1 Einleitung und Aufgabenstellung

In vielen technischen Prozessen hat der Transport von Partikeln im Größenbereich von wenigen Nanometern bis zu einigen Mikrometern eine große Bedeutung. Einerseits werden beispielsweise über Beschichtungsprozesse, d. h. eine gewünschte Partikelabscheidung, spezielle Oberflächeneffekte erzeugt, andererseits sind Aerosole ein unerwünschtes Nebenprodukt in Produktions- und bei Verbrennungsprozessen (z. B. Müllverbrennungsanlagen, Großkraftwerken und Dieselmotoren).

Die jeweils für die technischen und natürlichen Prozesse zu berücksichtigenden Transportmechnismen sind maßgeblich von den Randbedingungen abhängig. Ziel dieser Arbeit ist es, auf Basis einer grundsätzlichen Beschreibung des Transportes, die Parallelen von zunächst sehr unterschiedlich erscheinenden Fragestellungen aufzuzeigen. Ausgangpunkt bildet die detaillierte Beschreibung des Partikeltransportes in turbulenten Rohrströmungen und zu turbulent angeströmten Oberflächen unter Berücksichtigung der sogenannten externen Kräfte. Es folgt die Simulation des Partikeltransportes in industriellen Anlagen und einige Meßergebnisse zur Größenverteilung der emittierten Partikel als Folge der Abscheidemechanismen.

Den konvektiv- diffusiven Transport submikroner Partikel in laminar durchströmten Rohren haben bereits Gormley und Kennedy [25] mit einer empirischen Gleichung beschrieben. Theoretische Studien zur Abscheidung aufgrund der Thermophorese in laminaren Rohrströmungen sind beispielsweise von Walker *et al.* [97], Weinberg [98] und Stratmann *et al.* [90] [89] durchgeführt worden. Stratmann führt weitere Arbeiten an, auf die an dieser Stelle nur verwiesen wird, da im Rahmen dieser Arbeit insbesondere die gleichzeitige Wirkung von Diffusion und externen Kräften (z. B. Thermophorese) und nicht spezielle Einzelaspekte von Interesse sind. Die theoretischen und experimentellen Arbeiten von Stratmann sind auch durch Experimente von Montassier *et al.* [54] bestätigt worden. Es wurde eine gute Übereinstimmung festgestellt, wenn der thermophoretische Koeffizient nach Talbot [91] bzw. Batchelor und Shen [2] verwendet wird.

In technischen Prozessen kann die erzwungene Strömung nur in Ausnahmefällen als laminar angesehen werden. Die Turbulenz verändert das Geschwindigkeits- und Temperaturfeld und wirkt sich maßgeblich auf den konvektiv- diffusiven Stofftransport aus. Die Modellierung des laminar durchströmten Rohres wird innerhalb dieser Arbeit als einfacher Grenzfall der turbulenten Durchströmung berücksichtigt.

Zur Abscheidung der submikronen Partikel in turbulenten Rohrströmungen unter Berücksichtigung des konvektiv- diffusiven Transportes, der Thermophorese und der Wirbelträgheit liegen einige Studien vor. Bereits frühe Arbeiten von Friedlander und Johnstone [20] zeigen den Einfluß der Turbulenz auf die Partikelphase auf. Im Gegensatz zum laminaren Fall liegen nur wenige Arbeiten zur Thermophorese vor. Romay *et al.* [74] fassen diese aktuell zusammen und fügen einen einfachen theoretischen Ansatz hinzu. Die beträchtlichen Abweichungen (Faktor 2- 3) zwischen teilweise eigenen Meßwerten und allen theoretischen Ansätzen werden durch die gleichzeitig wirkende Wirbelträgheit erklärt. Die Autoren stellen dies selbst in Frage und sehen einen erheblichen Forschungsbedarf bei den Grundlagen über die Wechselwirkung Thermophorese/Wirbelträgheit. Hier setzen die eigenen numerischen Berechnungen ausgehend von dem erweiterten Modell an.

Der Transport submikroner Partikel auf eine turbulent angeströmte Oberfläche ist zunächst aufgrund der Strömungssituation eine recht eigenständige Problemstellung, die ebenfalls im Rahmen dieser Arbeit untersucht wird. Die Fertigung integrierter Schaltungen ist das bekannteste Beispiel für die unerwünschte Abscheidung submikroner Partikel. Hier kann die Deposition eines Partikels die Funktionstüchtigkeit des Chips beeinträchtigen. Obwohl extreme Anforderungen an die Qualität der Produktumgebung gestellt werden, die eine kostenintensive Luftaufbereitung und -führung erfordern, gelangen Partikel in den Nahbereich der Waferoberflächen und werden dort abgeschieden. Die Entwicklung von Vermeidungsstrategien zur Reduzierung des Produktionsausschusses setzt eine detaillierte Kenntnis der Transport- und Abscheidemechanismen im Nahbereich der Oberflächen durch Partikel wurden bereits einige theoretische (Cooper *et al.* [8]) und erste experimentelle Arbeiten zur Beschreibung der Deposition von Partikeln auf Wafern veröffentlicht. In einer vielzitierten theoretischen Arbeit von Liu und Ahn [50] wird der Partikeltransport aufgrund von Konvektion, Diffusion und Sedimentation zu einem laminar angeströmten freistehenden Wafer durch Superposition der Einzelmechanismen berechnet. Zur Berechnung des konvektiv- diffusiven Anteils werden die aus der Analogie zwischen Wärme- und Stofftransport entwickelten und experimentell bestätigten [86] [87], halbempirischen Gleichungen auf die Partikelphase übertragen. Experimentelle Arbeiten liegen z. B. von Otani *et al.* [59] vor. Die Berücksichtigung der gleichzeitig wirkenden Transportprozesse für eine ausgewählte Situation wurde von Opiolka [60], Opiolka *et al.* [61] und Ye *et al.* [103] untersucht. Schmidt [79] und Schmidt *et al.* [80] stellten ein dimensionsloses Modell unter besonderer Berücksichtigung von Analogie- und Ähnlichkeitsbeziehungen auf, das die Transportprozesse im Nahbereich umfassend darstellt. Für die laminare Strömungssituation wird im wesentlichen auf letztere Arbeiten verwiesen.

Bei der Vorstellung der Ergebnisse dieser Arbeiten wurden von industriellen Kunden immer wieder Bedenken bzgl. der Modellannahme der laminaren Strömungssituation geäußert. Auch innerhalb der Werkbänke, die zumindest am Auslaß eine wohldefinierte Strömung besitzen, wurde der Turbulenz eine maßgebliche Rolle zugedacht. Während eine größere Anzahl von Veröffentlichungen den turbulenten Transport in Rohrströmungen betrachtet, liegen insbesondere für den Transport zu angeströmten Oberflächen bei niedrigen Reynoldszahlen wenige Beiträge vor. Theoretische Untersuchungen in Reinräumen wurden beispielsweise von Busnaina et al. [5] [6] und Kuehn [40] veröffentlicht. Numerische Berechnungen des Partikeltransportes in turbulenten Kanalströmungen haben Fan und Ahmadi et al. [17], Li und Ahmadi [47] und Li et al. [48] durchgeführt. Die experimentellen Daten zur Deposition supermikroner Partikel vorheriger Studien werden bei Fan und Ahmadi et al. [17] zusammengefaßt und von Kvasnak et al. [41] vervollständigt. Studien, welche detailliert den Einfluß der Turbulenz auf die Abscheidung der submikronen Partikel beschreiben, liegen nicht vor, wären aber gerade für die Reinraumtechnik von Bedeutung. Basierend auf den Modellerweiterungen und Ergebnissen der turbulenten Rohrströmung in Verbindung zu den bereits durchgeführten Studien zur Abscheidung auf laminar angeströmten Oberflächen wird dieser Aspekt nachfolgend untersucht.

Die bislang aufgeführten Partikeltransportprozesse sind rotationssymmetrisch und konnten mit dem SIMPLER- Algorithmus gelöst werden. Bei der Simulation der weiteren Problemstellungen, speziell der Strömungssituationen in industriellen Anlagen, stellt die Zweidimensionalität eine Einschränkung dar. Im Rahmen dieser Arbeit wird nicht der Weg verfolgt, einen eigenen dreidimensionalen Algorithmus zu schreiben, sondern das Programmpaket *Phoenics* der Firma Cham anzuwenden. Es werden dabei zunächst die bereits dargestellten Ergebnisse der zweidimensionalen Rechnungen als Vergleichsmaßstab herangezogen, und es erfolgt jeweils ein sukzessiver Aufbau der ins Auge gefaßten Problemstellungen.

Für die Abscheidung von gröberen Stäuben, wie sie u. a. in der Zementindustrie vorkommen, werden Schüttschichtfilter mit Schüttschichten bestehend aus Kies, Quarz etc. eingesetzt. Schüttschichtfilter aus Aktivkohle werden in vielen technischen Anwendungen für die Abscheidung gas- und partikelförmiger Schadstoffe verwendet.

Bei der Rauchgasreinigung einer Müllverbrennungsanlage wird der Aktivkohlefilter als letzte Stufe eingesetzt, um als eine Art Polizeifilter sämtliche ggf. noch vorhandenen gasförmigen Schadgase insbesondere Dioxine und Schwermetalle abzuscheiden. Die zu untersuchende Ausführungsvariante besteht aus einem Wanderbett mit einer schnell abzuziehenden ersten Schicht aus Herdofenkoks und der nachgeschalteten Schicht aus Aktivkoks mit einer Schichtstärke von mehr als einem Meter. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Partikelabscheidung innerhalb des Filters als wirkungsvoller Nebeneffekt untersucht. Es werden verschiedene Modelle vorgestellt, die Unterschiede bzgl. des verwendeten Strömungsmodells, der Vereinfachungen und der berücksichtigten Abscheidemechanismen aufweisen. Die Ergebnisse werden verglichen mit Daten aus Messungen, die an der Müllverbrennung selbst bzw. an einer Technikumsanlage gemessen worden sind.

2 Transportmechanismen im Mehrphasensystem Aerosol

Als Aerosol wird das Mehrphasensystem, in dem Partikel (fest und / oder flüssig) im Gas suspendiert vorliegen, bezeichnet. Der betrachtete Größenbereich der Partikel erstreckt sich dabei im allgemeinen über 5 Größenordnungen von einigen Moleküldurchmessern (ca. 1 nm) bis 10 μ m.

Die Bedeutung der jeweiligen Kräfte, die auf die Partikelphase wirken, variiert entsprechend. Beispielsweise kann der Einfluß der Trägheit für Partikelgrößen kleiner als 100 nm und Strömungsgeschwindigkeiten kleiner als 1 m/s meist vernachlässigt [79] werden. Andererseits erfolgt die Berechnung der Partikelabscheidung für supermikrone Partikel in Abgasströmungen zumeist nur aufgrund der Trägheit. Es werden daraus resultierend in der Literatur zwei unterschiedliche Lösungsansätze für die Transportgleichungen dieses Systems eingesetzt:

Bei der Lagrangeschen Betrachtungsweise wird ein Teilchen oder Fluidelement bei seiner Bewegung im Raum verfolgt. Der Beobachter wird sozusagen mitbewegt. Zur Beschreibung der jeweiligen Position eines Teilchens wird seine Anfangsposition zum Zeitpunkt t=0 benötigt. Dagegen werden nach Euler die Änderungen der Strömungsgrößen an einer festen Stelle registriert. Die Verwendung eines ortsfesten Koordinatensystems entspricht dem Vorgehen beim Einsatz eines ortsfesten Meßgerätes. Nicht das einzelne Fluidelement, sondern der Geschwindigkeitszustand des strömenden Kontinuums ist hier von Bedeutung.

In den Anwendungsfällen mit sehr niedriger Partikelbeladung der Gasphase ist für beide Lösungsansätze eine Entkopplung der *fluidmechanischen* (Gasphase) und *aerosoldynamischen* (Partikelphase) Prozesse möglich. Das führt bei der Berechnung dazu, daß zunächst das Strömungsfeld und ggf. das Temperaturfeld simuliert und anschließend die Partikeltrajektorien bzw. das Konzentrationsfeld berechnet werden. Die Rückwirkung der Partikelbewegung auf das Strömungsfeld bleibt dann unberücksichtigt. Diese Annahme ist bei den geringen Partikelvolumenkonzentrationen, die bei den durchgeführten Untersuchungen vorliegen, sicherlich zulässig.

2.1 Fluidmechanik

Die Fluidmechanik beschreibt den Impulsaustausch und den Wärme- und Stofftransport innerhalb der Gasphase. In einem ruhenden Fluid erfolgt die Wärmeabgabe eines Körpers nur über Wärmeleitung oder Strahlung. Aufgrund des Temperaturgradienten sind Dichteänderungen des Fluids vorhanden, die Austauschvorgänge bewirken. Diese Strömung wird als *freie* Konvektion bezeichnet.

Bei erzwungenen (d. h. von außen aufgeprägten) konvektiven Austauschprozessen wird dieser Wärme- und Stofftransport wesentlich erhöht. Als Strömung wird die gerichtete makroskopische Bewegung der Gas- und Flüssigkeitsmoleküle bezeichnet. Sie bewirkt den Transport von "frischem" Fluid an die Körperoberfläche und damit eine Steigerung der Austauschvorgänge durch Vergrößerung des Gradienten. Die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes kann z. B. durch die numerische Berechnung der Impulsgleichungen des Strömungsfeldes erfolgen.

2.2 Aerosoldynamik

Die Veränderung der physikalischen und / oder chemischen Eigenschaften eines Aerosols wird als aerosoldynamischer Prozess bezeichnet. Friedlander [19] unterscheidet zwischen internen Prozessen wie beispielsweise Kondensation, Nukleation oder Koagulation und den externen Prozessen, die den Transport der Partikel über die Systemgrenzen verursachen (Konvektion, Diffusion und externe Kräfte). Die charakteristische Größe zur Beschreibung des Bewegungsverhaltens von Partikeln ist die Partikelflußdichte:

$$\vec{j}_{\rm p} = -D \, \nabla n_{\rm p} + \vec{u} \, n_{\rm p} + \vec{c}_{\rm ex} \, n_{\rm p}$$
 (2.1)

Der erste Term der rechten Seite der Gleichung 2.1 beschreibt den diffusiven Anteil des Transportes (erstes Ficksches Gesetz). Die weiteren Terme stellen die Erweiterung von Friedlander [19] zur Berücksichtigung des konvektiven und durch externe Kräfte hervorgerufenen Transportes dar.

Die Partikelflußdichte in Richtung zur Oberfläche beim Abstand eines Partikelradius gibt die Anzahl der deponierten Partikel pro Zeit und Fläche an. Wird dieser Wert auf die Anzahlkonzentration in der ungestörten Strömung bezogen, so besitzt der Quotient die Dimension einer Geschwindigkeit und wird daher auch als *Depositionsgeschwindigkeit* v_d bezeichnet (Davies [9]):

$$v_{\rm d} = \frac{\left|\vec{j}_{\rm p}\right|_{(d_{\rm p}/2)}}{n_{\rm p,\,\infty}} \tag{2.2}$$

Speziell für die Bewertung der Deposition von Partikeln in Rohren bietet sich die Penetration oder Durchdringung als anschaulicher Parameter an. Sie ist wie ein Wirkungsgrad definiert und setzt den austretenden Partikelfluß zu dem eintretenden ins Verhältnis:

$$P = \frac{\vec{j}_{\rm p,aus}}{\vec{j}_{\rm p,ein}} \tag{2.3}$$

Den Zusammenhang zwischen der mittleren Depositionsgeschwindigkeit und der Penetration erhält man durch die Integration des treibenden Konzentrationsgefälles über die betrachtete Rohrlänge L [84]:

$$P = exp\left(-\frac{2 \pi R L v_{\rm d}}{\dot{V}}\right) \tag{2.4}$$

$$v_{\rm d} = \frac{\dot{V}}{2 \pi R L} \ln\left(\frac{1}{P}\right) \tag{2.5}$$

Submikrone Partikel, die mit einer Oberfläche im Kontrollraum kollidieren, werden nicht reflektiert und haften u.a. aufgrund der van-der-Waals-Kraft. In vielen technischen Anwendungen ist die Partikelanzahlkonzentration so gering, daß die Abscheidung der Partikel nicht zu einer Änderung der relevanten Oberflächeneigenschaften führt. Ein Gegenbeispiel ist der Aufbau eines Filterkuchens, der maßgeblich die Partikelabscheidung beeinflußt.

2.2.1 Diffusion

Die Partikel eines Aerosols führen im Gleichgewichtszustand eine ungerichtete Bewegung aus, die in Analogie zur Brownschen Molekularbewegung als Brownsche Partikelbewegung bezeichnet wird. Ursache für diesen Transport ist der Impulsaustausch zwischen den Partikeln und den sich statistisch bewegenden Gasmolekülen.

Ein Gradient in der Partikelanzahlkonzentration n_p bewirkt einen gerichteten makroskopischen Partikelfluß \vec{j}_p in das Gebiet niedrigerer Konzentration. Dieser Partikeltransport durch Diffusion ist proportional dem Konzentrationsgradienten der Partikel im Fluid:

$$\vec{j}_{\rm p} = -D \cdot \nabla n_{\rm p} \tag{2.6}$$

$$D = \frac{k_{\rm B} \cdot T}{f} = k_{\rm B} \cdot T \cdot B \tag{2.7}$$

D ist der Diffusionskoeffizient, $k_{\rm B}$ die Boltzmann-Konstante, f der Reibungskoeffizienten der Partikel in Luft und B die Partikelmobilität. Die physikalische Erklärung und unterschiedliche Berechnungsansätze für den Reibungskoeffizienten kugelförmiger Partikel im Gültigkeitsbereich des Stokesschen Gesetzes wurden bereits in Schmidt [79] aufgezeigt. Auf dieser Basis wird der Reibungskoeffizient wie folgt berechnet:

$$f = \frac{3 \pi \eta d_{\rm p}}{C_{\rm s}} \tag{2.8}$$

mit C_s der Cunningham- Slipkorrektur (Hinds [30]) als Funktion des Partikeldurchmessers und der mittleren freien Weglänge λ :

$$C_{\rm s} = 1 + \frac{\lambda}{d_{\rm p}} \left[2,514 + 0,8 \cdot exp \left(\frac{-0,55 \ d_{\rm p}}{\lambda}\right) \right]$$
(2.9)

Nach Kinney und Pui [38] gilt:

$$\lambda = \lambda_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right) \cdot \left(\frac{p_0}{p}\right) \cdot \frac{1 + \frac{110,4}{T_0}}{1 + \frac{110,4}{T}}$$
(2.10)

mit: $\lambda_0 = 67,3$ nm bei $T_0 = 296,15$ K und $p_0 = 1,01\cdot 10^5$ Pa.

2.2.2 Konvektion

Als Konvektion wird die makroskopische Partikelbewegung aufgrund der Strömung der Gasphase bezeichnet. Der konvektive Transport resultiert aus der Schleppkraft, die das strömende Fluid auf die Partikel ausübt. Ausgangspunkt der Betrachtung ist ein zunächst ruhendes Partikel innerhalb der Gasströmung. Wird dieses Partikel zum Zeitpunkt t=0 freigegeben, so ergibt sich die aus dem Kräftegleichgewicht (dargestellt ohne externe am Partikel angreifende Kräfte) abgeleite Bewegungsgleichung (Partikelgeschwindigkeit \vec{u}_p):

$$\underbrace{m_{\rm p} \frac{\mathrm{d} \, \vec{u}_{\rm p} \left(t \right)}{\mathrm{d} \, t}}_{\mathrm{Trägheitskraft}} = \underbrace{f \cdot \left(\vec{u}_{\rm p} \left(t \right) - \vec{u} \right)}_{\mathrm{Reibungskraft}}$$
(2.11)

Die Lösung der Partikelbewegungsgleichung

$$\vec{u}_{\rm p}(t) = \vec{u} \cdot \left(1 - exp \ \left(-\frac{t}{\tau_{\rm p}}\right)\right) \tag{2.12}$$

zeigt das typische Verhalten eines trägen Systems erster Ordnung mit der Zeitkonstanten $\tau_{\rm p}$. Diese wird als Relaxationszeit bezeichnet und ist die Zeit, nach der ein Partikel 63 % der Fluidgeschwindigkeit annimmt.

$$\tau_{\rm p} = \frac{\rho_{\rm p} \ d_{\rm p}^2 \ C_{\rm s}}{18 \ \eta} = \frac{m_{\rm p}}{f}$$
(2.13)

Aufgrund der sehr geringen Masse m_p der Partikel in dem betrachteten Größenbereich sind die Relaxationszeiten sehr klein ($\rho_p = 1000 \text{ kg m}^{-3}, p = 1 \text{ bar}$):

$$\tau_{\rm p}\approx 2{\cdot}10^{-7}{\rm s}$$
für $d_{\rm p}=0,1~\mu{\rm m};\,\tau_{\rm p}\approx 10^{-5}{\rm s}$ für $d_{\rm p}=1\mu{\rm m}$

Die Partikel nehmen deshalb die Fluidgeschwindigkeit nahezu augenblicklich an. Die Partikelflußdichte aufgrund der Konvektion ergibt sich zu:

$$\vec{j}_{\rm p} = \vec{u} \cdot n_{\rm p} \tag{2.14}$$

2.2.3 Trägheit

Der Einfluß der Trägheit auf die Deposition der Partikel ist insbesondere bei der Umlenkung der Strömung zu untersuchen. Im Nahbereich einer angeströmten Oberfläche entsprechen die Partikelbahnen weiterhin den Stromlinien, wenn die Stokes- Zahl

$$Stk = \frac{u_{\infty} \tau_{\rm p}}{l} \tag{2.15}$$

einen kritischen Wert nicht übersteigt. Für einige Problemstellungen werden von Fuchs [22] kritische Stokes- Zahlen Stk_{cr} angegeben. Bei der Beschreibung des Transportes submikroner Partikel kann der Trägheitseinfluß meist vernachlässigt werden [79]. In einigen Problemstellungen ist aber gerade dieser Transport aufgrund der Trägheit entscheidend (s. Kapitel 7).

2.2.4 Externe Kräfte

Die resultierende Relativgeschwindigkeit der Partikel \vec{c}_{ex} aufgrund der äußeren Kräfte besitzt die generelle Form:

$$\vec{c}_{\rm ex} = \frac{1}{f} \cdot \vec{F} \tag{2.16}$$

Diese Beschreibung verdeutlicht das Gleichgewicht der Widerstandskraft, die das Fluid der Partikelbewegung entgegensetzt, und der an das Partikel angreifenden äußeren Kraft.

Im folgenden werden die resultierenden Partikelgeschwindigkeiten aufgezeigt, wenn Schwerkraft, Elektro- oder Thermophorese auf die Partikelphase wirken.

Schwerkraft

Wird das Schwerefeld der Erde bei der Beschreibung des Partikeltransportes berücksichtigt, setzt sich die am Partikel zusätzlich angreifende Kraft aus der Summe von Schwerkraft und Auftriebskraft zusammen. Die Abscheidung aufgrund der Schwerkraft wird als Sedimentation bezeichnet. Die Gleichung für die resultierende Partikelrelativgeschwindigkeit

$$\vec{c_{\text{ex}}} = \frac{1}{f} \frac{\pi \ d_{\text{p}}^3}{6} \ (\rho_{\text{p}} - \rho_{\text{g}}) \ \vec{g} \approx \tau_{\text{p}} \ \vec{g}$$
 (2.17)

enthält die Parameter $\tau_{\rm p}$, $\rho_{\rm p}$ und $\rho_{\rm g}$ (die Partikelrelaxationszeit, die Partikel- und Fluiddichte), wobei die Gasdichte im allgemeinen vernachlässigbar ist.

Elektrostatischen Kräfte

Elektrostatische Kräfte wirken, wenn Partikel und/oder Oberflächen elektrische Ladungen tragen. Abhängig davon, welche Kombination vorliegt, treten Coulomb-, Spiegelund Influenzkräfte auf. **Coulombkräfte** wirken auf die Partikelphase, wenn Partikel und Oberfläche elektrische Ladungen tragen¹. Die Partikelrelativgeschwindigkeit aufgrund des elektrischen Feldes beträgt:

$$\vec{c}_{\text{ex}} = -\frac{n_{\text{e}} e}{f} \cdot \nabla \varphi \qquad (2.18)$$

Die Parameter $n_{\rm e}$, e und φ beschreiben die Anzahl der Ladungen pro Partikel, die elektrische Elementarladung und das elektrische Potential. Im allgemeinen Fall ist die Coulombkraft durch den Gradienten $\nabla \varphi$ ortsabhängig. Eine ortsunabhängige Kraft liegt z. B. vor, wenn ein senkrecht auf die Oberfläche gerichtetes Potential mit konstanter Feldstärke \vec{E} zu berücksichtigen ist:

$$\vec{c}_{\text{ex}} = \frac{n_{\text{e}} e}{f} \vec{E}$$
(2.19)

Die Theorie der Ladungsverteilung eines Aerosols nach Boltzmann wurde von Wiedensohler [99] erweitert. Die Untersuchungen ergaben einen erhöhten Anteil negativ geladener Partikel für Partikeldurchmesser kleiner als 0,05 μ m. Der Einfluß unterschiedlicher Annahmen zur Ladungsverteilung auf die Partikeldeposition sind von Opiolka [60] und Opiolka *et al.* [61] untersucht worden.

¹Die Aufladung der Partikel kann beispielsweise wie bei der Entstaubung von Abgasen mit einer Korona erfolgen [3]

Spiegelladungen werden hervorgerufen durch geladene Partikel in einem Raum mit ortsabhängigen dielektrischen Eigenschaften, z. B. durch ein geladenes Partikel auf einer Oberfläche. Ist diese nichtleitend, so konvergiert die Driftgeschwindigkeit gegen den Wert 0. Den größten Wert nimmt die Driftgeschwindigkeit an, wenn die Oberfläche hochleitend ist. Auf ein ungeladenes Partikel, das sich in einem elektrischen Feld befindet, wirkt die **Influenzkraft**. Durch das äußere elektrische Feld werden die Ladungen im Partikel polarisiert. Liegt ein inhomogenes Feld vor, so sind die Ladungen im Partikel verschieden starken elektrischen Kräften ausgesetzt, und das Partikel bewegt sich in das Gebiet der höheren Feldstärke. Für die in den nachfolgenden Kapiteln untersuchten Problemstellungen sind sowohl Spiegel- als auch Influenzkraft ohne Bedeutung. Die formelmäßige Beschreibung und einige weitere Aspekte sind u. a. in Opiolka [60] und Opiolka *et al.* [61] aufgeführt.

Kräfte aufgrund eines Temperaturgradienten

In Anwesenheit eines Temperaturgradienten innerhalb der Gasphase spielt die Thermophorese als weiterer Transportmechanismus eine wichtige Rolle. Insbesondere submikrone Partikel erfahren eine signifikante Kraft in Richtung niedrigerer Temperatur.

Für Partikel mit einem Durchmesser wesentlich unterhalb der mittleren freien Weglänge $(d_{\rm p} \ll \lambda)$ resultiert die Kraft auf das Partikel aus einem asymmetrischen Impulsaustausch. Auf der "heißen" Seite der Partikel ist die kinetische Energie der umgebenden Gasmoleküle größer als auf der "kalten" Seite.

Bei großen Partikeln $(d_p \gg \lambda)$ ist die physikalische Erklärung komplexer, da hier verschiedene Phänomene gleichzeitig vorliegen. Wesentlich ist wohl die Rückwirkung auf das Gas.

Für Partikeldurchmesser von 0,01 μ m bis 10,0 μ m, d. h. sowohl im freimolekularen Bereich als auch im Kontinuumsbereich, kann die Relativgeschwindigkeit der Partikel aufgrund der Thermophorese mit Hilfe der Berechnungsformel des thermophoretischen Koeffizienten nach Talbot *et al.* [91] bzw. nach der von Batchelor *et al.* [2] modifizierten Form berechnet werden:

$$\vec{c}_{\rm ex} = -K_{\rm th} \ \nu \ \frac{\nabla T}{T} \tag{2.20}$$

mit:

$$K_{\rm th} = \frac{2,294 \left(\frac{\lambda_{\rm g}}{\lambda_{\rm p}} + 2,2 \ Kn\right) \ C_{\rm s}}{\left(1+3,438 \ Kn\right) \left(1+2 \ \frac{\lambda_{\rm g}}{\lambda_{\rm p}} + 4,4 \ Kn\right)}$$
(2.21)

Die Parameter $\lambda_{\rm g}$ und $\lambda_{\rm p}$ beschreiben die Wärmeleitfähigkeit des Gases und der Partikel. In Abbildung 2.1 ist der thermophoretische Koeffizient als Funktion der Knudsenzahl dargestellt. Für typische Parameterkombination ist $0 \leq K_{\rm th} \leq 0.8$; der Wert von $K_{\rm th}$ läuft für größere Knudsenzahlen (d. h. Partikeldurchmesser kleiner als die mittlere freie Weglänge) gegen 0.55.



Abbildung 2.1: Der thermophoretische Koeffizient

Die resultierenden Geschwindigkeitskomponenten sind ortsabhängig, und die Berechnung des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes der Gasphase ist die notwendige Grundlage zur Berücksichtigung der Thermophorese.

3 Modellierung der turbulenten Transportprozesse

Voraussetzung für die Beschreibung des dynamischen Verhaltens submikroner Partikel innerhalb einer Strömung nach Euler ist die Berechnung des durch Differentialgleichungen festgelegten:

- Geschwindigkeitsfeldes,
- Temperaturfeldes,
- elektrischen Feldes
- Konzentrationsfeldes.

