

**Simulation der Transport- und Depositionsvorgänge
von Nanopartikeln in der Gasphase
mittels Partikel-Monte-Carlo- und
Lattice-Boltzmann-Methoden**

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Udo Lantermann
aus
Oberhausen/Rhld.

Referent: Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel

Korreferent: Prof. Dr. rer.nat. Harry Yserentant, TU Berlin

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Juli 2006

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Verbrennung und Gasdynamik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der Universität Duisburg-Essen. Sie fasst die wesentlichen Ergebnisse aus dem Teilprojekt C2 „Numerische Simulation von Partikeltransport und Deposition auf komplexe Oberflächen“ des Sonderforschungsbereichs 445 „Nanopartikel aus der Gasphase: Entstehung, Struktur, Eigenschaften“ zusammen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. D. Hänel für die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit. Seine zahlreichen Ratschläge und Anregungen haben wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Herrn Prof. Dr. rer.nat. H. Yserentant danke ich sehr herzlich für die Übernahme des Korreferates.

Meinen derzeitigen und ehemaligen Kollegen der CFD-Gruppe danke ich für die gute Zusammenarbeit, die anregenden Diskussionen und die freundschaftliche Arbeitsatmosphäre.

Weiterhin möchte ich mich bei allen übrigen Mitarbeitern und Studenten des IVG und des Sfb 445, die in vielfältiger Weise zum erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit beigetragen haben, bedanken.

Düsseldorf im Sommer 2006

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Bewegungsgleichungen diskreter Partikel	5
2.1. Lagrangesche Bewegungsgleichungen	5
2.1.1. Translatorische Bewegung	6
2.1.2. Rotatorische Bewegung	6
2.2. Langevin-Gleichungen	7
2.2.1. Translatorische Bewegung	7
2.2.2. Rotatorische Bewegung	8
2.3. Externe Kräfte auf Partikel	9
2.3.1. Widerstandskraft	9
2.3.2. Volumenkräfte infolge externer Felder	11
2.3.3. Zufallskräfte infolge Brownscher Diffusion	15
2.3.4. Auftriebskräfte	16
2.3.5. Beschleunigungskräfte	18
2.4. Depositionsmodell und wandnahe Kräfte	20
2.4.1. Partikeldeposition	20
2.4.2. Verzögerte (retarded) Van-der-Waals-Kraft	21
2.4.3. Bild-Kraft	25
2.5. Externe Drehmomente auf Partikel	26
2.5.1. Reibungsmoment	26
2.5.2. Drehmoment infolge Brownscher Rotation	28
2.5.3. Magnetisches Drehmoment	28
2.6. Größenvergleich der externen Kräfte	29
3. Grundgleichungen der kontinuierlichen Felder	35
3.1. Erhaltungsgleichungen der Gasphase	35
3.1.1. Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide	35
3.1.2. Navier-Stokes-Gleichungen für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte	36
3.2. Elektromagnetische Felder	37
3.2.1. Elektrostatisches Potentialfeld	38
3.2.2. Magnetostatisches Potentialfeld	39

4. Numerische Lösungsverfahren der Partikelphase	41
4.1. Runge-Kutta-Verfahren	41
4.2. Partikel-Monte-Carlo-Methode	42
4.2.1. Translatorische Bewegung	42
4.2.2. Rotatorische Bewegung	47
5. Lattice-BGK-Methode	51
5.1. Grundlagen der LBGK-Methode	52
5.2. Konsistenz der LBGK-Gleichung mit den Navier-Stokes-Gleichungen . . .	56
5.3. LBGK-Methode für viskose, inkompressible Strömungen	63
5.4. LBGK-Methode für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte	64
5.5. LBGK-Methode für Konvektions-Diffusions-Gleichungen	65
5.6. LBGK-Methode zur Lösung von Poisson-Gleichungen	66
5.7. Randbedingungen der LBGK-Methode	67
5.7.1. Molekulare Reflektionsrandbedingung (bounce-back)	68
5.7.2. Gleichgewichtsrandbedingung	68
5.7.3. Periodische Randbedingung	69
5.7.4. Randbedingung höherer Ordnung (boundary-fitting)	69
5.8. Lokale Gitterverfeinerung	71
6. Finite-Differenzen-Verfahren	75
6.1. Gleichungen einer kontinuierliche Partikelphase	75
6.1.1. Diskretisierung der Konvektions-Diffusions-Gleichung	76
6.2. Poisson-Gleichung	77
6.2.1. Relaxiertes Gauß-Seidel-Verfahren	77
6.2.2. Diskretisierung der Randbedingungen	78
7. Implementierung	81
7.1. Algorithmische Beschreibung der PMC-Methode	81
7.2. Algorithmische Beschreibung der LBGK-Methode	85
7.3. Kombination der beiden Teilprogramme	87
8. Ergebnisse	89
8.1. Grundbegriffe der Filtration	89
8.2. Validierung der LBGK-Verfahren	91
8.2.1. LBGK-Verfahren für viskose, inkompressible Fluide	91
8.2.2. LBGK-Verfahren für Strömungen kleiner Machzahlen	93
8.2.3. LBGK-Verfahren zur Lösung einer Poisson-Gleichung	97
8.3. Validierung des Partikelmodells	98
8.4. Deposition von Mikropartikeln an einem Faserfilter	101
8.5. Deposition von Nanopartikeln an einem Faserfilter	104

8.5.1. Einfluss von Strömung und Brownscher Bewegung	105
8.5.2. Einfluss eines elektrostatischen Feldes	111
8.5.3. Einfluss eines magnetostatischen Feldes	114
8.5.4. Einfluss eines Temperaturfeldes	118
8.6. Deposition von Nanopartikeln auf ebenen glatten Oberflächen	120
8.6.1. Deposition auf einer ebenen Platte mit einer Potentialdifferenz . .	122
8.6.2. Vergleich bei unterschiedlichen Strömungsbedingungen	123
8.7. Untersuchungen der Wechselwirkungen zwischen Partikelstrukturen und äußeren Feldern	125
8.7.1. Einfluss auf das Strömungsfeld	126
8.7.2. Einfluss auf das elektrostatische Feld	126
8.7.3. Einfluss auf das Temperaturfeld	128
9. Zusammenfassung und Ausblick	131
A. Anhang	135
A.1. Tensornotation	135
A.2. Multivariate Verteilungen	137
A.3. Numerische Hilfsmittel	139
A.3.1. Erzeugung von normalverteilten Zufallszahlen	139
A.3.2. Trilineare Interpolation	140
A.3.3. Regula-falsi	140
A.3.4. Simpson-Regel	141
A.4. LBGK-Methode auf beliebigen Gittern	143
A.5. Parallelisierung der LBGK-Methode	149
A.6. Monte-Carlo-Direktsimulationsmethode (DSMC)	151
Literaturverzeichnis	155

Symbolverzeichnis

Symbol **Beschreibung** **SI-Einheit/Wert**

Griechische Buchstaben

α'	Korrekturkoeffizient der Bild-Kraft	
α_A	Verhältnis zwischen Faseroberfläche und Partikelquerschnitt	
α_{cm}	Fitparameter des magnetischen Momentes	
α_{dis}	Verhältnis zwischen Partikeldurchmesser und Gitterabstand	
α_{kd}	Verhältnis der Verschiebungen aufgrund Konvektion und Diffusion	
α_k	k -ter Runge-Kutta-Koeffizient	
α_s	Retardationsfaktor der van-der-Waals-Kraft	
β_r	inverse Relaxationszeit der Rotationsbewegung	1/s
β_t	inverse Relaxationszeit der Translationsbewegung	1/s
Δt	Zeitschritt der Partikel-Monte-Carlo-Methode für die Translation	s
Δ	dimensionsloser Abstand in kartesischer Richtung	
δ_t	Zeitschrittweite der LBGK-Methode	s
δ_t^k	Zeitschrittweite der LBGK-Methode auf dem feinen Gitter	s
δ_x	Gitterschrittweite	m
δ_x^k	Schrittweite des feinen Gitters	m
ϵ	diskrete Knudsenzahl	$\frac{\delta_x}{L}$
η	dynamische Viskosität des Fluids	kg/m s
η_D	Wirkungsgrad aufgrund Diffusion	
η_F	Filterwirkungsgrad	
η_{ip}	Wirkungsgrad aufgrund Impaktion	
η_{iz}	Wirkungsgrad aufgrund Interzeption	
κ	Isentropenexponent	
κ_e	elektrische Leitfähigkeit	S/m
λ	Mittlere freie Weglänge des Fluids	m
λ_f	Wärmeleitfähigkeit des Fluids	W/m K
λ_p	Wärmeleitfähigkeit des Partikels	W/m K
λ_e	charakteristische Wellenlänge	m
ν_s	Kollisionsfrequenz	1/s

Ω	dimensionslose Kollisionsfrequenz der LBGK-Methode	
ω	Kollisionsfrequenz/Relaxationsparameter der LBGK-Methode	1/s
Ω^i	Gewichtungsfaktor	
Ω^k	Relaxationsparameter auf dem feinen Gitter	
ϕ	elektrisches Potential	V
Φ_E	Wechselwirkungsenergie zwischen Partikeln	J
ϕ_E	Wechselwirkungsenergie zwischen Atomen	J
ψ	skalares magnetisches Potential	A
ρ	Massendichte des Fluids	kg/m ³
ρ_p	Massendichte des Partikels	kg/m ³
σ_r^2	Varianz der stochastischen Winkelverschiebung	1
σ_{vx}^2	Kovarianz der stoch. Geschwindigkeits- und Ortsverschiebung	m ² /s
σ_v^2	Varianz der stochastischen Geschwindigkeitsverschiebung	m ² /s ²
σ_x^2	Varianz der stochastischen Ortsverschiebung	m ²
σ_ω^2	Varianz der stochastischen Drehgeschwindigkeitsverschiebung	1/s ²
$\sigma_{\omega r}^2$	Kovarianz der stoch. Drehgeschwindigkeits- und Winkelverschiebung	1/s
τ_k	Relaxationszeit gegenüber äußeren Kräften	s
τ_{Rr}	Relaxationszeit der Rotationsbewegung	s
τ_{Rt}	Relaxationszeit der Translationsbewegung	s
τ_s	mittlere Kollisionszeit	s
$\widetilde{\Delta t}$	Zeitschritt der Partikel-Monte-Carlo-Methode für die Rotation	s
ξ	Relaxationsparameter des SOR-Verfahrens	
ζ_r	Reibungskoeffizient der Rotation	kg m ² /s
ζ_t	Reibungskoeffizient der Translationsbewegung	kg/s

Indizes

(<i>k</i>)	<i>k</i> -te Runge-Kutta-Stufe
0	Initialisierung
a	außen
b	Randknoten
c	kalt
F	Faser
f	Fluid
g	groß/grob
h	heiß
i	innen
k	klein/fein
max	maximal
m	mittlerer Wert

post	post-Kollisions-Wert
pp	Partikel-Partikel
prae	prae-Kollisions-Wert
pw	Partikel-Wand
p	Partikel
r	Rotationsbewegung
S	Oberfläche
t	Translationsbewegung
v	versetzt
w	Wandoberfläche
*	dimensionslos auf molekularen Skalen
˘	dimensionslos auf Strömungsskalen
n	Zeitdiskretisierung der Partikelbewegung
p	Betragsquadrat der diskreten Geschwindigkeitsrichtung
pi	diskrete Geschwindigkeitsrichtung

Konstanten

ϵ_0	Dielektrizitätskonstante im Vakuum	$8.854187817 \cdot 10^{-12} \text{ C/V m}$
ϵ_1	relative Dielektrizitätskonstante von Nickel	∞
ϵ_2	relative Dielektrizitätskonstante von Siliziumoxid	4.6
ϵ_3	relative Dielektrizitätskonstante von Stickstoff	1.000580
\mathcal{R}	allgemeine Gaskonstante	$8314.472 \text{ J/kmol K}$
μ_0	Permeabilität des Vakuums	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/A m}$
μ_f	Permeabilität des Stickstoffs	$\mu_0(1 - 5.0 \cdot 10^{-7}) \text{ Vs/A m}$
π	Kreiszahl	3.141592653589793238462643383279502884
A_H	Hamaker-Konstante	$4.0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
e_{el}	Elementarladung	$1.602176462 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
g	Erdbeschleunigung	9.80665 m/s^2
k_b	Boltzmann-Konstante	$1.3806503 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

Lateinische Buchstaben

ℓ_a	Ablöselänge	m
P	Penetration	
\tilde{P}	nulltes Moment der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion	kg/m^3
A_1	Konstante des Cunningham-Faktors	
A_2	Konstante des Cunningham-Faktors	
A_3	Konstante des Cunningham-Faktors	
A_q	Querschnittsfläche	m^2

a_r	relative Beschleunigung zwischen Fluid und Partikel	m/s^2
B	Partikelmobilität	kg/s
c	Partikelkonzentration	$\#/m^3$
c_0	molekulare Einheitsgeschwindigkeit	m/s
C_B	Faktor der Basset-Kraft	
C_C	Korrekturfaktor nach Cunningham	
c_D	Widerstandskoeffizient	
c_F	Packungsdichte des Filters	
c_L	Auftriebskoeffizient	
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	J/kg K
C_r	Reibungskoeffizient der Rotationsbewegung	
c_S	Schallgeschwindigkeit eines idealen Gases	m/s
c_s	isotherme Schallgeschwindigkeit	m/s
C_{therm}	Faktor der thermophoretischen Kraft	
C_{vm}	Faktor der Virtuelle-Masse-Kraft	
c_v	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	J/kg K
C_W	Widerstandsbeiwert	
$D_{\text{Br},r}$	Diffusionskoeffizient der Brownschen Rotation	$1/\text{s}$
$D_{\text{Br},t}$	Diffusionskoeffizient der Brownschen Translation	m^2/s
d_{fp}	gemittelter Durchmesser	m
d_f	Durchmesser eines Gasmoleküles	m
d_p	Partikeldurchmesser	m
E	Varianz der stochastischen Ortsverschiebung	m^2
f	Geschwindigkeitsverteilungsfunktion	kg/m^3
$f^{\text{eq,corr}}$	Korrekturterm der Gleichgewichtsverteilungsfunktion	kg/m^3
f^{eq}	Gleichgewichtsgeschwindigkeitsverteilungsfunktion	kg/m^3
f_L	Frequenz des Auftriebskoeffizienten	$1/\text{s}$
G	Varianz der stochastischen Geschwindigkeitsverschiebung	m^2/s^2
H	Kovarianz der stoch. Geschwindigkeits- und Ortsverschiebung	m^2/s
I_p	Trägheitsmoment des Partikels	kg m^2
L	makroskopische Länge	m
l	Länge	m
m_{fp}^*	mittlere Masse	kg
M_f	Molmasse des Fluids	kg/kmol
m_p	Partikelmasse	kg
N_{dep}	Anzahl der deponierten Partikel	
N_{dis}	vorgegebene Anzahl dep. Partikel zur Iteration der kont. Felder	
n_f	Teilchendichte der Gasmoleküle	$1/\text{m}^3$
N_h	Partikelanzahl hinter dem Filter	
N_{ik}	vorgegebene Anzahl innerer Knoten zur Iteration der kont. Felder	