Der Transport submikroner Partikel auf eine laminar angeströmte Oberfläche wird detailliert in Schmidt [79] und Schmidt *et al.* [80] untersucht, wobei ein dimensionsloses Modell unter besonderer Berücksichtigung von Analogie- und Ähnlichkeitsbeziehungen erstellt wurde.

In technischen Prozessen kann aber die erzwungene Strömung nur in Ausnahmefällen als laminar angesehen werden. Die Turbulenz verändert das Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld und wirkt sich auf den konvektiv- diffusiven Stofftransport aus. Turbulente Strömungen sind:

• unregelmäßig

Im Gegensatz zur laminaren Strömung, bei der sich die Fluidteilchen wohlgeordnet nebeneinander bewegen, besteht die turbulente Strömung aus komplexen Variationen der Geschwindigkeit und Temperatur in Abhängigkeit von Ort und Zeit. $\bullet \ mischangs intensiv$

Die turbulenten Schwankungen erzeugen durch Querbewegung der Fluidteilchen einen hohen Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch quer zur Hauptströmungsrichtung. Dagegen erfolgt bei einer laminaren Strömung der Transport quer zur Hauptströmungsrichtung nur infolge von Molekülbewegungen, also durch innere Reibung, Wärmeleitung bzw. Diffusion.

• instationär und dreidimensional

Dies trifft auf die turbulente Schwankungsbewegung immer zu, nicht aber auf die statistischen Mittelwerte. Im Gegensatz dazu können laminare Strömungen stationär ein- oder zweidimensional sein.

• drehbehaftet

Die Überlagerung der mittleren Geschwindigkeit und der Wirbelelemente ist dafür verantwortlich. Es liegen Wirbelelemente verschiedenster Größe bzw. Schwankungsfrequenz vor, die obere Grenze wird durch die Geometrie und die untere Grenze durch die viskosen Kräfte bestimmt.

• dissipativ

An den kleinsten Elementen mit der größten Frequenz wirken viskose Kräfte, die die kinetische Energie der Turbulenzbewegung in innere Energie (Wärme) überführen.

Erste systematische Untersuchungen zur Beschreibung des Strömungszustandes hat Reynolds bereits im Jahr 1883 durchgeführt. Über eine Sonde wird der Hauptströmung innerhalb eines Rohres eingefärbtes Wasser zugesetzt. Solange eine laminare Strömung vorliegt, bleibt ein begrenzter Farbfaden bestehen. Eine Vermischung erfolgt stromabwärts nur durch die Diffusion. Die turbulente Strömung zeichnet sich durch eine schnelle Auflösung des Stromfadens aus, die Flüssigkeit wird gleichmäßig verteilt. Als Ergebnis dieser frühen Arbeiten von Reynolds wurde festgehalten, daß der Umschlag immer bei der gleichen dimensionslosen Kennzahl erfolgt, die heute als kritische Reynoldszahl bezeichnet wird. Strömungen mit Reynoldszahlen kleiner als Re_{krit} sind stets laminar. Für $Re \geq Re_{krit}$ besitzt die Strömung zunächst einen intermittierenden Charakter, d. h. sie ist zeitweise laminar und zeitweise turbulent. Man geht heute aufgrund von Theorien zur Turbulenzentstehung davon aus, daß kleinste Störungen diese Instabilität bewirken. Unterhalb der kritischen Reynoldszahl klingen diese Störungen ab und die Grundströmung stabilisiert sich. Turbulenz entsteht immer dann, wenn Scherkräfte aufgrund eines starken Gradienten in der mittleren Geschwindigkeit wirksam werden. Scherströmungen liegen z. B. in Rührwerksbehältern, in Mischzonen von Freistrahlen und im Nachlauf fester Körper vor.

Eine vollständige Modellierung der o.g. Austauschprozesse ist nahezu undurchführbar. Für eine grundsätzliche Behandlung des Stofftransportes, insbesondere wenn man sich für die Rückwirkung auf die Partikelphase interessiert, sind diese Einzelheiten der turbulenten Strömung nicht von Bedeutung. Angezeigt ist eine statistische Betrachtungsweise der Bewegung durch Einführung von Schwankungsgrößen. In Abbildung 3.1 ist der zeitliche Verlauf des Momentanwertes für die Geschwindigkeit an einem festen Ort aufgetragen.



Abbildung 3.1: Schwankungsgröße und Mittelwert (1) stationär (2) instationär

Der Momentanwert u(t) läßt sich darstellen als Summe aus dem zeitlichen Mittel \overline{u} und der Schwankung u'(t). Für eine stationäre, inkompressible Einphasenströmung erhält man für die Geschwindigkeitskomponenten in den drei Koordinatenrichtungen:

$$u(t) = \overline{u} + u'(t) \tag{3.1}$$

$$v(t) = \overline{v} + v'(t) \tag{3.2}$$

$$w(t) = \overline{w} + w'(t) \tag{3.3}$$

Die Mittelwerte $\overline{u}, \overline{v}$ und \overline{w} sind als zeitliche Mittelwerte an einem festen Ort zu bilden. Für diese Mittelwerte gilt (z. B.):

$$\overline{u} = (\Delta t)^{-1} \int_{t}^{t+\Delta t} u(x,t) dt$$
(3.4)

Das Zeitintervall Δt muß hinreichend groß gewählt werden, damit die Mittelwerte von der Zeit unabhängig werden. Aufgrund dieser Definition ist der zeitliche Mittelwert einer Schwankungsgröße stets null. Somit ergibt sich:

$$\overline{u'} = \overline{v'} = \overline{w'} = 0 \tag{3.5}$$

Die Kontinuitätsgleichung ist für die Mittelwerte und für die Schwankungswerte erfüllt:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \overline{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial \mathbf{z}} = 0$$
(3.6)

$$\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\partial \mathbf{w}'}{\partial \mathbf{z}} = 0$$
(3.7)

Der zeitliche Mittelwert einer quadrierten Schwankungsgeschwindigkeit wurde als Intensität (RMS= root mean square) der turbulenten Schwankung eingeführt:

$$I = \sqrt{\overline{u'^{2} + \overline{v'^{2}} + \overline{w'^{2}}}$$
(3.8)

Die relative Intensität ist identisch mit dem Begriff des *Turbulenzgrades*. Allgemein versteht man unter dem Begriff Turbulenzgrad Tu das Verhältnis aus dem mittleren Wert der drei zeitlich gemittelten Quadrate der Geschwindigkeitsschwankungen und der Geschwindigkeit der Grundströmung. Für die Kanalströmung ist $\overline{v} = \overline{w} = 0$ und es gilt nach Schlichting [75]:

$$Tu = \frac{\sqrt{\frac{1}{3}(\overline{u'^{2}} + \overline{v'^{2}} + \overline{w'^{2}})}}{u_{\infty}}$$
(3.9)

Sind die statistischen Eigenschaften im gesamten Strömungsfeld richtungsunabhängig und gleich groß, liegt eine *isotrope* Turbulenz vor:

$$\overline{u'^2} = \overline{v'^2} = \overline{w'^2} \tag{3.10}$$

In der Praxis wird vielfach der *scheinbare* Turbulenzgrad Tu^* verwendet. Er gibt das Verhältnis der gemessenen Standardabweichung zur mittleren Geschwindigkeit an einem festen Meßort an. Arbeiten die verwendeten Meßsonden weitgehend richtungsabhängig und sind die Zeitkonstanten hinreichend klein, liefert der Wert für Tu^* einen ausreichend genauen Wert zur Beurteilung des Turbulenzgrades.

Wie ausführlich für die Geschwindigkeit dargestellt, lassen sich alle abhängigen Variablen der Differentialgleichungen (die Geschwindigkeiten in Richtung der Raumachsen, die Temperatur und die Partikelanzahlkonzentration) für diese Betrachtungsweise der turbulenten Strömung mit Hilfe der generalisierten abhängigen Variablen ϕ als die Summe aus einem statistischen Mittelwert $\overline{\phi}$ und einem instationären Schwankungsanteil ϕ' darstellen:

$$\phi = \overline{\phi} + \phi' \tag{3.11}$$

Die Schwankungsgröße ist definiert als:

$$\frac{1}{t} \int_{0}^{t} \phi' \, dt = \overline{\phi'} = 0 \tag{3.12}$$

Diese statistische Darstellungsweise der abhängigen Variablen führt zu der Möglichkeit von einer dreidimensionalen und instationären zu einer zweidimensional rotationssymmetrischen und stationären Betrachtung der Strömungssituation zu gelangen, da in Richtung der Winkelkoordinate zeitlich gemittelt keine Austauschvorgänge auftreten.

3.1 Impulserhaltungsgleichungen

Die mittleren Geschwindigkeiten¹ der vorliegenden Strömungsprozesse werden mit Hilfe der Impulserhaltungsgleichungen (Impulsgleichungen bzw. Navier- Stokes- Gleichungen) unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung beschrieben (Bird *et al.* [4], Herleitung s. Anhang A.1). Wie in der Literatur für niedrige Geschwindigkeiten ($Ma \leq 0,3$) üblich [100], wird das Gas als inkompressibel angesehen. Vereinfachend wird ein stationärer rotationssymmetrischer Prozeß und ein vernachlässigbarer Gravitationseinfluß angenommen. In der Druck- Geschwindigkeitsformulierung lautet die Gleichung bei Verwendung der effektiven Viskositäten für die axiale Geschwindigkeitskomponente (z- Impuls):

$$u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_{\text{eff}} r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_{\text{eff}} r \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{2}{\rho_{\text{eff}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{1}{\rho_{\text{g}}} \frac{\partial p}{\partial z}$$
(3.13)

Die Gleichung für die radiale Geschwindigkeitskomponente (r- Impuls) lautet:

$$u \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_{\text{eff}} r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - 2 \nu_{\text{eff}} \frac{v}{r^2} - \frac{1}{\rho_{\text{g}}} \frac{\partial p}{\partial z}$$

$$(3.14)$$

3.2 Energieerhaltungsgleichung

Das Temperaturfeld läßt sich mit Hilfe der Energieerhaltungsgleichung bei gegebenem Geschwindigkeitsfeld ermitteln. Für den inkompressiblen, rotationssymmetrischen, stationären Fall ohne Wärmequellen lautet die Gleichung nach Bird *et al.* [4]:

$$u \frac{\partial T}{\partial z} + v \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(a_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(a_{\text{eff}} r \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$
(3.15)

¹Nachfolgend werden die zeitlichen Mittelwerte der Geschwindigkeiten mit u bzw. v bezeichnet.

Die effektive Temperaturleitfähigkeit a_{eff} in der Energieerhaltungsgleichung ist die analoge Intensitätsgröße zur effektiven Viskosität der Impulserhaltungsgleichungen und setzt sich aus der Temperaturleitfähigkeit $a = \lambda_{\text{g}}/(\rho_{\text{g}} c_p)$ und der turbulenten Austauschgröße $a_{\text{t}} = \frac{\nu_{\text{t}}}{Pr_{\text{t}}}$ zusammen. Speziell für die Rohrströmung ermittelte Ludwieg [53] $Pr_{\text{t}} = \frac{2}{3-r/R}$.

3.3 Partikeltransport

Aerosoldynamische Prozesse werden mathematisch beschrieben mit Hilfe der General Dynamic Equation nach Friedlander [19]. Die GDE ist die Bilanzgleichung zur Massenerhaltung der Partikelphase, die in analoger Form zur Energie- und Impulserhaltungsgleichung vorliegt. Für die Untersuchung des Partikeltransportes in einer turbulenten Strömung werden zunächst die folgenden Annahmen für die Partikelphase getroffen:

- monodisperse kugelförmige Partikel,
- externe aerosoldynamische Prozesse
- keine Partikelträgheit,
- keine internen Partikelquellen und -senken.

Unter Berücksichtigung dieser Vereinfachungen erhält man eine Transportgleichung für die Partikelphase: 2

$$u \frac{\partial n_{\rm p}}{\partial z} + v \frac{\partial n_{\rm p}}{\partial r} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{\rm eff} \ r \cdot \frac{\partial n_{\rm p}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{\rm eff} \ \cdot \frac{\partial n_{\rm p}}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot n_{\rm p} \sum c_{\rm ex,r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(n_{\rm p} \sum c_{\rm ex,z} \right)$$
(3.16)

 D_{eff} setzt sich aus dem Diffusionskoeffizienten und der Austauschgröße $D_{\text{t}} = \frac{\nu_{\text{t}}}{Sc_{\text{t}}}$ zusammen. Auf Basis der Analogie wird $Sc_{\text{t}} = \frac{2}{3-r/R}$ angenommen.

²Die Geschwindigkeitsanteile aufgrund externer Kräfte sind unterteilt in axiale $c_{\text{ex,z}}$ und radiale $c_{\text{ex,r}}$ Komponenten. Diese sind ortsunabhängig, hervorgerufen beispielsweise aufgrund des Schwerefeldes der Erde, oder aufgrund eines homogenen elektrischen Feldes oder ortsabhängig, hervorgerufen z. B. durch die thermophoretische Kraft.

3.4 Effektive Transportgrößen- Turbulenzmodelle

Zur Beschreibung des Turbulenzeinflusses enthalten die (in den vorherigen Kapiteln genannten) Transportgleichungen die sogenannten effektiven Transportkoeffizienten. Der Wert der Viskosität setzt sich zusammen aus dem Stoffwerte für den laminaren Fall und der Austauschgröße, die auch als Schein- oder Wirbelviskosität bezeichnet wird:

$$\nu_{\rm eff} = \nu + \nu_{\rm t} \tag{3.17}$$

Die Wirbelviskosität ν_t ist dabei in Analogie zu der stofflichen Viskosität eine Impulsaustauschgröße [75], die strömungs- und nicht fluidabhängig ist und aus der scheinbaren Schubspannung abgeleitet wird:

$$\tau_{\rm t} = -\rho_{\rm g} \ \overline{u' \ v'} = \ \nu_{\rm t} \ \frac{\partial u}{\partial r} \tag{3.18}$$

Die eigentliche Problemstellung ist damit die Berechnung der turbulenten Viskosität an jedem Ort innerhalb des betrachteten Kontrollraumes. Vorteil des Konzeptes ist, daß sich der Typ der partiellen Differentialgleichungen und die jeweiligen Rand- und Anfangsbedingungen nicht ändern. Es können somit die für laminare Strömungen üblichen Lösungsalgorithmen verwendet werden. Die dargestellte Zerlegung des Momentanwertes (sog. Reynoldssche Mittelung) zur Beschreibung der turbulenten Strömung wird allgemein akzeptiert, führt mathematisch jedoch neue Unbekannte, die Reynoldsspannungen, ein. Als Schließungsproblem der Turbulenz bezeichnet man die Beschreibung der turbulenten Spannungen durch die Mittelwerte der Strömungsgrößen.

Die nachfolgenden Modelle unterscheiden sich ganz wesentlich im notwendigen Aufwand, der zur Berechnung notwendig ist. Ein Beispiel für ein Modell ohne weitere Transportgleichung (sog. algebraisches Turbulenzmodell) ist der Prandtlsche Mischungswegansatz. Mit seiner Hilfe können einfache Strömungsfelder für Rohr-, Kanal- und Plattenströmungen und der turbulente Freistrahl berechnet werden. Der Mischungsweg ist als Weg definiert, den die einheitlich bewegten Fluidballen quer zur Hauptströmungsrichtung zurücklegen, bevor sie durch Vermischung ihre Individualität wieder einbüßen. Durch die Einführung des Mischungsweges l_m wird eine Beziehung zwischen der Scheinzähigkeit ν_t und der Geschwindigkeitsschwankung aufgestellt:



Abbildung 3.2: Der Mischungsweg

$$\nu_{\rm t} = l_{\rm m}^2 \left| \frac{\partial u}{\partial r} \right| \tag{3.19}$$

Komplexe Strömungssituationen können mit diesem Ansatz nicht modelliert werden, da hier der Mischungsweg nicht in geeigneter Weise ermittelt werden kann.

Abhilfe bieten numerische Modelle zur Beschreibung der Transportprozesse. Diese haben eine erhebliche Weiterentwicklung aufgrund der fortschreitenden verfügbaren Rechenleistung erfahren. Das bekannteste und am häufigsten eingesetzte Turbulenzmodell (Leschziner et al., [45]), das k- ε - Modell, berechnet mit zwei zusätzlichen Differentialgleichungen den Transportkoeffizienten:

$$\nu_{\rm t} = c_{\mu} \, \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{3.20}$$

Dabei kennzeichnet der Parameter k die turbulente kinetische Energie der Wirbel, ε die Dissipationsrate (d. h. die pro Zeit- und Masseneinheit in Wärme überführte kinetische Energie der Turbulenzbewegung) und c_{μ} eine Konstante, die auf Anpassungen experimenteller Daten beruht (s. nachfolgende Tabelle).

Die kinetische Energie der turbulenten Wirbelelemente wird ähnlich dem Turbulenzgrad definiert [65]:

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right)$$
(3.21)

Die Dissipationsrate ε berechnet sich für die zunächst betrachteten stationären, rotationssymmetrischen Strömungen nach Hinze [31]:

$$\varepsilon = \nu \left[\left(\frac{\partial u'}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v'}{\partial z} \right)^2 + \frac{5}{2} \left(\frac{\partial u'}{\partial r} \right)^2 \right]$$
(3.22)

Nach Pollard und Spalding [69] ergeben sich folgende partielle Differentialgleichungen in Zylinderkoordinaten:

$$v \frac{\partial k}{\partial r} + u \frac{\partial k}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_k} r \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{G}{\rho_{\rm g}} - \varepsilon \qquad (3.23)$$

$$v \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + u \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_{\varepsilon}} r \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{c_1 G}{\rho_{\rm g}} - c_2 \varepsilon \right)$$
(3.24)

Der Parameter G steht für die Reynoldsspannungen, die auch als Generierung der turbulenten Energie bezeichnet werden:

$$G = \nu_{\rm t} \cdot \rho_{\rm g} \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right\}$$
(3.25)

Die Konstanten c_1 , c_2 und c_{μ} sowie die Diffusionskonstanten σ_k und σ_{ε} basieren auf computergestützten Anpassungen experimenteller Daten [45]:

c_1	c_2	c_{μ}	$\sigma_{\rm k}$	σ_{ε}
1,44	1,92	0,09	$1,\!0$	$1,\!3$

Mit Hilfe der zusätzlichen Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und für die Dissipationsrate ε wird die stark ortsabhängige Größe der dynamischen Wirbelviskosität $\nu_{\rm t}$ im ganzen betrachteten Kontrollraum berechnet. Das eigentliche Probleme bei der Beschreibung des turbulenten Transportes mit Hilfe des k- ε - Modells ist:

- die Festlegung von Startwerten für die kinetische Energie und die Dissipationsrate,
- die Vorgabe aller Randbedingungen in unmittelbarer Nähe der Oberfläche.

Beim Standard- k- ε Modell wird als Ansatz üblicherweise das logarithmische Wandgesetz gewählt (Launder und Spalding [43]). Dabei wird für wandnahe Punkte jeweils überprüft, ob sie in der laminaren Grenzschicht liegen oder ob turbulente Einflüsse überwiegen. Bewährt hat sich diese Vorgehensweise insbesondere für die Simulation großräumiger Strömungsprobleme (Busnaina und Abuzeid [5], Fahn und Ahmadi [17], Li und Ahmadi [47] und [48] und Kuehn [40]). Erwartungsgemäß ist dieser Ansatz nicht geeignet, um die Transportvorgänge innerhalb der Geschwindigkeits- bzw. Konzentrationsgrenzschicht detailliert zu beschreiben, da diese Grenzschichten maximal eine Dicke von einigen Millimetern besitzen [79].

Spezifische Modellerweiterungen für langsame turbulente Strömungen, die sog. Low-k- ε - Modelle (s. Anhang A.3), sind von Patel *et al.* [66] systematisch untersucht worden. Die Erweiterungen werden von den Autoren kritisch bewertet, insbesondere wird ihnen teilweise jegliche physikalische Basis abgesprochen. Die erhebliche Streuung der Ergebnisse und die Einschränkungen in der Anwendung für Strömungen mit größeren Reynoldszahlen haben diese Vorgehensweise als weniger geeignet erscheinen lassen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden deshalb eigene Modellerweiterungen durchgeführt, wobei zunächst als Basis neuere Erkenntnisse über die Bedingungen in der wandnahen Region genutzt wurden. Die Modellerweiterungen zielen speziell auf die Beschreibung langsamer turbulenter Strömungen mit Grenzschichtcharakter ab. In der Literatur recht gut untersucht ist die turbulente Rohrströmung (experimentelle Arbeit von Hinze [31] und theoretische z. B. von Launder [43]). Für turbulente Strömungen über feste Wände sind trotz unterschiedlichster Außenströmungen die Zustände in Wandnähe sehr ähnlich. An der festen Wand selbst gilt die Undurchdringlichkeits- und die Haftbedingung (d. h. beide Geschwindigkeitskomponenten und damit auch die Reynoldsspannungen sind hier Null). Die effektive Viskosität wird von der stofflichen in der viskosen Unterschicht dominiert. Diese aber auch die turbulente Außenströmung sind durch die vorhandenen Modelle (Leschziner et al. [45]) hinreichend beschrieben. Erweiterungen sind notwendig für den Ubergangsbereich, wo die örtlichen Reynoldsspannungen G stark von der örtlichen Dissipationsrate ε abweichen [45]. Ein naheliegender Weg ist hier die Verwendung eines Mischungswegansatzes, so daß die Wirbelviskosität ν_t in Abhängigkeit vom dimensionslosen Wandabstand $y_{\tau} = \frac{yu_{\tau}}{\nu}$ (s. Gleichung 4.5 ff.) für die drei Bereiche der universellen Geschwindigkeitsverteilung separat berechnet wird [82]:

viskose (laminare) Unterschicht $0 < y_{\tau} < 5$ $\nu_t = 0$ Übergangsbereich $5 < y_{\tau} < 70$ Mischungswegansatz volle Turbulenz $70 < y_{\tau}$ k- ε -Modell

Die Randbedingungen für das k- ε -Modell beim dimensionslosen Wandabstand $y_{\tau} = 70$ werden zunächst entsprechend der Arbeit von Leschziner et al. [45] eingesetzt. Besteht an dieser Stelle das lokale Gleichgewicht (Produktion und Dissipation der turbulenten kinetischen Energie sind nahezu gleich groß), so läßt sich der konvektive Term vernachlässigen, und es ergibt sich für die turbulente kinetische Energie:

$$k_{(y_{\tau}=70)} = \frac{u_{\tau}^2}{\sqrt{c_{\mu}}} \tag{3.26}$$

Die Randbedingung für die Dissipationsrate ε wird aus dem logarithmischen Wandgesetz abgeleitet:

$$\varepsilon_{(y_{\tau}=70)} = \frac{u_{\tau}^3}{\kappa \ (R-r_P)} \tag{3.27}$$

Letztere Randbedingung führt jedoch bei der turbulenten Rohrströmung im betrachteten Bereich von $Re < 10^5$ zu keinen befriedigenden Ergebnissen.

Für turbulente Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen ist deshalb im Rahmen der Untersuchungen [82] folgende Randbedingung entwickelt worden:

$$\varepsilon_{(y_{\tau}=70)} = \frac{c_{\mu} \ k_P^2}{l_{\rm m}^2 \ |\frac{du}{dr}|} = \frac{u_{\tau}^4}{l_{\rm m}^2 \ |\frac{du}{dr}|}$$
(3.28)

3.5 Numerisches Lösungsverfahren zur Modellierung rotationssymmetrischer Transportprozesse

Die in den vorherigen Unterkapiteln dargestellten partiellen Differentialgleichungen beschreiben zwar die physikalischen Effekte mit den vorgegebenen Einschränkungen exakt, sind jedoch analytisch nur für vereinfachte Einzelanwendungen lösbar. Ein numerisches Verfahren, das die Differentiale in Differenzenquotienten überführt und eine iterative Lösung der Problemstellung ermöglicht, bietet sich insbesondere im Hinblick auf die Rechenleistung moderner Datenverarbeitungssysteme an.

Nachfolgend wird ein numerisches Lösungsverfahren, basierend auf dem von Patankar [64] entwickelten SIMPLER-³ Algorithmus eingesetzt, das durch eine Erweiterung speziell die Berücksichtigung externer Kräfte vereinfacht (Stratmann und Whitby [88]). Die Intention ist nicht die vollständige Dokumentation und Darstellung der numerischen Berechnungsmethode (s. Patankar [64]). Vielmehr werden die Besonderheiten bei Berücksichtigung der externen Kräfte und die algorithmusspezifischen Besonderheiten zur Festlegung eines Körpers im Kontrollraum angesprochen.

3.5.1 SIMPLER- Algorithmus

Insbesondere in der dimensionslosen Form ist die Analogie der Impuls-, Energie- und Stofferhaltungsgleichungen deutlich zu erkennen (Stratmann und Whitby [88]). Bis auf die Druckkorrektur bestehen sie jeweils aus Konvektions-, Diffusions- und Quellen-/Senkenterm

$$\nabla \left(\rho_{g} \ \vec{u}_{\phi} \ \phi \right) = \nabla \left(\Gamma_{\phi} \ \nabla \ \phi \right) + S_{\phi} \tag{3.29}$$

mit den generalisierten Größen:

- ϕ : unabhängige Variable
- Γ_{ϕ} : Intensitätsgröße
- S_{ϕ} : Quellen- und Senkenterm

 $^{^3{\}rm Semi-}$ Implicit Method for Pressure Linked Equation Revised



Das zu untersuchende System wird mit Hilfe eines Rasters bestehend aus Haupt- und Geschwindigkeitsstützstellen (Gridpunkten) diskretisiert (s. Abb. 3.3).

Abbildung 3.3: Gridpunkte und Kontrollvolumen

Auf dem Punkt P (Hauptstützstelle) werden Temperatur, Konzentration und Transportkoeffizienten berechnet, während die Geschwindigkeit u an den Grenzen des Kontrollvolumens (auf den Punkten w und e) und die Geschwindigkeit v auf den Punkten s und nbestimmt wird. Durch diese Vorgehensweise und die Bestimmung der Massenströme an den vier Seiten wird die Kontinuität für jedes diskrete Kontrollvolumen überprüft.

Bei der Berechnung des Partikeltransportes aufgrund von externen Kräften mit Hilfe der Partikelerhaltungsgleichung erfüllt das neu eingeführte Partikelgeschwindigkeitsfeld $\vec{u}_{\rm p}$ zunächst nicht die Kontinuitätsgleichung. Die notwendigen Erweiterungen, die den Partikelfluß über die Kontrollvolumina betreffen, sind von Stratmann und Whitby [88] erläutert worden.

3.5.2 Numerische Modellierung

Der in dieser Arbeit eingesetzte Algorithmus ermöglicht die numerische Berechnung der genannten Strömungs- und Wärme-/Stofftransportprozesse, die mit Hilfe der sog. "General- ϕ - Equation" mathematisch beschrieben werden können, unter folgenden physikalischen Randbedingungen:

- stationärer Zustand,
- inkompressibles Fluid,
- 2- dimensional rotationssymmetrische Strömung.

In Zylinderkoordinaten kann Gleichung 3.29 vereinfacht dargestellt werden [79]:

$$\rho_{\rm g} \left(v \; \frac{\partial \phi}{\partial r} + u \; \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} \left(\Gamma_{\phi} \; r \; \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma_{\phi} \; \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_{\phi} \tag{3.30}$$

Die Diskretisierung des Rohres und der umströmten Kreisscheibe als exemplarisch untersuchte rotationssymmetrische Problemstellungen erfolgt in einem virtuellen Rohr entsprechend Abbildung 3.4. Die Vorgehensweise ist zweckmäßig zur Definition der Randund Startbedingungen des Programmes. Die Abmessungen des Kontrollsystems sind für das Beispiel der umströmten Kreisscheibe hinreichend groß gewählt, um eine Störung des Strömungsfeldes zu vermeiden.



Abbildung 3.4: Der rotationssymmetrische Kontrollraum

Zusätzlich gilt für die Partikelphase:

- nur externe Prozesse (d. h. Prozesse, die Partikelflüsse über Systemgrenzen bewirken,
- hundertprozentige Haftwahrscheinlichkeit der Partikel nach Deposition,
- keine Rückwirkung der Partikelphase auf die Gasphase.