N_{\max}	Gesamtanzahl der diskreten Partikel	
P	Gasdruck	Pa
$P^{(0)}$	thermodynamischer Druck	Pa
$P^{(1)}$	akustischer Druck	Pa
$P^{(2)}$	hydrodynamischer Druck	Pa
q	Anzahl der elektrischen Ladungen des Partikels	
Q^{rs}	Quellterm der Poisson-Gleichung	$\cdot \text{m}^2$
q_a	freie Flächenladung	C/m^2
q_l	Flächenladungsdichte	C/m^2
q_v	Raumladung	C/m^3
R	spezifische Gaskonstante	$\text{J}/\text{kg K}$
r_p	Partikelradius	m
$s^{(1)}$	Quellterme der LBGK-Methode	$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}$
$s^{(2)}$	Quellterme der LBGK-Methode	$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}^2$
$s^{(k)}$	Quellterme der LBGK-Methode	$\text{kg}/\text{m}^3 \text{s}$
T	Temperatur des Fluids	K
t_0	Startzeit der Integration	s
t_p	Gewichtungsfaktoren	
u_0	mittlere Anströmgeschwindigkeit	m/s
v_{Br}	mittlere Brownsche Geschwindigkeit	m/s
w	Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens	$1/\text{m}$
w_D	Dichtefunktion der bivariaten Normalverteilung	$1/(\text{m}^2/\text{s})^3$
z_g	auf $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl	
z_n	normalverteilte Zufallszahl	
z_s	standardnormalverteilte Zufallszahl	

Vektoren

ω	Winkelgeschwindigkeit des Partikels	$1/\text{s}$
ω_r	relative Winkelgeschwindigkeit	$1/\text{s}$
τ	Tangenteneinheitsvektor	
θ	Drehwinkel des Partikels	
A	Stochastische Beschleunigung des Partikels	m/s^2
A_m	magnetisches Vektorpotential	A
B	magnetische Induktion	T
B_1	zufallsverteilte Funktion	m/s
B_2	zufallsverteilte Funktion	m
c_{pi}	diskrete molekulare Geschwindigkeit	m/s
D	elektrische Verschiebungsdichte	C/m^2
E	elektrische Feldstärke	V/m

$F_{\text{bild_pp}}$	Bild-Kraft für Partikel-Partikel-Wechselwirkungen	N
$F_{\text{bild_pw}}$	Bild-Kraft für Partikel-Wand-Wechselwirkungen	N
F_{Br}	Kraft infolge Brownscher Translationsbewegung	N
F_{B}	Basset-Kraft	N
F_{Coulomb}	Coulomb-Kraft	N
F_{Dipol}	Dipol-Kraft	N
F_{ext}	externe Kraft	N
F_{g}	Gravitations- und Auftriebskraft	N
F_{Magnus}	Magnus-Kraft	N
F_{mag}	magnetische Kraft	N
F_{P}	Druckgradienten-Kraft	N
F_{Saffman}	Saffman-Kraft	N
F_{therm}	thermophoretische Kraft	N
$F_{\text{vdw_pp}}$	van-der-Waals-Kraft zwischen zwei Partikeln	N
$F_{\text{vdw_pw}}$	van-der-Waals-Kraft zwischen Partikel und Wand	N
F_{vm}	Virtuelle-Masse-Kraft	N
F_{w}	Widerstandskraft	N
H	magnetische Feldstärke	A/m
J	elektrische Stromdichte	A/m ²
J_{s}	Flächenstromdichte	A/m ²
L	Drehimpuls des Partikels	kg m ² /s
M	Magnetisierung des Partikels	A/m
m	magnetisches Moment des Partikels	A m ²
M_{F}	Magnetisierung der Faser	A/m
M_{s}	Sättigungsmagnetisierung	A/m
n	äußerer Normaleneinheitsvektor	
P	dielektrische Polarisierung	C/m ²
p_{m}	Dipolmoment eines Partikels	C m
Res	Residuum des Runge-Kutta-Verfahrens	
r	Richtungsvektor	m
T_{Br}	Drehmoment infolge Brownscher Rotationsbewegung	kg m ² /s ²
T_{ext}	externes Drehmoment	kg m ² /s ²
T_{mag}	magnetisches Drehmoment	kg m ² /s ²
T_{w}	Reibungsdrehmoment	kg m ² /s ²
u	Geschwindigkeit des Fluids	m/s
V	stochastische Geschwindigkeitsverschiebung	m/s
v	Geschwindigkeit des Partikels	m/s
X	stochastische Ortsverschiebung	m
x	Position des Partikels	m

Matrizen

Φ	Matrix zur Integration der Langevin-Gleichungen	
Σ	Kovarianzmatrix	
Θ	Trägheitstensor eines Partikels	kg m^2
\tilde{B}	Matrix zur Integration der rotatorischen Langevin Gleichungen	
B	Matrix zur Integration der translatorischen Langevin Gleichungen	
I	Einheitsmatrix	
L	Cholesky-Zerlegung der Kovarianzmatrix	
M_1	Matrix der Langevin Gleichungen	
M_2	Matrix der Langevin Gleichungen	
M_3	Matrix der Langevin Gleichungen	
M_D	Drehmatrix	

Operatoren und Relationen

$\bar{\cdot}$	arithmetischer Mittelwert
$\frac{d}{dt}$	Gewöhnlicher Differentialoperator
\equiv	identisch mit
$\langle \cdot \rangle$	Erwartungswert
$ \cdot $	Euklidische Norm/Betrag eines Vektors
$\mathcal{K}(\cdot)$	Kollisionsoperator
\mathcal{Q}	Quellterm
$\mathcal{T}(\cdot)$	Konvektionsoperator
$\frac{\partial}{\partial \cdot}, \partial$	Partieller Differentialoperator
\propto	proportional
\sim	in der Größenordnung von
\triangleq	definiert durch
$O(\cdot)$	Größenordnung

dimensionslose Kennzahlen

CFL	Courant-Friedrichs-Levi-(CFL)-Zahl	$\frac{u_0 \delta t}{\delta x}$
Kn	Knudsenzahl	$\frac{\lambda}{r_p}$
M	Machzahl	$\frac{u_0}{c_s}$
M^{art}	künstliche Machzahl	$\frac{u_0}{c_0}$
Nu	lokale Nusseltzahl	$\frac{\lambda_f \nabla T}{\lambda_{f,0} (T_h - T_c) / L}$
Pe	Partikel-Pecletzahl	$\frac{u_0 d_F}{D_{\text{Br},t}}$
Pr	Prandtlzahl des Fluids	$\frac{\eta c_p}{\lambda_f}$
Ra	Rayleighzahl	$\text{Pr} \frac{g \rho_0^2 (T_h - T_k) L^3}{T_0 \eta^2}$

Re	Reynoldszahl des Fluids	$\frac{\rho u_0 L}{\eta}$
Re _r	Partikel-Reynoldszahl der Rotationsbewegung	$\frac{\rho 4r_p^2 \omega_r }{\eta}$
Re _t	Partikel-Reynoldszahl der Translationsbewegung	$\frac{2r_p \rho \mathbf{u} - \mathbf{v} }{\eta}$
Sr	Strouhalzahl	$\frac{f L}{u_0}$
Stk	Stokeszahl	$\frac{u_0 \tau_{Rt}}{d_F}$

Abbildungsverzeichnis

2.1. Partikel als elektrischer Dipol	12
2.2. Magnetische Kraft	13
2.3. Saffman-Kraft	17
2.4. Magnus-Kraft	18
2.5. Virtuelle-Masse-Kraft	18
2.6. Van-der-Waals-Kraft als Wirkungsquerschnitt	21
2.7. Van-der-Waals-Kraft als Wechselwirkungsenergie	23
2.8. Retardationsfaktor der van-der-Waals-Kraft	24
2.9. Bild-Kraft	26
2.10. Magnetisches Drehmoment	28
2.11. Größenvergleich zwischen Gravitations- und Brownscher Kraft	29
2.12. Größenvergleich zwischen Widerstands- und Brownscher Kraft	30
2.13. Größenvergleich zwischen Virtuelle-Masse- und Brownscher Kraft	30
2.14. Größenvergleich zwischen Druckgradienten- und Brownscher Kraft	31
2.15. Größenvergleich zwischen Saffman- und Brownscher Kraft	31
2.16. Größenvergleich zwischen Magnus- und Brownscher Kraft	32
2.17. Größenvergleich zwischen thermophoretischer und Brownscher Kraft	32
2.18. Größenvergleich zwischen Bild- und Brownscher Kraft	33
2.19. Größenvergleich zwischen van-der-Waals- und Brownscher Kraft	33
2.20. Vergleich der auf ein 10 nm Partikel wirkenden Kräfte	34
2.21. Vergleich der auf ein 1 000 nm Partikel wirkenden Kräfte	34
4.1. Mittlere Kollisionszeit zwischen Partikel und Fluidmolekülen	48
5.1. Diskreter Phasenraum	53
5.2. Molekulare Reflektionsrandbedingung	68
5.3. Boundary-fitting Randbedingung	70
5.4. Verfeinerung des Grundgitters	72
6.1. Randbedingungen des magnetischen Potentials	79
7.1. Flussdiagramm der PMC-Methode	82
7.2. Flussdiagramm der LBGK-Methode	86

7.3. Bestimmung des Iterationsparameters N_{ite}	88
8.1. Abscheidemechanismen	90
8.2. Geometrie und Randbedingungen des DFG-Tests	91
8.3. Vergleichswerte des instationären Testfalls	94
8.4. Geometrie und Randbedingungen des LMNA-Testfalls	95
8.5. Isolinien der Temperatur und Stromlinien	97
8.6. Isolinien der Wirbelstärke	97
8.7. Isolinien des Potentials bei Dirichletschen Randbedingungen	98
8.8. Isolinien des Potentials bei von Neumannschen Randbedingungen	98
8.9. Mittels Diffusionsgeschwindigkeit bestimmter Diffusionskoeffizient	99
8.10. Mittels PMC-Methode bestimmter Diffusionskoeffizient	99
8.11. Filterwirkungsgrade abhängig vom Partikeldurchmesser	101
8.12. Einzelfaserabscheidegrad bei unterschiedlichen Randbedingungen	102
8.13. Vergleich mit einem Experiment: Filterwirkungsgrad	102
8.14. Filtergitter mit deponierten Mikropartikeln	103
8.15. Filterwirkungsgrad in Abhängigkeit der Zeit	104
8.16. Unterschiedliche Geometrien des Filters	106
8.17. Vergleich mit einem Experiment: Filterpenetration	107
8.18. Verteilungsfunktionen über eine Querschnittsfläche	108
8.19. Depositionsschichten am Faserkreuz	109
8.20. Simulation mit variabler Partikelgröße	110
8.21. Einfluss der van-der-Waals-Kraft auf die Partikeltrajektorie	111
8.22. Simulation mit einem elektrostatischen Feld	112
8.23. Einfluss eines elektrischen Feldes auf die Partikeltrajektorie	113
8.24. Einfluss der Bild-Kraft auf die Partikeltrajektorie	114
8.25. Partikeltrajektorien bei unterschiedlichen magnetischen Momenten	115
8.26. Äquipotentialflächen des magnetischen Potentials	115
8.27. Partikeltrajektorien bei unterschiedlichen magnetischen Momenten	117
8.28. Partikeltrajektorien bei verschiedenen Fasermagnetisierungen	118
8.29. Einfluss der Thermophorese auf die Partikelbewegung	120
8.30. Geometrie einer Staupunktströmung	121
8.31. Partikeltrajektorien bei unterschiedlichen Strömungsbedingungen	121
8.32. Deposition bei unterschiedlichen elektrischen Potentialen	122
8.33. Deposition bei unterschiedlichen Strömungsbedingungen	124
8.34. Rückwirkungen auf das elektrostatische Potential	127
8.35. Rückwirkungen auf Äquipotentialflächen des elektrischen Potentials	127
8.36. Rückwirkungen auf das Temperaturfeld	129
A.1. Trilineare Interpolation	141

A.2. Regula-falsi für eine konvexe Funktion	141
A.3. Finite-Volumen-Diskretisierung	144
A.4. Hybrides Gitter und Isolinien der Geschwindigkeit	145
A.5. Geometrie und Geschwindigkeiten der Strömung in einer Kavität	147
A.6. Gebietszerlegung für 8 Prozessoren	149
A.7. Rechenzeit abhängig von der Prozessoranzahl	150
A.8. DSMC-Simulationen einer Couette-Strömung	152

Tabellenverzeichnis

8.1. Vergleichswerte des stationären Falls des DFG-Tests	92
8.2. Vergleichswerte des instationären Falls des DFG-Tests	93
8.3. Vergleichswerte des LMNA-Testfalls	96
8.4. Vergleich mit einem Experiment: Faserpenetration	116
A.1. Stationärer Fall des DFG-Tests auf hybridem Gitter	146

1. Einleitung

Transport und Deposition von Nanopartikeln in einer Gasphase sind wichtige Vorgänge bei experimentellen und industriellen Prozessen zur Herstellung von Oberflächenstrukturen und zur Analyse einer Partikelphase. Als Nanopartikel werden Partikel mit einem Durchmesser $d_p \leq 100 \text{ nm} = 0.1 \text{ }\mu\text{m}$ bezeichnet. Die räumlichen Dimensionen, um die es sich hierbei handelt, können durch folgenden Vergleich veranschaulicht werden: wird ein Nanopartikel mit einem Durchmesser von 13 nm auf die Größe eines Fußballes ausgedehnt, so wird der Ball im Vergleich dazu die Größe der Erde annehmen. Nanopartikel liegen in der Größenordnung von größeren Molekülen, das entspricht dem Übergangsbereich zwischen atomarer und mesoskopischer Skala. In diesem Bereich treten vermehrt quantenphysikalische Effekte auf, die bei Bulkmaterial nicht vorkommen. Aus nanoskaligen Strukturen aufgebaute Materie hat eine große spezifische Oberfläche, d. h. der Einfluss der Oberflächeneigenschaften nimmt im Vergleich zu den Volumeneigenschaften deutlich zu.

In der Natur treten häufig Effekte auf, deren Ursachen in der Größenskala von Nanometern zu finden sind. Das bekannteste Beispiel ist die Lotuspflanze, deren Blattoberflächen mit einer Nanostruktur belegt sind. Diese liefert eine Adhäsionsreduktion bei Schmutzteilchen und Regentropfen durch Minimierung des Oberflächenkontaktes. Aufgrund dessen perlen die Fremdkörper ab und die Blätter bleiben sauber. Der beschriebene Effekt hat in der Technik bereits Einzug gehalten in Form von Schmutz abweisenden Farben und Lacken oder pflegeleichten Sanitärkeramiken. Ein weiteres Beispiel ist die Stubenfliege, die kopfüber an glatten Oberflächen laufen kann. Ermöglicht wird dies durch die sich an den Fußenden befindenden feinen Haare, die mit der Oberfläche eine van-der-Waals-Verbindung eingehen. Da die so erzeugte Kraft pro Haar nur sehr klein ist, sorgt eine Vielzahl an Haaren für die notwendige Haftung.

Anwendungen finden Nanopartikel neben dem oben erwähnten Beispiel auch in der Kosmetikindustrie. So werden Titandioxid-Partikel mit Durchmessern in der Größenordnung von 100 nm Sonnenschutzcremes zugefügt. Diese Partikel absorbieren bzw. reflektieren die UV-Strahlung des Sonnenlichts, dessen Wellenlänge kleiner als 380 nm ist. Die Strahlung im sichtbaren Bereich wird hingegen nicht reflektiert. Die Partikel wirken transparent, da ihre Durchmesser deutlich unterhalb der entsprechenden Wellenlängen zwischen 380 und 780 nm liegen.

Für die beschriebenen Anwendungsfälle werden Nanopartikel mit einer möglichst monodispersen Größenverteilung, d. h. mit gleichgroßen aerodynamischen Durchmes-

uern, benötigt. Es wird versucht, diese Eigenschaft bereits während des Entstehungsvorganges in einem Partikelreaktor über die Prozessbedingungen einzustellen. Am Ende der Prozesskette zur Herstellung und Verarbeitung von Nanopartikeln steht deren Transport zu Oberflächen und die anschließende Deposition. Können diese Vorgänge gezielt gesteuert werden, so lassen sich nanostrukturierte Materialien mit bestimmten Eigenschaften herstellen. In der Mikroelektronik können zur Zeit in der Serienfertigung Leiterbahnen mit einer Breite um 90 nm hergestellt werden. Mit einer gezielten Deposition kann diese Breite bis auf die Dimension von wenigen Nanometern verringert werden. Durch schichtweises Auftragen von magnetischen Nanopartikeln, die eine dichte Belegung der Oberfläche erlauben, können neue magnetische Speichermedien entwickelt werden, deren Speicherdichte um mehrere Größenordnungen über derjenigen heutiger Medien liegt.

Bevor diese Ideen umgesetzt werden können müssen jedoch verschiedene Fragestellungen geklärt werden. Neben den experimentell zu lösenden Fragen nach den physikalischen und chemischen Eigenschaften der erzeugten Partikel bzw. Materialien gehört auch die Untersuchung der Transport- und Depositionsvorgänge zu den wesentlichen Punkten.

Letzteres wird in der vorliegenden Arbeit mit Hilfe numerischer Simulationen am Beispiel von einfachen Geometrien in Form einer ebene Platte und von komplexen Geometrien in Form eines Faserfilters durchgeführt. Die mathematische Modellierung des physikalischen Problems basiert auf der Voraussetzung einer geringen Partikelkonzentration. Dadurch wird einerseits die Entkopplung von Trägergas und der Partikelphase ermöglicht, andererseits können die rechenzeitintensiven Partikel-Partikel-Wechselwirkungen während des Fluges vernachlässigt werden. Bei diesem sogenannten Euler/Lagrange-Verfahren werden die Gasphase und die äußeren Kräfte unabhängig von der Partikelphase berechnet. Deren Transport wird anschließend mit den nun bekannten Strömungs- und Kraftfeldern bestimmt. Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Phasen werden durch abgeschiedene Partikel an der Oberfläche berücksichtigt. Die deponierten Partikel ändern die Oberflächengeometrie und somit die Randbedingungen des Fluidfeldes und der Kraftpotentiale. Dieser Einfluss wird durch eine iterative Prozedur zwischen den Berechnungen der einzelnen Felder, die über eine fest vorgegebene Anzahl an abgeschiedenen Partikeln gesteuert wird, integriert.

Die Bewegung der Partikel wird durch die Langevin-Gleichungen beschrieben. Die numerische Integration dieser Gleichung ist erstmals in [18] mit Hilfe einer Monte-Carlo-Simulation unter Berücksichtigung von Brownscher Bewegung und einer beliebigen äußeren Kraft durchgeführt worden. Diese Methode hat sich als gut geeignet erwiesen und ist in einer Vielzahl an Veröffentlichungen weiterentwickelt und angewendet worden, zum Beispiel in [36] bei der Betrachtung von Partikeldeposition auf einer kreisförmigen Filterfaser unter Einfluss verschiedener Kräfte. Sowohl elektrisches als auch Strömungsfeld sind durch analytische Lösungen bestimmt worden. Die Abscheidung submikroner

Partikel auf Fasern in zweidimensionaler Strömung ist in [8] untersucht worden. Das Geschwindigkeitsfeld ist aus dem Kuwabara-Modell für eine Einzelfaser berechnet worden. In die Summe der externen Kräften ist zusätzlich die van-der-Waals-Kraft eingebunden worden.

In [92] sind Simulationen zur Deposition von submikronen Partikeln an Faserfiltern unter Einfluss magnetischer Kräfte durchgeführt worden. Neben der translatorischen ist auch die rotatorische Partikelbewegung berücksichtigt worden. Das Strömungs- und das magnetische Feld des zweidimensionalen Problems sind als stationäre Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen bzw. der Poisson-Gleichung berechnet worden. Das Modell konnte für eine geringe Partikelkonzentration und ein großes Verhältnis von Faser- zu Partikeldurchmesser validiert werden.

In den bisher betrachteten Modellen spielen deponierte Partikel in Bezug auf die Transport- und Depositionsvorgänge nachfolgender Partikel keine Rolle. Dieser Einfluss ist in [89] bei zweidimensionalen Simulationen von Partikeldeposition an elektrisch geladenen Filtern und von [69] in 2D- und 3D-Modellen zumindest für den Abscheidvorgang berücksichtigt worden. Dadurch sind fraktalähnliche Partikelstrukturen an den Oberflächen entstanden. Diese Dendriten-ähnlichen Gebilde spielen eine wesentliche Rolle während des Depositionsvorganges. Die Randbedingungen von Strömungsfeld und elektrischem Potential sind jedoch nicht angepasst worden.

Ein starker Anstieg des Rechenaufwands ergibt sich durch Berücksichtigung der Rückwirkungen abgeschiedener Partikel auf die äußeren Felder. Ein 2D-Modell auf Basis eines Lattice-Boltzmann-Verfahrens zur Simulation von Partikelbewegung durch einen Faserfilter ist in [73] entwickelt worden. Diese Methode berücksichtigt auch den Einfluss von deponierten Partikeln an der Oberfläche auf das Strömungsfeld. Neben der Widerstandskraft wird die Kraft infolge der Brownschen Bewegung und eine Ablösekraft, durch die abgeschiedene Partikel wieder in das Fluid suspendieren können, betrachtet. Da das Partikelmodell Gitter-basiert ist, wird jedes Partikel durch einen Knoten mit dem Durchmesser $r_p = \delta x/2$ repräsentiert. Dies führt jedoch auf eine schnell anwachsende Zahl an Gitterpunkten und somit zu einem sehr hohen Speicheraufwand, insbesondere bei dreidimensionalen Betrachtungen. Eine weitere auf einem Lattice-Boltzmann-Modell basierende Methode zur Simulation der Transport- und Depositionsvorgänge von Schnee in Luft ist in [66] entwickelt worden. Dabei ist das Partikelmodell in die Lattice-Boltzmann-Methode unter Berücksichtigung von Erosion und die sich dadurch ändernden Randbedingungen integriert worden. Das Modell ist in [15] zur Simulation der Wechselwirkungen zwischen Sedimenten und Wasser erweitert worden.

Im folgenden Kapitel 2 werden die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen für die Translation und die Rotation eines Partikels einschließlich der einwirkenden Kräfte und Momente formuliert. Diese externen Kräfte und Momente sind zum Teil Folgen kontinuierlicher Felder, die zusammen mit ihren Randbedingungen in Kapitel 3 beschrieben werden. Wesentlichen Einfluss auf den Partikeltransport hat hierbei die Trägergasströ-

mung, die durch die Navier-Stokes-Gleichungen repräsentiert wird. Die elektrischen und magnetischen Kräfte und Momente werden durch entsprechende Potential-Gleichungen beschrieben. Die folgenden drei Kapitel beziehen sich auf die numerische Diskretisierung und Lösung der Grundgleichungen für die Partikel- und die Kontinuumsphase. Das vierte Kapitel beschreibt die Integration der Lagrangeschen Gleichungen mit Hilfe eines semi-analytischen Ansatzes und numerischer Einschnitt-Euler-Integration, die sog. Partikel-Monte-Carlo-(PMC)-Methode. Das Depositionsmodell basiert auf der van-der-Waals-Kraft in Oberflächennähe und berücksichtigt die Änderungen der Randbedingungen durch abgeschiedene Partikel. Die zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen verwendete Lattice-Boltzmann-Methode wird in Kapitel 5 beschrieben. Diese Methode beinhaltet Gitterverfeinerung für lokal feinere Auflösungen und Randformulierungen zur Beschreibung beliebiger Oberflächenkonturen. Als Alternative zur Lösung der Potential-Gleichungen steht ein Finite-Differenzen-Verfahren zur Verfügung, das in Kapitel 6 einschließlich seiner diskreten Randbedingungen erläutert wird. Die algorithmische Umsetzung und einige programmiertechnische Details werden in Kapitel 7 näher beschrieben. Die Kombination der verschiedenen Methoden wird in Kapitel 8 mit Hilfe von experimentellen und theoretischen Ergebnissen validiert. Anwendungsbeispiel ist neben der Partikelfiltration die Partikeldeposition auf einer ebenen glatten Oberfläche unter Berücksichtigung verschiedener äußerer Kräfte und Momente. Das abschließende Kapitel 9 fasst die Arbeit zusammen und bietet einen Ausblick auf zukünftige Erweiterungen.

2. Bewegungsgleichungen diskreter Partikel

Ziel ist die numerische Simulation des Transportes und der Deposition von Nanopartikeln unter dem Einfluss externer Kräfte und Momente. Hierzu ist eine diskrete Partikelphase besonders geeignet. Jedes Partikel wird, im einfachsten Fall, als Kugel betrachtet. Der Einfachheit halber wird die Lagrangesche Betrachtungsweise gewählt, d. h. das Koordinatensystem bewegt sich mit dem Partikel mit. Der Transport wird zu jedem Zeitpunkt aus dem Newtonschen Axiom, also einer Kräftebilanz, für jedes einzelne Partikel bestimmt. Die Auswirkungen externer Felder wie Fluidfeld, elektrisches oder magnetisches Feld auf die Partikelbewegung lassen sich durch zusätzliche Kräfte leicht in die Bilanz integrieren. Rückwirkungen der Partikelphase auf diese Felder können durch sich ändernde Randkonturen nach Deposition oder durch Anpassung der äußeren Felder um sich bewegende Partikel berücksichtigt werden. Mit dieser Betrachtungsweise kann insbesondere das Depositionsverhalten der Partikel genauer untersucht werden. Nachteile treten bei der Bestimmung makroskopischer Größen, wie dem Filterwirkungsgrad, auf, die sich nur als Mittelwert eines Ensembles bestehend aus vielen Einzelpartikeln, bestimmen lassen. Um sinnvolle Aussagen treffen zu können, muss eine Statistik über moderate Partikelzahlen (10^4 bis 10^6) erfolgen. Insbesondere die Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen einzelnen Partikeln kann zu einem großen Rechenaufwand führen.