Ausgehend von der mathematischen Beschreibung ist der erste Schritt der Realisierung des numerischen Modells die Zuordnung von systemspezifischen zu algorithmusspezifischen Variablen. Die sich ergebenden Korrespondenzen für das allgemeine Strömungsfeld (d. h. ohne Körper) lauten:

Prozess	ϕ	u_{ϕ}	v_{ϕ}	Γ_{ϕ}	S_{ϕ}
Impuls	u	u	v	ν_{eff}	$\frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\text{eff}} \ \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \ \frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_{\text{eff}} \ r \ \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial z}$
	v	u	v	$ u_{ m eff}$	$\frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\text{eff}} \ \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \ \frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_{\text{eff}} \ r \ \frac{\partial v}{\partial r} \right) - 2 \ \nu_{\text{eff}} \ \frac{v}{r^2} + \frac{\partial p}{\partial r}$
kinetische Energie	k	u	v	$\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_{\rm k}}$	$G- ho_{ m g}~arepsilon$
Dissipationsrate	ε	u	v	$\frac{\nu_{\rm t}}{\sigma_{\varepsilon}}$	$rac{arepsilon}{k} \left(c_1 \; G - c_2 \; ho_{ m g} \; arepsilon ight)$
Wärmetransport	Т	u	v	$a_{ ext{eff}}$	0
Anzahlkonzentration	$n_{\rm p}$	$u_{\rm p}$	$v_{\rm p}$	$D_{\rm eff}$	0

c_1	c_2	c_{μ}	$\sigma_{\rm k}$	σ_{ε}	Vorwondoto Konstanton
1,44	$1,\!92$	$0,\!09$	$1,\!0$	$1,\!3$	

Die bereits angesprochene Wahl der Stützstellen (Gridpunkte) ist ein entscheidender Faktor für die Qualität der Berechnungsergebnisse und die benötigte Rechenzeit. Betrachtet man z.B. das Geschwindigkeitsfeld, so befindet sich die Zone der größten Änderungen zwischen Grenzschichtende und Oberfläche des Körpers. Diese Überlegungen führen zu einer Gittereinteilung mit sich exponentiell verkleinernden Abständen in der Nähe der Körperoberflächen. Die Aufteilung der Stützstellen im übrigen Kontrollsystem wurde ausreichend fein gewählt, um Wirbelstrukturen etc. auflösen zu können. Dem Programm wird <u>die Existenz eines Körpers</u>, dessen Umrandungen auf Geschwindigkeitsgridpunkte gesetzt werden, durch die Veränderung der Transportkoeffizienten vorgegeben:

- Bei der Berechnung der Geschwindigkeit mit Hilfe der Impulserhaltungsgleichung ist innerhalb des ruhenden festen Körpers kein Geschwindigkeitsgradient vorhanden. Die Viskosität läuft gegen unendlich.
- Bei der Energieerhaltung ist die normierte Temperatur θ auf der Kreisscheibe nach Definition gleich null. Es findet eine "unendlich gute" Wärmeleitung zu einer imaginären Wärmesenke statt, um die Temperatur konstant auf $T_{\rm w}$ zu halten. Daraus folgt, daß Γ_{ϕ} gegen unendlich läuft.
- Analog zur Energieerhaltung erfolgt die Festlegung bei der Partikelerhaltung. Die normierte Partikelanzahlkonzentration auf der Oberfläche der Scheibe ist null, und die "unendlich gute" Partikeldiffusion zu einer imaginären Partikelsenke hält die Konzentration auf der Scheibe konstant auf dem Startwert ($\Gamma_{\phi,w} = \infty$).

Die Variation der Transportkoeffizienten auf den Körperstützstellen, wie sie in dieser Arbeit eingesetzt wird, weist im Vergleich zur bisherigen Definition mit Hilfe der Quell- bzw. Senkenterme [60] Vorteile auf. Diese zeigen sich in der Reduzierung des Programmieraufwandes, ein Aspekt der zwischenzeitlich insbesondere bei komplexeren Geometrien zunehmende Bedeutung erhalten hat.

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse des Modells (mit den durchgeführten Erweiterungen im wandnahen Bereich) für den Fall der Rohrströmung und der angeströmten Kreisscheibe dargestellt und, soweit vorhanden, mit Daten aus der Literatur verglichen.
4 Turbulente Rohrströmungen

4.1 Geschwindigkeitsprofil für glatte Rohre

Im folgenden Unterkapitel werden die berechneten Geschwindigkeitsprofile der turbulenten Rohrströmung mit den wenigen experimentellen Daten und verschiedenen theoretischen Arbeiten verglichen.



Abbildung 4.1: Geschwindigskeitprofile laminarer/ turbulenter Rohrströmungen

Die Abbildung 4.1 zeigt die axiale Geschwindigkeit bezogen auf die mittlere Geschwindigkeit im Rohr als Funktion der radialen Laufkoordinate $(1 - \frac{r}{R})$. Bei dieser Vorgabe der Abszisse ist bei 0 die Wand und bei r = R die Symmetrieachse. Dargestellt werden das ausgeprägte Geschwindigskeitprofil der laminaren Strömung im Vergleich zu den kolbenförmigen Profilen der turbulenten Strömung (Re = 5.000, 10.000 und 100.000). Auch bei der turbulenten Strömung haftet das Fluid an der Wand fest und die Turbulenzbewegung wird behindert. Setzt man eine glatte Wand voraus, dann bildet sich eine dünne Schicht, in der die scheinbare Schubspannung vernachlässigbar wird. Diese zähe Unterschicht wird deshalb auch häufig als laminare Unterschicht bezeichnet; diese Bezeichnung ist jedoch irreführend, da auch an der Wand unregelmäßige Schwankungen um den Mittelwert vorliegen [70].

In den Abbildungen 4.2 - 4.7 werden verschiedene theoretische Berechnungsansätze mit experimentellen Daten von Nikuradse aus [75] (umgerechnete Werte aus einer dimensionslosen Darstellung) oder Laufer [42] verglichen. Dargestellt wird jeweils das axiale Geschwindigkeitsprofil, wobei die Geschwindigkeitswerte auf den Maximalwert bezogen worden sind, als Funktion der radialen Laufkoordinate. Zum Vergleich herangezogen wurde eine weitverbreitete Interpolationsformel:

$$\frac{u}{u_{max}} = \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^m\right)^n \tag{4.1}$$

Bei Anwendung dieser Gleichung ist zu beachten, daß die Werte für die Exponenten n und m von der Reynoldszahl abhängig sind und in der Literatur unterschiedlich aufwendig berechnet werden. In der einfachsten Form, dem 1/7- Potenzgesetz nach Prandtl, ist m = 1 und $n = \frac{1}{7}$. Die Gültigkeit dieses Ansatzes ist jedoch auf einen Bereich von 15.000 $\leq Re \leq 70.000$ beschränkt [44]. Der Wert des Exponenten n ändert sich nach Truckenbrodt [95] zwischen $n = \frac{1}{6}$ für Re = 4.000 und $n = \frac{1}{10}$ für Re = 3.200.000 (m = 1). Nunner [58] gibt für glatte Rohre mit einer turbulenten Strömung (Re < 100.000) eine Beziehung zur Berechnung des Exponenten n aus der Widerstandszahl λ an ¹:

$$n = \sqrt{\lambda} \qquad ; \qquad \lambda = 0,316 \ Re^{-0.25} \tag{4.2}$$

Bei einem konstanten Wert von $n = \frac{1}{7}$ variiert Karman [37] den Exponenten m im Bereich von $1, 25 \leq m \leq 2$. Im Fall einer laminaren Rohrströmung ergeben sich die Exponenten m = 2 und n = 1. Dubs [14] setzt m = 2 und berechnet n wie folgt:

$$n = \frac{1}{1 + \sqrt[6]{\frac{Re}{50}}}$$
(4.3)

¹Weitere Ansätze zur genaueren Berechnung der Widerstandszahl sind im Anhang A.2 aufgeführt.

In den nachfolgenden Abbildungen werden die Reynoldszahlen (Re=4.000; 12.300; 30.800) und der Bereich der Laufkoordinate geändert. Betrachtet man den ganzen Rohrabschnitt (s. Abb. 4.2, 4.4, 4.6) ergibt sich jeweils eine recht gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und den Näherungsformeln. Der vollausgebildete turbulente Bereich der Strömung wird für die unterschiedlichen Reynoldszahlen recht gut nachvollzogen, während der wandnahe Bereich (s. Abb. 4.3, 4.5, 4.7) nur sehr unzureichend angegeben wird. Die Ergebnisse des eingesetzten o. g. Modells sind insbesondere in diesem Bereich deutlich besser. Der höhere Aufwand ist notwendig, da der Nahbereich der Oberfläche maßgebend für die Deposition der Partikel ist.



Abbildung 4.2: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 4.000

In den Abbildungen 4.8 und 4.9 sind ergänzend bei gleicher Darstellungsart die Ergebnisse der numerischen Berechnungen (Standard- und erweiteres k- ϵ - Modell) verglichen worden mit den Ergebnissen, die mit Hilfe des Mischungswegansatzes (MWA) nach Gleichung 3.19 und des Ansatzes von Karman erzielt worden sind. Insbesondere die mit dem MWA berechneten Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den numerischen.In Abbildung 4.9 ist erneut der wandnahe Bereich besonderes hervorgehoben. Hier ist die gute Übereinstimmung des erweiteren Modells dieser Arbeit mit den Ergebnissen des MWA und denen von Karman zu erkennen.



Abbildung 4.3: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 4.000 (Nahbereich)



Abbildung 4.4: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 12.300



Abbildung 4.5: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 12.300 (Nahbereich)



Abbildung 4.6: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 30.000



Abbildung 4.7: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 30.000 (Nahbereich)



Abbildung 4.8: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 10.000



Abbildung 4.9: Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei Re = 10.000

Die verwendete dimensionsbehaftete Darstellung ist weniger geeignet, um den wandnahen Bereich hervorzuheben. Bezieht man die Ergebnisse auf die Schubspannungsgeschwindigkeit u_{τ} , die aus der Wandschubspannung τ_w gemäß A.2 berechnet wird

$$u_{\tau} = \sqrt{\frac{\tau_{\rm w}}{\rho_{\rm g}}} \tag{4.4}$$

und trägt diese als Funktion des dimensions
losen Wandabstand y_τ auf

$$y_{\tau} = \frac{y \ u_{\tau}}{\nu} \tag{4.5}$$

dann ergibt die Darstellung der Strömungsgrößen eine universelle Form (s. Abb. 4.10). Diese Geschwindigkeitsverteilung gilt sowohl für Rohr- als auch für Kanalströmung und wird in der Literatur häufig benutzt. Sie verläuft im Gebiet vollausgebildeter turbulenter Strömung unabhängig von der Reynoldszahl als Gerade in Abhängigkeit vom dimensionslosen Wandabstand. Aus diesem Zusammenhang leitet sich das logarithmische Wandgesetz ab [75]:

$$\frac{u}{u_{\tau}} = 2,5 \ln \left(\frac{y u_{\tau}}{\nu}\right) + 5,5 \tag{4.6}$$

bzw.

$$\frac{u}{u_{\tau}} = 5,75 \log \left(\frac{y \, u_{\tau}}{\nu}\right) + 5,5 \tag{4.7}$$

Dieses Gesetz gilt nur für die Bereiche, in denen die laminare Schubspannung gegenüber der turbulenten vernachlässigt werden kann. In unmittelbarer Wandnähe, wo die turbulente Schubspannung gegen Null geht und die laminare Schubspannung wesentlich wird, gilt für die Geschwindigkeit das laminare Gesetz:

$$\frac{u}{u_{\tau}} = \frac{y \ u_{\tau}}{\nu} \tag{4.8}$$



Abbildung 4.10: Die universelle Geschwindigkeitsverteilung für glatte Rohre

In der Abbildung 4.10 sind die entsprechenden Geschwindigkeitsprofile in dimensionsloser Darstellung gezeichnet. Auch in dieser Form, die zum einen eine geschwindigkeitsunabhängige Darstellung ermöglicht und die gleichzeitig den wandnahen Bereich besonders verdeutlicht, herrscht eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten und den theoretischen Ergebnissen dieser Arbeit. Die experimentellen Werte von Nikuradse wurden bei Reynoldszahlen von 4.000 und 105.000 erzielt. Erneut ist zu erkennen, daß der sehr einfache Ansatz von Prandtl (1/7 Potenzgesetz) die Verhältnisse sehr unzureichend wiedergibt. Die Auswirkungen auf die Berechnung der Deposition submikroner Partikel werden in den nachfolgenden Unterkapiteln dargestellt. Der Bereich laminarer Reibung liegt nach Schlichting [75] bei $\frac{y \ u_{\tau}}{\nu} < 5$ (ln $\frac{y \ u_{\tau}}{\nu} < 1, 61$) vor. Für $5 < \frac{y \ u_{\tau}}{\nu} < 70$ (oder $1, 61 < \ln \frac{y \ u_{\tau}}{\nu} < 4, 25$) liegt ein Übergangsbereich vor. Ab $\frac{y \ u_{\tau}}{\nu} > 70$ (bzw. ln $\frac{y \ u_{\tau}}{\nu} > 4, 25$) herrscht immer rein turbulente Reibung. Aus der Beziehung $\frac{y \ u_{\tau}}{\nu} < 5$ läßt sich die Stärke der laminaren Grenzschicht δ_1 berechnen:

$$\delta_{\rm l} = 5 \; \frac{\nu}{u_{\tau}} \tag{4.9}$$

Durch Umstellung der Gleichung läßt sich die Größe der Grenzschichtdicke bezogen auf den Radius R des Rohres in Abhängigkeit von der Reynoldszahl berechnen mit:

$$\frac{\delta_{\rm l}}{R} = \frac{50,28}{Re^{7/8}} \tag{4.10}$$

4.2 Turbulente Strömungen in rauhen Rohren

Technisch verwendete Rohre besitzen mehr oder weniger rauhe Innenwände, so daß glatte Rohre in der Praxis Sonderfälle sind. Infolge der Rauhigkeit wird die Widerstandszahl λ größer als bei glatten Rohren. Grundsätzlich werden die Formen der Rauheit eines Rohres unterschieden in Wandrauheit und Wandwelligkeit. Als Wandrauheit wird dabei die Rauhigkeit bezeichnet, die bei besonders dichten und groben Wandunebenheiten z. B. bei rauhen Eisen- oder Betonrohren auftritt. Dagegen tritt die Wandwelligkeit bei kleinerer Rauheit oder Übergängen zwischen den Rauheitselementen auf. Die Wandwelligkeit bildet somit den Übergang vom glatten zum rauhen Rohr.

Wandunebenheiten werden durch die Rauhigkeitshöhe k erfaßt. Das Verhältnis dieser Größe zum Rohrradius R (bzw. bei nicht kreisförmigem Querschnitt zum gleichwertigen Radius) wird von Schlichting [76] als *relative Rauhheit* bezeichnet.

Umfangreiche und systematische Untersuchungen an rauhen Rohren wurden von Nikuradse [75] durchgeführt. Er benutzte Kreisrohre, die mit Sand einer definierten Korngröße beklebt waren. Durch Variation des Rohrdurchmessers und der Korngröße des Sandes wurde die relative Rauhigkeit² in den Grenzen von 1/500 bis 1/15 verändert. In Abbildung 4.11 sind die Ergebnisse dargestellt. Mit Hilfe dieser Daten lassen sich

 $^{^{2}\}mathrm{Im}$ Rahmen der Arbeit wird die Sandrauhigkeit nach Nikuradse mit k_{s} bezeichnet.



Abbildung 4.11: Widerstandsdiagramm für technisch rauhe Rohre [75]

die Gesetzmäßigkeiten für die Geschwindigkeitsverteilung und die Widerstandszahl für das rauhe Rohr mit denen für glatte Rohre in Zusammenhang bringen. Im Bereich der laminaren Strömung () ($Re \leq 2.300$) haben alle rauhen Rohre den gleichen Widerstand wie das glatte Rohr. Im Bereich der turbulenten Strömung existiert für jede relative Rauhigkeit ein gewisser Reynoldszahlenbereich, in welchem das rauhe Rohr den gleichen Widerstand hat wie das glatte (). In diesem Bereich ist es *hydraulisch glatt* und λ hängt nur von der Reynoldszahl ab. In Abhängigkeit von der relativen Rauhigkeit weichen dann aber ab einer bestimmten Reynoldszahl die Kurvenverläufe voneinander ab ().

Die Höhe der Rauhigkeit ist im hydraulisch glatten Bereich so gering, daß sämtliche Rauhigkeiten innerhalb der laminaren Unterschicht liegen. λ hängt innerhalb dieses Gebietes nur von Re ab:

$$0 \leq \frac{k_{\rm s} \, u_{\tau}}{\nu} \leq 5 \qquad ; \qquad \lambda = \lambda(Re)$$

$$(4.11)$$

Die Höhe der Rauhigkeit ist im Übergangsbereich größer als die Breite der laminaren Unterschicht. Der Zusatzwiderstand rührt im wesentlichen vom Formwiderstand der Rauhigkeitselemente her, die zum Teil in die turbulente Strömung ragen. Die Widerstandszahl ist somit im Übergangsbereich abhängig von der Reynoldszahl Re und $\frac{k_s}{R}$:

$$5 \leq \frac{k_{\rm s} u_{\tau}}{\nu} \leq 70 \qquad ; \qquad \lambda = \lambda(\frac{k_{\rm s}}{R}, Re)$$

$$(4.12)$$

Ragen alle Rauhigkeitselemente aus der laminaren Unterschicht heraus, überwiegt der Anteil der einzelnen Formwiderstände der Rauhigkeiten (vollständig rauher Bereich). Es gilt das rein quadratische Widerstandsgesetz, wobei λ nur noch abhängig ist von $\frac{k_s}{R}$:

$$\frac{k_s \ u_\tau}{\nu} > 70 \qquad ; \qquad \lambda = \lambda(\frac{k_s}{R}) \tag{4.13}$$

Die Dicke der laminaren Unterschicht nimmt bei steigender Reynoldszahl ab, deshalb kann ein Rohr bei kleinen Geschwindigkeiten *hydraulisch glatt*, bei mittleren Geschwindigkeiten teilweise *rauh* und bei großen Geschwindigkeiten *vollständig rauh* sein.

Aus dem Verlauf der Größen für λ lassen sich für die verschiedenen Gebiete entsprechende Näherungsformeln herleiten [95]:

- laminar , $\lambda = \frac{Re}{64}$
- turbulent (glatt), $\frac{k}{R} \to 0$, $\lambda = 0,316 Re^{-0.25}$
- turbulent (glatt , $Re \to \infty$)

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 2,0 \, \log\left(Re \, \sqrt{\lambda}\right) - 0,8 \tag{4.14}$$

• turbulent (allgemein)

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 2,0 \, \log\left(\frac{2,51}{Re \,\sqrt{\lambda}} + 0,27\frac{k}{2R}\right) \tag{4.15}$$

• turbulent (rauh, $Re \to \infty$)

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 1,14-2,0 \ \log\left(\frac{k}{2R}\right) \tag{4.16}$$

Die Geschwindigkeitsverteilung in rauhen Rohren

Die Wandrauhigkeit ist, so Truckenbrodt [95], ohne Einfluß auf die Schwankungsgeschwindigkeit, wenn von den Vorgängen in der schmalen viskosen Unterschicht abgesehen wird. Nach Nunner [58] kann die Geschwindigkeitsverteilung in einem rauhen Rohr ebenfalls mit einem Potenzgesetz der Form aus Gleichung (4.1) angenähert werden. Der Exponent berechnet sich aus der Rohrreibungszahl des rauhen Rohres $n = \sqrt{\lambda}$.



Abbildung 4.12: Geschwindigkeitsverteilung für glatte und rauhe Wände [75] (hier ist $U = u_{\text{max}}$, bei y/R = 0 ist die Wand)

In der Abbildung 4.12 wird die Abhängigkeit des Geschwindigkeitsprofils von der Wandrauhigkeit dargestellt. Mit zunehmender Rauhigkeit, d. h. fallendem R/k_s , ist die Kurve weniger steil. Die eigenen numerischen Ergebnisse unterschätzen den Einfluß der Wandrauhigkeit geringfügig. Die universelle Geschwindigkeitsverteilung rauher Rohre ist in Abbildung 4.13 dargestellt. Bei vollständig rauhen Rohren läßt sich der Verlauf der Geschwindigkeitsverteilung annähern mit:

$$\frac{u}{u_{\tau}} = 5,75 \log \left(\frac{y \ u_{\tau}}{\nu}\right) + 8,5 - 5,75 \log \left(\frac{k_s \ u_{\tau}}{\nu}\right)$$
(4.17)

In die Geschwindigkeitsverteilung eines rauhen Rohres geht demnach zusätzlich die Rauhigkeit des Rohres ein. Die laminare Unterschicht spielt bei einer "vollständig rauhen" Wand, wie Abbildung 4.13 zeigt, keine Rolle.

Andere Rauhigkeiten, aber auch der Übergang sandrauh - technisch rauh werden im Rahmen dieser Arbeit unter Verweis auf das Buch von Schlichting nicht weiter besprochen.



Abbildung 4.13: Universelle Geschwindigkeitsverteilung für glatte und rauhe Wände [75] (hier wird $\frac{u}{u_{\tau}}$ mit φ bezeichnet)

4.3 Temperaturfeld

Die partiellen Differentialgleichungen der Impuls- und Energieerhaltung sind gekoppelt. Im Programm erfolgt deshalb die Berechnung des Temperatur- und des Geschwindigkeitsfeldes gleichzeitig.

In der nachfolgenden Abbildung 4.14 wurde zur Darstellung des radialen Temperaturprofils an verschiedenen axialen Positionen die normierte Temperatur θ verwendet $(T_{\infty}(z)$ entspricht der Temperatur auf der Symmetrieachse):

$$\theta = \frac{T - T_W}{T_\infty(z) - T_W} \tag{4.18}$$

Bei einer konstanten Reynoldszahl wird jeweils der Verlauf der dimensionslosen Temperatur berechnet. Dieser stimmt qualitativ mit Ergebnissen von Gröber *et al.* [26] überein. Liegt ein vollausgebildetes Temperaturprofil vor, so ist dieses unabhängig von der axialen Laufkoordinate und der vorliegenden Temperaturdifferenz. Unmittelbar an der Wand ergibt sich eine Steigung der Verlaufes (der Temperaturgradient), welche mit der entsprechenden Steigung der Geschwindigkeit übereinstimmt (s. Abb. 4.4). Im wandnahen Bereich ist die Analogie zwischen Energie- und Impulstransport gültig [26]. Es liegt jeweils eine schwache Abhängigkeit von der Reynoldszahl vor.

In Analogie zur Darstellung des universellen Geschwindigkeitsverlaufes im Bereich der viskosen Unterschicht (s. Abb. 4.10) ist eine weitere dimensionslose Temperatur zur Darstellung verwendet worden.

$$T^{+} = (T - T_{W}) \frac{\rho_{\rm g} c_{\rm p} u_{\tau}}{q}$$
(4.19)

In der Abbildung 4.15 ist diese Temperatur als Funktion des dimensionslosen Wandabstandes y_{τ} aufgetragen. Diese Art der Darstellung verdeutlicht die Analogie zum Impulstransport. Weitere Details hierzu sind in der Arbeit von Hishida *et al.* [32] dargestellt. Es ergibt sich des weiteren eine sehr gute Übereinstimmung mit den aus Temperaturmessungen und Berechnungen des Wärmestroms ermittelten Daten von Qiu *et al.* [71].



Abbildung 4.14: Temperaturprofil der turbulenten Rohrströmung



Abbildung 4.15: Dimensionsloses Temperaturprofil der turbulenten Rohrströmung

In der Abbildung 4.16 wird die Temperaturdifferenz zwischen Wandtemperatur und der Temperatur auf der Symmetrieachse als Funktion der Laufkoordinate z/L dargestellt. In dem Beispiel, welches im nachfolgenden Kapitel bei der Beschreibung des Partikeltransportes aufgrund der Thermophorese wieder aufgegriffen wird, beträgt die Eintrittstemperatur des Fluides $T_{\rm Ein} = 443$ K und die Wandtemperatur des Rohres $T_{\rm w} = 293$ K (Re= 10.000 bezogen auf die Wandtemperatur). Innerhalb des Rohres (L=0,965 m) wird das Fluid fast vollständig auf die Temperatur der Wand abgekühlt. Im Eintrittsbereich herrscht der größte Gradient, hier findet auf einem sehr kurzen Abschnitt bereits ein erheblicher Abbau des Temperaturunterschiedes statt (s. Abb. 4.16). Bei Re = 20.000, d. h. der zweifachen Anströmgeschwindigkeit, wird auf der Rohrachse die Wandtemperatur nicht mehr erreicht. Obwohl sich offensichtlich die mittlere Temperatur wesentlich ändert, ergibt sich in Abb. 4.14 an den verschiedenen Abschnitten das gleiche Profil.



Abbildung 4.16: Ausgleich der Temperaturdifferenz (Wand und Symmetrieachse)

Bei gleicher Darstellung wird in der Abbildung 4.17 die Temperaturdifferenz zwischen Wandtemperatur und der adiabaten Mitteltemperatur $T_{\rm m}(z)$ im jeweiligen Abschnitt dargestellt. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden dabei verglichen mit Ergebnissen einer Enthalpiebilanz, wie sie beispielsweise auch von Incropera und DeWitt [33] veröffentlicht wurde. Es ergibt sich:

$$\frac{T - T_{\rm w}}{T_{\rm Ein} - T_{\rm w}} = exp(\frac{2 \pi R \alpha z}{\rho_{\rm g} \dot{V} c_p}) \tag{4.20}$$

Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Die geringen Abweichungen im Einlaufbereich sind darauf zurückzuführen, daß die halbempirischen Gleichungen für sehr kurze Abschnitte weniger geeignet sind.



Abbildung 4.17: Ausgleich der Temperaturdifferenz

4.4 Wirbelviskosität

Wie bereits im Unterkapitel 3.4 dargestellt, ist die Berechnung der effektiven Transportgrößen der wesentliche Faktor, um die Unterschiede der turbulenten zur laminaren Strömung zu erfassen. Im folgenden werden experimentelle Daten von Nikuradse mit theoretischen Ergebnissen verglichen, die auf der Basis des Mischungswegansatzes oder des erweiterten $k - \varepsilon$ Models berechnet wurden. Folgende Ansätze zur Berechnung des Mischungsweges wurden für $Re > 10^5$ getestet:

• **Prandtl** ermittelt für große Reynoldszahlen empirisch einen linearen Zusammenhang ($\kappa = 0, 4$) zwischen dem Wandabstand und dem Mischungsweg (aus Schlichting [75]) :

$$l_{\rm m} = \kappa \ (R - r) \tag{4.21}$$

• Nikuradse gibt für die Rohrströmung eine ebenfalls aus Versuchen ($\text{Re} > 10^5$) abgeleitete Interpolationsformel für den gesamten Rohrquerschnitt an. Die laminare Unterschicht wird (wie bei Prandtl) nicht berücksichtigt (aus [75]):

$$\frac{l_{\rm m}}{R} = 0,14 - 0,08 \,\left(1 - \frac{(R-r)}{R}\right)^2 - 0,06 \,\left(1 - \frac{(R-r)}{R}\right)^4 \tag{4.22}$$

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen ist der Einfluß der laminaren Unterschicht jedoch nicht mehr vernachlässigbar und so werden nachfolgende Ansätze für diesen Bereich berücksichtigt:

• Van Driest [12] führt zur Berücksichtigung der laminaren Unterschicht bei niedrigeren Reynoldszahlen eine Dämpfungsfunktion ein:

$$l_{\rm m} = \kappa \left(R - r\right) \left[1 - exp\left(-\frac{\left(R - r\right)u_{\tau}}{A^+ \nu^*}\right)\right]$$
(4.23)

Die van Driest'sche Konstante wurde für hydraulisch glatte Wände mit $A^+ = 26$ ermittelt. ν^* ist die dimensionslose Viskosität gemäß Gleichung 4.26.

• Rotta berücksichtigt die laminare Unterschicht (δ_l) , indem er den Prandtl'schen Mischungswegansatz erst an ihrer Grenze ansetzt. Nach [95] gilt :

$$l_{\rm m} = 0$$
 ; $0 \le (R - r) \le \delta_1$ (4.24)

$$l_{\rm m} = \kappa \ \left((R - r) - \delta_{\rm l} \right) \qquad ; \delta_{\rm l} \le (R - r) \tag{4.25}$$

In Abbildung 4.18 sind die Werte für die radiale Verteilung des Mischungsweges dargestellt, die mit den unterschiedlichen Ansätzen berechnet wurden. Der Ansatz von Rotta, der insbesondere für den wandnahen Bereich geeignet ist, wird im weiteren mit dem von Nikuradse kombiniert.



Abbildung 4.18: Radiale Verteilung des Mischungsweges

Die Wirbelviskosität $\nu_{\rm t}$ ist bei bekanntem Mischungsweg nur noch eine Funktion des Geschwindigkeitsgradienten, der unmittelbar aus den aufgezeigten Profilen der Geschwindigkeit ermittelt werden kann. Um einen universellen Verlauf der scheinbaren kinematischen Viskosität ν^* zu erhalten, wird $\nu_{\rm t}$ auf die Schubspannungsgeschwindigkeit u_{τ} und den Radius R bezogen: $\nu^* = \frac{\nu_{\rm t}}{u_{\tau} R}$ (4.26)

Für die laminare Strömung ist der Wert von $\nu^* = \nu_{lam}^*$ nur abhängig von der Reynoldszahl:

$$u_{\tau} = u \sqrt{\frac{\lambda}{8}}$$
 mit $\lambda = \frac{64}{Re}$

und eingesetzt:

$$\nu_{\rm lam}^* = \frac{\nu}{u_\tau \ R} = \frac{1}{\sqrt{2 \ Re}} \tag{4.27}$$

In der Abbildung 4.19 ist der nach Nikuradse ermittelte Verlauf der scheinbaren Viskosität im Vergleich zu den stofflichen Viskositäten der laminaren Strömung dargestellt. Für den turbulenten Fall ergibt sich an der Rohrwand zunächst ein recht steiler Anstieg, ein Maximum bei ca. r/R=0,5 und im Bereich der Symmetrieachse der Wert Null.



Abbildung 4.19: Radiale Verteilung der scheinbaren kinematischen Viskosität

Die berechneten Werte der stofflichen Viskosität sind konstant und jeweils nur von der Reynoldszahl abhängig. Außer im unmittelbaren Nahbereich der Wand ist der Anteil der stofflichen Viskosität ohne Bedeutung und wird deshalb auch vernachlässigt. Dies ist auch in der Abbildung 4.20 besonders gut zu erkennnen. Dargestellt ist das Verhältnis von scheinbarer zu laminarer Viskosität als Funktion des Radius bei verschiedenen Reynoldszahlen.

Wie bereits erwähnt, ist der Gültigkeitsbereich des Mischungswegansatzes auf einfache Strömungen beschränkt, da die Reynoldsspannungen außer vom Mischungsweg nur noch von dem radialen Geschwindigkeitsgradienten abhängen. Im wandnahen Bereich liefert der Mischungswegansatz für die Rohrströmungen gute Ergebnisse. Im Nahbereich der Symmetrieachse läuft der Gradient und damit die Scheinviskosität gegen Null. Dies wird als ansatzbedingter Fehler im allgemeinen akzeptiert, da der Stoff- und Wärmetransport zur Wand gut beschrieben wird.



Abbildung 4.20: Vergleich laminare und kinematische Viskosität

Die numerisch ermittelten Ergebnisse für die effektiven kinematischen Viskosität sind in der Abbildungen 4.21 über dem auf den Rohrradius normierten Wandabstand dargestellt. Für die in der Arbeit von Laufer [42] vorliegenden Randbedingungen (R = 12,34cm und einer Geschwindigkeit von 3,05 m/s) d.h. bei Re=50.000 wird das Ergebnis der numerischen Berechnungen verglichen mit denen der Gleichung von Reichardt [72].

$$\nu^* = \frac{1}{15} \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \left[1 + 2\left(\frac{r}{R}\right)^2 \right]$$
(4.28)

Im wandnahen Bereich herrscht eine gute Übereinstimmung. Für Abszissenwerte größer als 0,3 weichen die Ergebnisse, die mit Hilfe der Gleichung 3.20 und dem Mischungsweg nach Nikuradse berechnet wurden, deutlich ab. Der Geschwindigkeitsgradient wird in Richtung Rohrachse zu Null, und der Ansatz ist in diesem Bereich weniger geeignet. Die numerischen Ergebnisse stimmen ebenfalls mit den experimentellen Daten von Laufer [42], wie sie in Hinze [31] zitiert werden, gut überein.



Abbildung 4.21: Radiale Verteilung der scheinbaren kinematischen Viskosität

5 Partikelabscheidung in turbulent durchströmten Rohren

Der Transport und die Abscheidung von Partikeln in Rohren und Kanälen sind in vielen theoretischen und einigen experimentellen Arbeiten sowohl für laminare als auch für turbulente Strömungsbedingungen untersucht worden. Häufig werden jedoch Einzeleffekte betrachtet.

5.1 Konvektiv- diffusive Partikelabscheidung

Zunächst werden im folgenden Abschnitt die Ergebnisse des erweiterten numerischen Modells dieser Arbeit verglichen mit theoretischen und experimentellen Ergebnissen der genannten Arbeiten. Für die Berechnung des konvektiv- diffusiven Transportes submikroner Partikel in laminaren und turbulenten Rohrströmungen bietet sich aufgrund der Analogie der Transportgleichungen die Verwendung halbempirischer Gleichungen an, die aus Experimenten zum Wärmetransport gewonnen wurden. Die Vorgehensweise wurde bereits ausführlich in [79] erläutert. In dem hier untersuchten Beispiel, wie auch in den meisten praktischen Problemstellungen des Wärme- und Stofftransportes, liegt keine Reynoldssche Analogie vor. Deshalb werden bei Transportprozessen empirische Näherungsgleichungen, mit eng begrenztem Gültigkeitsbereich, in Form von Potenzprodukten verwendet:

- für den Wärmeübergang: $Nu = k \cdot Re^m \cdot Pr^n$
- für den Stoffübergang: $Sh = k \cdot Re^m \cdot Sc^n$

Die Parameter k, m und n sind experimentell für unterschiedliche Anordnungen bestimmt worden. Es erfolgt die näherungsweise Berechnung der mittleren Depositionsgeschwindigkeit mit:

$$v_{\rm d} = \frac{Sh \cdot D}{2 R} \tag{5.1}$$

Für die Wärmeübertragung im laminar durchströmten Rohr ermittelte Hausen [29] folgende Gleichung:

$$Nu = 3,66 + \frac{0,19 \left(Re \ Pr \ 2 \ R/L\right)^{0,8}}{1+0,117 \left(Re \ Pr \ 2 \ R/L\right)^{0,467}}$$
(5.2)

Durch das Ersetzen von Nu durch Sh und Pr durch Sc erhält man die Gleichung für den konvektiven Stoffübergang. Für 2 R/L < 0, 1 gilt:

$$Sh = 3,66 + \frac{0,19 \left(Re \ Sc \ 2 \ R/L\right)^{0,8}}{1+0,117 \left(Re \ Sc \ 2 \ R/L\right)^{0,467}}$$
(5.3)

Für 2 R/L > 0, 1 vereinfacht sich diese Gleichung zu:

$$Sh = 0,664 \sqrt[3]{Sc} \sqrt{Re \frac{2 R}{L}}$$

$$(5.4)$$

Die Gleichung ist gültig für Re < 2.300 und 0, 1 < Re Pr 2 R/L < 10.000 bzw. 0, 1 < Re Sc 2 R/L < 10.000.

In der Literatur wird die Penetration des weiteren häufig mit der empirischen Gleichung von Gormley und Kennedy [25] berechnet. Es gilt für $\xi \leq 0,02$:

$$P = 1 - 2,56 \,\xi^{2/3} + 1,2 \,\xi + 0,177 \,\xi^{4/3} \tag{5.5}$$

und für $\xi > 0,02$

$$P = 0,819 \ exp \ (-3,657 \ \xi) + \ 0,097 \ exp \ (-22,3 \ \xi) + 0,032 \ exp \ (-57 \ \xi) \tag{5.6}$$

mit :
$$\xi = \frac{D \ L}{u_{\infty} \ R^2} = \frac{\pi \ D \ L}{\dot{V}}$$

Friedlander [19] ermittelte aus experimentellen Untersuchungen folgende Gleichung:

$$v_{\rm d} = 0,042 \ u_{\infty} \ f^{1/2} \ Sc^{-2/3} \tag{5.7}$$

mit u_{∞} als mittlerer Strömungsgeschwindigkeit und dem Rohrreibungsfaktor f entspechend Gleichung A.24.

Für den entsprechenden turbulenten Fall wird die Gleichung von Gnielinski [24] verwendet:

$$Sh = \frac{1/2 \ f \ (Re - 1000) \ Sc}{1 + 12, 7 \ \sqrt{f/2} \ (Sc^{2/3} - 1)} \left[\ 1 + \left(\frac{2 \ R}{L}\right)^{2/3} \right]$$
(5.8)

mit dem Rohrreibungsfaktor f gemäß Gleichung A.26. Diese Gleichung ist gültig für: 2.300 < Re < 1.000.000 und 0, 6 < Sc < 2.000

Den Zusammenhang zwischen der mittleren Depositionsgeschwindigkeit v_d und der Penetration P (Durchdringung) stellt sich, wie bereits erwähnt, wie folgt dar:

$$P = exp\left(-\frac{2 \pi R L v_{\rm d}}{\dot{V}}\right)$$

oder umgeformt:

$$v_{\rm d} = \frac{V}{2 \pi R L} ln \left(\frac{1}{P}\right)$$

In der Abbildung 5.1 sind die Ergebnisse für die laminare Rohrströmung bei einer ausgewählten Geometrie (Rohrlänge L=10 m, Rohrdurchmesser d=1,52 cm) dargestellt. Aufgetragen ist die Penetration P als Funktion des Partikeldurchmessers bei Reynoldszahlen von 50 und 2.000. Der Vergleich der numerisch ermittelten Ergebnisse mit denen der empirischen Gleichung nach Gormley und Kennedy und den Analogiebeziehungen (Gleichung 5.3 und 5.4) zeigt eine perfekte Übereinstimmung bei Re = 50. Für Re = 2.000ergeben sich minimale Abweichungen bei der Anwendung der Analogiebeziehungen für Partikeldurchmesser unterhalb von 10 nm.



Abbildung 5.1: Penetration bei laminarer Rohrströmung



Abbildung 5.2: Penetration bei unterschiedlichen Reynoldszahlen

Für die gleiche Geometrie werden in der Abbildung 5.2 die Ergebnisse für die laminare Rohrströmung (Re = 2.000) verglichen mit den numerisch berechneten Ergebnissen für die turbulente Rohrströmung bei verschiedenen Reynoldszahlen. Ein gravierender Unterschied tritt auf, wenn man die Kurvenverläufe bei Re = 2.000 für den laminaren oder turbulenten Fall vergleicht. Da der Umschlag der Strömung von laminar auf turbulent von der Vorgeschichte, den Eintrittsbedingungen am Rohr, der Wandrauhigkeit und weiteren Parametern abhängt, kann es bei diesen Bedingungen recht schnell zu Abweichungen bei experimentellen Ergebnissen kommen. Bei Reynoldszahlen größer als 5.000 liegen die Kurvenverläufe übereinander, d. h. die kürzere Verweilzeit der Partikel wird durch den intensiveren Austauschprozeß ausgeglichen.



Abbildung 5.3: Vergleich verschiedener Literaturstellen zur turbulenten Abscheidung

In der Abbildung 5.3 werden weitere Ansätze zur Berechnung der Partikelabscheidung in turbulenten Rohrströmungen aus der Literatur verglichen mit Ergebnissen dieser Arbeit. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung bei den bereits angegebenen Randbedingungen. Der Partikelgrößenbereich von 0,001 μ m bis 0,010 μ m ist in der nachfolgenden Abbildung 5.4 ausgeblendet worden, um den am meisten interessierenden Größenbereich näher betrachten zu können. Insgesamt unterschätzen die berechneten Werte die Vergleichswerte der Literatur etwas, wobei die konvektiv- diffusive Abscheidung für Partikel oberhalb von 0,1 μ m für die vorgegebenen Randbedingungen vernachlässigbar ist. Die dargestellte Abweichung ist damit eher unbedeutend im Vergleich zur möglichen Abscheidung aufgrund von Thermophorese und Elektrophorese.



Abbildung 5.4: Vergleich verschiedener Literaturstellen zur turbulenten Abscheidung

Es bietet sich aber (wie in Abb. 5.5 dargestellt) die Möglichkeit, den im Rahmen dieser Arbeiten durchgeführten Ansatz zur Berechnung des turbulenten Diffusionskoeffizienten zu erläutern. Zur Bestimmung des Wirbelviskosität ν_t im Grenzschichtbereich und über die Berechnung des turbulenten Diffusionskoeffizienten liegen mehr als 20 Veröffentlichungen vor, die jeweils recht kontroverse Modellansätze verfolgen. Geht man an dieser Stelle zurück zur Abbildung 4.20, so ist zu erkennen, daß nur im Bereich der viskosen Unterschicht (hier wird im Modell $\nu_t = 0$ vorgegeben) die stofflichen Transportkoeffizienten eine Bedeutung besitzen. Im Übergangsbereich und im Bereich der vollausgebildeten Turbulenz ist der turbulente Austausch maßgeblich. Wird der gewählte Ansatz der effektiven Transportgrößen auch für den Diffusionsterm akzeptiert, ergibt sich eine etwas



Abbildung 5.5: Vergleich verschiedener Ansätze für die viskose Unterschicht

andere Situation. Bei kleinen Partikeldurchmessern unterhalb $d_{\rm p} = 0, 10 \ \mu {\rm m}$ ergeben sich auch für den stofflichen Transportkoeffizienten sehr kleine Zahlenwerte. In diesem Fall können die turbulenten Austauschgrößen selbst für die viskose Unterschicht nicht vernachlässigt werden. Bei nochmaliger Vergrößerung im Vergleich zu Abbildung 5.4 werden in Abbildung 5.5 lediglich unterschiedliche Ansätze zur Berechnung von $\nu_{\rm t}$ in der viskosen Unterschicht verwendet. Verglichen werden Ergebnisse, die mit Hilfe des Standardk- ϵ - Models, der Analogiebeziehung von Gnielinski und des erweiterten turbulenten Modells erzielt werden. Setzt man die Analogie als Maßstab an, so weichen insbesondere das Standard- k- ϵ - Model und der $\nu_t = 0$ - Ansatz erheblich ab. Berücksichtigt man Literaturstellen, die für die viskose Unterschicht einen turbulenten Austausch vorsehen, und beachtet ferner den kleinen Zahlenwert des Diffusionskoeffizienten, so kann diese Abweichung erklärt werden. Wird für $y_{\tau} \leq 5$ nach Friedlander [20] $\frac{\nu_t}{\nu} = (\frac{y_{\tau}}{14.5})^3$ (Numerik 1) oder $\frac{\nu_t}{\nu} = (\frac{y_\tau}{8.9})^3$ (Numerik 3) nach Davies [10] eingesetzt, ergibt sich erwartungsgemäß eine bessere Übereinstimmung. Der Ansatz von Owen [63] $\frac{\nu_t}{\nu} = (\frac{y_\tau}{10.0})^3$, mit Numerik 2 gekennzeichnet, wird im weiteren verwendet, da hier bei niedrigen Reynoldszahlen unabhängig vom Partikeldurchmesser die größte Übereinstimmung erzielt wurde.



Abbildung 5.6: Die berechneten Depositionsgeschwindigkeiten



Abbildung 5.7: Die berechneten Depositionsgeschwindigkeiten für variable Re

In Abbildung 5.6 sind die Depositionsgeschwindigkeiten als Funktion des Partikeldurchmessers für die bereits genannte Geometrie berechnet worden. Die typischen vförmigen Depositionskurven liegen nicht vor, da Sedimentation, Wirbelträgheit und weitere Transportmechanismen, die maßgeblich die größere Partikelfraktion beeinflussen, erst im nächsten Unterkapitel zusätzlich berücksichtigt werden. Unabhängig von der Reynoldszahl (s. Abb. 5.7) liegt eine gute Übereinstimmung vor, wobei es bei Penetrationen $P \geq 0,99$ zu rechnerischen Abweichungen bedingt durch den Logarithmus kommt. Die berechneten Depositionsgeschwindigkeiten kleiner als 10^{-2} cm/s sind allerdings technisch ohne Bedeutung, da dann zumeist andere Transportmechanismen überwiegen.

5.2 Partikelabscheidung aufgrund von Temperaturgradienten und Wirbelträgheit

Für die laminare Rohrströmung liegen sowohl experimentelle als auch theoretische Arbeiten zur Partikeldeposition, wie beispielsweise in Stratmann *et al.* [90] und Stratmann [89] zusammengefaßt, vor. In Abbildung 5.8 ist die Abscheidewahrscheinlichkeit als Funktion der Eintrittstemperatur des Gases bei vorgegebener Wandtemperatur von 20 °C dargestellt. Das verwendete numerische Modell zeigt eine gute Übereinstimmung zu den experimentellen Daten, wenn der thermophoretische Koeffizient nach Talbot *et al.* [91] bzw. Batchelor und Shen [2] verwendet wird. Da die numerischen Berechnungen dieser Arbeit zur turbulenten Rohrströmung auf der Arbeit von Stratmann aufbauen, ist die vollständige Übereinstimmung für den laminaren Fall vorgegeben.



Abbildung 5.8: Thermophoretische Abscheidung in einer laminaren Rohrströmung

Im Gegensatz zum laminaren Fall sind für die turbulente Strömung nur wenige Studien verfügbar, die die Abscheidung aufgrund der Thermophorese beschreiben. Diese wurden aktuell von Romay *et al.* [74] dargestellt und insbesondere durch weitere Experimente ergänzt. In der Abbildung 5.9 ist die Abscheidewahrscheinlichkeit (1 - P) als Funktion der Eintrittstemperatur bei $d_p = 0.3 \ \mu m$ und für Re= 5.520 aufgetragen.



Abbildung 5.9: Thermophoretische Abscheidung in einer turbulenter Rohrströmung

Verglichen werden die numerischen Ansätze zur laminaren und turbulenten Deposition im Rohr, die experimentellen Ergebnisse von Romay und der einfache theoretische Ansatz von Romay. Letzterer beruht auf den schon erwähnten Analogiebeziehungen und wird korrigiert, indem die mittleren Temperaturwerte (wie in der Literatur sonst üblich) zur Berechnung der Reynoldszahl etc. verwendet wurden. Aufgrund der Ergebnisse zur Deposition submikroner Partikel (Schmidt [79]) wird im Rahmen dieser Arbeit abweichend die Temperatur an der Wand eingesetzt (in der Abb. 5.9 mit verb. Romay bezeichnet). Bei einer Reynoldszahl von 5520 wird mit dem laminaren Modell die Abscheidung deutlich zu niedrig berechnet, während das turbulente die experimentellen Daten gut widerspiegelt. Eine gute Übereinstimmung zeigt ebenfalls der verbesserte Ansatz (verb. Romay).

Bei gleicher Auftragungsweise zeigt die Abbildung 5.10 die entsprechenden Ergebnisse für die Reynoldszahl 9659. Hier werden sowohl mit dem verbesserten Ansatz als auch mit dem numerischen Modell Werte berechnet, die deutlich niedriger sind als die experimentellen Daten. Romay *et al.* [74] selbst sehen, unter Zitierung weiterer Literaturstellen, die nicht berücksichtigte Wirbelträgheit als Ursache für die Abweichung an. Gleichzeitig wird hier von den Autoren ein erheblicher Forschungsbedarf gesehen, der uns veranlaßt hat, dieser Frage im Detail nachzugehen. Die Arbeiten hierzu werden allerdings Gegenstand eines neuen Forschungsprojektes sein, welches nicht mehr im Rahmen dieser Arbeit abgeschlossen wird.



Abbildung 5.10: Thermophoretische Abscheidung in einer turbulenter Rohrströmung

Nahezu alle bisherigen Arbeiten zur **Wirbelträgheit** stützen sich auf die Experimente von Liu und Agarwal [51], die folgenden Zusammenhang zwischen der dimensionslosen Relaxationzeit

$$\tau_{\rm p}^{+} = \frac{\tau_{\rm p} \ u_{\tau}^{2}}{\nu} \tag{5.9}$$

und der dimensionslosen Depositionsgeschwindigkeit

$$v_{\rm d}^+ = \frac{v_{\rm d}}{u_\tau} \tag{5.10}$$

in Form einer halbempirischen Gleichung ermittelten:

$$v_{\rm d}^{+} = 6 \cdot 10^{-4} \ (\tau_{\rm p}^{+})^2 \tag{5.11}$$

Untersucht wurde hier die Deposition von Öltröpfchen mit Durchmessern von 1,4 μ m bis 21 μ m im Rohr bei zwei Reynoldszahen von 10.000 und 50.000.

In der Abbildung 5.11 sind Wirbelträgheit und der konvektiv- diffusive Transport superpositioniert. Dargestellt sind die Ergebnisse für Reynoldszahlen von 5.000 und 10.000 für Partikel mit einer Dichte von 1000 kg/m³. Die Wirbelträgheit verliert für Werte von $\tau_{\rm p}^+$ kleiner 0,1 an Bedeutung; hier steigt die Bedeutung des konvektiv- diffusiven Transportes.



Abbildung 5.11: Dimensionslose Darstellung der Depositionsgeschwindigkeiten

6 Partikelabscheidung auf turbulent angeströmte Oberflächen

Der Transport submikroner Partikel auf eine laminar angeströmte Oberfläche ist detailliert in Schmidt [79] und Schmidt *et al.* [80] untersucht worden, wobei das dimensionslose Modell insbesondere Analogie- und Ähnlichkeitsbeziehungen berücksichtigt. Darauf aufbauend ist auch für Systeme bei reduziertem Druck der Transport der submikronen Partikel untersucht worden (Schmidt *et al.* [81], [77] und [78]). Bei der Vorstellung der Ergebnisse dieser Arbeiten sind von industriellen Kunden immer wieder Bedenken bzgl. der Modellannahme der laminaren Strömungssituation geäußert worden. Auch innerhalb von Sicherheitswerkbänken wurde der Turbulenz eine maßgebliche Rolle zugedacht. Studien, welche den Einfluß der Turbulenz auf die Abscheidung beschreiben, liegen nicht vor. Basierend auf den Modellerweiterungen und Ergebnissen der turbulenten Rohrströmung wird dieser Aspekt nachfolgend untersucht. Die zunächst untersuchte Geometrie (s. Abb. 6.1) ist die senkrecht angeströmte, horizontal liegende Kreisscheibe (Abbildung ist um 90 ° gedreht).

Die Diskussion der Ergebnissse des numerisch berechneten Geschwindigkeitsfeldes der freistehenden, umströmten Kreisscheibe erfolgt zunächst qualitativ mit Hilfe der Abbildung 6.2. Die Geschwindigkeitsvektoren verdeutlichen die Ausbildung eines Wirbels hinter der Kreisscheibe. Es entsteht eine Rückströmung auf der Symmetrieachse im Nachlauf des Körpers mit einer Geschwindigkeit, die dem absoluten Wert der ungestörten Anströmungsgeschwindigkeit in etwa entspricht. Auf der Staupunktlinie ist in Übereinstimmung mit der Annahme des Modells der Staupunktströmung keine radiale Geschwindigkeitskomponente vorhanden. Es zeigt sich die dominierende tangentiale Geschwindigkeit im Nahbereich der Oberfläche.


Abbildung 6.1: Kontrollraum der umströmten Kreisscheibe

Liegt das Hauptaugenmerk in der Darstellung der Transportmechanismen auf der Frontseite, so ist die Dicke der Kreisscheibe und eine veränderte Geometrie im Nachlauf (wie experimentelle Untersuchungen von Kottke [39] gezeigt haben) von untergeordneter Bedeutung. Dieser Nahbereich der Oberfläche der Scheibenvorderseite wird im folgenden detailliert untersucht.



Abbildung 6.2: Strömungsfeld um die Kreisscheibe

6.1 Laminar angeströmte Kreisscheiben

Im folgenden Abschnitt werden ausgewählte Ergebnisse der bereits erwähnten eigenen Arbeiten zum Partikeltransport auf die laminar angeströmte Kreisscheibe aufgeführt. Aufbauend auf dieser Beschreibung der Transportmechanismen im Nahbereich der Oberfläche insbesondere unter Berücksichtigung der Wirkung externer Kräfte werden im nächsten Abschnitt lediglich die Änderungen aufgrund der Turbulenz besprochen.



Abbildung 6.3: Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für verschiedene Re-Zahlen

In Abbildung 6.3 ist die normierte Grenzschichtdicke¹ (δ_v^*) als Funktion der radialen Laufkoordinate $r^* = \frac{r}{R}$ (mit R als Radius der Scheibe) für verschiedene *Re*-Zahlen aufgetragen. Verglichen werden die Ergebnisse der numerischen Berechnung mit der für die Staupunktnähe entwickelten analytischen Lösung nach Schlichting [75]:

$$\delta_{\rm v}^* = \frac{\delta_{\rm v}}{R} = 2,45 \cdot Re^{-0.5} \tag{6.1}$$

¹Das Ende der Geschwindigkeitgrenzschicht ist gemäß der Definition von Schlichting [75] für die ebene Staupunktströmung erreicht, wenn die radiale Geschwindigkeit 99 % der max. radialen Geschwindigkeit beträgt.

Ausgehend vom Staupunkt² bis ca. $r^* \approx 0,6$ stimmen die jeweiligen Ergebnisse gut überein. Im Randbereich des Wafers nimmt die numerisch berechnete Grenzschichtdicke aufgrund der Umströmung, die eine erhebliche Beschleunigung verursacht, deutlich ab.

Die dimensionslose Temperaturgrenzschicht $\delta_{\rm T}^*$ als Funktion der radialen Koordinate r^* zeigt das gleiche Verhalten wie in Abbildung 6.3 dargestellt. Für eine Gasströmung (vereinfachend mit Pr = 0,7) wird eine mittlere Temperaturgrenzschichtdicke aus den Ergebnissen der numerischen Berechnungen bestimmt:

$$\delta_{\rm T}^* = \frac{\delta_{\rm T}}{R} = 3,50 \cdot Re^{-0.5} \tag{6.2}$$

Nachfolgend werden die numerischen Berechnungsergebnisse des Partikelanzahlkonzentrationsfeldes dargestellt und mit den entsprechenden Werten des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes verglichen. Von besonderem Interesse ist die Abgrenzung zwischen dem Partikeltransport aufgrund von Konvektion und Diffusion und dem Transport bedingt durch die resultierende Partikelrelativgeschwindigkeit verursacht durch äußere Kräfte.

Das Partikelanzahlkonzentrationsfeld ohne Berücksichtigung externer Kräfte

Die Péclet-Partikel-Zahl $(Pe_p = \frac{u_{\infty}R}{D})$ ist der wichtigste Parameter bei der Berechnung des Partikeltransportes und entspricht für den Druck $p = 10^5$ Pa (Luft) und Raumtemperatur den folgenden Partikeldurchmessern (in μ m):

	$Pe_{\rm p} = 10^5$	$Pe_{\rm p} = 10^7$
$Re = 10^2$	0,020	0,30
$Re = 10^3$	0,006	0,06
$Re = 10^4$	0,002	0,02

Diese Tabelle zeigt, daß für eine bestimmte $Pe_{\rm p}$ -Zahl je nach Re-Zahl sehr unterschiedliche Partikeldurchmesser vorliegen. Für typische Randbedingungen sind in Abbildung 6.4 die numerisch berechneten normierten Grenzschichtdicken δ_c^* über der normierten radialen Koordinate r^* für die Randbedingungen $Re = 10^4$ und $Pe_{\rm p} = 10^5$, 10^6 und 10^7 dargestellt.

²Direkt im Staupunkt ist eine Geschwindigkeitsgrenzschicht hier nicht definiert, da dort die radiale Geschwindigkeit den Wert null besitzt.



Abbildung 6.4: Normierte Konzentrationsgrenzschichtdicke

Es ist zu erkennen, daß sich mit steigender $Pe_{\rm p}$ -Zahl (d. h. geringerem Diffusionskoeffizienten bei konstanter Anströmgeschwindigkeit und konstantem Radius) die Grenzschichtdicke verringert. Verglichen werden die Ergebnisse der numerischen Berechnung mit denen einer eindimensionalen Näherungslösung. Ausgehend von der Staupunktumgebung zeigt sich bis $r^* \approx 0,7$ eine gute Übereinstimmung für beide Ansätze. Erst im Randbereich des Wafers verringert sich die Grenzschichtdicke erwartungsgemäß deutlich. Die Schmidt-Zahl ($Sc = \nu/D = Pe_{\rm p}/Re_{\rm g}$) stellt dabei die den Stofftransport charakterisierende Größe dar. Unter Verwendung der Ergebnisse der numerischen Berechnung zur Bestimmung der Konstanten lautet die Gleichung für die normierte Grenzschichtdicke der Partikelanzahlkonzentration:

$$\delta_c^* = 3, 0 \cdot Sc^{-1/3} \cdot Re^{-0.5} = 3, 0 \cdot Pe_{\rm p}^{-1/3} \cdot Re^{-1/6} \tag{6.3}$$

In Abbildung 6.5 sind die Kurvenprofile der normierten Geschwindigkeit, der Partikelanzahlkonzentration Φ und der dimensionslosen Temperatur ($\theta = \frac{T-T_w}{T_w-T_w}$; Temperaturverhältnis $T_v = \frac{T_w}{T_w}$) als Funktion der axialen Ortskoordinate x^* (beginnend auf der Oberfläche, in negative z- Richtung und bezogen auf den Radius), die des weiteren normiert wird auf die jeweilige Grenzschichtdicke δ_i^* , dargestellt. Ohne den Einfluß einer externen Kraft auf die Partikelphase stimmen die Kurvenverläufe weitgehend überein. Das liegt daran, daß in der Grenzschicht für die einzelnen Transportmechanismen, mit ihren unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen, eine strukturelle Analogie vorliegt. Durch die Normierung der Ortskoordinate auf die jeweilige Grenzschichtdicke fallen die Einflüsse der unterschiedlichen Intensitätsgrößen heraus, und damit existiert eine einheitliche Lösung für den Impuls-, Energie- und Stofftransport.



Abbildung 6.5: Vergleich der normierten Geschwindigkeits-, Konzentrations- und Temperaturprofile

Die Wirkung externer Kräfte auf das Partikelanzahlkonzentrationsfeld

Für die Partikelphase sind die externen Kräfte, d. h. die zusätzlichen Terme der Partikeltransportgleichung, von besonderem Interesse. Je bedeutender ihr Einfluß ist, desto größer sind die zu erwartenden Auswirkungen auf die Dicke der Partikelanzahlkonzentrationsgrenzschicht und das Profil innerhalb der Konzentrationsgrenzschicht.

In Abbildung 6.6 sind für verschieden große, positive und negative Partikelrelativgeschwindigkeiten die normierten Grenzschichtdicken der Partikelanzahlkonzentration in Abhängigkeit von der normierten radialen Ortskoordinate aufgetragen. Eine resultierende positive, d.h. zur Oberfläche gerichtete Kraft, bewirkt eine Verkleinerung der Grenzschichtdicke; bei einer resultierenden negativen Kraft ist es entsprechend umgekehrt. Diese Auswirkung ist um so deutlicher, je geringer der Diffusionseinfluß auf die Partikelphase, also je größer die Pe_p -Zahl, ist.