Bei der Modellierung der Partikelphase wird vorausgesetzt, dass die Partikel nur in geringen Konzentrationen auftreten. Einerseits ermöglicht dies die Entkopplung der Partikelphase von der Gasphase, so dass beide unabhängig voneinander bestimmt werden können. Andererseits können somit die rechenzeitintensiven Wechselwirkungen zwischen Partikeln während des Fluges vernachlässigt werden. Außerdem werden nur sphärische Partikel betrachtet, da in diesem Fall einfache analytische Ausdrücke für Terme wie den Widerstandsbeiwert C_w , das Trägheitsmoment I_p u. ä. existieren.

2.1. Lagrangesche Bewegungsgleichungen

Die translatorische Bewegung einzelner diskreter Partikel wird durch die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen beschrieben. Neben dem Kraftgesetz von Newton, „das Produkt aus Masse und Beschleunigung ist gleich der Summe der angreifenden Kräfte“, wird

die zeitliche Ableitung der Partikelposition gleich der Partikelgeschwindigkeit gesetzt. Analoge Gleichungen können für die rotatorische Bewegung aufgestellt werden.

Die Variablen Geschwindigkeit und Position sowie Winkelgeschwindigkeit und Drehwinkel hängen nur von der Zeit ab. Da die äußeren Kräfte und Drehmomente teils durch kontinuierliche Felder bestimmt werden, wird die sich daraus ergebende Abhängigkeit vom Ort bzw. vom Winkel durch die Variable x bzw. θ verdeutlicht.

2.1.1. Translatorische Bewegung

Die translatorische Bewegung eines Partikels der Masse m_p wird beschrieben durch

$$m_p \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}(t)). \quad (2.1)$$

Die linke Seite der Gleichung entspricht der Trägheitskraft, die auf das Partikel wirkt, während die rechte Seite aus der Summe der externen Kräfte \mathbf{F}_{ext} besteht. Die Partikelposition lässt sich dann durch Integration der Partikelgeschwindigkeit \mathbf{v} bestimmen aus

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t). \quad (2.2)$$

2.1.2. Rotatorische Bewegung

Analoge Gleichungen können für die rotatorische Bewegung aufgestellt werden. Die Erhaltungsgleichung für den Drehimpuls $\mathbf{L} = \Theta \boldsymbol{\omega}$ lautet

$$\Theta \frac{d\boldsymbol{\omega}(t)}{dt} = \sum \mathbf{T}_{\text{ext}}(t, \boldsymbol{\theta}(t)), \quad (2.3)$$

wobei die Variable $\boldsymbol{\omega}$ die Winkelgeschwindigkeit und Θ den Trägheitstensor bezeichnet. Die Eulerschen Winkel $\boldsymbol{\theta}$ können mit Hilfe der Gleichung

$$\frac{d\boldsymbol{\theta}(t)}{dt} = \boldsymbol{\omega}(t) \quad (2.4)$$

berechnet werden.

Die Summe der externen Drehmomente \mathbf{T}_{ext} bewirkt eine zeitliche Änderung des Drehimpulses. Der Trägheitstensor Θ kann für kugelförmige Partikel aufgrund der Symmetrieeigenschaften durch das skalare Trägheitsmoment I_p ersetzt werden. Dieses kann unter diesen Voraussetzungen mittels des Partikelradius r_p und der Partikelmasse m_p

dargestellt werden durch

$$I_p = 0.4 m_p r_p^2. \quad (2.5)$$

Für sphärische Partikel kann die Erhaltungsgleichung des Drehimpulses (2.3) somit vereinfacht werden zu

$$I_p \frac{d\boldsymbol{\omega}(t)}{dt} = \sum \mathbf{T}_{\text{ext}}(t, \boldsymbol{\theta}(t)). \quad (2.6)$$

2.2. Langevin-Gleichungen

Die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen werden zu den Langevin-Gleichungen, indem in der Impuls- (2.1) bzw. Drallerhaltungsgleichung (2.6) zusätzliche Zufallsterme in Form einer Kraft $\mathbf{F}_{\text{Br}}(t)$ bzw. eines Drehmomentes $\mathbf{T}_{\text{Br}}(t)$ berücksichtigt werden, die nicht von der Partikelposition sondern nur von der Zeit abhängen. Diese Zusatzterme sind im Gegensatz zu den anderen Termen unstetig. Physikalisch gesehen beschreiben sie die durch die Zusammenstöße mit den Gasmolekülen erzeugte zufallsverteilte Brownsche Translations- bzw. Rotationsbewegung, die im Raum in beliebiger Richtung ausgerichtet sein kann.

2.2.1. Translatorische Bewegung

In den Langevin-Gleichungen der Translation wird die zufällige Kraft $\mathbf{F}_{\text{Br}}(t)$ durch das Produkt aus der Partikelmasse m_p und einer zufallsverteilten Beschleunigung $\mathbf{A}(t)$ ersetzt für die folgende Voraussetzungen gelten:

1. $\mathbf{A}(t)$ ist unabhängig von der Partikelgeschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$ und von der Partikelposition $\mathbf{x}(t)$
2. Änderungen in $\mathbf{A}(t)$ sind deutlich schneller als diejenigen in $\mathbf{v}(t)$ bzw. $\mathbf{x}(t)$.

Für den Erwartungswert, siehe Anhang A.2, gilt außerdem $\langle \mathbf{A}(t) \rangle = \mathbf{0}$. Voraussetzung 2 besagt, dass die Kollisionen zwischen Molekülen und Partikeln praktisch instantan verlaufen, was für unterschiedliche Zeiten t, \tilde{t} mathematisch durch

$$\langle \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{A}(\tilde{t}) \rangle = 6k_b T \zeta_t \delta(t - \tilde{t}) \quad (2.7)$$

beschrieben werden kann mit der Diracschen Deltafunktion $\delta(t)$, dem Reibungskoeffizienten ζ_t , siehe Abschnitt 2.3.1, der Boltzmann-Konstanten k_b und der Temperatur T .

Damit lauten die Langevin-Gleichungen

$$m_p \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}(t)) + m_p \mathbf{A}(t) \quad (2.8)$$

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t). \quad (2.9)$$

Kritikpunkte an der Differentialgl. (2.8) sind u. a. die Verwendung der Diracschen Deltafunktion und die Nicht-Existenz der Zeitableitung der Geschwindigkeitsfunktion $\mathbf{v}(t)$, vgl. [10]. Deshalb wird sie im folgenden in Analogie zu [10] als Integral-Gleichung

$$\mathbf{v}(t) - \mathbf{v}(t_0) = \frac{1}{m_p} \int_{t_0}^t \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(\tau, \mathbf{x}(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t d\mathbf{B}(\tau) \quad (2.10)$$

interpretiert. Das letzte Integral auf der rechten Seite beschreibt die zufallsverteilte Beschleunigung $\mathbf{A}(t)$. Die Zufallsvariablen \mathbf{B} erfüllen die Voraussetzungen eines Wiener Prozesses mit

$$\int_{t_0}^t d\mathbf{B}(\tau) = \mathbf{B}(t) - \mathbf{B}(t_0) = \sum_{k=0}^{n-1} [\mathbf{B}(t_{k+1}) - \mathbf{B}(t_k)], \quad (2.11)$$

wobei $t_0 < t_1 < t_2 \dots < t_{n-1} < t_n = t$ gilt. Dieser spezielle Typ eines stochastischen Prozesses wurde von Wiener 1923 eingeführt, siehe z. B. [84], um eine exakte mathematische Beschreibung der statistischen Eigenschaften der Brownschen Bewegung zu ermöglichen.

2.2.2. Rotatorische Bewegung

Wird die Bewegung magnetischer Partikel unter dem Einfluss eines äußeren Magnetfeldes betrachtet, so muss auch für sphärische Partikel die Rotationsbewegung berücksichtigt werden. Sowohl die magnetische Kraft als auch das magnetische Drehmoment hängen von der Ausrichtung des magnetischen Partikelmomentes ab.

Die Langevin-Gleichungen der Rotationsbewegung werden für sphärische Partikel mit dem Trägheitsmoment I_p aus Gl. (2.5) durch

$$I_p \frac{d\boldsymbol{\omega}(t)}{dt} = \sum \mathbf{T}_{\text{ext}}(t, \boldsymbol{\theta}(t)) + \mathbf{T}_{\text{Br}}(t) \quad (2.12)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\theta}(t)}{dt} = \boldsymbol{\omega}(t) \quad (2.13)$$

beschrieben. Für das Brownsche Drehmoment $\mathbf{T}_{\text{Br}}(t)$ gelten analoge Aussagen wie für die Zufallskraft $\mathbf{F}_{\text{Br}}(t) = m_p \mathbf{A}(t)$ aus dem vorherigen Unterabschnitt.

2.3. Externe Kräfte auf Partikel

In diesem Abschnitt werden die von außen auf die diskreten Partikel wirkenden Kräfte beschrieben. Sie lassen sich in zwei Gruppen einteilen: Kräfte, die unabhängig von der Geometrie im gesamten Gebiet auf die Partikel wirken und diejenigen, die nur in unmittelbarer Oberflächennähe, also einem Abstand in Größenordnung weniger Partikeldurchmesser, entscheidenden Einfluss auf die Partikelbewegung haben. Die Kräfte der erstgenannten Gruppe werden in diesem Abschnitt näher erläutert, während diejenigen der letzteren im folgenden Abschnitt 2.4 zusammen mit der Modellierung des Depositionsvorganges genauer beschrieben werden. Die detaillierte Modellierung kann, soweit nicht anders angegeben, der Literatur entnommen werden, siehe z. B. [30, 6, 17, 50].

2.3.1. Widerstandskraft

Die Widerstandskraft ist die Kraft, die bei der Bewegung eines Partikels in einem Fluid aufgebracht werden muss, um das Fluid zu verdrängen. Ist die Fluidgeschwindigkeit kleiner als diejenige des Partikels, so ist sie der Partikelbewegung entgegen gerichtet, hat also eine bremsende Wirkung.

Allgemein kann die Widerstandskraft in Abhängigkeit von der Querschnittsfläche A_q des Partikels wie folgt beschrieben werden, siehe z. B. [47]

$$\mathbf{F}_w = C_w A_q \frac{1}{2} \rho (\mathbf{u} - \mathbf{v}) |\mathbf{u} - \mathbf{v}| \quad (2.14)$$

mit dem Widerstandsbeiwert

$$C_w = f(\text{Re}_t), \quad (2.15)$$

der von der Partikel-Reynoldszahl der Translationsbewegung

$$\text{Re}_t = \frac{2r_p \rho |\mathbf{u} - \mathbf{v}|}{\eta} \quad (2.16)$$

abhängt. Hierbei bezeichnet \mathbf{u} die Fluidgeschwindigkeit, ρ die Dichte des Fluids und η die dynamische Viskosität des Fluids. Unter der Voraussetzung kugelförmiger Partikel mit dem Radius r_p wird $A_q = \pi r_p^2$ und die Widerstandskraft ergibt sich zu

$$\mathbf{F}_w = \frac{1}{2} C_w \rho \pi r_p^2 (\mathbf{u} - \mathbf{v}) |\mathbf{u} - \mathbf{v}|. \quad (2.17)$$

Bei kleinen Partikel-Reynoldszahlen $\text{Re}_t < 0.01$ kann der Widerstandsbeiwert für

sphärische Partikel aus der Stokesschen Formel

$$C_w = \frac{24}{\text{Re}_t} \quad (2.18)$$

bestimmt werden. Treten größere Partikel-Reynoldszahlen auf¹, muss C_w angepasst werden, z. B. nach [60] durch

$$C_w = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_t} (1 + 0.15 \text{Re}_t^{0.687}) & \text{falls } 0.01 < \text{Re}_t \leq 1000 \\ 0.44 & \text{falls } \text{Re}_t > 1000 \end{cases} \quad (2.19)$$

Damit lässt sich die Widerstandskraft einer Kugel in einem Fluid durch Vergleich mit Gl. (2.14) ausdrücken als

$$\mathbf{F}_w = \zeta_t \alpha_w (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (2.20)$$

mit dem Reibungskoeffizienten der Translationsbewegung

$$\zeta_t = 6\pi\eta r_p \quad (2.21)$$

Sie ist also proportional der Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel multipliziert mit dem Reibungskoeffizienten ζ_t und einem Korrekturfaktor

$$\alpha_w = (1 + 0.15 \text{Re}_t^{0.687}) \geq 1, \quad (2.22)$$

der von Re_t abhängt. Der Fall eines konstanten Widerstandsbeiwertes $C_w = 0.44$ kann bei den in dieser Arbeit betrachteten Partikelgrößen und Fluidgeschwindigkeiten vernachlässigt werden.

Aus der kinetischen Gastheorie ist bekannt, dass jedes Molekül, das mit der Partikeloberfläche zusammenstößt, deren Geschwindigkeit annimmt, falls vollständige Akkommodation vorausgesetzt wird. Ist die Anzahl der Moleküle, die mit der Wand kollidieren genügend groß, so ergibt sich für die makroskopische Wandgeschwindigkeit durch Mittelung über die Moleküle Haftbedingung an nicht bewegten Wänden. Ist der Partikelradius deutlich kleiner als die mittlere freie Weglänge λ des Gases (z. B. gilt für Luft unter Normalbedingungen $\lambda = 65 \text{ nm}$), so treten nicht mehr genügend Stöße zwischen den Gasmolekülen und dem Partikel auf. Damit ergibt sich eine von Null verschiedene makroskopische Gleitgeschwindigkeit an der Oberfläche und der Widerstand wird reduziert. Dieser Effekt wird durch den Korrekturfaktor nach Cunningham C_C berücksichtigt. Er

¹Der bei sehr großen Reynoldszahlen ($\text{Re}_t > 2.5 \cdot 10^5$) auftretende Transitions- bzw. vollturbulente Bereich wird hier nicht berücksichtigt, da er aufgrund der geringen geometrischen Abmessungen und Strömungsgeschwindigkeiten nicht erreicht wird.

wird in Abhängigkeit von der Knudsenzahl $\text{Kn} = \lambda/r_p$ ermittelt aus

$$C_C = 1 + \text{Kn} \left[A_1 + A_2 \exp\left(-\frac{2A_3}{\text{Kn}}\right) \right] \quad (2.23)$$

mit Konstanten A_1 , A_2 und A_3 (vgl. [30]). Für den in dieser Arbeit als Trägergas eingesetzten Stickstoff wurden die in [87] ermittelten Werte $A_1 = 1.187$, $A_2 = 0.599$ und $A_3 = 1.893$ verwendet. Der beschriebene Effekt wird durch folgende Korrektur des Reibungskoeffizienten ζ_t aus Gl. (2.21) berücksichtigt:

$$\zeta_t = \frac{6\pi\eta r_p}{C_C}. \quad (2.24)$$

Mit der Partikelmasse m_p kann der Reibungskoeffizient überführt werden in eine Relaxationszeit τ_{Rt} und deren Inverse β_t

$$\tau_{\text{Rt}} = \frac{m_p}{\zeta_t} \quad \text{und} \quad \beta_t = \frac{1}{\tau_{\text{Rt}}} = \frac{\zeta_t}{m_p}. \quad (2.25)$$

Sie beschreibt die Zeit, die das Partikel benötigt um auf die externe Kraft zu reagieren und seine Geschwindigkeit entsprechend einzustellen.

2.3.2. Volumenkräfte infolge externer Felder

Betrachtet werden Volumenkräfte, die durch externe Felder entstehen. Dazu zählt neben den elektromagnetischen Kräften die thermophoretische und die Gravitationskraft.

Coulomb-Kraft

Bewegt sich ein geladenes Partikel in einem elektrischen Feld, so tritt eine auf diesen Körper wirkende elektrische Kraft auf. Diese sogenannte Coulomb-Kraft kann beschrieben werden durch

$$\mathbf{F}_{\text{Coulomb}} = q e_{\text{el}} \mathbf{E} = -q e_{\text{el}} \nabla \phi \quad (2.26)$$

mit der Elementarladung $e_{\text{el}} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, der Anzahl q der Ladungen des Partikels, dem elektrostatischen Feld \mathbf{E} und dem elektrischen Potential ϕ , das aus einer Poisson-Gleichung bestimmt werden kann. Die Kraft bewirkt eine Beschleunigung des Partikels entlang der Feldlinien eines externen elektrischen Feldes. Ist das Partikel positiv geladen, so wird es durch ein elektrisches Feld in Richtung der negativen Elektrode transportiert.

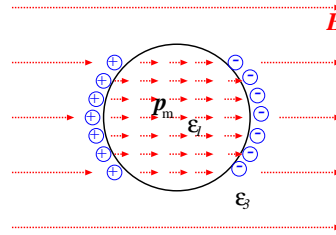


Abbildung 2.1.: Ausbildung eines Dipols in einem homogenen ungestörten elektrischen Feld

Dipol-Kraft

Bewegen sich polarisierbare, z. B. metallische oder dielektrische, Partikel in einem externen elektrischen Feld, so bilden sie elektrische Dipole. In Abb. 2.1 ist ein polarisiertes Partikel mit den Dipolmomenten \mathbf{p}_m in einem elektrischen Feld \mathbf{E} skizziert. Innerhalb des polarisierten Körpers entstehen Linienladungen, die zu Ladungen an der Oberfläche führen. Nach [51] kann die Dipol-Kraft beschrieben werden durch

$$\mathbf{F}_{\text{Dipol}} = \mathbf{p}_m \cdot \nabla \mathbf{E} \quad (2.27)$$

mit dem Dipolmoment

$$\mathbf{p}_m = 4\pi\epsilon_0\epsilon_3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_3}{\epsilon_1 + 2\epsilon_3} r_p^3 \mathbf{E}. \quad (2.28)$$

Hierbei bezeichnen ϵ_1 die relative Dielektrizitätskonstante des Partikels, ϵ_3 die relative Dielektrizitätskonstante des Fluids und ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums. Ist $\epsilon_1 < \epsilon_3$, dann zeigt das Dipolmoment in die entgegengesetzte Richtung des elektrischen Feldes \mathbf{E} , ansonsten in die gleiche Richtung. Für metallische Partikel geht der Term $\frac{\epsilon_1 - \epsilon_3}{\epsilon_1 + 2\epsilon_3}$ gegen eins, da $\epsilon_1 \rightarrow \infty$. Aus Gl. (2.27) lässt sich ersehen, dass in einem homogenen elektrischen Feld keine Dipol-Kräfte auf die Partikel wirken, da in diesem Fall der Term $\nabla \mathbf{E}$ verschwindet.

Magnetische Kraft

Ein ferromagnetisches Partikel besitzt ein magnetisches Moment \mathbf{m} , das als Integration seiner Magnetisierung \mathbf{M} über sein Volumen V_p

$$\mathbf{m} = \int_{V_p} \mathbf{M} dV \quad (2.29)$$

definiert ist. Sind die Partikel genügend klein, erreichen sie ihren energetisch günstigsten Zustand, wenn sie aus einer einzigen magnetischen Domäne bestehen und somit homo-

gen magnetisiert sind. Dann kann das magnetische Moment aus dem Partikelvolumen V_p und der Sättigungsmagnetisierung M_s durch

$$\mathbf{m} = V_p \mathbf{M}_s \quad (2.30)$$

bestimmt werden. Für Nickel-Partikel gilt z. B. $|\mathbf{M}_s| = 4.84 \cdot 10^5 \text{ A/m}$, vgl. [12]. Im Rahmen dieser Arbeit werden Einzeldomänenpartikel betrachtet, die als magnetischer Dipol mit dem Moment \mathbf{m} dargestellt werden können.

Es kann gezeigt werden, dass für die Kraft auf einen magnetischen Dipol in einem inhomogenen magnetischen Feld \mathbf{H} gilt, vgl. [88]:

$$\mathbf{F}_{\text{mag}} = \nabla (\mathbf{m} \cdot (\mu_0 \mathbf{H})). \quad (2.31)$$

Hierbei bezeichnet $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/Am}$ die Permeabilität des Vakuums. Unter der Annahme, dass die Änderung des Gradienten von \mathbf{H} über dem Partikelvolumen vernachlässigbar ist, kann die Kraft umformuliert werden zu

$$\mathbf{F}_{\text{mag}} = \mu_0 |\mathbf{m}| \cos \alpha \nabla |\mathbf{H}|. \quad (2.32)$$

α bezeichnet den Winkel zwischen dem magnetischen Moment des Partikels \mathbf{m} und dem magnetischen Feld \mathbf{H} , vgl. Abb. 2.2.

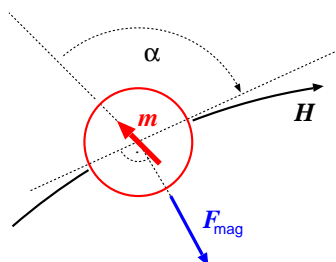


Abbildung 2.2.: Kraft auf ein Partikel im magnetischen Feld \mathbf{H}

Thermophoretische Kraft

Thermophorese tritt auf, wenn sich ein Partikel innerhalb eines nicht isothermen Fluidfeldes, also bei einem Temperaturgradienten mit $|\nabla T| \neq 0$, bewegt. Aus der kinetischen Gastheorie, siehe z. B. [37, 85], ist bekannt, dass die mittlere thermische Geschwindigkeit der Gasmoleküle proportional \sqrt{T} ist. Dadurch kommt es auf der Seite mit der höheren Temperatur zu einem erhöhten Impulsaustausch zwischen den Gasmolekülen und dem Partikel. Dies führt auf einer Kraft, die entgegengesetzt zum Temperaturgradienten, also in Richtung der niedrigeren Temperatur gerichtet ist. In [75] ist sie in

Abhängigkeit von der Knudsenzahl Kn angegeben als

$$\mathbf{F}_{\text{therm}} = -\frac{9}{2} \frac{\eta^2 m_p}{\rho r_p^2 \rho_p} C_{\text{therm}} \frac{\nabla T}{T} \quad (2.33)$$

mit

$$C_{\text{therm}} = \frac{C_{ts}}{1 + 3C_{tm}\text{Kn}} \frac{1 + C_{tt}\text{Kn}C_t}{1 + C_{tt}\text{Kn}C_t + C_t/2}. \quad (2.34)$$

Dabei ist C_t das Verhältnis der Wärmeleitfähigkeit des Partikels zu derjenigen des Gases sowie

$$C_{tt} = \frac{15}{8} \left(\frac{2 - a_{tt}}{a_{tt}} \right) \quad \text{und} \quad C_{tm} = \frac{2 - a_{tm}}{a_{tm}} \quad (2.35)$$

mit den Konstanten $a_{tt} = 0.92$ und $a_{tm} = 0.93$. Bei vollständiger thermischer Akkommodation wird der Koeffizient $C_{ts} = 1.147$ gesetzt.

Gravitations- und Auftriebskraft

Die Gravitationskraft beschleunigt das Partikel in Richtung des Schwerfeldes. Die Auftriebskraft ergibt sich aus dem vom Partikel verdrängten Fluidvolumen und beschreibt den hydrostatischen Auftrieb (Gesetz von Archimedes), sie wirkt der Schwerkraft entgegen. Für ein kugelförmiges Partikel mit dem Volumen $V_p = \frac{4}{3}\pi r_p^3$ ergibt sich die verdrängte Fluidmasse zu $m_f = \rho V_p$. Wie in Abschnitt 2.6 gezeigt wird, liefert diese Kraft ab einem Partikeldurchmesser in der Größenordnung von $1 \mu\text{m}$ einen entscheidenden Beitrag zur Impulsänderung. Bei kleineren Durchmessern, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden, kann sie vernachlässigt werden. Beide Kräfte werden zusammengefasst zu

$$\mathbf{F}_g = m_p \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) g \mathbf{n}_g \quad (2.36)$$

mit der Erdbeschleunigung g und dem normierten Richtungsvektor der Schwerkraft \mathbf{n}_g . Das Verhältnis der Massen wurde durch das Dichteverhältnis ersetzt.

Die beschriebene Auftriebskraft ist mit $\rho g \mathbf{n}_g = \nabla P$ ein Spezialfall der im folgenden erläuterten Oberflächenkraft infolge eines Druckgradienten:

Kraft infolge eines Druckgradienten

Bewegt sich ein Partikel in einer nicht isobaren Strömung, so wird durch die inhomogene Druckverteilung an der Partikeloberfläche eine Kraft auf dieses ausgeübt. Diese Kraft wirkt in Richtung des negativen Druckgradienten, d. h. sie bewegt das Partikel vom

hohen Druck in Richtung des niedrigen

$$\mathbf{F}_P = -\frac{m_p}{\rho_p} \nabla P. \quad (2.37)$$

Sie ist umgekehrt proportional der Partikeldichte ρ_p und kann deshalb für große Partikeldichten vernachlässigt werden. In den später betrachteten Anwendungsfällen handelt es sich jeweils um Strömungen mit kleinen Druckgradienten, was die Größenordnung der Kraft zusätzlich verringert, so dass sie vernachlässigt werden kann.

2.3.3. Zufallskräfte infolge Brownscher Diffusion

Mit Brownscher Diffusion wird die unregelmäßige, zufällige Bewegung bezeichnet, die insbesondere kleine Partikel in Fluiden ausführen. Ursache hierfür ist der Impulsaustausch bei Stößen zwischen Partikeln und den wesentlich kleineren Fluidmolekülen. Letztere bewegen sich in einem Fluid mit ständig wechselndem Geschwindigkeitsbetrag und Richtung und sind im Ortsraum zufällig verteilt.

Die Brownsche Bewegung kann als Diffusionsprozess aufgefasst werden, siehe z. B. [61]. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein sphärisches Teilchen zur Zeit t in einem Abstand zwischen r und $r + dr$ vom Ursprung lässt sich dann beschreiben durch

$$w(t, r) dr = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_{Br,t}^3 t^3}} e^{\frac{-r^2}{4D_{Br,t}t}} r^2 dr \quad (2.38)$$

mit einem Diffusionskoeffizienten $D_{Br,t}$. Damit ergibt sich das mittlere Quadrat des Abstandes vom Ursprung zum Zeitpunkt t aus

$$\overline{r^2}(t) = \int_0^\infty r^2 w(t, r) dr \quad (2.39)$$

und liefert für den n -dimensionalen Raum mit $n = 1, 2, 3$

$$\overline{r^2} = 2n D_{Br,t} t. \quad (2.40)$$

D. h. ein Partikel legt im dreidimensionalen Raum während eines Zeitintervalls Δt im Mittel eine Strecke von $\Delta x = \sqrt{6 D_{Br,t} \Delta t}$ zurück, wobei die Richtung beliebig ist.

Der Diffusionskoeffizient $D_{Br,t}$ kann über die Stokes-Einstein-Gleichung

$$D_{Br,t} = \frac{k_b T}{\zeta_t} \quad (2.41)$$

bestimmt werden mit der Boltzmann-Konstanten k_b und dem Reibungskoeffizienten ζ_t aus Gl. (2.24). Nach der Gl. (2.41) ist der Diffusionskoeffizient proportional dem inversen Partikelradius, in Zeichen $D_{Br,t} \propto r_p^{-1}$. Dies erklärt die Beobachtung, dass die

Zufallsbewegung bei konstanten Umgebungsbedingungen umso größer wird, je kleiner die Partikel werden.