Abbildung 6.6: Die Konzentrationsgrenzschichtdicke unter dem Einfluß einer externen Kraft charakterisiert durch die Partikelgeschwindigkeit c_{ex}^*

Berechnung der normierten Depositionsgeschwindigkeiten

Die Depositionsgeschwindigkeit ist definiert als Partikelstrom, der auf die Scheibenoberfläche trifft, bezogen auf die Anfangskonzentration und die Scheibenfläche. Sie ist eine häufig verwendete Größe zur Beschreibung der Kontamination von Flächen durch Partikel. Die Abbildung 6.7 zeigt die auf die Anströmgeschwindigkeit normierte Depositionsgeschwindigkeit ($v_d^* = \frac{v_d}{u_{\infty}}$) als Funktion der Péclet-Partikel-Zahl für $Re = 10^4$. Ohne die Wirkung einer äußeren Kraft existiert ein linearer Zusammenhang zwischen v_d^* und Pe_p . Mit zunehmender Bedeutung der Kraft in Richtung der Oberfläche steigt die Deposition an. Es findet damit eine Bewertung des konvektiven Anteils im Vergleich zur resultierenden externen Kraft statt: Richtung und die Stärke der Einzelkräfte sind ohne Bedeutung. Einen sichtbaren Vorteil der normierten Darstellung erkennt man aus der Übereinstimmung der jeweils auf die Anströmgeschwindigkeiten normierten Depositionsgeschwindigkeit und der Partikelrelativgeschwindigkeit aufgrund der externen Kraft, z. B. für $Pe_{\rm p}$ - Zahlen größer als 10⁷ in Kombination mit $c_{\rm ex}^* = 10^{-3}$. Mit Hilfe der Abbildung werden Randbedingungen erkennbar, bei denen die Berücksichtigung des konvektiv- diffusiven Transportes nicht notwendig ist.

Für eine resultierende negative Kraft (d. h. entgegen der Strömungsrichtung) wird die Depositionsgeschwindigkeit für steigende Pe_p -Zahlen kleiner. Im Grenzfall bildet sich unmittelbar oberhalb der Waferoberfläche ein Bereich aus, der eine Anzahlkonzentration von null aufweist, die sogenannte *partikelfreie Zone*. Gleichzeitig reichert sich aber vor dieser Zone die normierte Anzahlkonzentration Φ an.



Abbildung 6.7: Normierte Depositionsgeschwindigkeiten für $Re = 10^4$

In Abbildung 6.8 sind die numerisch berechneten Depositionsgeschwindigkeiten als Funktion des Partikeldurchmessers im Vergleich zu einer Näherungslösung aufgetragen. Die Abscheidung der Partikel ($\rho_p = 1.000 \text{ kg m}^{-3}$) größer als 1,0 μ m wird im wesentlichen durch die Schwerkraft und unterhalb von 0,1 μ m durch Konvektion und Diffusion beeinflußt. Im Zwischenbereich besitzen die externen Kräfte besondere Bedeutung. Die Auswirkung eines Temperaturgradienten im Nahbereich der Oberfläche wird durch die Kühlung des Wafers verdeutlicht. Eine Temperaturdifferenz von 10 K führt bereits zu einer erheblichen Erhöhung der Abscheiderate.



Abbildung 6.8: Depositionsgeschwindigkeit bei gekühlter Oberfläche ($\rho_{\rm p} = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$)

Wird die Wafertemperatur erhöht, so wirkt die thermophoretische Kraft der Sedimentation entgegen und die Depositionsgeschwindigkeit sinkt. Für diesen Fall ist die Superposition weniger geeignet, wenn der Partikelgrößenbereich $\leq 0.05 \ \mu$ m untersucht wird.

6.2 Senkrecht angeströmte horizontale Oberflächen

Im nachfolgenden Kapitel werden die gerade vorgestellten Ergebnisse verallgemeinert indem sie angewendet werden auf senkrecht angeströmte Oberflächen. Die Ergebnisse der theoretischen Berechnungen werden dabei verglichen mit experimentellen Daten, die mit nachfolgend erläutertem Versuch erzielt wurden.

Den Versuchsaufbau nach Opiolka *et al.* [62] bzw. Opiolka [60] zeigt die Abbildung 6.9. Die Anordnung stellt eine rotationssymmetrische Staupunktströmung oberhalb der sich im Zentrum einer ausgedehnten Werkbank befindlichen Kreisscheibe, die temperierbar ist, dar. Die homogene Anströmgeschwindigkeit beträgt $u_{\infty} \approx 0.3 \text{ m/s}$, und in Anlehnung an die Arbeit von Otani *et al.* [59] erfolgt die Zuführung der Partikel unterhalb des Strömungskanals auf der Staupunktlinie. Durch diese Vorgehensweise wird eine Reduzierung der Partikelanzahlkonzentration durch Verdünnung vermieden und die zeitliche Durchführbarkeit verbessert. Theoretische Untersuchungen anderer Autoren (Stratmann *et al.* [90], Yuu und Jotaki [104]) bestätigen die Annahme einer Gleichverteilung der Partikelanzahlkonzentration auf der Konzentrationsgrenzschicht.



Abbildung 6.9: Versuchsaufbau zum angeströmten Wafer bei Normaldruck [61]

Die Partikelgenerierung erfolgt durch Zerstäubung einer Suspension mit fluoreszierenden Latexpartikeln in hochreinem Wasser entsprechend der VDI Richtlinie 3491 (Blatt 3). Der Zerstäubungsvorgang produziert ein Aerosol aus Flüssigkeitstropfen, in denen sich jeweils maximal ein Latexpartikel befindet. Die Flüssigkeit wird in der nachgeschalteten Trockenstrecke verdampft, so daß einzelne Partikel den Generator verlassen. Die ungleiche Ladungsverteilung der Partikel wird durch die Bereitstellung von Ionen innerhalb des Neutralisators mit einer Krypton 85 Quelle in eine definierte Ladungsverteilung überführt. Die Anzahlkonzentration wird mit Hilfe optischer Partikelzähler bestimmt, die als zusätzliche Information den Durchmesser der zerstäubten Partikel auswerten.

Manuell werden die deponierten Latexpartikel mit der entwickelten Nachweistechnik auf Basis der Fluoreszenzauflichtmikroskopie gezählt. Die Experimente werden mit Latexpartikeln mit einem Durchmesser zwischen $0.08 \,\mu\text{m}$ und $3.5 \,\mu\text{m}$ durchgeführt.

In der Abbildung 6.10 werden die Meßdaten der senkrecht angeströmten Oberfläche mit der zweidimensionalen Modellrechnung verglichen. Hierbei wird im Gegensatz zur zitierten Veröffentlichung [62] die Werkbank nicht idealisiert als unendlich ausgedehnte Ebene sondern als umströmte Scheibe angesehen,³ in deren Zentrum sich der Wafer befindet. Die gute Übereinstimmung der berechneten Depositionsgeschwindigkeiten beider Modelle stützt damit die Aussage eines weitgehend eindimensionalen Transportprozesses für die vorliegende Problemstellung und ermöglicht damit die angestrebte Verallgemeinerung der Ergebnisse. Die dargestellten Depositionskurven berücksichtigen die Abscheidemechanismen Konvektion, Diffusion, Schwerkraft und die Thermophorese mit Temperaturdifferenzen zwischen Gasströmung und gekühlter Oberfläche von $\Delta T = 0 K$, $\Delta T = 5 K$ und $\Delta T = 10 K$. Die Kurven zeigen den typischen v- förmigen Verlauf, wenn die Depositionsgeschwindigkeit v_d als Funktion des Partikeldurchmessers d_P im doppeltlogarithmischen Maßstab aufgetragen wird (s. auch Abb. 6.8).



Abbildung 6.10: Ergebnisse der Depositionsexperimente zur Wirkung der Thermophorese ($\rho_p = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$)

Weitere Details zum Versuchsaufbau und zu den Ergebnissen bei Berücksichtigung des elektrischen Feldes sind in der Arbeit von Opiolka *et al.* [62] zusammengefaßt.

 $^{^3\}mathrm{Die}$ Werkbank hat eine rechteckige Grundfläche von 0,50 m mal 0,70 m (Scheibendurchmesser $d_{\rm S}=0,6$ m).

6.3 Partikeltransport auf die turbulent angeströmte Kreisscheibe

Die Ergebnisdarstellung für das Geschwindigkeitsfeld erfolgt, wie im laminaren Fall, für den Nahbereich der Waferfrontseite. In Abbildung 6.11 ist das Geschwindigkeitsverhältnis auf der Staupunktlinie als Funktion des Wandabstandes (bezogen auf den Scheibenradius) für die Reynoldszahlen 1.000 und 10.000 aufgetragen. Es ergibt sich eine perfekte Übereinstimmung der analytischen Daten von Frössling [21] mit den Ergebnissen dieser Arbeit.



Abbildung 6.11: Der Geschwindigkeitsverlauf auf der Staupunktlinie

Die Abbildung 6.12 zeigt die numerisch mit Hilfe des (für den wandnahen Bereich) modifizierten k- ε - Modells, berechneten dimensionslosen Grenzschichtdicken als Funktion der dimensionslosen radialen Laufkoordinate für verschiedene Turbulenzgrade der Strömung bei konstanter Reynoldszahl 10⁴. Ausgehend vom Staupunkt ergeben sich, wie bereits für die laminare Strömungssituation dokumentiert, relativ konstante Grenzschichtdicken. Im Randbereich der Scheibe nimmt die Grenzschichtdicke aufgrund der Umströmung deutlich ab. Die analytische Lösung zur Bestimmung der Grenzschichtdicke nach Gleichung 6.3 stimmt erwartungsgemäß mit den Ergebnissen für einen Turbulenzgrad von 0 % überein. Mit steigendem Turbulenzgrad erhöht sich der Impulsaustausch, und die Dicke der Geschwindigkeitsgrenzschicht verringert sich maximal um einen Faktor von ca. 3 bei Tu = 2 %. Bei gleicher Auftragungsart zeigt die Abbildung 6.13 die entsprechenden Ergebnisse für eine Reynoldszahl von 10^3 . Auch innerhalb der Grenzschicht verändert sich der Verlauf der Geschwindigkeit verändert (s. Abb. 6.14).



Abbildung 6.12: Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für $Re = 10^4$

In den Abbildungen 6.15 und 6.16 sind die numerisch berechneten Konzentrationsgrenzschichtdicken erneut in Abhängigkeit von der radialen Koordinate r^* für verschiedene Turbulenzgrade bei konstanter Reynoldszahl aufgetragen. In Abbildung 6.15 beträgt der Partikeldurchmesser 0,002 µm. Eine deutliche Verkleinerung um ca. 150 % der Konzentrationsgrenzschichtdicke bei Tu = 2 % ist hier zu erkennen. Mit steigendem Partikeldurchmesser verringert sich die Bedeutung (s. Abb. 6.16). Bei Partikeldurchmessern oberhalb von 0,1 µm konnte keine Beeinflussung mehr festgestellt werden.



Abbildung 6.13: Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für $Re=10^3$



Abbildung 6.14: Radiale Geschwindigkeit innerhalb der Grenzschicht



Abbildung 6.15: Konzentrationsgrenzschichtdicke



Abbildung 6.16: Konzentrationsgrenzschichtdicke

Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen der Partikelanzahlkonzentration innerhalb des Nahbereiches der angeströmten Waferoberfläche zeigen die Wirkung der Turbulenz auf die Konzentrationsgrenzschicht. Die Partikeldeposition aufgrund des geänderten konvektiv- diffusiven Transportes wird in Abbildung 6.17 dargestellt. Aufgetragen ist die dimensionsbehaftete Depositionsgeschwindigkeit als Funktion des Partikeldurchmessers für unterschiedliche Turbulenzintensitäten und zwei Reynoldszahlen bei konstantem Druck von 10⁵ Pa ($\rho_p = 10^3$ kg m⁻³). Der typische v- förmige Verlauf der Kurven ist zu erkennen. Die Ergebnisse zeigen eine geringe Abhängigkeit der Deposition vom Turbulenzgrad für Partikeldurchmesser kleiner als 0,100 μ m. Weitere Details sind auch in der Veröffentlichung Schmidt *et al.* [82] beschrieben.



Abbildung 6.17: Bedeutung der Turbulenz bei niedrigen Reynoldszahlen

7 Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen

In den vorangegangenen Kapiteln wurde detailliert die Modellierung des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes und des Partikeltransportes für stationäre rotationssymmetrische Anordnungen, speziell die Rohrströmung und die angeströmte Kreisscheibe, vorgestellt. In technischen Prozessen ist insbesondere die Zweidimensionalität, die durch den vorhandenen Lösungsalgorithmus vorgegeben ist, eine erhebliche Einschränkung. Im Rahmen dieser Arbeit wird nicht der Weg verfolgt, einen eigenen dreidimensionalen Algorithmus zu schreiben, sondern das Programmpaket *Phoenics* der Firma Cham anzuwenden. Die bekannten Unzulänglichkeiten eines kommerziellen Programmes sind dabei in Kauf genommen worden. Deshalb sind auch zunächst die bereits dargestellten Ergebnisse der zweidimensionalen Rechnungen als Vergleichsmaßstab herangezogen worden und es erfolgt ein sukzessiver Aufbau der Problemstellungen.



Abbildung 7.1: Diffusor im kartesischen Koordinatensystem

Ein unmittelbarer Vorteil des Programmpaketes ist dabei die Möglichkeit, körperangepaßte Koordinatensysteme (BFC) verwenden zu können. Bei der Verwendung eines kartesischen Koordinatensystems (s. Abb. 7.1) kann der wandnahe Bereich nur durch Rechtecke angenähert werden, was die berechneten Geschwindigkeitswerte beeinflußt. Dagegen stellen sich die Ergebnisse mit BFC besser dar (7.2).



Abbildung 7.2: Diffusor mit BFC

7.1 Ergebnisdarstellung für ausgewählte Beispiele

Durchströmung eines rechtwinkligen Rohrkrümmers

Bei dieser Aufgabenstellung handelt es sich um ein dreidimensionales Strömungsproblem, welches nur mit Hilfe von BFC-Koordinaten berechnet werden kann (s. Abb. 7.3).



Abbildung 7.3: Mit BFC-Koordinaten erstelltes Gitter

Die numerische Berechnung einer Strömung in einem 90°-Rohrkrümmer ist von Schönung [83] durchgeführt worden, so daß eine direkte Vergleichsmöglichkeit gegeben ist. In Abbildung 7.3 ist der Gitteraufbau des Strömungsproblems dargestellt. Nach einer kurzen geraden Einlaufstrecke folgt eine Rohrkrümmung um 90°. Der Krümmungsradius R_m beträgt das 2,8-fache des Rohrdurchmessers D. Hieran schließt sich eine Auslaufstrecke, die die vierfache Länge des Durchmessers hat, an. Schönung hat seine Berechnung für eine Reynoldszahl von Re = 1093 durchgeführt. Um für die Simulation mit PHOENICS eine vergleichbare Reynoldszahl zu erhalten, wird ein Durchmesser von D = 0.03 m und eine mittlere Geschwindigkeit von $w_m = 0.56$ m/s gewählt. Die Geschwindigkeitsverteilung am Eintritt des Rohres hat ein kolbenförmiges Profil.

Die Daten für die Simulation sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefaßt:

Dreidimensionale Strömung im 90°-Rohrkrümmer					
geometrische Abmessungen		Fluid: Luft bei 20° C			
Radius: I	R = D/2 = 0.015 m	Geschw.:	$w_m = 0.56 \mathrm{m/s}$		
Einlaufstrecke: <i>l</i> ,	$_{\rm e} = 0.0174~{ m m}$	kin. Visk.:	$\nu = 1.544 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$		
Krümmungsradius: <i>I</i>	$R_m = 0.084 \text{ m}$				
Auslaufstrecke: l_{a}	$_{i}=0,12~\mathrm{m}$				
Reynoldszahl: $Re = 1088,08$					
Gitterverteilung: konstant					
x-Richtung: 20	y-Richtung: 10		z-Richtung: 30		

In den folgenden Ergebnisbildern wird, wegen der Symmetrie der Strömung [83], nur die obere Hälfte des Rohres dargestellt. Abbildung 7.4 zeigt die Geschwindigkeitsvektoren in der Symmetrieebene. Aufgrund der im Rohrkrümmer auftretenden Zentrifugalkräfte bildet sich eine Sekundärströmung in Querrichtung aus. Das Geschwindigkeitsmaximum verschiebt sich stromabwärts nach außen, was auf die Sekundärströmung zurückzuführen ist.

In den Abbildungen 7.5, 7.6, 7.7 und 7.8 ist die sich ausbildende Sekundärströmung zu sehen. Die Geschwindigkeitsvektoren werden in verschiedenen Querschnitten ($\Theta = 30^{\circ}$, 60° und 75°), sowie in einer Ebene des geraden Auslaufs gezeigt. Die Sekundärströmung bei $\Theta = 30^{\circ}$ ist schwächer als bei $\Theta = 60^{\circ}$, wo sie am stärksten ist. Bei $\Theta = 75^{\circ}$ ist sie nur unwesentlich kleiner und in der letzten Ebene ist sie fast vollständig verschwunden. Der Vergleich mit der zitierten Literatur zeigt die qualitative Übereinstimmung der berechneten Ergebnisse. Die Lage der Maximalwerte und der auftretenden Wirbel stimmen gut überein. Die geringfügigen Unterschiede können daher rühren, daß in [83] in der Eintrittsebene eine nicht näher definierte Geschwindigkeitsverteilung vorgegeben wurde, während in dieser Arbeit ein Kolbenprofil als Startbedingung verwendet wird.



Abbildung 7.4: Geschwindigkeitsvektoren in der Symmetrieebene



Abbildung 7.5: Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=30^\circ$



Abbildung 7.6: Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=60^\circ$



Abbildung 7.7: Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=75^\circ$



Abbildung 7.8: Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt des Auslaufs



Abbildung 7.9: DMA

Strömungsverhältnisse im Einlauf eines differentiellen Mobilitätsanalysators Beim nächsten der hier vorgestellten Beispiele sind die Strömungsverhältnisse im Bereich der Einlaßschneide eines differentiellen Mobilitätsanalysators (DMA) berechnet worden. Variiert wird die Geometrie im Einlaßbereich (Breite ca. 2,5 mm) bei vorgegebenen Volumenströmen von 1,5 l/min und 15 l/min. Mit der Neukonstruktion ist insbesondere das

Ziel verfolgt worden, daß keine Turbulenzen bei der Zusammenführung von Aerosol und Schleierluft entstehen. Dieses Ziel ist, wie in den Abbildungen 7.9 bzw. 7.10 dargestellt, erreicht und mittlerweile experimentell bestätigt worden.





Abbildung 7.10: Einlaßbereich des DMA

Wärmetransport am querangeströmten Einzelzylinder

Als Beispiel für die Berechnung von Temperaturverteilungen und damit des Wärmetransportes wird der beheizte querangeströmte Zylinder simuliert (s. Abb. 7.11). Der Zylinder mit Durchmesser d befindet sich in einem Strömungskanal der Höhe h und der Breite b. Dieses Problem ist u. a. im VDI-Wärmeatlas [96] beschrieben, so daß die Ergebnisse der Simulation mit denen der halbempirischen Berechnungsansätze verglichen werden können.



Abbildung 7.11: Einzelzylinder in einem Kanal

Da es sich um ein zweidimensionales symmetrisches Problem handelt, wird die Berechnung nur für die obere Hälfte des Strömungskanals durchgeführt. Die Erstellung des Gitters erfolgt mit BFC-Koordinaten (s. Abb. 7.12).



Abbildung 7.12: Gitterverteilung um den Zylinder

Die eintretende Luft hat eine Temperatur von $\vartheta_{ein} = 20^{\circ}$ C und die Zylinderwand eine konstante Temperatur von $\vartheta_{Wand} = 50^{\circ}$ C. Die Stoffwerte sind für die mittlere Luft-temperatur $\vartheta_{m} = (\vartheta_{ein} + \vartheta_{aus})/2$ einzusetzen. Die weiteren Randbedingungen für die Simulation sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefaßt:

7 Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen

Wärmeübergang beim querangeströmten Rohr					
geometrische Abmessungen	Fluid: Luft bei 20° C				
d = 0.02 m	$w_0 = 10 \mathrm{m/s}$				
h = 0.05 m	$ ho=1,\!189~{ m kg/m^3}$				
b = 1,00 m	$\nu = 1.5$	$544 \cdot 10^{-5} \ \mathrm{m^2/s}$			
	$c_p = 1,004 { m kJ/(kg \ K)}$				
	$\lambda = 26$	$3 \cdot 10^{-3} \ { m W}/({ m m \ K})$			
	$\Pr = 0$,7148			
Gitterverteilung: konstant					
x-Richtung: 1 y-Richt	ung: 25	z-Richtung: 85			

Das berechnete Geschwindigkeitsfeld ist in der Abbildung 7.13 dargestellt. Es ist zu erkennen, daß aufgrund der Umströmung, die größten Geschwindigkeiten oberhalb des Zylinders auftreten. Die Strömung löst sich bei einem Winkel von $\Theta \approx 135^{\circ}$ ab und es bildet sich hinter dem Zylinder ein Wirbel aus.

Die Darstellung der Temperaturverteilung erfolgt in Abbildung 7.14. Die strömende Luft wird nur im unmittelbaren Nahbereich der Oberfläche auf die Zylinderwandtemperatur aufgeheizt. Dies Ergebnis ist sicherlich eher qualitativ; zu einer quantitativen Überprüfung wird eine Wärmebilanz im Vergleich mit den halbempirischen Ansätzen nach VDI-Wärmeatlas durchgeführt. Die durch erzwungene Konvektion an überströmten Körpern übertragene Wärme errechnet sich zu:

$$\dot{Q} = \alpha \cdot A \cdot (T_{\text{Wand}} - T_{\text{Ein}})$$
, mit A als überströmte Fläche (7.1)

Der Wärmeübergangskoeffizient α berechnet sich mit Hilfe der Nußelt-Zahl zu:

$$\alpha = \lambda \cdot Nu \cdot l$$
 mit der Überströmlänge $l = \frac{\pi}{2} \cdot d = 0.03142$ m (7.2)

Die Nußelt-Zahl selbst berechnet sich zu:

$$Nu = Nu_0 \cdot K$$
 mit $K = (T_m/T_{Wand})^{0,12} = 0,9884$ (7.3)

$$Nu_0 = 0.3 + \sqrt{Nu_{\text{lam}}^2 + Nu_{\text{turb}}^2}$$
(7.4)





92

 $\overline{}$ Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen





Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen

 $\overline{}$

$$Nu_{\rm lam} = 0.664\sqrt{Re} \cdot \sqrt[3]{Pr} \tag{7.5}$$

$$Nu_{\rm turb} = \frac{0.037Re^{0.8}Pr}{1 + 2.443Re^{-0.1}Pr^{2/3} - 1)}$$
(7.6)

Die Reynoldszahl $Re = \frac{w \ l}{\nu}$ wird mit der korrigierten Geschwindigkeit berechnet.

$$w = w_0/\psi$$
 , $\psi = 1 - \frac{\pi d}{4h} = 0,6858 \text{ m}$ (7.7)

Der Vergleich zwischen den Ergebnissen der analytischen und numerischen Berechnungen weist eine prozentuale Abweichung $\Delta \dot{Q} = \left| \frac{\dot{Q}_{\text{analytisch}} - \dot{Q}_{\text{numerisch}}}{\dot{Q}_{\text{analytisch}}} \right|$ von 1,9 % auf. Bezogen auf den eintretenden Wärmestrom ist die Abweichung 2,67·10⁻³ %. Die Werte aus der Simulation stimmen damit gut mit denen der halbempirischen Berechnung überein.

Partikelabscheidung in einem Rohr mit abrupter Querschnittsverringerung

Erneut ist eine in der Literatur gut beschriebene Problemstellung ausgewählt worden, um das Programm zunächst zu überprüfen. In einem geraden Rohr verringert sich abrupt der Querschnitt. Partikel, die sich im Luftstrom befinden, folgen aufgrund der Trägheit nicht den Stromlinien und werden auf der Einengung abgeschieden. Für die Simulation werden die geometrischen Abmessungen und sonstigen Randbedingungen aus den theoretischen Arbeiten von Ye und Pui [102] übernommen. Der Bereich der Querschnittsverengung ist in Abbildung 7.15 dargestellt.



Abbildung 7.15: Querschnittsverengung im Rohr

Das Rohr hat einen Eintrittsdurchmesser von $D_e = 0,005$ m und ein Durchmesserverhältnis von $D_e/D_0 = 2$. Damit eine laminare Strömungsform vorliegt, wird eine Eintrittsgeschwindigkeit von u = 3 m/s gewählt. Mit dem kommerziellen Programmpaket *Phoenics* werden die Bahnkurven einzelner Partikel berechnet, wobei die Startposition der Partikel in einem Querschnitt $\Delta l=0,05$ m vor der Rohrverengung liegt. In der Arbeit von Ye und Pui [102] wird am Rohreintritt ein laminar ausgebildetes Geschwindigkeitsprofil vorgegeben, welches hier durch eine Einlaufstrecke von $l_{ein}=0,2$ m realisiert wird. Die weiteren Randbedingungen sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefaßt:

Rohrströmung mit Querschnittsverengung					
geometrische Abmessungen		Fluid: Luft bei 20° C			
$D_e = 0,005 \text{ m}$		$u = 3 \mathrm{m/s}$			
$D_0 = 0,0025 \text{ m}$		$ ho_g=1,\!189~{ m kg/m^3}$			
$l_{ges} = 0.4 \text{ m}$		$ ho_p=1000~{ m kg/m^3}$			
_		$\nu =$	$1,544 \cdot 10^{-5} \mathrm{~m^2/s}$		
		Re = 972			
Gitterverteilung: exponentiell					
x-Richtung: 1	y-Richtung: 40		z-Richtung: 90		

Die Abbildung 7.16 zeigt das berechnete Geschwindigkeitsfeld. Durch die Querschnittsverengung tritt eine deutliche Geschwindigkeitserhöhung ein, wie es auch aufgrund der Massenerhaltung zu erwarten war. Zielsetzung dieser Simulation ist es, eine sogenannte Abscheidegradkurve zu berechnen. Für ein Partikel mit einem bestimmten Durchmesser d_p wird die Startposition in radialer Richtung r verändert. Der Radius r, ab dem die Partikel alle an der Querschnittsverengung abgeschieden werden, wird kritischer Radius r_{cr} genannt (siehe Abb. 7.15). Ist der kritische Radius für eine Partikelgröße bestimmt worden, führt man die Simulation für den nächsten Partikeldurchmesser durch. Ein Beispiel für Partikelbahnen befindet sich in der Abbildung 7.17.

Die Gesamtanzahl der Partikel, die pro Zeiteinheit den Rohrquerschnitt passiert, berechnet sich zu:

$$\dot{N}_{ges} = \int_{0}^{D_e/2} C_N \cdot u(r) \cdot r \, dr \tag{7.8}$$

mit C_N der Partikelanzahlkonzentration [1/m³].

Die Anzahl der Partikel, die pro Zeiteinheit auf der Wand abgeschieden werden, ist:

$$\dot{N}_{dep} = \int_{D_{cr}}^{D_e/2} C_N \cdot u(r) \cdot r \, dr \tag{7.9}$$

Der Abscheidegrad auf der Stufe η ist definiert als:

$$\eta = \frac{\dot{N}_{dep}}{\dot{N}_{qes}} \tag{7.10}$$

und wird unter der Annahme eines konstanten Partikelflusses $C_N \cdot u$ berechnet zu:

$$\eta = 1 - \left(\frac{D_{cr}}{D_e}\right)^2 \tag{7.11}$$

Der Abscheidegrad wird in der o.g. Literatur über der Wurzel aus der Stokes-Zahl aufgetragen, die sich folgendermaßen berechnen läßt:



Abbildung 7.16: Geschwindigkeitsvektoren



Abbildung 7.17: Grenztrajektorien

86

Berechnung des Partikeltransportes in dreidimensionalen Strömungen

 $\overline{}$

$$Stk = \frac{\rho_p \, d_p^2 \, u \, C_s}{18 \, \eta \, D_0} \quad , \tag{7.12}$$

Der Vergleich der Ergebnisse von Ye mit denen dieser Arbeit (s. Abb. 7.18) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Für Werte $Stk \leq 0.35$ fällt die Bedeutung der Trägheit exponentiell ab, und es liegt eine geringe Abweichung der theoretischen Ansätze vor.



Abbildung 7.18: Abscheidegrad (Ye and Pui [102])

7.2 Modellierung der Partikelabscheidung in industriellen Anlagen

Der Rauchgaskanal

Im nachfolgenden Beispiel wird die Strömung innerhalb eines Abschnittes einer Rauchgasreinigung berechnet. Das heiße Rauchgas strömt durch einen Kanal mit rechteckigem Querschnitt und wird zweimal umgelenkt. Der Volumenstrom beträgt 250.000 $m^3 h^{-1}$, die Strömung ist turbulent. In den Abbildungen 7.19 und 7.20 sind die Hauptabmessungen und die Gitterverteilung skizziert.



Abbildung 7.19: Strömungskanal mit rechteckigem Querschnitt



Abbildung 7.20: Gitterverteilung im Strömungskanal



Abbildung 7.21: Geschwindigkeitsvektoren in der Meßebene

Von besonderem Interesse ist das Geschwindigkeitsprofil in der Meßebene (Abb. 7.21), da die dort gemachten Messungen beurteilt werden sollen. Das berechnete Geschwindigkeitsprofil zeigt eine erhebliche Unsymmetrie, die Geschwindigkeiten liegen zwischen 10 - 21 m/s (Abb. 7.22).