Die mittlere Weglänge, die ein Partikel aufgrund der Brownsche Bewegung zurücklegt hängt nach Gl. (2.40) von einem beliebigen Zeitschritt² ab. Um die Kraft infolge der Brownschen Bewegung unabhängig von dem gewählten Zeitschritt abschätzen zu können, kann für kugelförmige Partikel eine mittlere Brownsche Geschwindigkeit v_{Br} und damit eine Kraft vom Betrag F_{Br} angegeben werden. Bei Vernachlässigung externer Kräfte besitzen diese Partikel lediglich drei translatorische Freiheitsgrade. Wird lokales Gleichgewicht vorausgesetzt, so kann die kinetische Energie der Brownschen Bewegung gleichgesetzt werden mit der thermischen Energie, also

$$\frac{1}{2}m_p v_{Br}^2 = \frac{3}{2}k_b T. \quad (2.42)$$

Hierbei bezeichnen m_p die Partikelmasse, k_b die Boltzmann-Konstante und T die Fluidtemperatur. Lokales Gleichgewicht bedeutet, dass die Momente von denen die Gleichgewichtsfunktion abhängt im Ort variieren können, die zeitlichen Ausgleichsprozesse zwischen Nichtgleichgewicht und Gleichgewicht laufen jedoch sehr viel schneller als die makroskopischen Transportprozesse ab, so dass sich an jedem Ort zu jedem Zeitpunkt ein Gleichgewichtszustand einstellt.

Als mittlere Brownsche Geschwindigkeit v_{Br} ergibt sich dann

$$v_{Br} = \sqrt{\frac{3k_b T}{m_p}}. \quad (2.43)$$

Diese kann unter Zuhilfenahme der Partikelmobilität

$$B = \frac{1}{\zeta_t} \quad (2.44)$$

mit ζ_t aus Gl. (2.24), umgeformt werden in eine Kraft vom Betrag

$$F_{Br} = \frac{1}{B} v_{Br}. \quad (2.45)$$

2.3.4. Auftriebskräfte

Unter den Auftriebskräften werden diejenigen Kräfte zusammengefasst, die aufgrund von Translations- oder Rotationsgeschwindigkeiten einen dynamischen Auftrieb erzeugen. Da die Kräfte vom Dichteverhältnis zwischen Gas und Fluid abhängen, können sie i. a. für Gas-Partikel-Strömungen vernachlässigt werden.

²„Beliebig“ ist hier nicht ganz korrekt, da die Gleichung ihre Gültigkeit verliert, wenn der Zeitschritt sich der Größenordnung der inversen Kollisionsfrequenz der Fluidmoleküle nähert.

Saffman-Kraft

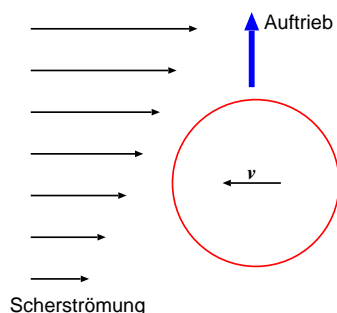


Abbildung 2.3.: Einfluss einer Scherströmung

Die Saffman-Kraft beschreibt den Einfluss einer Scherströmung auf die Partikeltrajektorie. Trifft ein Partikel auf eine derartige Strömung, vgl. Abb. 2.3, so bildet sich an dem Teil der Partikeloberfläche, der von der größeren Fluidgeschwindigkeit beeinflusst wird ein geringerer Druck aus als an der gegenüberliegenden Seite mit der kleineren Geschwindigkeit. Aufgrund dieser Druckdifferenz wird das Partikel orthogonal zur Relativgeschwindigkeit in Richtung des niedrigen Druckes beschleunigt. Erstmals ist die Saffman-Kraft in [77] erwähnt und für eine zweidimensionale Scherströmung hergeleitet worden. In [80] wird das Modell auf drei Dimensionen erweitert und kann durch

$$\mathbf{F}_{\text{Saffman}} = 4.845 \sqrt{\frac{\rho\eta}{\pi^2 \rho_p r_p}} \frac{m_p}{\rho_p r_p} \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \times \boldsymbol{\omega}_f}{\sqrt{|\boldsymbol{\omega}_f|}} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\omega}_f = \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.46)$$

beschrieben werden.

Das Verhältnis der Beträge der Saffman-Kraft und der Widerstandskraft ist proportional der Quadratwurzel aus der Partikel-Reynoldszahl, in Zeichen $\frac{|\mathbf{F}_{\text{Saffman}}|}{|\mathbf{F}_w|} \propto \sqrt{\text{Re}_t}$, vgl. [20]. Die Saffman-Kraft kann deswegen bei kleinen Partikel-Reynoldszahlen wie sie in der vorliegenden Arbeit auftreten vernachlässigt werden.

Magnus-Kraft

Die Magnus-Kraft hängt sowohl von der Translations- als auch von der Rotationsgeschwindigkeit des Partikels ab. Betrachtet wird ein Partikel, das sich mit der Translationsgeschwindigkeit v und der Rotationsgeschwindigkeit ω bewegt, vgl. Abb. 2.4. Aufgrund der Rotationsbewegung ist der Druckverlauf an der Oberfläche inhomogen und erzeugt somit einen dynamischen Auftrieb. Durch die Drehbewegung entsteht an der Oberseite ein niedriger Druck, während sich an der Unterseite ein hoher Druck ausbildet. Diese Differenz bewirkt eine Kraft, die Magnus-Kraft, die das Partikel in diesem Falle nach oben bewegt. Sie lässt sich nach [76] für kleine Reynoldszahlen durch das Kreuzprodukt

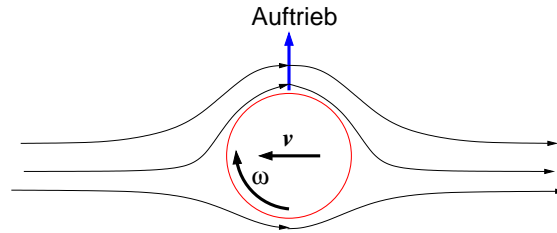


Abbildung 2.4.: Magnus-Effekt aufgrund der Rotationsbewegung

zwischen relativer Rotations- und Translationsbewegung als

$$\mathbf{F}_{\text{Magnus}} = \frac{3}{4} m_p \frac{\rho}{\rho_p} \left[\left(\frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} - \boldsymbol{\omega} \right) \times (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \right] \quad (2.47)$$

beschreiben.

2.3.5. Beschleunigungskräfte

Näher beschrieben werden Kräfte, die aufgrund instationärer Effekte entstehen. Sie beruhen auf der Beschleunigung der Relativgeschwindigkeit.

Die folgenden Kräfte sind jeweils proportional dem Dichteverhältnis zwischen Fluid und Partikel ρ/ρ_p . Bei den in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsbeispielen liegt dieses Verhältnis zwischen 10^{-3} und 10^{-4} , so dass die Kräfte vernachlässigt werden können.

Virtuelle Masse

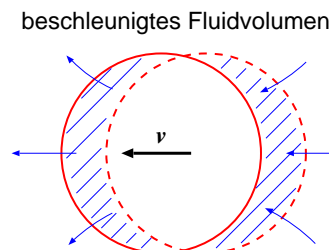


Abbildung 2.5.: Beschleunigung eines Partikels bewirkt Beschleunigung seiner Umgebung

Die Beschleunigung eines Partikels bewirkt auch die Beschleunigung dessen unmittelbarer Umgebung, vgl. Abb. 2.5. Die Kraft der virtuellen Masse ist eine Kraft, die im Gegensatz zur Widerstandskraft von dem Partikel auf das Fluid wirkt. Sie ist proportional

der Differenz zwischen der Beschleunigung des Fluids in der Partikelumgebung und derjenigen des Partikels und wird beschrieben durch

$$\mathbf{F}_{\text{vm}} = \frac{1}{2} m_p \frac{\rho}{\rho_p} C_{\text{vm}} \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \quad \text{mit} \quad \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2.48)$$

Dabei sind

$$C_{\text{vm}} = 2.1 - \frac{0.132}{0.12 + A_c^2} \quad \text{und} \quad A_c = \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}|^2}{2r_p \left| \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right|}. \quad (2.49)$$

Bringt man den Anteil, der proportional der Partikelgeschwindigkeit ist, auf die linke Seite der Lagrangeschen Bewegungsgleichung (2.1), so ergibt sich als Trägheitskraft des Partikels der Term

$$\left(1 + \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} C_{\text{vm}} \right) m_p \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.50)$$

Durch die zusätzliche Masse erscheint die effektive Partikelmasse größer als die physikalisch vorhandene und die Partikelbewegung wird träger. Eine ausführliche Herleitung der Kraft wird z. B. in [11] gegeben.

Basset-Kraft

Die Basset-Kraft tritt bei Berücksichtigung viskoser Effekte zwischen dem Fluid und dem Partikel auf. Sie beschreibt die zeitliche Ausbildung der Geschwindigkeitsgrenzschicht um ein Partikel, unter sich verändernder Relativgeschwindigkeit $\mathbf{u} - \mathbf{v}$. Sie hängt nicht nur vom aktuellen Zeitpunkt sondern auch von den vorherigen ab, weswegen sie auch Vorgeschichtskraft genannt wird. Nach [11] kann sie ausgedrückt werden durch

$$\mathbf{F}_{\text{Basset}} = \frac{9}{2} \sqrt{\frac{\rho \eta}{\pi}} \frac{m_p}{\rho_p r_p} C_B \left\{ \int_0^t \frac{\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}}{dt}}{\sqrt{t - \tau}} d\tau + \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v})_0}{\sqrt{t}} \right\} \quad (2.51)$$

mit A_c aus (2.49) und

$$C_B = 0.48 + \frac{0.52}{(1 + A_c)^3}. \quad (2.52)$$

Der zweite Term in der geschweiften Klammer von Gl. (2.51) beschreibt den Einfluss einer Geschwindigkeit an der Partikeloberfläche zum Zeitpunkt $t = 0$. Die Berechnung des Integrals aus Gl. (2.51) ist sehr zeitaufwendig, in [80] wird ein Anwachsen der Rechenzeit für einen Zeitschritt der Trajektorienbestimmung um den Faktor zehn erwähnt.

Die Basset-Kraft spielt erst ab einem Dichteverhältnissen ρ/ρ_p in der Größenordnung von eins eine entscheidende Rolle, vgl. [3].

2.4. Depositionsmodell und wandnahe Kräfte

Nähert sich ein Partikel einer festen Oberfläche, also einem bereits vorher abgeschiedenen Partikel oder einem makroskopischen Körper wie einer Filterfaser, so beginnt der Depositionsprozess. Neben den Kräften, die den Transport des Partikels im gasgetragenen Zustand entscheidend beeinflussen können, treten dabei zusätzliche auf, die proportional dem reziproken Abstand zwischen dem Partikel und der Oberfläche sind. Dadurch spielen sie insbesondere im wandnahen Bereich, also einem Abstand von wenigen Partikeldurchmessern, eine große Rolle.

Ist der Partikeldurchmesser genügend klein, so dass die Brownsche Bewegung nicht vernachlässigt werden darf, kann aufgrund der stochastischen Bewegung erst im letzten Schritt entschieden werden ob und wo das Partikel deponiert.

2.4.1. Partikeldeposition

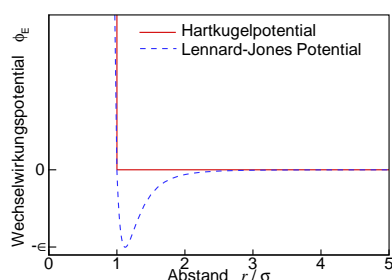
Ein Partikel deponiert an einer festen Wand oder an einem bereits vorher abgeschiedenen Partikel, falls der minimale Abstand zwischen dem Partikelmittelpunkt und der Oberfläche kleiner gleich dem Partikelradius ist. Ist der Abstand genügend klein, spielen die van-der-Waals- und im Falle elektrisch geladener Partikel die Bild-Kraft eine wesentliche Rolle beim Depositionsprozess. Diese werden durch die nachfolgend beschriebenen Modelle bestimmt und zu den externen Kräften addiert.

Vorgänge wie Ablösungen und Verformungen der Depositionsstrukturen können bei Nanopartikel vernachlässigt werden, da die van-der-Waals-Kraft genügend groß ist, um die Partikel an ihrer Position zu halten. Die Widerstandskraft der Dendriten gegenüber dem Fluid ist wegen der kleinen Partikelquerschnittsflächen sehr gering. Aufgrund der niedrigen Partikelgeschwindigkeit und -masse wird bei der Deposition eines Partikels auf einem Dendriten nur ein geringer Impuls übertragen, der für die Ablösung der Depositionsstrukturen nicht ausreicht.

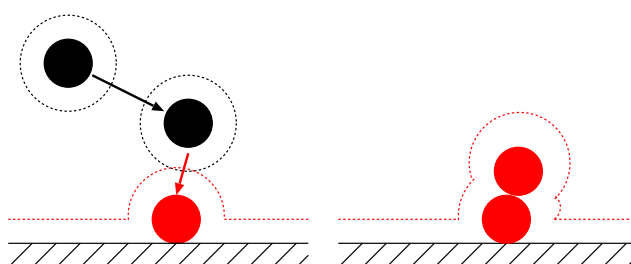
Die Wechselwirkungen zwischen deponierten Partikeln und den äußeren Feldern spielt in bestimmten Fällen eine große Rolle. Auf einer Wand abgeschiedene Partikel und ihre Strukturen ändern die Geometrie und somit die Randbedingungen für das äußere Feld, was wiederum eine Änderung des Feldes selbst bewirkt und somit einen Einfluss auf die nachfolgenden Partikel hat. Als Beispiel sei das Zuwachsen eines Filters durch Deposition größerer Partikel genannt, siehe z. B. [25], wo ohne Berücksichtigung des Einflusses der sich stetig ändernden Geometrie auf die Strömung die Simulationsergebnisse unrealistisch werden.