Abbildung 7.22: Geschwindigkeitsprofil in der Meßebene

Die ermittelten Trajektorien für Partikeldurchmesser von 1 und 10 μ m sind in den Abbildungen 7.23 und 7.24 dargestellt. Auch hier ist eine deutliche Verschiebung des Konzentrationsverlaufs nach außen zu erkennen, wobei sich die Trajektorien für die untersuchten Partikelgrößen von 1 μ m und 10 μ m kaum unterscheiden. Eine repräsentative Aussage bzgl. der Staubbeladung und Größenverteilung kann, insbesondere da nur für eine Position im Kanal Messungen vorliegen, nicht erwartet werden.



Abbildung 7.23: Trajektorien für Partikel mit einem Durchmesser von 1 μ m



Abbildung 7.24: Trajektorien für Partikel mit einem Durchmesser von 10 μ m
Die Kohlestaubzudosierung zur Schadstoffreduzierung

Es werden einem Abgasstrom stoßartig und zeitlich versetzt über 10 Anschlüsse, die gleichmäßig am Rohrumfang verteilt sind, Partikel ($d_p = 10 \,\mu$ m) zugegeben. Der jeweilige Teilvolumenstrom ($\dot{V} = 410 \,m^3 h^{-1}$, u=100 m/s) entspricht etwa 1 /1000 des Hauptstromes (u=5 m/s). Die Berechnung der Strömung erfolgt zunächst ohne Berücksichtigung der Partikelphase. Es wird eine geringe Eindringtiefe ermittelt (Abb. 7.25). Dieser erste Eindruck wird auch durch die berechneten Partikelbahnen bestätigt (Abb. 7.26). Die angestrebte gleichmäßige Verteilung wird nicht erreicht. Bei dieser Berechnung wird die Rückwirkung der Partikelphase auf die Gasphase vernachlässigt, eine Annahme die nur bis zu einem geringen Volumenanteil der Partikel zulässig ist.



Abbildung 7.25: Geschwindigkeitskomponente



Abbildung 7.26: Partikelbahnen

Reinigung von Rauchgasströmen mit Trockenadsorbentien

Entgegen der Hauptströmungsrichtung (Abgasvolumenstrom: 7000 $m^3 h^{-1}$, Eintrittsgeschwindigkeit: 1,35 m/s, Kanalquerschnitt am Eintritt: 1,1 m x 1,3 m) wird ein mit partikelförmigem Trockenadsorbens ($d_p = 20 \mu m$) beladener Luftstrom (300 $m^3 h^{-1}$, Austrittsgeschwindigkeit an der Düse ca. 13,4 m/s) zugeführt. Dieses Adsorbens reagiert mit einer Abgaskomponente, es ist deshalb eine gute Vermischung erwünscht. Zunächst wird der Abgaskanal ohne Einbauten betrachtet (Abb. 7.27).



Abbildung 7.27: Abgaskanal ohne Einbauten

Durch die 180 Grad Umlenkung der Strömung entsteht ein sehr ungleichmäßiges Geschwindigkeitsprofil (Abb. 7.27(a)). Die Geschwindigkeit im Außenbereich ist deutlich erhöht, im Bereich der Abrißkante erfolgt eine Rückströmung. Aufgrund der hohen Austrittsgeschwindigkeit des eingedüsten Luftstromes entstehen in diesem Bereich Verwirbelungen. Wie die ausgewählten Partikelbahnkurven zeigen, wird die gewünschte Verteilung der Partikel in der Strömung nicht erreicht (Abb. 7.27(b)). Es liegt vielmehr eine Strähnenbildung vor. Bei einer Variante der angedachten Verbesserungen des Prozesses wird die Strömung im Bereich der Eindüsung durch Kanaleinbauten eingeschnürt (Abb. 7.28). Zusätzlich wird vor der Düse ein Kegel zur Aufweitung des partikelbeladenen Luftstromes eingefügt. Die Kanaleinbauten bewirken jetzt eine starke Beschleunigung der Strömung. Die Strömung wird durch den Druckabfall gleichmäßiger und es liegt ein symmetrischeres Geschwindigkeitsprofil vor (Abb. 7.28(a)). Die Partikelbahnkurven weisen eine verbesserte Verteilung im Abgas auf (Abb. 7.28(b)).



(a) Geschwindigkeitsvektoren

(b) Partikelbahnkurven

Abbildung 7.28: Abgaskanal mit Einbauten

7.3 Zusammenfassung des Kapitels

Numerische Verfahren zur Simulation von Strömungen finden in vielen technischen Bereichen eine zunehmende praktische Bedeutung. Ein Grund für diese Entwicklung ist die enorm gestiegene Leistung und Preisentwicklung moderner Rechner. Es sind aber auch erhebliche Fortschritte bei der Modellbildung und dem Einsatz der Lösungsalgorithmen gemacht worden. In Verbindung mit wenigen experimentellen Untersuchungen, zur zwingend erforderlichen Absicherung der Simulationsergebnisse, können detaillierte Informationen über die Strömungssituation erzielt werden [57]. Die Berechnung der Strömung innerhalb des strömungsführenden Verbindungsrohrleitungssystems einer industriellen Anlage, z. B. einer Abgasreinigung, ist für analytische Berechnungen zu komplex. Hier wird auf empirische Erkenntnisse zurückgegriffen, die teilweise an Technikumsanlagen oder an bereits vorhandenen Anlagen gewonnen werden. Die Abmessungen der strömungsführenden Kanäle sind dabei typischerweise so groß, daß die Übertragung von Versuchen an kleinen Modellen auf technische Anlagen kritisch zu bewerten sind, da sie die Realität nur unvollständig wiedergeben können. Zudem verursacht der experimentelle Aufwand erhebliche Kosten.

Allerdings sind auch die Ergebnisse, die man mittels numerischer Berechnungsverfahren erhält, immer kritisch zu betrachten. Zur Verifikation werden weiterhin experimentelle Untersuchungen benötigt. In Freitas [18] werden die Simulationsergebnisse mehrerer kommerzieller CFD-Programme gegenübergestellt und mit experimentellen Daten verglichen. Das Testbeispiel für ein stationäres, laminares zweidimensionales Problem ist die o. g. überströmte Stufe. Dieser Fall ist experimentell und theoretisch u. a. von Armaly *et al.* [1] untersucht worden. Bei Überströmung der Stufe bildet sich eine wirbelförmige Strömung aus. Die Lage des Wirbelzentrums ist abhängig von der Reynoldszahl und der Stufenhöhe. Bei höheren Reynoldszahlen tritt ein weiterer Wirbel am oberen Rand des Kanals auf.

Das Problem wurde mit den Programmen FLOW-3D, FLOTRAN und FLUENT numerisch berechnet. Die charakteristischen Längen normiert auf die Stufenhöhe s sind für unterschiedliche Reynoldszahlen ermittelt worden. Hierbei ist x_1 die Länge des Primärwirbels. Der Sekundärwirbel, der sich erst bei größeren Reynoldszahlen ausbildet, wird durch den Abstand x_4 von der Stufenkante bis zum Anfang des Wirbels und dessen

Länge x_s bestimmt. Die Summe von x_4 und x_s wird mit x_5 bezeichnet. Diese Größen sind im Rahmen der Arbeit mit PHOENICS ermittelt und für die Reynoldszahlen 200 und 450 den numerischen und experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt worden (Tabelle 7.1).

Strecken-	Armaly	FLOW-3D	FLOTRAN	FLUENT	PHOENICS
verhältnisse	et al.				
Re=200					
x_1/s	5,0	$4,\!87$	4,59	$4,\!98$	4,74
Re=450					
x_1/s	$_{9,5}$	8,64	8,12	8,50	7,78
x_4/s	$7,\!6$	$7,\!77$	$7,\!62$	$7,\!27$	6,47
x_5/s	$11,\!3$	$10,\!80$	9,32	$12,\!16$	10, 12
x_s/s	3,7	3,03	1,70	$4,\!89$	3,65

Tabelle 7.1: Vergleich der charakteristischen Längen für die überströmte Stufe

Die maximalen Abweichungen für die Länge des Primärwirbels variiert vom gemessenen Wert um 8,2 bzw. 18,1 Prozent für die Reynoldszahlen 200 bzw. 450. Die minimalen Abweichungen vom gemessenen Wert betragen 0,4 bzw. 9,1 Prozent. Aus diesem Vergleich erkennt man, daß man selbst bei relativ einfachen Problemen (laminar, zweidimensional) je nach verwendetem CFD-Programm recht unterschiedliche Ergebnisse erhält.

Setzt man die Qualitätskriterien für die Annahme von Artikeln des Journal of Fluid Engineering als Maßstab, so wären diese Programme nicht akzeptabel. Die Herausgeber dieser Zeitschrift sehen den eigenen Anspruch als sehr hoch an. Sie stellen allerdings fest, daß für praktische Anforderungen meist Programme verwendet werden, die diesen Anforderungen nicht genügen. Berücksichtigt man ferner, daß die Deposition der kleinen Partikel wesentlich von den Strömungsverhältnissen im unmittelbaren Nahbereich zur Wand beeinflußt werden, so können die Programme mit gutem Erfolg verwendet werden.

8 Partikeltransport im Aktivkohlefilter einer Müllverbrennungsanlage

In den vorangegangenen Kapiteln sind numerische Verfahren eingesetzt worden, um den Transport von Partikeln in einfachen oder auch komplexeren Geometrien bzw. Anlagen zu beschreiben. Für die Abscheidung von Partikeln im Aktivkohlefilter einer Müllverbrennungsanlage sind diese Verfahren bis zum heutigen Zeitpunkt nur bedingt erfolgreich. Ein Grund ist die komplexe Bewegung der Schüttung innerhalb des Bettes.

Aktivkohlefilter werden in sehr unterschiedlichen technischen Systemen eingesetzt, um gasförmige Schadstoffe abzuscheiden. Die Partikelabscheidung ist dabei ein Nebeneffekt. Im folgenden werden zunächst experimentelle Untersuchungen zur Größenverteilung der Partikel im Rauchgas einer Verbrennungsanlage dargestellt. Die Ansätze, die zur Berechnung herangezogen werden, unterscheiden sich in den berücksichtigten Abscheidemechanismen, Vereinfachungen und verwendeten Strömungsmodellen.

8.1 Experimentelle Bestimmung der Partikelanzahlkonzentration

Das aufgebaute System (s. Abb. 8.1) gemäß VDI- Richtlinie 2066 Blatt 5 ermöglicht die Charakterisierung des Staubes einer Sondermüllverbrennungsanlage. Die Probenahme erfolgt mit einem Kaskadenimpaktor (s. Abb. 8.2) und einem Planfilterkopf. Die Filter werden gravimetrisch und mittels Rasterelektronenmikroskop in Verbindung mit einer energiedispersiven Röntgenfluoreszenzanalyse untersucht.



Abbildung 8.1: Probenahmesystem zur Charakterisierung der Staubbeladung

Das Meßsystem besteht aus der Entnahmesonde, dem Kaskadenimpaktor selbst (der sich zur Vermeidung einer Kondensatbildung innerhalb des Rauchgaskanals befindet) und der Vorrichtung zur Bestimmung des Volumenstroms des trockenen Abgases. Die Probenahme wird isokinetisch durchgeführt. Die gravimetrisch ermittelte Beladung (nach Aktivkohlefilter) von $0,25 - 0,37 \text{ mg/m}^3$ ist zu gering, um akzeptable Meßzeiten mit dem Kaskadenimpaktor zu erzielen. In Anlehnung an die VDI- Richtlinie 2066 aber mit verlängerten Sammelzeiten von ca. 50 Stunden sind die Probenahmen durchgeführt worden. Die Auswertung der Sammelfolien erfolgte mit dem REM. Abbildung 8.3 zeigt die charakteristische Größenverteilung von ca. 20.000 Einzelpartikeln. Weil neben der niedrigen Staubfracht auch die sehr heterogene Zusammensetzung der eingesetzten Brennstoffe problematisch ist, sind die dargestellten Meßdaten mehr als Momentanwerte anzusehen.



Abbildung 8.2: Abscheidung der Partikel durch Impaktion



Abbildung 8.3: Partikelgrößenverteilung des Rauchgases einer Müllverbrennungsanlage

Die Staubkonzentration ist an 3 Meßstellen der Rauchgasreinigung: vor und nach Wäscher (nach bedeutet vor dem Aktivkohlefilter) und nach Aktivkohlefilter (vor dem Kamin) bestimmt worden. Die gravimetrische Auswertung liefert deutlich fallende Werte von 80 mg/m³ auf 15 mg/m³ und auf weniger als 1 mg/m³. Die Partikelanzahlkonzentrationen liegen dagegen in nahezu gleicher Größenordnung. Dies ist über die Partikelanzahl in den jeweiligen Größenfraktionen erklärbar. Wenige etwas größere Partikel an den Meßstellen vor und hinter dem Wäscher sind bestimmend für die Massenkonzentration. Die Anzahlkonzentration ist bereits vor dem Wäscher für Partikel größer als 1 µm recht gering. Die Anzahlkonzentration steigt erwartungsgemäß deutlich mit fallendem Partikeldurchmesser, da die Abscheidung dieser Fraktion nicht mehr durch die vorgeschalteten Trägheitsabscheider und Elektrofilter zu gewährleisten ist.

In Abbildung 8.4 ist die relative Häufigkeit der Partikel als Funktion des Partikeldurchmessers für verschiedene Anlagen dargestellt. Die Maxima liegen bei den Partikelgrößen zwischen 0,15 μ m und 0,45 μ m für die betrachteten Anlagen. Diese charakteristische Größenverteilung bleibt auch erhalten, wenn die erste ca. 10 cm starke Aktivkoksschicht bewegt wird und dabei Abrieb entsteht. Die Partikel, die durch diese Bewegung entstehen, werden in der anschließenden Schicht direkt wieder abgeschieden.



Abbildung 8.4: Partikelgrößenverteilung nach dem Aktivkohlefilter [27]

8.2 Berechnung der Partikelabscheidung in einem Aktivkohlefilter

Schüttschichtfilter sind filternde Abscheider, bei denen ein staubbeladener Gasstrom eine körnige Schicht durchströmt und dabei gereinigt wird. Bei Anwendungen in der Zementindustrie besteht die Schüttschicht aus Quarz oder Kies und zeichnet sich insbesondere durch die hohe Temperaturbeständigkeit und Verschleißfestigkeit bei niedrigen Kosten aus. Wie bei anderen filternden Abscheidern findet die Staubabscheidung insbesondere am Filterkuchen, d. h. am bereits abgeschiedenen Staub, statt. Mit zunehmender Betriebsdauer wächst die Schichtstärke des Filterkuchens an, was mit einem deutlich ansteigenden Druckverlust einhergeht. Bei hohen Staubbeladungen muß das Filtermedium häufiger regeneriert werden. Bei der Müllverbrennungsanlage (MVA) ist aufgrund der vorgeschalteten Reinigungsstufen die Staubbeladung vor dem Aktivkohlefilter prinzipiell bei weitem niedriger. Im folgenden Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen der Partikelabscheidung behandelt, wobei die unterschiedlichen Modelle verschiedener Autoren gegenübergestellt werden.

8.2.1 Berechnungsansätze

Das Abscheideverhalten eines Filters wird durch den Fraktionsabscheidegrad bzw. Trenngrad $T(d_p)$ als Funktion der Partikelgröße d_p charakterisiert:

$$T(d_{\rm p}) = \frac{c(d_{\rm p})_{\rm roh} - c(d_{\rm p})_{\rm rein}}{c(d_{\rm p})_{\rm roh}}$$

$$\tag{8.1}$$

mit: $c(d_p)_{roh}$ und $c(d_p)_{rein}$ der Roh- bzw. Reingaskonzentration

Aus der Mengenbilanz erhält man die sog. Filtergleichung (Löffler [52]):

$$T(d_{\rm p}) = 1 - exp[f \cdot \Phi(d_{\rm p})] \tag{8.2}$$

Wird speziell bei Schüttschichtfiltern eine Mengenbilanz über ein differentielles Filterelement unter Annahme einer homogenen Schüttung aus Körnern gleicher Größe durchgeführt und über die Höhe integriert, so erhält man den Trenngrad als Funktion des Einzelkornabscheidegrades $\Phi(d_p)$ (Jung *et al.* [36]):

$$T(d_{\rm p}) = 1 - exp[K_1 (1 - \epsilon) \frac{H}{d_k} \cdot \Phi(d_{\rm p})]$$
(8.3)

mit K_1 der Filterkonstanten, der Porösität ϵ , H der Höhe der Schüttung, d_k dem Durchmesser des Schüttkorns und dem Einzelkornabscheidegrad $\Phi(d_p)$ als Produkt des Einzelauftreffgrades η und der Haftwahrscheinlichkeit h.

$$\Phi(d_{\rm p}) = \eta \cdot h \tag{8.4}$$

Die Konstante K_1 wurde von Snaddon und Dietz aus [36] mit 1,5 bestimmt. In [36] werden auch Arbeiten anderer Autoren genannt, die eine Abhängigkeit von K_1 von der Porösität aufzeigen. Es wird im folgenden für die genannte Partikelverteilung die Haftwahrscheinlichkeit mit 1 angesetzt. Der Einzelauftreffgrade η setzt sich (vernachlässigt man die Kopplung der Mechanismen) aus den Anteilen zusammen, die durch die jeweils berücksichtigten Transportmechanismen (Diffusion, Sperr- und Trägheitseffekt) hervorgerufen werden.

$$\eta = \eta_{\rm D} + \eta_{\rm R} + \eta_{\rm T} \tag{8.5}$$

Als Sperreffekt wird die Partikelabscheidung aufgrund der geometrischen Ausdehnung der Partikel bezeichnet, wenn diese nicht mehr durch die Poren der Schüttung gelangen. Bei den im Rahmen dieser Untersuchungen betrachteten Partikelgrößen ist dieser Effekt eher unbedeutend ($\eta_R=0$). Die empirischen Ansätze zur Berechnung des konvektiv- diffusiven Anteils und des Beitrages aufgrund der Trägheit werden im folgenden Abschnitt, nachdem zunächst die grundlegenden Modelle kurz aufgeführt werden, vorgestellt.

Der Gesamtabscheidegrad E wird durch Integration des Trenngrades und der Partikelgrößenverteilung q_e bestimmt:

$$E = \int_{d_{\rm p}(min)}^{d_{\rm p}(max)} T(d_{\rm p}) \cdot q_{\rm e}(d_{\rm p}) \ d d_{\rm p}$$
(8.6)

Bei der theoretischen Untersuchung der Partikelabscheidung am Einzelelement unterscheidet man generell *Porenmodelle* oder Modelle zur *umströmten Einzelkugel*.

Modelle zur umströmten Einzelkugel

Bei dem Modell der umströmten Einzelkugel wird die Partikelabscheidung am isolierten Schüttgutkorn betrachtet. Vereinfachend wird eine homogene Schüttung angenommen und das einzelne Schüttgutkorn als Kugel idealisiert.

Bei diesem Modell wird eine sogenannte Grenzpartikelbahn als diejenige Trajektorie eingeführt, bei der ein Partikel gerade noch die Kollektor- bzw. Kugeloberfläche berührt. Dies bedeutet, daß alle Partikel, die innerhalb des gedachten Zylinders mit der Anströmfläche $(A = \pi y_0^2)$ axial auf die Kugel zuströmen, die Kollektoroberfläche berühren und abgeschieden werden. Partikel, die außerhalb des Zylinders auf den Kollektor zuströmen, kommen nicht mit der Kollektoroberfläche in Berührung. Der Einzelkornauftreffgrad wird demnach als Quotient aus der Querschnittsfläche zur Projektionsfläche der Kugel definiert (s. Abb. 8.5). Die Grenzpartikelbahn wird durch Lösen der Bewegungsgleichung auf Basis des berechneten Strömungsfeldes in der jeweiligen Schüttung kalkuliert. Für verschiedene Partikelgrößen ergeben sich unterschiedliche Grenzpartikelbahnen, d. h. erwartungsgemäß ist der Einzelkornabscheidegrad ebenfalls eine Funktion der Partikelgröße.



Abbildung 8.5: Die umströmte Einzelkugel nach Gal et al. [23]

Das free- surface- Modell nach Happel [28] stellt das bekannteste Modell zur Beschreibung der Partikelabscheidung in Schüttschichten dar. Zur Bestimmung des Strömungsbzw. Geschwindigkeitsprofiles wird das poröse Festbett in einzelne Zellen unterteilt. Jede Zelle besteht aus einer Kugel, die von einer konzentrischen Fluidhülle umschlossen wird. Die einzelnen Kollektoren (Kugeln) haben eine freie Oberfläche, d.h. keine Kugel berührt eine andere. Die Zellen sind gleich groß und besitzen das gleiche Strömungsfeld. Die Porosität einer Einzelzelle entspricht der Porosität der Schüttung. Zur Beschreibung der Strömungsverhältnisse verwendet Happel die Navier- Stokes- Gleichung, unter Vernachlässigung der Trägheitsterme. Der Nachteil des Modells der umströmten Einzelkugel besteht vor allem darin, daß ein isolierter Einzelkollektor betrachtet und somit der Einfluß benachbarter Kollektoren auf die Strömungs- und Geschwindigkeitsverhältnisse nicht berücksichtigt wird.

Aufbauend auf dem Modell von Brinkmann untersuchten Neale und Nader [55] ebenfalls die Partikelabscheidung in Schüttschichten. Die Schüttung wird dabei als poröse Masse betrachtet, die aus einer Anzahl verschieden großer Schüttgutkörner bzw. Kollektoren besteht und, wie schon bei Happel, in einzelne Zellen unterteilt wird. Die einzelnen Schüttgutkörner werden als Kugeln angesehen, die von einer Fluidhülle umgeben sind. Die Porosität der Einzelzelle (Kugel mit umgebender Fluidhülle) muß der Porosität der Schüttung entsprechen. Unter der Voraussetzung einer inkompressiblen, schleichenden Strömung wird das Strömungsfeld für den Zellenbereich und die poröse Masse gelöst.

Snyder und Stewart [85] entwickelten für kubisch dichtgepackteste Schüttungen ein dreidimensionales Strömungsmodell (*dense cubic packing model*) unter der Voraussetzung gleich großer Kollektoren und einer schleichenden Strömung. Bei diesem Ansatz wird der Einfluß der angrenzenden Kollektoren berücksichtigt, was zu höheren Abscheidegraden im Vergleich zu den *sphere-in-cell-* Modellen führt.

Porenmodelle

Bei den Porenmodellen wird nicht die Umströmung von Einzelkollektoren sondern die Durchströmung einzelner Kanäle bzw. Poren betrachtet. Die Partikel werden an der Oberfläche der Poren abgeschieden, durch die das Fluid strömt. Es erfolgt ebenfalls eine Bahnkurvenberechnung, allerdings innerhalb der Pore. Ein Partikel wird als abgeschieden betrachtet, wenn es die Porenwand berührt (vollständige Haftung wird vorausgesetzt). Beim Zylindermodell werden zur Beschreibung der Strömungs- und Geschwindigkeitsverhältnisse innerhalb einer Schüttung zylinderförmige Poren betrachtet. Diese Annahme stellt bei dem unregelmäßigen Aufbau von Schüttschichten allerdings eine Vereinfachung dar. Beim constricted- tube- Model nach Pendse und Tien [67] besitzt die Pore die Form eines eingeschnürten Zylinders. Bei dieser Modellvorstellung wird das poröse Filterbett in einzelne Bettelemente unterteilt, und jedes Bettelement wiederum besteht aus geometrisch ähnlichen Einzelzellen bzw. Poren.

Peukert [68] entwickelte zur Beschreibung der Partikelabscheidung in Schüttschichten ein Modell als Kombination aus dem herkömmlichen Modell der umströmten Einzelkugel und dem Porenmodell. Die eigentliche Abscheidung wird ähnlich wie bei Happels Modell am isolierten Kollektor innerhalb einer repräsentativen Elementarzelle betrachtet. Jedoch berücksichtigt Peukert in seinem Modell einen gewissen Einfluß benachbarter Kollektoren auf die Strömungsverhältnisse, indem er einen dimensionslosen Durchmesser als Verhältnis von Porendurchmesser zu Korndurchmesser einführt.

Aufbauend auf diesen Modellvorstellungen und experimentellen Untersuchungen sind von verschiedenen Autoren Ansätze zur Berechnung des Einzelkornabscheidegrades und des Fraktionsabscheidegrades in Schüttschichten entwickelt worden. Wie bereits dargestellt, werden der Diffusions- und Trägheitsbeitrag meist einzeln berechnet und aufaddiert. Der konvektiv- diffusive Stofftransport zur Einzelkugel kann mit Hilfe einer halbempirischen Gleichung (s. auch Kapitel 5) beschrieben werden. Die empirischen Konstanten sind u. a. von Levich [46] wie folgt ermittelt worden (die charakeristische Länge für die Re- Zahl ist hier der Durchmesser des Korns):

$$Sh = 0,997 \cdot Pe_{\rm p}^{\frac{1}{3}}$$
 (8.7)

Der Einzelkornabscheidegrad ist definitionsgemäß die Anzahl der Partikel, die auf der Kugel abgeschieden werden, bezogen auf die zugeführten Partikel. Für die Berechnung des Stofftransportes innerhalb einer Schüttung wird eine Korrekturfunktion $g(\epsilon)$ eingeführt, die dem veränderten Transport Rechnung trägt. Es gilt nach Tardos *et al.* [92]:

$$\eta_{\rm D} = 4 \cdot g(\epsilon) \cdot P e_{\rm p}^{-\frac{2}{3}} \tag{8.8}$$

Eine Vielzahl von Autoren (aufgelistet in Tardos *et al.* [93]) hat Werte für die Korrekturfunktion für verschiedene Anwendungsbereiche theoretisch und experimentell ermittelt. Für die Randbedingungen, wie sie in dieser Arbeit vorliegen, eignen sich die Funktionen nach Wilson und Geankoplis [101]

$$g(\epsilon) = \frac{1,09}{\epsilon} \tag{8.9}$$

und Tardos *et al.* [93]

$$g(\epsilon) = \frac{1,31}{\epsilon} \tag{8.10}$$

Für Partikel im supermikronen Größenbereich wird der konvektiv- diffusive Transport vernachlässigbar. Die Partikelabscheidung beruht dann vorrangig auf dem Trägheitseffekt. Berechnungsansätze liegen in größerer Anzahl in der Literatur vor. Aufgrund der besonderen Randbedingungen erscheinen zunächst nur die drei nachfolgend aufgeführten Ansätze prinzipiell geeignet. Auf Basis des Strömungsmodells von [85] (kubisch dichteste Packung gleichgroßer Kugeln) lösten Gal *et al.* [23] die Bewegungsgleichung zur Berechnung der Partikelabscheidung. Der Einzelkornauftreffgrad aufgrund von Trägheit ergibt sich zu:

$$\eta_{\rm T} = \frac{2 \; Stk^{* \; 3,9}}{4,3 \cdot 10^{-4} + Stk^{* \; 3,9}} \tag{8.11}$$

mit der modifizierten Stokeszahl Stk^{\ast}

$$Stk^* = \left(1 + \frac{1,75 \ Re}{150 \cdot (1-\epsilon)}\right) \cdot Stk \tag{8.12}$$

D'Ottavio und Goren [11] führen zur Beschreibung der Partikelabscheidung im Trägheitsbereich die effektive Stokeszahl Stk_{eff} und hydrodynamische Faktoren $A_{\rm h}$ ein. Für Reynoldszahlen größer als 1 gilt:

$$A_{\rm h} = 1,14 \cdot Re^{\frac{1}{2}} \cdot \epsilon^{-\frac{3}{2}} \tag{8.13}$$

$$Stk_{eff} = A_{\rm h} \cdot Stk \tag{8.14}$$

Der Einzelkornauftreffgrad berechnet sich dann zu:

$$\eta_{\rm T} = \frac{Stk_{eff}^{3,55}}{1,67 + Stk_{eff}^{3,55}} \tag{8.15}$$

Basierend auf experimentellen Daten entwickelte Thambimuthu [94] folgenden Zusammenhang:

$$\eta_{\rm T} = \left(\frac{Stk}{Stk + 0,062 \ \epsilon} \right)^3 \tag{8.16}$$

Mit dieser Beziehung ist der Einzelkornauftreffgrad keine Funktion der Reynoldszahl, sie kann nur bedingt auf andere Problemstellungen angewendet werden.

8.2.2 Vergleich und Diskussion der Ergebnisse

In der Abbildung 8.6 ist der Einzelkornabscheidegrad als Funktion des Partikeldurchmessers aufgetragen. Als Abscheidemechanismus ist nur die Diffusion berücksichtigt. Erwartungsgemäß ergibt sich für das Einzelkorn eine recht geringe Abscheiderate, die nur für Partikelgrößen kleiner als 0,1 μ m einen nennenswerten Beitrag darstellt. Es liegt eine gute Übereinstimmung für die empirischen Ansätze nach Tardos *et al.* [93] und Wilson und Geankoplis [101]) vor. Der Trenngrad $T(d_p)$ als Funktion des Partikeldurchmessers ist in Abbildung 8.7 für die Schüttschichthöhen 10 cm und 150 cm dargestellt. Obwohl bei der 10 cm- Schüttung bereits ca. 40 Lagen des Aktivkohlekorns vorliegen, ist der Trenngrad für die Partikelgröße von 0,1 μ m mit ca. 40 % eher gering. Erst die größeren Schüttschichthöhen führen hier zu einer deutlichen Erhöhung der Abscheideleistung. Dies bedingt einen steigenden Druckverlust und damit höhere Betriebskosten für das Gebläse. An dieser Stelle muß ferner darauf hingewiesen werden, daß die experimentellen Bedingungen der zitierten Arbeiten erheblich von den hier vorliegenden Bedingungen abweichen. Die Partikelabscheidung innerhalb von Schüttschichten mit mehr als 1 m Höhe standen nicht zur Verfügung.



Abbildung 8.6: Einzelkornabscheidegrad im Diffusionsbereich nach Wilson und Geankoplis [101] und Tardos *et al.* [93]



Abbildung 8.7: Trenngrad im Diffusionsbereich bei unterschiedlicher Betthöhe

In den vorherigen Abbildungen ist nur die Diffusion als Abscheidemechanismus berücksichtigt worden. Für Partikel größer als 1 μ m wird die Trägheit der bedeutende Mechanismus. In den Abbildungen 8.8 und 8.9 ist bei gleicher Auftragungsart und gleichen Randbedingungen auch dieser Einfluß mit berücksichtigt ¹. Bereits bei einer Schüttschichthöhe von 10 cm werden die Partikel größer als 4 μ m vollständig abgeschieden, da sie der Strömung aufgrund ihrer Masse nicht mehr folgen können. Es ergibt sich ein u- förmiger Verlauf des Trenngrades. Bei Vergrößerung der Schüttschichthöhe liegt ein ausgeprägtes Minimum bei ca. 1 μ m vor. Die Übereinstimmung der jeweiligen empirischen Ansätze ist gut, allerdings sind die Bedingungen im Aktivkohleschüttschichtfilter erheblich abweichend von denen der entsprechenden Experimente.

Bei gleicher Auftragung wird in den Abbildungen 8.10 und 8.11 die Temperatur bzw. der Korndurchmesser variiert. Die Erhöhung der Temperatur auf einen typischen Betriebswert von 398 K verändert die Abscheideleistung nur unwesentlich. Die Veränderung des Korndurchmessers beeinflußt den berechneten Werte des Trenngrades maßgeblich. Ein Korndurchmesser von 1 mm ist aufgrund des resultierenden Druckverlustes (bei der vorgegebenen Betthöhe von 150 cm) praktisch nicht umsetzbar.

¹Der Diffusionseinfluß wird nach Tardos et al. [93] berechnet und superpositioniert.



Abbildung 8.8: Trenngrad im Diffusions- und Trägheitsbereich



Abbildung 8.9: Trenngrad im Diffusions- und Trägheitsbereich



Abbildung 8.10: Trenngrad bei unterschiedlicher Temperatur



Abbildung 8.11: Trenngrad bei unterschiedlichem Korndurchmesser der Schüttung nach Gal *et al.* [23]

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Transport und die Abscheidung submikroner Partikel in turbulenten Strömungen theoretisch untersucht. Ausgehend von der Simulation der Transportprozesse innerhalb einer Rohrströmung werden angeströmte Oberflächen und komplexe Strömungssituationen, wie sie beispielsweise in industriellen Anlagen zur Rauchgasreinigung vorliegen, betrachtet. Auf die Partikelphase wirken gleichzeitig Konvektion, Diffusion, Schwerkraft, Thermophorese oder Trägheitskräfte.

Zur Berechnung der partiellen Differentialgleichungen des Geschwindigkeits-, Temperatur- und Partikelanzahlkonzentrationsfeldes wird für die zweidimensionalen, rotationssymmetrischen Problemstellungen (Rohrströmung und angeströmte Kreisscheibe) der SIMPLER- Algorithmus eingesetzt. Verschiedene Turbulenzmodelle werden vorgestellt. Die berechneten Geschwindigkeitsprofile für die turbulente Rohrströmung werden mit den wenigen verfügbaren experimentellen Daten verglichen. Für die untersuchten Low-Reynolds- Strömungsbedingungen ergibt sich die Notwendigkeit, das Standard k- ε -Modell zu erweitern, um insbesondere die Bedingungen im Bereich der Grenzschicht im Detail erfassen zu können.

Die Partikelabscheidung innerhalb der turbulenten Rohrströmung wird aufbauend auf den Vorarbeiten zur laminaren Rohrströmung berechnet. Diese Ergebnisse werden verglichen mit denen von empirischen Gleichungen, die auf der Analogie zwischen Wärme- und Stofftransport basieren. Die Bedeutung verschiedener Modellannahmen für die Wirbelviskosität im unmittelbaren Nahbereich zur Wandoberfläche für die Partikelabscheidung im Rohr wird aufgezeigt. Während der turbulente Transportbeitrag für die Berechnung des Geschwindigkeits- und Temperaturverlaufes in der viskosen Unterschicht nicht ausschlaggebend ist, beeinflußt der turbulente Transport in dieser Schicht den Partikeltransport. Die vereinfachende Annahme, daß innerhalb der viskosen Unterschicht (teilweise mißverständlich auch als laminare Unterschicht bezeichnet) die Wirbelviskosität den Wert Null annimmt, führt zu deutlichen Fehlern. Mit Hilfe der Modellerweiterung dieser Arbeit wird dagegen eine sehr gute Übereinstimmung des jeweils ermittelten konvektivdiffusiven Stofftransportes erzielt. Als Beispiel für mögliche Erweiterungen ist die Abscheidung von Partikeln aufgrund eines Temperaturgradienten betrachtet worden. Die Einbindung weiterer Transportmechanismen, insbesondere der Wirbelträgheit, wird Gegenstand eines geplanten Forschungsprojektes sein.

Die durchgeführte Modellerweiterung zur Berücksichtigung der Turbulenz ist auf die turbulent angeströmte Kreisscheibe adaptiert worden. Zur Erzeugung einer definierten Anströmung mit bekanntem Turbulenzgrad und vorgegebener Wirbelgröße wird bei der Simulation ein Turbulenzgitter berücksichtigt. Aufbauend auf den Vorarbeiten zum Transport zu einer laminar angeströmten Kreisscheibe ist damit der geringe Beitrag der Turbulenz an der Gesamtdeposition für diese Randbedingungen erkennbar geworden. Die Bedenken der Betreiber von Reinräumen, daß die Annahme einer laminaren Strömung bei der Beurteilung des Partikeltransportes eine erhebliche Vereinfachung darstellt, konnten teilweise entkräftet werden.

Zur Berechnung des Partikeltransportes innerhalb komplexer Geometrien, wie sie beispielsweise in den Anlagen zur Rauchgasreinigung vorliegen, wird ein kommerzielles Programmpaket verwendet. Dreidimensionale, instationäre Strömungssituationen werden simuliert, wobei die Möglichkeiten körperangepaßte Koordinaten einsetzen zu können erhebliche Vorteile bringen. Es erfolgte ein sukzessiver Aufbau der Problemstellungen. Zunächst sind bekannte Anwendungen nachvollzogen und die Ergebnisse mit experimentellen oder theoretischen Daten aus der Literatur verglichen worden. Somit ist eine Basis geschaffen worden, um auch realistische Ergebnisse für Problemstellungen zu erzielen, die nicht weiter überprüfbar sind. Aufgrund der Berechnungen sind dann Anlagenkonzepte verbessert oder bestehende Fehler aufgezeigt worden. Insbesondere unter Berücksichtigung des extremen Zeit- und Kostenaufwandes experimenteller Untersuchungen, die dann ggf. noch von Labor- auf Industriemaßstab extrapoliert werden, stellen kommerzielle Programmpakete eine Alternative dar. Eine kritische Analyse und Bewertung der Simulationsergebnisse sollte unbedingt vorgenommen werden. Der Support durch den Vertreiber, d. h. im Einzelfall das gemeinsame Aufspüren von Programmlimitierungen und -fehlern, ist entscheidend für die Nutzbarkeit des Programmpaketes.

Der Partikeltransport im Aktivkohlefilter einer Müllverbrennungsanlage wird mit Hilfe empirischer Gleichungen berechnet. Für den interessierenden Partikelgrößenbereich erhält man den charakteristischen v- förmigen Verlauf der Abscheidewahrscheinlichkeit, wenn der konvektiv- diffusive Transport und die Trägheit berücksichtigt werden. Partikel mit Durchmessern von 0,1 μ m bis 1 μ m werden bei einer Schüttschichthöhe von 10 cm (entspricht 40 Lagen Aktivkohlekörnern) nur zu einem sehr geringen Anteil abgeschieden. Erst die Schüttschichthöhen von mehr als 1 m führen zu einer nennenswerten Abscheidung von Partikeln kleiner als 0,5 μ m. Größere Partikel sind, wie begleitend durchgeführte Messungen gezeigt haben, nur noch in sehr geringer Anzahlkonzentration vorhanden.

Obwohl im Rahmen dieser Arbeit die Transportprozesse, die insbesondere die Deposition submikroner Partikel beeinflussen, für sehr unterschiedliche Geometrien untersucht worden sind, ergibt sich eine einheitliche Abscheidecharakteristik in Abhängigkeit von der Partikelgröße. Supermikrone Partikel werden maßgeblich aufgrund von Sedimentation und Trägheit abgeschieden. Partikel $\leq 0,1 \ \mu m$ werden durch konvektiv- diffusive Transportprozesse beeinflußt. Für Partikelgrößen $0,1 \ \mu m \leq d_p \leq 1,0 \ \mu m$ ergibt sich ein Abscheideminimum, das insbesondere auch bei Filtern bekannt ist. Der Transport von Partikeln dieser Größe wird dann in Anwesenheit eines Temperaturgradienten durch Thermophorese oder in Anwesenheit von Potentialunterschieden durch Elektrophorese beeinflußt. Unabhängig von der Geometrie konnte des weiteren die maßgebliche Bedeutung des unmittelbaren Nahbereichs der Oberfläche für die Partikelabscheidung aufgezeigt werden. Dies gilt insbesondere auch für die Deposition von Nanopartikeln. Die aktuellen Studien der Arbeitsgruppe werden an dieser Stelle nicht mehr aufgeführt.

Die Simulation der Ausbreitung submikroner Partikel (die von gefaßten oder diffusiven Quellen emittiert werden), die Berechnung des Partikeltransportes in Hochtemperaturschüttschichtfiltern, die numerische Berechnung der Partikelabscheidung in weiteren Anlagenkomponenten der Rauchgasreinigung, und ggf. die Deposition innerhalb des Atemsystems des Menschen werden aufbauend auf den hier vorgestellten Ergebnissen als nächste Problemstellung untersucht.

Nomenklatur

Symbol	Dimension	Erklärung	
a	m^2/s	Temperaturleitfähigkeit des Gases	
$a_{\rm eff}$	m^2/s	effektive Temperaturleitfähigkeit des Gases	
A	m^2	Fläche	
В	s/kg	Partikelmobilität	
c	m/s	thermische Molekülgeschwindigkeit	
$\vec{c}_{ m ex}$	m/s	Partikelgeschwindigkeit aufgrund einer externen Kraft	
$c_{\text{ex}}^* = \frac{c_{\text{ex}}}{u_{\infty}}$	1	dimensionslose Partikelgeschwindigkeit	
$c_{\rm p}$	J/(kgK)	mittlere spezifische Wärmekapazität	
$C_{\rm s}$	1	Cunningham- Slipkorrektur	
$d_{ m p}$	m	Partikeldurchmesser	
$d_{\rm k}$	m	Korndurchmesser	
D	$\mathrm{m}^2\mathrm{/s}$	Diffusionskoeffizient der Partikel in Luft	
\vec{E}	V/m	Elektrische Feldstärke	
f	m kg/s	Reibungskoeffizient	
\vec{F}	Ν	externe Kraft	
G	${\rm N}{\rm m}^{-2}{\rm s}^{-1}$	Generierung der turbulenten Energie	
\vec{g}	$ m m/s^2$	${ m Erdbeschleunigung}$	
h	1	${ m Haftwahrscheinlichkeit}$	
Н	m	Höhe der Schüttung	
$ec{j}_{ m p}$	$1/({ m m}^{-2}{ m s})$	Partikelflußdichte	
k	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-2}$	kinetische Energie der turbulenten Schwankungsgrößen	
$k_{ m s}$	1	Sandrauhigkeit nach Nikuradse	
$K_{ m th}$	1	thermophoretischer Koeffizient	
L	m	Rohrlänge	
l	m	charakteristische Länge	
$l_{ m m}$	m	Mischungsweglänge	
\dot{m}	m kg/s	Massenstrom	
$m_{ m p}$	kg	Einzelpartikelmasse	

Symbol	Dimension	Erklärung	
n _p	$1/m^3$	Partikelanzahlkonzentration	
$n_{ m e}$	1	Anzahl der Ladungen	
P	1	Penetration	
q	W/m^2	Wärmestrom	
r	m	radiale Koordinate	
$r^* = \frac{r}{R}$	1	dimensionslose radiale Koordinate (nur Kapitel 6)	
R \tilde{R}	m	Radius (des Rohres bzw. in Kap.6 der Kreisscheibe)	
S_{ϕ}		generalisierter Quellen-/Senkenterm	
Stk		Stokes- Zahl	
t	S	Zeit	
T	К	absolute Temperatur	
$T_{\rm m}$	К	mittlere Temperatur	
$T_{ m ein}$	К	Eintrittstemperatur des Fluides	
$T_{\rm v} = \frac{T_{\infty}}{T_{\rm w}}$	1	Temperaturverhältnis	
$T_{\rm W}$	К	Temperatur des Wand	
T^+	1	dimensionslose Temperatur	
Tu	1	Turbulenzgrad	
$T(d_{\rm p})$	1	Fraktionsabscheidegrad bzw. Trenngrad	
u	m/s	Fluidgeschwindigkeit (axiale Komponente)	
\overline{u}	m/s	Mittelwert der Fluidgeschwindigkeit	
		(wird ab Kapitel 3 vereinfachend mit u bezeichnet)	
u'(t)	m/s	Schwankungswert der Fluidgeschwindigkeit	
u^*	1	normierte Geschwindigkeit $(\mathrm{u}/\mathrm{u}_\infty)$	
u_{∞}	m/s	Geschwindigkeit der ungestörten Anströmung	
$u_{ au}$	m/s	${ m Schubspannungsgeschwindigkeit}$	
\vec{u}	m/s	Fluidgeschwindigkeit	
$ec{u}_{ ext{p}}$	m/s	Partikelgeschwindigkeit	
v	m/s	Fluidgeschwindigkeit (radiale Komponente)	
\overline{v}	m/s	Mittelwert der Fluidgeschwindigkeit	
		(wird ab Kapitel 3 vereinfachend mit v bezeichnet)	
v'(t)	m/s	Schwankungswert der Fluidgeschwindigkeit	
V	$\mathrm{m}^{3}/\mathrm{s}$	Volumenstrom	
$v_{ m d}$	m/s	${ m Depositionsgeschwindigkeit}$	
$v_{\rm d}^+$	1	dimensionslose Depositionsgeschwindigkeit	
$v_{\rm d}^* = \frac{v_{\rm d}}{u_{\infty}}$	1	dimensionslose Depositionsgeschwindigkeit (nur Kap. 6)	
x	m	axiale Koordinate (entgegensetzt zu z , ausgehend	
		von der Oberfläche der Scheibe)	
$y_{ au}$	1	dimensionsloser Wandabstand	
<i>z</i>	m	axiale Koordinate	

Symbol	Dimension	Erklärung
α	$\rm W/~m^2~K$	Wärmeübergangskoeffizient
$\delta_{ m c}$	m	Konzentrationsgrenzschichtstärke
δ_{T}	m	${ m Temperaturg renzschichtst}$ ärke
$\delta_{ m v}$	m	Reibungsgrenzschichtstärke
δ^*_{i}	1	dimensionslose Grenzschichtstärken $\left(\frac{\delta_i}{B}\right)$
ε	$m^2 s^{-3}$	Dissipationsrate
ϵ		Porösität der Schüttung (nur Kapitel 8)
η	m kg/(ms)	dynamische Viskosität
η	1	Einzelauftreffgrad (nur Kapitel 8)
$\eta_{\mathrm{D}}; \eta_{\mathrm{R}}; \eta_{\mathrm{T}}$	1	Einzelauftreffgrad aufgrund von Diffusion,
		Sperr- und Trägheitseffekt
θ	1	dimensionslose Temperatur
$\lambda_{\rm g}; \lambda_{\rm p}$	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit (Gas; Partikel)
λ^*	1	Wärmeleitfähigkeitsverhältnis $\left(\frac{\lambda_{\rm p}}{\lambda_{\sigma}}\right)$
λ	m	mittlere freie Weglänge
λ	1	Widerstandsbeiwert
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
$ u^* $		dimensionslose Austauschgröße
$ ho_{ m g}; ho_{ m p}$	$\mathrm{kg/m}^{3}$	Dichte (Gas; Partikel)
$ au_{\rm w}$	N/m^2	Wandschubspannung
$ au_{ m p}$	S	Relaxationszeit (Partikel)
$\tau_{\rm p}^+$	S	dimensionslose Relaxationszeit
ϕ		generalisierte Variable (SIMPLER-Algorithmus)
φ	V	elektrisches Potential
Γ_{ϕ}	1	generalisierter Diffusionskoeffizient
Φ	1	dimensionslose Partikelanzahlkonzentration
$\Phi(d_{\rm p})$	1	Einzelkornabscheidegrad

Griechische Symbole

Konstanten

Symbol	Zahlenwert	Erklärung
e	$1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ A s}$	Elementarladung
g	$9,81~{ m m~s^{-2}}$	Erdbeschleunigung
$k_{\rm B}$	$1,38062 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$	Boltzmann-Konstante

Symbol	Erklärung
eff	effektiv
g	Gas
i	Laufindex
m	gemittelter Wert
n	Laufindex
р	Partikel
r	radiale Richtung
∞	ungestörte Anströmung
t	turbulent
$^{\mathrm{th}}$	${\it thermophoretisch}$
z	axiale Richtung

Indizes

Kennzahlen

Kennzahl	Definition	Erklärung
Knudsen- Zahl	$Kn = \frac{2 \cdot \lambda}{d_p}$	Verhältnis der mittleren freien Weglänge
	r	in Gasen zu einer Bezuglänge
Lewis- Zahl	$Le = \frac{a}{D}$	Verhältnis der konvektiv transportierten
	2	Wärmemenge zur transportierten Stoffmenge
Péclet- Gas- Zahl	$Pe_{g} = Re \cdot Pr$	Verhältnis der konvektiv transportierten
		Wärmemenge zu der durch Leitung
Péclet- Partikel- Zahl	$Pe_{\rm p} = Sc \cdot Re$	Verhältnis der konvektiv transportierten
		Wärmemenge zum Diffusionstransport
Prandtl- Zahl	$Pr = \frac{\nu}{a}$	Verhältnis der durch Reibung
		erzeugten zur fortgeleiteten Wärmemenge
Reynolds- Zahl	$Re = \frac{u \cdot R}{\nu}$	Verhältnis der Trägkeitskraft zur Reibung
Schmidt-Zahl	$Sc = \frac{\nu}{D}$	Analogon zur Prandtl-Zahl

Literaturverzeichnis

- Armaly, B. F.; Durst, F.; Pereira, J. C. F.; Schönung, B. (1983)
 Experimental and theoretitical investigations of backward-facing step fow J. Fluid Mech., 1277, S. 473 - 496
- Batchelor, G.K.; Shen, C. (1985)
 Thermophoretic Deposition of Particles in Gas Flowing over Cold Surfaces
 J. Col. Int. Sci. 107, Nr. 1, S. 21-37
- [3] Batel, W. (1972) *Entstaubungstechnik*; Springer-Verlag; Berlin Heidelberg New York
- Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N. (1960) Transport Phenomena; John Wiley and Sons; New York
- [5] Busnaina, A. A. and Abuzeid, A. (1990)
 Modeling of Air Flow and Particle Transport in Clean Rooms
 Swiss Contamination Control, 3, Nr.4, 276-280
- Busnaina, A. A., Abuzeid, A. and Sharif, M. A. R. (1988)
 Three- dimensional numerical simulation of fluid flow and particle tranport in a clean room.
 Institute of Environmental Science, Proceedings, 326-330
- [7] Chien, K.-Y (1981)
 Prediction of Channel and Boundary-Layer Flows with a Low-Reynolds-Number Turbulence Model
 AIAA Journal 1982 20, Nr. 1, S. 33-38

- [8] Cooper, D.W.; Peters M.H.; Miller R.J. (1989)
 Predicted Deposition of Submicrometer Particles Due to Diffusion and Electrostatics in Viscous Axisymmetric Stagnation-Point Flow
 Aerosol Sci. Technol. 11, S. 133-143
- [9] Davies, C.N. (1966)
 Aerosol Science
 Academic Press; London
- [10] Davies, J.T. (1983)
 A new theory of aerosol deposition from turbulent fluids Chem. Engineering Sci., 38, S. 135-139
- [11] D'Ottavio, T.; Goren, S.L. (1983)
 Aerosol Capture in Granular Beds in the Impaction Dominated Regime Aerosol Sci. Technol. 2, S. 91-108
- [12] Driest, E. R. van (1956)
 Turbulent boundary- layer in compressible fluids.
 J. Aeron. Sci., 23, S. 1007- 1011
- [13] Dryden, H. L.; Schubauer, G. B.; Mock, W. C. Jr.; Skramstad, H. K. (1937) Measurement of intensity and scale of wind tunnel turbulence and their relation to the critical Reynolds number of spheres. NACA Report, 581
- [14] Dubs, R. (1947) Angewandte Hydraulik Rascher; Zürich
- [15] El Telbany, M. M. M. and Reynolds, A. J. (1981) Turbulence in plane channel flows.
 J. Fluid Mech., 111, S. 283-318
- [16] Epstein, P. (1924)
 Phy. Rev., 23, S. 710

- [17] Fahn, F.-G. and Ahmadi, G. (1993)
 A sublayer model for a turbulent deposition of particles in vertical ducts with smooth and rough surfaces.
 J. Aerosol Sci., 24, S. 45-64
- [18] Freitas, C. J. (1995)
 Perspective: Selected Benchmarks from commercial CDD Codes
 J. of Fluids Engineering, 117, S. 208 218
- [19] Friedlander, S.K. (1977)
 Smoke, Dust and Haze
 John Wiley and Sons; New York
- [20] Friedlander, S.K.; Johnestone (1957)
 Deposition of suspended particles from turbulent gas streams
 Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 49, Nr. 7, S. 1151- 1156
- [21] Frössling, N. (1940) Verdunstung, Wärmeübergang und Geschwindigkeitsverteilung bei zweidimensionaler und rotationssymmetrischer laminarer Grenzschichtströmung Leipzig, O. Harrassowitz
- [22] Fuchs, N.A. (1964)
 The Mechanics of Aerosol
 Pergamon Press Ltd.; Oxford
- [23] Gal, E.; Tardos, G.; Pfeffer, R. (1985)
 A Study of Inertial Effects in Granular Bed Filtration AIChE Journal 31, Nr. 7, S. 1093-1104
- [24] Gnielinski, K. (1975)
 Neue Gleichungen f
 ür den W
 ärme- und den Stoff
 übergang in turbulent durchstr
 ömten Rohren und Kan
 älen Forsch. Ing.-Wes. Nr. 41
- [25] Gormley, P.G.; Kennedy, M. (1949)
 Diffusion from a Steam Flowing Through a Cylindrial Tube Proc. Royal Irish Acad., 52A, S. 163-169

- [26] Gröber, H.; Erk, S.; Grigull, U. (1981)
 Die Grundgesetze der Wärmeübertragung
 Springer Verlag; Berlin
- [27] Haep, S. (2000)
 Bildung und Wachstum von Aerosolen unter Bedingungen der nassen Rauchgasreinigung
 Dissertation im Fachbereich Maschinenbau, Gerhard-Mercator-Universtät Duisburg
- [28] Happel, J. (1958)
 Viscous Flow in Multiparticle Systems: Slow Motion of Fluids Relative to Beds of Spherical Particles
 AIChE Journal 4, Nr. 2, S. 197-201
- [29] Hausen, H. (1969)
 Verfahrenstechnik, Vol. 3, S. 355 u. 480
- [30] Hinds, W.C. (1982)
 Aerosol Technology
 John Wiley and Sons; New York
- [31] Hinze, J.O. (1959) Turbulence McGraw- Hill Book Comp.; New York
- [32] Hishida, M.; Nagano, Y.; Nakamura, Y. (1978)
 Temperature distribution in the turbulent boundary layer in a circular pipe Bulletin of the JSME Vol. 21, Nr. 157, S. 1175-1184
- [33] Incropera, F. P. und DeWitt, D. P. (1996)
 Introduction to Heat Transfer
 3rd Edition, Wiley, New York
- [34] Jeans, J. (1962)
 An Introduction to the Kinetic Theory of Gases
 University Press; Cambridge

- [35] Jones, W.O.; Launder, B.E. (1972) The Calculation of Low-Reynolds-Number Phenomena with a Two-Equation Model of Turbulence J. Heat Mass Tranfer 1973, Nr. 16, S. 1119-1130
- [36] Jung, Y.; Walata, S.A.; Tien, C. (1989)
 Experimental determination of initial collection efficiency of granular beds in the inertial-impaction-dominated region
 J. Aerosol Sci., 11 S. 168-182
- [37] Karman von, T. (1921)Über laminare und turbulente Reibung Z.A.M.M. Nr. 1
- [38] Kinney, P.D.; Pui, D.Y.H. (1991)
 Use of electrostatic classifikation method to size 0,1, μm SRM particles
 A feasibility study
 J. of Research of NIST, Vol. 96, No. 2, S. 147-176
- [39] Kottke, V.; Blenke, H.; Schmidt, K.G. (1977)
 Messung und Berechnung des örtlichen und mittleren Stoffübergangs an stumpf angeströmten Kreisscheiben bei unterschiedlicher Turbulenz
 Wärme- und Stoffübertragung, 10, S. 89-105
- [40] Kühn, T. H. (1988)
 Computer simulation of airflow and particle transport in cleanrooms Jour. Environmental Sci., 10, S. 21-27
- [41] Kvasnak, W.; Ahmadi, G.; Bayer, R. and Gaynes, M. (1993)
 Experimental investigations of dust particle deposition in a turbulent channel flow. J. Aerosol Sci., 6, S. 795-815
- [42] Laufer, J. (1953)
 The Structure of Turbulence in Fully Developed Pipe Flow National Advisory Committee for Aeronautics Report 1174

- [43] Launder, B.E.; Spalding, D.B. (1973)
 The Numerical Computation of Turbulent Flows
 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Nr. 3, S. 269-289
- [44] Lehmann, J. (1961)
 Widerstandsgesetze der turbulenten Strömung in geraden Stahlrohren Gesundheits-Ing. Nr. 82, S. 6-9
- [45] Leschziner, M.A.; Rodi, W. Scheuerer, G; Schönung, B.. (1990)
 Numerische Berechnung turbulenter Strömungen in Forschung und Praxis Unterlagen zu einem Kurzlehrgang
 Sonderforschungsbereich 210; Universität Karlsruhe
- [46] Levich, V.G. (1962)
 Physicochemical Hydrodynamics
 Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J.
- [47] Li, A. and Ahmadi, G. (1993)
 Deposition of aerosols on surfaces in a turbulent channel flow. Int. J. Engng Sci., 31, S. 435-451
- [48] Li, A.; Ahmadi, G.; Bayer, R. and Gaynes, M. (1994)
 Aerosol particle deposition in an obstructed turbulent duct flow
 J. Aerosol Sci., 25, S. 91-112
- [49] Liu, B.Y.H.; Pui, D.Y.H. Rubow K.L; Szymanski W. (1985)
 Elektostatic Effects in Aerosol Sampling and Filtration
 Ann. Occup. Hyg., 29, S. 251-269
- [50] Liu, B.Y.H.; Ahn, K.H. (1987)
 Particle Deposition on Semiconductor Wafers
 Aerosol Sci. Technol. Nr. 6, S. 215-224
- [51] Liu, B.Y.H.; Agarwal, J.K. (1974)
 Experimental Observation of Aerosol Deposition in Turbulent Flow Aerosol Sci. Technol. Nr. 5, S. 145-155

- [52] Löffler, F. (1980)
 Die Abscheidung von Partikeln aus Gasen in Faserfiltern Chem.- Ing.- Tech., 52, S. 312 -323
- [53] Ludwieg, H. (1956)
 Bestimmung des Verhältnisses der Austauschkoeffizienten für Wärme und Impuls bei turbulenten Grenzschichten
 Z. Flugwiss. Nr. 4, S. 73-81
- [54] Montassier, N.; Boulaud, D.; Startmann, F.; Fissan, H. (1990)
 Comparison between Experimental Study and Theoretical Model of Thermophoretic Transport in Laminar Tube Flow
 J. Aerosol Sci., 21, Nr. S1, S.86-88
- [55] Neale, G.; Nader, W. (1974)
 Prediction of Transport Processes within Porous Media: Creeping Flow Relative to a Fixed Swarm of Spherical Particles
 AIChE Journal 20, Nr. 3, S. 530-538
- [56] Nikuradse, J. (1926)
 Untersuchungen über die Geschwindigkeitsverteilungen in turbulenten Strömungen Heft 281, VDI- Verlag GmbH, Berlin
- [57] Noll, B. (1993)Numerische StrömungsmechanikSpinger- Verlag
- [58] Nunner, W. (1956) VDI-Forschungsheft 455
- [59] Otani, Y.; Emi, H.; Kanaoka, C.; Kato, K. (1989)
 Determination of Deposition Velocity onto a Wafer for Particles in the Size Range between 0,3 and 0,8 μm
 J. Aerosol Sci. 20, Nr. 7, S. 787-796