2.4.2. Verzögerte (retarded) Van-der-Waals-Kraft

Die Ursache der van-der-Waals-Kraft liegt in der Anziehungskraft zwischen elektrischen Ladungen der Atome, sie wird durch die Elektronenbewegung um die Atomkerne der Moleküle hervorgerufen. Durch die Fluktuationen der Ladungen entstehen kurzzeitig Dipole die benachbarte Moleküle, ebenfalls kurzzeitig Dipole, anziehen. Dadurch wirkt die van-der-Waals-Kraft stets anziehend. In unmittelbarer Oberflächennähe hat diese Kraft einen entscheidenden Einfluss auf die Bewegung und das Depositionsverhalten der Partikel. Bei Entfernung von der Oberfläche wird sie jedoch sehr schnell vernachlässigbar klein.



(a) Wechselwirkungspotentiale ϕ_E zwischen Atomen oder Molekülen



(b) Berücksichtigung des Wirkungsquerschnittes bei der Deposition

Abbildung 2.6.: Van-der-Waals-Kraft als Wirkungsquerschnitt

Zur Vereinfachung seien Wechselwirkungspotentiale zwischen Atomen oder kleinen Molekülen der Form $\phi_E(r) = -C_k/r^n$ mit konstantem positiven C_k bzw. n bei einem Abstand r zwischen den Atommittelpunkten gegeben. Es wird vorausgesetzt, dass sich die Wechselwirkungsenergie Φ_E zwischen zwei makroskopischen Körpern additiv aus denen der Atome und Moleküle zusammensetzt. Durch das negative Vorzeichen wird die stets anziehende Wirkung der van-der-Waals-Kraft berücksichtigt. Sie kann dann mit dem Abstand d zwischen Partikel- und Wandoberfläche und dem äußeren Normaleneinheitsvektor des Partikels \mathbf{n} , der die Richtung des minimalen Abstands zur Wand bestimmt, ausgedrückt werden als

$$\mathbf{F}_{\text{vdw}} = \frac{d\Phi_E}{dd} \mathbf{n}. \quad (2.53)$$

Im folgenden werden zwei Modelle mit unterschiedlichen Wechselwirkungspotentialen zwischen Atomen oder Molekülen vorgestellt.

Das einfachere Modell verwendet auf molekularer Ebene das Wechselwirkungspotential des Hartkugelmodells

$$\phi_E(r) = + \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n \quad \text{mit} \quad n = \infty, \quad (2.54)$$

wobei σ dem Molekülradius entspricht. Das Potential ist in Abb. 2.6 (a) als durchgezogene Linie skizziert. Es ist konstant Null und somit ist auch die van-der-Waals-Kraft exakt Null, solange der Abstand des Moleküls zur Wand größer σ ist. Wird dieser Wert erreicht, so springt der Wert des Potentials und damit auch derjenige der Kraft auf unendlich und das Molekül deponiert an der Oberfläche. Die Voraussetzung der Additivität der Potentiale liefert analoge Aussagen für die Wechselwirkungsenergie Φ_E eines Partikels, die ebenfalls durch (2.54) dargestellt werden kann. Um den Einfluss der van-der-Waals-Kraft auf die Partikelbewegung im wandnahen Bereich zu berücksichtigen, wird $\sigma = r_p + d_{\min}$ als Summe aus dem Partikelradius und einer zusätzlichen Strecke d_{\min} gesetzt. Die van-der-Waals-Kraft spielt solange keine Rolle, wie der Abstand zwischen Partikelmittelpunkt und Wand größer als σ ist. Unterschreitet die Entfernung jedoch diesen Grenzwert, so springt der Betrag der Kraft auf unendlich und das Partikel wird ohne Berücksichtigung anderer Kräfte an der Oberfläche abgeschieden. Damit wird der bedeutende Einfluss der van-der-Waals-Kraft auf die Partikelbewegung in unmittelbarer Oberflächennähe simuliert. Dieses Modell kann auch als Wirkungsquerschnitt um die Oberflächen beschrieben werden, vgl. Abb. 2.6 (b). Ein Nachteil ist der vorzugebende und unbekannte Mindestabstand d_{\min} , der bei einem kleinen Partikeldurchmesser nicht zu Null gesetzt werden darf. Er muss entsprechend den Partikel- und Fluideigenschaften individuell angepasst werden.

Eine andere Möglichkeit besteht in der Verwendung des Lennard-Jones oder ‚6-12‘-Potentials auf molekularer Ebene

$$\phi_E(r) = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad (2.55)$$

mit Konstanten $A = 4 \epsilon \sigma^{12}$ und $B = 4 \epsilon \sigma^6$. Der Parameter σ stimmt in diesem Fall nicht mit dem Moleküldurchmesser überein. Die minimale Energie $\phi_E = -\epsilon$ wird bei einem Abstand $r = 2^{1/6}\sigma$ erreicht, bei $r = \sigma$ gilt $\phi_E = 0$, vgl. Abb. 2.6 (a). Das Potential setzt sich aus einem abstoßenden Term $\propto r^{-12}$ und einem anziehenden $\propto r^{-6}$ zusammen. Im folgenden wird der für die van-der-Waals-Kraft unwesentliche abstoßende Term vernachlässigt. Betrachtet werde nun ein kugelförmiges Molekül, das sich einem makroskopischen Körper, z. B. einer festen Wand, nähert, der aus ebenfalls sphärischen Molekülen zusammengesetzt ist. Das Wechselwirkungspotential des Moleküls mit der Wand ergibt sich dann als Summe der Wechselwirkungen zwischen diesem und allen Molekülen der Wand. Die Integration ist in [50] im Detail beschrieben worden, so dass hier nur das Ergebnis angegeben wird. Für das Molekül im Abstand d von der Körperoberfläche ergibt sich ein Wechselwirkungspotential

$$\phi_E(d) = -\frac{\pi B N}{6d^3}, \quad (2.56)$$

wobei N die Anzahldicke der Moleküle in der Wand beschreibt und B die Konstante aus

Gl. (2.55) ist. Um die gesamte Wechselwirkungsenergie zwischen einem Partikel und einer ebenen Wand zu bestimmen, werden die paarweisen Wechselwirkungspotentiale aus Gl. (2.56) zwischen den Molekülen des Partikels und denjenigen der Wand aufaddiert. Dies lässt sich als Integration beschreiben durch, vgl. [50]

$$\Phi_E(d) = -\frac{2\pi BN^2}{12} \int_0^{2r_p} \frac{(2r_p - z)z}{(d+z)^3} dz. \quad (2.57)$$

Die analytische Lösung dieses Integrals ist die aus der Literatur, z. B. [17], bekannte Wechselwirkungsenergie für Partikel-Wand-Wechselwirkungen

$$\Phi_{E_PW} = -\frac{A_H}{6} \left[\frac{r_p}{d} + \frac{r_p}{d+2r_p} + \ln \left(\frac{d}{d+2r_p} \right) \right], \quad (2.58)$$

mit den Bezeichnungen aus Abb. 2.7 (a). Hierbei wird der konstante Ausdruck vor dem Integral durch die Hamaker-Konstante $A_H = \pi BN^2$ ersetzt.

Analog ergibt sich für Partikel-Partikel-Wechselwirkungen mit den Radien r_{p1} und r_{p2} , vgl. Abb. 2.7 (b)

$$\Phi_{E_PP} = -\frac{A_H}{6} \left[\frac{2r_{p1}r_{p2}}{d^2 + 2r_{p1}d + 2r_{p2}d} + \frac{2r_{p1}r_{p2}}{d^2 + 2r_{p1}d + 2r_{p2}d + 4r_{p1}r_{p2}} + \ln \left(\frac{d^2 + 2r_{p1}d + 2r_{p2}d}{d^2 + 2r_{p1}d + 2r_{p2}d + 4r_{p1}r_{p2}} \right) \right]. \quad (2.59)$$

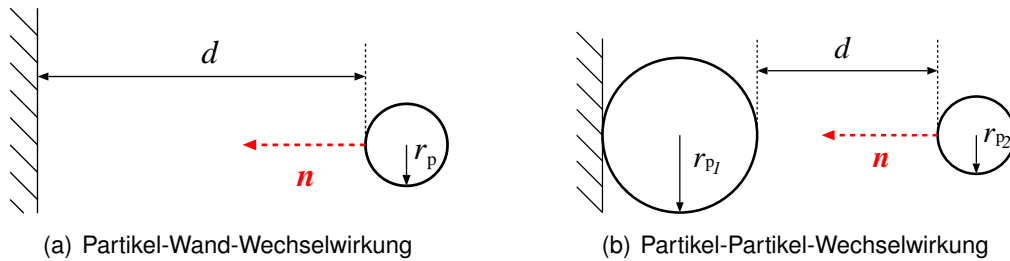


Abbildung 2.7.: Van-der-Waals-Kraft als Wechselwirkungsenergie

Mit Hilfe von Gl. (2.53) kann somit die van-der-Waals-Kraft beschrieben werden durch

$$\mathbf{F}_{vdw_pw} = \frac{2A_H}{3} \frac{r_p^3}{d^2(2r_p + d)^2} \mathbf{n} \quad (2.60)$$

$$\mathbf{F}_{vdw_pp} = \frac{32A_H}{3} \frac{r_{p1}^3 r_{p2}^3 (r_{p1} + r_{p2} + d)}{d^2 (2r_{p1} + 2r_{p2} + d)^2 (4r_{p1}r_{p2} + 2r_{p1}d + 2r_{p2}d + d^2)^2} \mathbf{n} \quad (2.61)$$

mit dem vom Partikel zur Oberfläche gerichteten Normaleneinheitsvektor \mathbf{n} . Die Indizes

p_w bzw. p_p markieren hierbei Partikel-Wand- bzw. Partikel-Partikel-Wechselwirkungen. Die Hamaker-Konstante bei Metalle kann nach [50] durch den Wert $A_H = 4 \cdot 10^{-19}$ J gut angenähert werden.

Aus der Literatur, z. B. [83], ist bekannt, dass Gl. (2.60) und Gl. (2.61) zur Überbewertung der van-der-Waals-Kraft neigen. Im folgenden werden zwei relativ einfache Modelle zur Reduktion der Kräfte beschrieben.

Nach [71] kann ein Retardationsfaktor

$$0 < \alpha_s(r_p, d, \lambda_e) < 1 \quad (2.62)$$

eingeführt werden, der vom Partikelradius, dem Abstand d und einer „charakteristischen Wellenlänge“ λ_e abhängt. Letztere hat für die meisten Materialien einen Wert um 100 nm, siehe [17]. Multiplikation der Gl. (2.60) und (2.61) mit diesem Faktor liefert die verzögerte oder retarded van-der-Waals-Kraft. Der über den Abstand d aufgetragene Verlauf von α_s für verschiedene Partikelradien r_p ist in Abb. 2.8 dargestellt. Je größer der Partikelradius ist, desto größer ist der Einfluss des Retardationsfaktors.

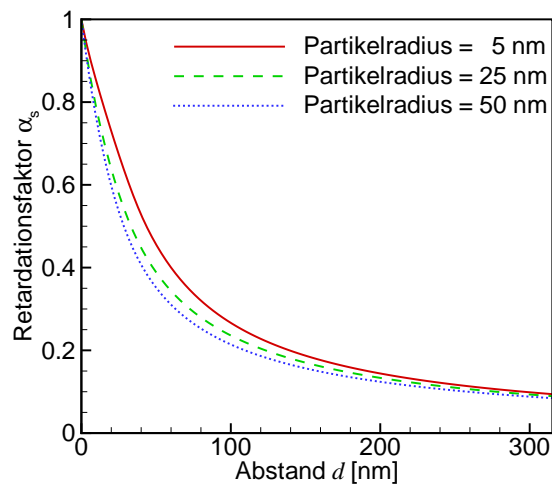


Abbildung 2.8.: Retardationsfaktor α_s der van-der-Waals-Kraft

Eine andere Möglichkeit besteht darin die einzelnen Terme der Wechselwirkungsenergien Φ_E entsprechend anzupassen. In [35] wird der folgende Ausdruck für Partikel-Partikel-Wechselwirkungsenergien vorgeschlagen

$$\Phi_{E_{pp}} = -\frac{A_H r_{p1} r_{p2}}{6d(r_{p1} + r_{p2})} \left[1 - \frac{bd}{\lambda_e} \ln \left(1 + \frac{\lambda_e}{bd} \right) \right] \quad (2.63)$$

mit $b = 5.32$. Für Partikel-Wand-Wechselwirkungen entwickelte Czarnecki in [13] die

Formel

$$\Phi_{E_pw} = -A_H \left[\frac{2.45\lambda_e}{60\pi} \left(\frac{d - r_p}{d^2} - \frac{d + 3r_p}{(d + 2r_p)^2} \right) - \frac{2.17\lambda_e^2}{720\pi^2} \left(\frac{d - 2r_p}{d^3} - \frac{d + 4r_p}{(d + 2r_p)^3} \right) + \frac{0.59\lambda_e^3}{5040\pi^3} \left(\frac{d - 3r_p}{d^4} - \frac{d + 5r_p}{(d + 2r_p)^4} \right) \right]. \quad (2.64)$$

Differentiation der beiden Ausdrücke nach dem Abstand d und Multiplikation mit dem normierten Richtungsvektor \mathbf{n} ergibt dann die verzögerten van-der-Waals-Kräfte.