[60] Opiolka, S. (1992)

Partikeltransport zu laminar senkrecht angeströmten Oberflächen Dissertation im Fachbereich Elektrotechnik; Gerhard-Mercator-Universtät Duisburg

- [61] Opiolka, S.; Schmidt, F.; Fissan, H. (1994)
 Combined Effect of Electrophoresis and Thermophoresis on Particle Deposition onto Flat Surfaces
 J. Aerosol Sci., Vol. 25, Nr. 4, S. 665-671
- [62] Opiolka, S.; Schmidt, F. (1993)
 Partikelabscheidung auf senkrecht angeströmte Wafer unter Berücksichtigung von Thermophorese und Elektrophorese
 Reinraumtechnik 3, S. 16-20
- [63] Owen (1969)
 Pneumatic transport
 J.Fluid Mech., Vol.39, Part 2, S. 407 -432
- [64] Patankar, S.V. (1980)
 Numerical Heat Transfer and Fluid Flow
 McGraw-Hill; New York
- [65] Patankar, S.V.; Spalding, D.B. (1970)
 Heat and Mass Transfer in Boundary Layers
 Intertext Books; London
- [66] Patel, V.C.; Rodi, W.; Scheurer, G. (1984)
 Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows: A Review
 AIAA Journal 23, Nr. 9, S. 1308-1318
- [67] Pendse, H.; Tien, C. (1982)
 General Correlation of the Initial Collection Efficiency of Granular Filter Beds AIChE Journal 28, Nr. 4, S. 677-686
- [68] Peukert, W. (1990)
 Optimierung der Feinstaubabscheidung bei hohen Temperaturen und der simultanen Sorption gasförmiger Schadstoffe in einem Schüttschichtfilter

Projekt Europäisches Forschungszentrum für Maßnahmen zur Luftreinhaltung (PEF), Kernforschungszentrum Karlsruhe

- [69] Pollard, A.; Spalding, D.B. (1978)
 The Prediction of the Three-Dimensional Turbulent Flow-Field in a Flow-Splitting Tee-Junction
 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Vol.13, S. 293-306
- [70] Prandtl, L.; Oswatitsch, K.; Wieghardt (1989)
 Führer durch die Strömungslehre
 Vieweg- Verlag, 9. Auflage
- [71] Qiu, S.; Simon, T.W.; Vollno, R.J. (1995)
 Evaluation of local wall temperature, heat flux, and convective heat transfer coefficient from near- wall temperature profile *Heat Transfer in Turbulent Flows, ASME*, HTD- Vol. 318
- [72] Reichardt, H. (1951)
 Vollständige Darstellung der turbulenten Geschwindigkeitsverteilung in glatten Leitungen
 Z.A.M.M. Nr. 81, S. 208-219
- [73] Reichardt, H. (1961)
 The Principle of Turbulent Heat Transfer.
 Recent Advances in Heat and Mass Transfer 223-252, McGraw-Hill, New York
- [74] Romay, F. J.; Takagaki, S. S.; Pui, Y.H.; Liu Y.H. (1998)
 Thermophoretic Deposition of Aerosol Particles in a Turbulent Pipe Flow
 J. Aeros. Sci., Vol.29, Nr. 8, S. 943-959
- [75] Schlichting, H. (1964)Grenzschichttheorie, 3. AuflageVerlag G. Braun; Karlsruhe
- [76] Schlichting, H.;Gersten, K. (1997)
 Grenzschichttheorie, 9. Auflage
 Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

- [77] Schmidt, F.; Stratmann, F.; Fissan, H.;
 Periasamy, R.; Donovan, R.P.; Clayton, A.C.; Yamamoto, T. (1992)
 Particle Deposition Inside of Process Equipment, *ICCCS Proceedings 1992*, London, S. 131-134
- [78] Schmidt, F.; Stratmann, F.; Fissan, H.; Periasamy, R.
 Donovan, R.P.; Clayton, A.C.; Yamamoto, T.; Ensor, D.S. (1992)
 Theoretical and Experimental Study of Partical Transport in Vacuum Chambers
 J. Aerosol Sci., Vol. 23, Nr. 1, S. 59-62
- [79] Schmidt, F. (1994)
 Transport submikroner Partikel zu einer laminar umströmten Kreisscheibe
 Dissertation im Fachbereich Maschinenbau, Gerhard-Mercator-Universtät Duisburg
- [80] Schmidt, F.; Fissan, H.; Schmidt, K. G. (1994) Numerische Berechnung des Partikeltransportes zu einer laminar angeströmten Kreisscheibe Wärme- und Stoffübertragung, 30, S. 47-54
- [81] Schmidt, F Fissan, H.; Schmidt, K. G. (1996)
 Transport of Submicron Particles into and Particle Deposition inside of a Chamber at Reduced Pressure
 J. Aerosol Sci., Vol. 27, No. 4, S. 547-557
- [82] Schmidt, F.; Gartz, K.; Fissan (1997)
 Turbulent Particle Deposition on a Horizontal Circular Plate
 J. Aerosol Sci.; Vol. 28, No. 6, 973- 984
- [83] Schönung, B. (1990)
 Numerische Strömungsmechanik, Inkompressible Strömungen mit komplexen Berandungen.
 Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- [84] Sehmel, G.A. (1968)
 Aerosol Deposition from Turbulent Airstreams in Vertical Conduits
 BNWL-578 Pacific Northwest Laboratory; Richland, Washington
- [85] Snyder, L.J.; Stewart, W.E. (1966)
 Velocity and Pressure Profiles for Newtonian Creeping Flow in Regular Packed Beds of Spheres
 AIChE Journal 12, Nr. 1, S. 167-173
- [86] Sogin, H. H. (1958)
 Sublimation from Disks to Air Streams Flowin Normal to Their Surfaces
 ASME Transactions, 80, S. 61-62
- [87] Sparrow, E.M.; Geiger, G.T. (1985)
 Local Heat Transfer Characteristics for a Disk Situated Perpendicular to a Uniform Flow
 J. Heat Transfer 127, S. 321-326
- [88] Stratmann, F.; Whitby, E.R. (1989)
 Numerical Solution of Aerosol Dynamics for Simultaneous Convection,
 Diffusion and External Forces
 J. Aerosol Sci. 20, Nr. 4, S. 437-440
- [89] Stratmann, F. (1992)
 Partikeltransport in einer gekühlten laminaren Rohrströmung durch gleichzeitige Konvektion, Diffusion und Thermophorese
 Dissertation im Fachbereich Elektrotechnik; Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- [90] Stratmann, F.; Otto, E.; Fissan, H. (1994)
 Thermophoretical and Diffusional Particle Transport in Cooled Laminar Tube Flow
 J. Aerosol Sci., Vol. 25, Nr. 7, S. 1305-1319
- [91] Talbot, L.; Cheng, R. K.; Schefer, R. W.; Willis, D. R. (1980) Thermophoresis in a Heated Boundary Layer J. Fluid Mech.(101), 4, S. 737-758
- [92] Tardos, G.; Gutfinger, C.; Abuaf, N. (1974)
 Deposition of dust particles in a fluidizied bed filter Israel J. Tech., 12, S. 389-394

- [93] Tardos, G.; Abuaf, N.; Gutfinger, C. (1978)
 Dust deposition in granular bed filter: theories and experiments
 J. of the Air Pollution Control Association, 28, S. 354-363
- [94] Thambimuthu, K.V. (1980)Ph.D. thesisUniversity of Cambridge, Cambridge, England
- [95] Truckenbrodt, E (1980)FluidmechanikBerlin
- [96] VDI-Wärmeatlas (1994) VDI- Verlag
- [97] Walker, K.L.; Homsy, G.M.; Geyling, F.T. (1979)
 Thermophoretic Deposition of Small Particles in Laminar Tube Flow.
 J. Co. Int. Sci., 69, Nr. 1, S. 138-147
- [98] Weinberg, M.C. (1981)
 Calculation of Thermophoretic Deposition of Small Particles in Laminar Tube Flow.
 J. Col. Int. Sci., 84, Nr. 2, S. 550- 551
- [99] Wiedensohler, A. (1988)
 An Approximation of the Bipolar Charge Distribution for Particles in the Submicron Size Range
 J. Aerosol Sci. 19, S. 387-389
- [100] Wilde, K. (1978)
 Wärme- und Stoffübertragung in Strömungen Steinkopf, Darmstadt
- [101] Wilson, E.J.; Geankoplis, C.J. (1966)
 Liquid Mass Transfer at Very Low Reynolds Numbers in Packed Beds
 Ind. Eng. Chem. Fundamentals 5, Nr. 9

- [102] Ye, Y. und Pui, Y.H.D. (1990)
 Particle Deposition in a tube with an abrupt contraction J. Aerosol Sci. Vol. 21.
- [103] Ye, Y.; Pui, D.Y.H.; Liu B.Y.H.; Opiolka S. Blumhorst S.; Fissan H. (1991) Thermophoretic Effect of Particle Deposition on a Free-Standing Semiconductor Wafer in a Clean Room J. Aerosol Sci. 22, Nr. 1, S. 63-72
- [104] Yuu, S.; Jotaki, T. (1978)
 The Calculation of Particle Deposition Efficiency due to Inertia, Diffusion and Interception in a Plane Stagnation Flow Chem. Eng. Sci. 33, S. 971-978

Abbildungsverzeichnis

2.1	Der thermophoretische Koeffizient	13
3.1	Schwankungsgröße und Mittelwert (1) stationär (2) instationär	16
3.2	Der Mischungsweg	22
3.3	Gridpunkte und Kontrollvolumen	27
3.4	Der rotationssymmetrische Kontrollraum	28
4.1	Geschwindigskeit profile laminarer/ turbulenter Rohrströmungen $\ . \ . \ .$	31
4.2	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re=4.000$	33
4.3	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re = 4.000$ (Nahbereich)	34
4.4	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re=12.300$	34
4.5	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re = 12.300$ (Nahbereich)	35
4.6	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re=30.000$	35
4.7	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re = 30.000$ (Nahbereich)	36
4.8	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung be i $Re=10.000$	36

4.9	Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung bei $Re=10.000$ 3				
4.10	Die universelle Geschwindigkeitsverteilung für glatte Rohre	38			
4.11	Widerstandsdiagramm für technisch rauhe Rohre [75]	40			
4.12	Geschwindigkeitsverteilung für glatte und rauhe Wände [75] (hier ist $U = u_{\text{max}}$, bei $y/R = 0$ ist die Wand)	42			
4.13	Universelle Geschwindigkeitsverteilung für glatte und rauhe Wände [75] (hier wird $\frac{u}{u_{\tau}}$ mit φ bezeichnet)	43			
4.14	Temperaturprofil der turbulenten Rohrströmung	45			
4.15	Dimensionsloses Temperaturprofil der turbulenten Rohrströmung	45			
4.16	Ausgleich der Temperaturdifferenz (Wand und Symmetrieachse) \ldots .	46			
4.17	Ausgleich der Temperaturdifferenz	47			
4.18	Radiale Verteilung des Mischungsweges	49			
4.19	Radiale Verteilung der scheinbaren kinematischen Viskosität	50			
4.20	Vergleich laminare und kinematische Viskosität	51			
4.21	Radiale Verteilung der scheinbaren kinematischen Viskosität	52			
5.1	Penetration bei laminarer Rohrströmung	56			
5.2	Penetration bei unterschiedlichen Reynoldszahlen	56			
5.3	Vergleich verschiedener Literaturstellen zur turbulenten Abscheidung $\ . \ .$	57			
5.4	Vergleich verschiedener Literaturstellen zur turbulenten Abscheidung $\ . \ .$	58			
5.5	Vergleich verschiedener Ansätze für die viskose Unterschicht	59			
5.6	Die berechneten Depositionsgeschwindigkeiten	60			
5.7	Die berechneten Depositionsgeschwindigkeiten für variable Re	60			

5.8	Thermophoretische Abscheidung in einer laminaren Rohrströmung			
5.9	Thermophoretische Abscheidung in einer turbulenter Rohrströmung	63		
5.10	Thermophoretische Abscheidung in einer turbulenter Rohrströmung	64		
5.11	Dimensionslose Darstellung der Depositionsgeschwindigkeiten	65		
6.1	Kontrollraum der umströmten Kreisscheibe	67		
6.2	Strömungsfeld um die Kreisscheibe	67		
6.3	Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für verschieden e $Re\mathchar`$ Zahlen \hdots	68		
6.4	Normierte Konzentrationsgrenzschichtdicke	70		
6.5	Vergleich der normierten Geschwindigkeits-, Konzentrations- und Temperaturprofile	71		
6.6	Die Konzentrationsgrenzschichtdicke unter dem Einfluß einer externen Kraft charakterisiert durch die Partikelgeschwindigkeit c^*_{ex}	72		
6.7	Normierte Depositionsgeschwindigkeiten für $Re = 10^4$	73		
6.8	Depositionsgeschwindigkeit bei gekühlter Oberfläche ($\rho_{\rm p}~=~10^3~{\rm kg}~{\rm m}^{-3})$.	74		
6.9	Versuchsaufbau zum angeströmten Wafer bei Normaldruck [61]	75		
6.10	Ergebnisse der Depositionsexperimente zur Wirkung der Thermophorese $(\rho_p = 10^3 \text{ kg m}^{-3})$	76		
6.11	Der Geschwindigkeitsverlauf auf der Staupunktlinie	77		
6.12	Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für $Re = 10^4$	78		
6.13	Geschwindigkeitsgrenzschichtdicke für $Re = 10^3$	79		
6.14	Radiale Geschwindigkeit innerhalb der Grenzschicht	79		
6.15	Konzentrationsgrenzschichtdicke	80		

6.16	Konzentrationsgrenzschichtdicke	80
6.17	Bedeutung der Turbulenz bei niedrigen Reynoldszahlen	81
7.1	Diffusor im kartesischen Koordinatensystem	82
7.2	Diffusor mit BFC	83
7.3	Mit BFC-Koordinaten erstelltes Gitter	83
7.4	Geschwindigkeitsvektoren in der Symmetrieebene	85
7.5	Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=30^\circ$	86
7.6	Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=60^\circ$	86
7.7	Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt $\Theta=75^\circ$	87
7.8	Geschwindigkeitsvektoren im Querschnitt des Auslaufs	87
7.9	DMA	88
7.10	Einlaßbereich des DMA	89
7.11	Einzelzylinder in einem Kanal	90
7.12	Gitterverteilung um den Zylinder	90
7.13	Geschwindigkeitsvektoren	92
7.14	Temperaturverteilung	93
7.15	Querschnittsverengung im Rohr	95
7.16	Geschwindigkeitsvektoren	97
7.17	Grenztrajektorien	98
7.18	Abscheidegrad (Ye and Pui [102])	99
7.19	Strömungskanal mit rechteckigem Querschnitt	100

7.20	Gitterverteilung im Strömungskanal
7.21	Geschwindigkeitsvektoren in der Meßebene
7.22	Geschwindigkeitsprofil in der Meßebene
7.23	Trajektorien für Partikel mit einem Durchmesser von 1 μ m
7.24	Trajektorien für Partikel mit einem Durchmesser von 10 μ m 102
7.25	Geschwindigkeitskomponente
7.26	Partikelbahnen
7.27	Abgaskanal ohne Einbauten
	7.27(a) Geschwindigkeitsvektoren
	7.27(b) Partikelbahnkurven
7.28	Abgaskanal mit Einbauten
	$7.28(a)$ Geschwindigkeitsvektoren $\ldots \ldots 105$
	7.28(b) Partikelbahnkurven
8.1	Probenahmesystem zur Charakterisierung der Staubbeladung 109
8.2	Abscheidung der Partikel durch Impaktion
8.3	Partikelgrößenverteilung des Rauchgases einer Müllverbrennungsanlage . 110
8.4	Partikelgrößenverteilung nach dem Aktivkohlefilter [27]
8.5	Die umströmte Einzelkugel nach Gal <i>et al.</i> [23]
8.6	Einzelkornabscheidegrad im Diffusionsbereich nach Wilson und Geankoplis [101] und Tardos <i>et al.</i> [93]
8.7	Trenngrad im Diffusionsbereich bei unterschiedlicher Betthöhe 119

8.8	Trenngrad im Diffusions- und Trägheitsbereich
8.9	Trenngrad im Diffusions- und Trägheitsbereich
8.10	Trenngrad bei unterschiedlicher Temperatur
8.11	Trenngrad bei unterschiedlichem Korndurchmesser der Schüttung nach Gal <i>et al.</i> [23]
A.1	Der Rohrreibungskoeffizient

A Anhang

A.1 Herleitung der Impulserhaltungsgleichungen

Zur Bestimmung des axialen und radialen Geschwindigkeitsfeldes in einer stationären, zweidimensionalen rotationssymmetrischen und inkompressiblen turbulenten Gasströmung sind die Navier-Stokes-Gleichung sowie die Kontinuitätsgleichung zu lösen.

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt allgemein die Massenerhaltung an einem Kontrollvolumen:

$$\frac{\partial \rho_{\rm g}}{\partial t} = -\nabla(\varrho \ \vec{u}) \tag{A.1}$$

mit:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

Für den stationären und inkompressiblen Fall folgt daraus:

$$\nabla \, \vec{u} = 0 \tag{A.3}$$

Die allgemeine Form der Navier-Stokes-Gleichung lautet [4]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_{\rm g} \ \vec{u} \right) = -\left[\nabla (\rho_{\rm g} \ \vec{u} \ \vec{u}) \right] - \nabla p - \left[\nabla \tau \right] + \rho_{\rm g} \ \vec{g} \tag{A.4}$$

Für die stationäre Strömung, unter Vernachlässigung der Gravitation auf die Gasphase, vereinfacht sie sich zu:

$$\left[\nabla(\rho_{\rm g} \ \vec{u} \ \vec{u})\right] = -\nabla p - \left[\nabla\tau\right] \tag{A.5}$$

Für das zweid
imensionale rotationssymmetrische System werden die Winkelkomponente der Geschwindigkeit
 wund die partiellen Ableitungen in Richtung der Winkelko
ordinate φ zu Null.

$$w = 0 \tag{A.6}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \varphi} = 0 \tag{A.7}$$

A.1.1 Axiale Impuls

In Komponentenschreibweise gilt für den axialen Impuls [4]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \ \rho_{\rm g} \ u \ v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_{\rm g} \ u \ u) = -\frac{\partial p}{\partial z} - [\nabla_z \tau]$$
(A.8)

Nach Umformung der linken Seite erhält man:

$$\rho_{\rm g} \left[\left(v \; \frac{\partial u}{\partial r} + u \; \frac{\partial u}{\partial z} \right) + u \; \left(\frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} (r \; v) + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] = -\frac{\partial p}{\partial z} - \left[\nabla_z \tau \right] \tag{A.9}$$

mit:

$$[\nabla_z \tau] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \ \tau_{rz}) + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}$$
(A.10)

und der Kontinuitätsgleichung für inkompressible Fluide:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \ v) + \frac{\partial u}{\partial z}\right) = 0 \tag{A.11}$$

folgt daraus:

$$\rho_{\rm g} \left(v \; \frac{\partial u}{\partial r} + u \; \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} (r \; \tau_{rz}) - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \tag{A.12}$$

Für die Schubspannungskomponenten gilt unter Verwendung effektiver Transportgrößen und der Voraussetzung eines inkompressiblen Newtonschen Fluides [4]:

$$\tau_{rz} = \tau_{zr} = -\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$
(A.13)

$$\tau_{zz} = -2 \ \mu_{\text{eff}} \ \frac{\partial u}{\partial z} \tag{A.14}$$

Die verwendete Erhaltungsgleichung für den z-Impuls ergibt sich demnach zu:

$$\rho_{\rm g} \left(v \; \frac{\partial u}{\partial r} + u \; \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(-2 \; \mu_{\rm eff} \; \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ - \frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} \left[-r \; \mu_{\rm eff} \; \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right]$$

$$\rho_{\rm g} \left(v \, \frac{\partial u}{\partial r} + u \, \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + 2 \, \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\rm eff} \, \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ + \frac{1}{r} \, \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_{\rm eff} \, r \, \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \, \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_{\rm eff} \, r \, \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$
(A.15)

A.1.2 Radiale Impuls

In Komponentenschreibweise gilt für den radialen Impuls [4]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \ \rho_{\rm g} \ v \ v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_{\rm g} \ u \ v) = -\frac{\partial p}{\partial r} - [\nabla_r \tau]$$
(A.16)

Analog zum axialen Impuls erhält man nach Umformung der linken Seite :

$$\rho_{\rm g} \left[\left(v \; \frac{\partial v}{\partial r} + u \; \frac{\partial v}{\partial z} \right) + v \; \left(\frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} (r \; v) + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] = -\frac{\partial p}{\partial r} - \left[\nabla_r \tau \right] \tag{A.17}$$

mit:

$$[\nabla_r \tau] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \ \tau_{rr}) - \frac{\tau_{\varphi\varphi}}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z}$$
(A.18)

und der Kontinuitätsgleichung für inkompressible Fluide A.11 folgt:

$$\rho_{\rm g} \left(v \; \frac{\partial v}{\partial r} + u \; \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} (r \; \tau_{rr}) + \frac{\tau_{\varphi\varphi}}{r} - \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} \tag{A.19}$$

Für die Schubspannungskomponenten gilt unter Verwendung effektiver Transportgrößen und der Voraussetzung eines inkompressiblen Newtonschen Fluides [4]:

$$\tau_{rr} = -2 \ \mu_{\text{eff}} \ \frac{\partial v}{\partial r} \tag{A.20}$$

$$\tau_{\varphi\varphi} = -2 \ \mu_{\text{eff}} \ \frac{v}{r} \tag{A.21}$$

Die im weiteren verwendete Erhaltungsgleichung für den r-Impuls ergibt sich zu:

$$\rho_{g} \left(v \frac{\partial v}{\partial r} + u \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-2 r \mu_{eff} \frac{\partial v}{\partial r} \right) + 2 \mu_{eff} \frac{v}{r^{2}} - \frac{\partial}{\partial z} \left[-\mu_{eff} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] \rho_{g} \left(v \frac{\partial v}{\partial r} + u \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_{eff} r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + 2 \mu_{eff} \frac{v}{r^{2}} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$
(A.22)

A.2 Rohrreibungskoeffizient

Der Rohrreibungskoeffizient ist eine wichtige Größe zur Bestimmung der Schubspannungsgeschwindigkeit [100]:

$$f_R = \frac{\Delta p}{\frac{1}{2} \rho_{\rm g} \,\overline{u}^2} \, \frac{D}{\Delta l} = \frac{\tau_w}{\frac{1}{2} \rho_{\rm g} \,\overline{u}^2} \tag{A.23}$$

Aufgrund der Proportionalität des Rohrreibungskoeffizienten zu der Wandschubspannung ist er auch proportional zu dem Geschwindigkeitsgradienten $\frac{\partial u}{\partial r}$ an der Rohrwand. Da dieser Geschwindigkeitsgradient für die turbulente Rohrströmung viel größer ist als für den laminaren Fall, ist ihm besondere Aufmerksamkeit zu schenken, um die Ungenauigkeiten bei seiner Bestimmung so gering wie möglich zu halten. Schon kleinere Abweichungen von dem tatsächlichen Wert führen zu größeren Fehlern bei den weiteren Berechnungen.

Schlichting [75] gibt für ein hydraulisch glattes Rohr, ausgehend von dem Blasius'schen Gesetz für $Re < 10^5$ eine Gleichung zur Bestimmung des Rohrreibungsfaktors an:

$$f_R = \frac{0,316}{4\sqrt[4]{Re}}$$
(A.24)

Untersuchungen von Lehmann [44] haben gezeigt, daß die Gültigkeit des Gesetzes auf $15.000 \le Re \le 70.000$ beschränkt ist. Für einen Gültigkeitsbereich von $2.300 \le Re \le 100.000$ gilt mit größerer Genauigkeit:

$$\frac{1}{f_R} = 2,13 \ lg\left(Re * \sqrt{f_R}\right) - 1,34 \tag{A.25}$$

Im VDI-Wärmeatlas wird eine einfache Gleichung für den Rohrreibungskoeffizienten angegeben:

$$f_R = \frac{1}{(1,82 \ lg(Re) - 1,64)^2} \tag{A.26}$$

Die Widerstandsgesetze nach Blasius, Lehmann und dem VDI-Wärmeatlas sind in Abb. A.1 für den Wertebereich von $10^3 \leq Re \leq 10^5$ dargestellt. Die vertikale Linie bei Re=2.300 markiert die kritische Reynoldszahl, den möglichen Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung. Der Ansatz nach Blasius liegt, wie zu erwarten, für Reynoldszahlen kleiner als 15.000 unter den beiden anderen Ansätzen. Der einfache Zusammenhang für den Rohrreibungskoeffizienten nach dem VDI-Wärmeatlas zeigt nur geringe Abweichungen zu dem Graph nach Lehmann. Für die Berechnungen wird dennoch die komplexere Gleichung von Lehmann verwendet, um die Anfangsbedingungen für die axiale Geschwindigkeit zur Verbesserung der Konvergenz des Iterationsverfahrens so genau wie möglich vorzugeben.



Abbildung A.1: Der Rohrreibungskoeffizient

A.3 Low-Re-k- ε -Modelle

Eine Modifikation der Konstanten c_1 , c_2 und c_{μ} oder auch eine Modellerweiterung des Standard- k- ε -Modelles für den wandnahen Bereich ist über die Low-Re-k- ε -Modelle möglich.

A.3.1 Low-Re-k- ε -Modell nach Lam-Bremhorst

Die Berücksichtigung der viskosen Einflüsse im wandnahen Bereich erfolgt in dem Low-Re-k- ε -Modell nach Lam-Bremhorst [66] ausschließlich durch Modifikation der Konstanten bzw. Diffusionskonstanten. Die Transportgleichungen der kinetischen turbulenten Energie (3.23) und der Dissipationsrate (3.24) bleiben unverändert.

Die Gleichung zur Berechnung der Wirbelviskosität wird um einen Dämpfungsterm für erweitert, der im wandnahen Bereich wirksam wird:

$$\mu_t = c_\mu f_\mu \rho_g \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{A.27}$$

Der Dämpfungsterm ist definiert als:

$$f_{\mu} = \left[1 - exp(-0, 016 \ Re_r)\right] \left(1 + \frac{19, 5}{Re_t}\right)$$
(A.28)

mit der örtlichen Reynoldszahl:

$$Re_r = \frac{\sqrt{k} (R-r) \rho_{\rm g}}{\mu} \tag{A.29}$$

und der Turbulenz- Reynoldszahl:

$$Re_t = \frac{k^2 \rho_{\rm g}}{\mu \varepsilon} \tag{A.30}$$

Die Konstanten c_1 und c_2 aus Gleichung 3.24 werden durch die Konstanten c_1^* und c_2^* ersetzt, die das Verhältnis der turbulenten zu den viskosen Schubspannungen berücksichtigen:

$$c_1^* = c_1 \left[1 + (0,061 \ f_\mu)^3 \right]$$
 (A.31)

$$c_2^* = c_2 \left[1 - exp(-Re_t^2) \right] \tag{A.32}$$

A.3.2 Low-Re-k- ε -Modell nach Chien

In dem von Chien [7] vorgestellten Low-Re-k- ε -Modell werden sowohl die Konstanten als auch die Transportgleichungen modifiziert. Die erweiterten Transportgleichungen werden in dieser Arbeit von kartesischen auf Zylinderkoordinaten transformiert:

$$\rho_{g} \left(v \frac{\partial k}{\partial r} + u \frac{\partial k}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu + \mu_{t}}{\sigma_{k}} r \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu + \mu_{t}}{\sigma_{k}} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + G - \rho_{g} \varepsilon - 2 \mu \frac{k}{(R - r)^{2}}$$
(A.33)

$$\rho_{g} \left(v \; \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + u \; \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \; \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu + \mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} \; r \; \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu + \mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} \; \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + c_{1} \; \varepsilon \; \frac{\mu_{t}}{k} \; G$$
$$- \frac{\rho_{g} \; \varepsilon}{k} \left[c_{2} \; f \; \varepsilon + \frac{2 \; \nu \; k \; exp\left(- \frac{c_{4} \; u_{\tau} \; (R-r)}{\nu} \right)}{(R-r)^{2}} \right]$$
(A.34)

Der Dämpfungsterm f ist definiert als:

$$f = 1 - \frac{\kappa}{1,8} \exp\left[-\left(\frac{k^2}{6 \nu \varepsilon}\right)\right]$$
(A.35)

Der Dämpfungseffekt an der Wand wird für die turbulente Zähigkeit berücksichtigt durch:

$$\mu_t = c_\mu \ \rho_g \ \frac{k^2}{\varepsilon} \ \left[1 - exp\left(-\frac{c_3 \ u_\tau \ (R-r)}{\nu} \right) \right]$$
(A.36)

Der Konstantensatz des Standard $k\text{-}\varepsilon\text{-}\mathrm{Modelles}$ muß für diesen Ansatz modifiziert werden.

c_1	c_2	c_3	c_4	c_{μ}	σ_k	σ_{ε}
$1,\!35$	$1,\!8$	0,0115 - 0,01	0,5	$0,\!09$	$1,\!0$	$1,\!3$

Die Konstante c_3 des Dämpfungsterms der Wirbelviskosität ist eine Funktion der Reynoldszahl. Die oben angegebenen Werte wurden ermittelt für 4100< Re <38800. Im Programm wird die Konstante mit Hilfe linearer Interpolation bzw. linearer Extrapolation bestimmt.