Die aufgeführten Modelle berücksichtigen bei der Bestimmung der van-der-Waals-Kraft jeweils nur den Einfluss des wandnächsten Punktes. Es kann jedoch, gerade bei den durch deponierte Partikel entstehenden komplexen geometrischen Strukturen, vorkommen, dass ein ankommendes Partikel zu mehreren Oberflächenpunkten einen Abstand der gleichen Größenordnung besitzt. Unter diesen Umständen müssten alle Punkte einen ähnlichen Beitrag zu der van-der-Waals-Kraft liefern. In den Simulationen ist dies durch Summation über die jeweiligen Teilkräfte berücksichtigt worden. Im allgemeinen führt diese Methode jedoch zur Überbewertung der van-der-Waals-Kraft, da z. B. auch durch Partikel teilweise verdeckte Oberflächen voll in die Summe eingehen. Diese Überlegungen führen auf das allgemeine, jedoch sehr komplexe Problem der verzögerten van-der-Waals-Kraft, das in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht weiter vertieft wird. Eine detaillierte Darstellung wird z. B. in [50, 55, 56] gegeben.

2.4.3. Bild-Kraft

Nähert sich ein geladenes Partikel einer leitenden oder dielektrischen Oberfläche, so wird an der gegenüberliegenden Seite in gleichem Abstand zur Trennfläche eine Bildladung, also eine Ladung mit entgegengesetzter Polarität induziert, vgl. Abb. 2.9. Die daraus resultierende Kraft, die sogenannte Bild-Kraft, kann für Partikel-Wand-Wechselwirkungen dargestellt werden durch, siehe z. B. [51],

$$\mathbf{F}_{\text{bild_pw}} = \alpha'(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) \frac{-(qe_{\text{el}})^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_3(2(d + r_p))^2} \left(\frac{\epsilon_2 - \epsilon_3}{\epsilon_2 + \epsilon_3} \right) \mathbf{n}_{\text{pw}}. \quad (2.65)$$

Hierbei ist $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$ die Dielektrizitätskonstante im Vakuum, ϵ_2 die relative Dielektrizitätskonstante der Wand und ϵ_3 die relative Dielektrizitätskonstante des Fluids. d ist der Abstand zwischen Partikel- und Wandoberfläche, q ist die Anzahl der elektrischen Ladungen des Partikels und \mathbf{n}_{pw} ist der negative Normaleneinheitsvektor der Partikeloberfläche, der die Richtung des minimalen Abstandes festlegt. Der Korrektorkoeffizient $\alpha' \geq 1$ hängt von den verschiedenen Dielektrizitätskonstanten ab und muss numerisch bestimmt werden, vgl. [34, 14]. Die Bild-Kraft bewirkt, dass das Partikel sich in Richtung der Wand bewegt, falls $\epsilon_2 - \epsilon_3 > 0$, was bei allen Festkörper-Gas-Kombinationen

gegeben ist.

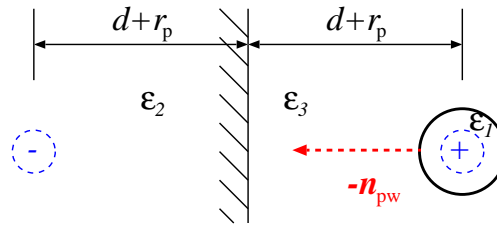


Abbildung 2.9.: Durch ein geladenes Partikel an der Oberfläche induzierte Bildladung.

Für Partikel-Partikel-Wechselwirkungen wird die Bild-Kraft für zwei gleichgroße Partikel in [51, 59] hergeleitet

$$\mathbf{F}_{\text{bild_pp}} = \left(\frac{-r_p^2 (q_1 e_{\text{el}})^2}{2\pi\epsilon_0 d_b^3} + \frac{2r_p^2 d_b (q_1 e_{\text{el}})^2}{\pi\epsilon_0 (d_b^2 - r_p^2)} \right) \mathbf{n}_{\text{pp}} + \left(\frac{-r_p^2 (q_2 e_{\text{el}})^2}{2\pi\epsilon_0 d_b^3} + \frac{2r_p^2 d_b (q_2 e_{\text{el}})^2}{\pi\epsilon_0 (d_b^2 - r_p^2)} \right) \mathbf{n}_{\text{pp}}. \quad (2.66)$$

Dabei ist $d_b = d + 2r_p$ der Abstand zwischen den beiden Partikelmittelpunkten und \mathbf{n}_{pp} ist der normierte Richtungsvektor zwischen dem Mittelpunkt des ankommenden und demjenigen des bereits deponierten Partikels.

Da die Bild-Kraft proportional dem inversen Abstand zum Quadrat ist, nimmt ihr Einfluss auf die Partikelbewegung mit wachsender Distanz stark ab.

2.5. Externe Drehmomente auf Partikel

Bei der Betrachtung des Transportes kugelförmiger Partikel in einem Fluid kann die Rotationsbewegung aufgrund der symmetrischen Geometrie vernachlässigt werden. Die Koppelung zwischen Translations- und Rotationsbewegung findet nur über die Saffman- und die Magnus-Kraft statt. Beide können jedoch aufgrund des kleinen Dichteverhältnisses zwischen Fluid und Partikel vernachlässigt werden.

Werden elektromagnetische Felder betrachtet, so muss aufgrund des mit dem Partikel fest verbundenen magnetischen Momentes auch die Drehbewegung berücksichtigt werden. Zur Bestimmung der Rotationsgeschwindigkeit eines Partikels müssen neben dem magnetischen Drehmoment auch das Reibungsdrehmoment und das zufallsverteilte Drehmoment aufgrund Brownscher Rotation in Betracht gezogen werden.

2.5.1. Reibungsmoment

Bei Berücksichtigung der Rotationsbewegung eines Partikels wird aufgrund des Reibungsmomentes die Drehgeschwindigkeit des Partikels derjenigen des Fluids angepasst.

Bei Zeiten $t \rightarrow \infty$ stimmen beide überein, wenn keine anderen Momente auf das Partikel wirken. Wirbelfreie Fluide bremsen die Partikelrotation. Für sphärische Partikel gilt nach [80] für das Reibungsmoment

$$\mathbf{T}_w = C_r r_p^5 \frac{1}{2} \rho \boldsymbol{\omega}_{\text{rel}} |\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}| \quad (2.67)$$

mit der relativen Winkelgeschwindigkeit

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} - \boldsymbol{\omega}, \quad (2.68)$$

der Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} , der Winkelgeschwindigkeit des Partikels $\boldsymbol{\omega}$ und dem Reibungskoeffizienten der Rotationsbewegung

$$C_r = \begin{cases} \frac{64\pi}{\text{Re}_r} & \text{falls } \text{Re}_r \leq 32 \\ \frac{12.9}{\sqrt{\text{Re}_r}} + \frac{128.4}{\text{Re}_r} & \text{falls } 32 < \text{Re}_r < 1000 \end{cases}. \quad (2.69)$$

Dabei ist die Partikel-Reynoldszahl der Rotationsbewegung definiert durch

$$\text{Re}_r = \frac{\rho 4r_p^2 |\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}|}{\eta} \quad (2.70)$$

Für die in dieser Arbeit auftretenden Reynoldszahlen gilt aufgrund der Abhängigkeit vom quadratischen Partikelradius immer $\text{Re}_r \leq 32$, so dass sich das Reibungsmoment ausdrücken lässt durch

$$\mathbf{T}_w = \zeta_r \left(\frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} - \boldsymbol{\omega} \right). \quad (2.71)$$

Dabei bezeichnet

$$\zeta_r = 8\pi\eta r_p^3 \quad (2.72)$$

den Reibungskoeffizienten der Rotation. Ein dem Cunningham-Faktor vergleichbarer Korrekturterm, der den Übergang vom Kontinuums- zum freimolekularen Bereich für den Reibungskoeffizienten beschreibt, kann nicht angegeben werden. In der Literatur existieren bisher keine experimentell überprüften Ansätze, vgl. [65]. Mit Hilfe des Trägheitsmomentes I_p kann der Reibungskoeffizient in eine Relaxationszeit τ_{Rr} und deren Inverse β_r

$$\tau_{\text{Rr}} = \frac{I_p}{\zeta_r} \quad \text{und} \quad \beta_r = \frac{1}{\tau_{\text{Rr}}} = \frac{\zeta_r}{I_p} \quad (2.73)$$

umgerechnet werden. Diese beschreibt die Zeit, die das Partikel benötigt, um auf ein externes Drehmoment zu reagieren.

2.5.2. Drehmoment infolge Brownscher Rotation

Analog zur Brownschen Diffusion resultiert aus den Kollisionen zwischen einem Partikel und den Fluidmolekülen eine sogenannte Brownsche Rotationsbewegung. Für sphärische Partikel leitete Einstein folgende Formeln für das mittlere Quadrat der Drehwinkeländerung $\Delta\theta$ einer Raumrichtung sowie den zugehörigen Diffusionskoeffizienten der Rotationsbewegung $D_{\text{Br},r}$ her:

$$\overline{\Delta\theta^2}(\Delta t) = 2D_{\text{Br},r}\Delta t \quad (2.74)$$

$$D_{\text{Br},r} = \frac{k_b T}{\zeta_r}, \quad (2.75)$$

siehe [16]. Hierbei bezeichnet Δt einen Zeitschritt, k_b die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur und ζ_r den Reibungskoeffizienten aus Gl. (2.72). Analog zur Kraft infolge der Brownschen Bewegung, vgl. Gl. (2.45), kann die Brownsche Rotation als ein zufallsverteiltes Drehmoment $T_{\text{Br}}(t)$ angesehen werden.

2.5.3. Magnetisches Drehmoment

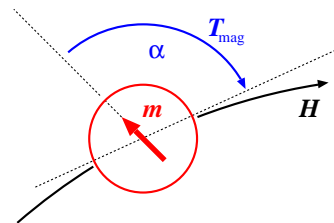


Abbildung 2.10.: Drehmoment auf ein Partikel im magnetischen Feld H

Betrachtet werde ein magnetisiertes Partikel, das sich in einem magnetischen Feld H bewegt. Weiterhin handele es sich um ein Eindomänenpartikel, welches sich als magnetischer Dipol mit dem Moment m darstellen lässt. Ist das Moment des Partikels nicht in Richtung der Feldlinien des magnetischen Feldes ausgerichtet, vgl. Abb. 2.10, wird es sich in die entsprechende Richtung ausrichten. Damit wird ein Drehmoment, das sogenannte magnetischen Drehmoment, auf das Partikel ausgeübt. Dieses kann mit der Permeabilität des Vakuums μ_0 dargestellt werden durch

$$T_{\text{mag}} = m \times (\mu_0 H). \quad (2.76)$$

2.6. Größenvergleich der externen Kräfte

Im folgenden werden die wichtigsten externen Kräfte hinsichtlich ihrer Größenordnung betragsmäßig miteinander verglichen. Dazu werden die Beträge der Kräfte durch Division mit dem Betrag der Kraft infolge der Brownschen Bewegung (2.45) dimensionslos betrachtet. Diese Bezugsgröße wird gewählt, da sie bei hinreichend kleinen Partikelradien die Bewegung entscheidend beeinflusst. Außerdem hängt sie bei vorgegebener Partikeldichte nur vom Partikelradius ab. Aufgrund analoger Eigenschaften eignet sich zur Normalisierung bei größeren Partikeln die Summe aus Gravitations- und Auftriebskraft (2.36). Abb. 2.11 zeigt, dass diese dimensionslose Kraft für kleinere Partikelradien um einige Größenordnungen kleiner als die dimensionslose Brownsche Kraft ist. Erst ab einem Durchmesser von etwa $0.8 \mu\text{m}$ dreht sich das Verhältnis um.

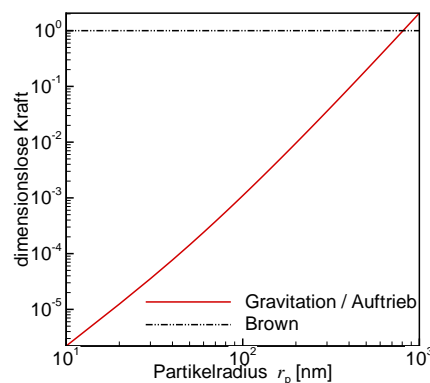


Abbildung 2.11.: Dimensionslose Gravitations- und Auftriebskraft im Vergleich mit der dimensionslosen Kraft infolge Brownscher Bewegung in Abhängigkeit vom Partikelradius.

Die folgenden Kräfte sind jeweils an drei Testfällen, in denen der entscheidende Parameter der jeweiligen Kraft variiert worden ist, für Partikelradien zwischen 10 und $1000 \text{ nm} = 1 \mu\text{m}$ genauer untersucht worden. In allen Fällen sind für das Trägergas Stickstoff die Geschwindigkeit $|\mathbf{u}| = 0.1 \text{ m/s}$, die Dichte $\rho = 1.15 \text{ kg/m}^3$, die Temperatur $T = 298.15 \text{ K}$, der Druck $P = 101325 \text{ Pa}$, die dynamische Zähigkeit $\eta = 1.77 \cdot 10^{-5} \text{ kg/ms}$, die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_f = 0.026 \text{ W/mK}$ und die relative Dielektrizitätskonstante $\epsilon_3 = 1.00058$ konstant gewählt worden. Für die Nickel-Partikel sind folgende Parameter festgelegt worden: die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_p = 90.7 \text{ W/mK}$ sowie die elektrischen Eigenschaften $q = 1$ und $\epsilon_2 = 4.6$. Die Rotationsgeschwindigkeit der Partikel ist mit $|\omega_p| = 15 \text{ 1/s}$ eher gering angesetzt worden. Da diese Größe jedoch lediglich in der relativen Drehgeschwindigkeit ω_{rel} zwischen Fluid und Partikel bei der Magnus-Kraft auftritt, führt diese Wahl auf

ein eher großes ω_{rel} und damit auf einen eher zu großen Betrag dieser Kraft. Da die dimensionslosen Kräfte auf einer logarithmischen Skala dargestellt sind, werden lediglich ihre Absolutwerte betrachtet, anziehende bzw. abstoßende Wirkungen werden nicht berücksichtigt.

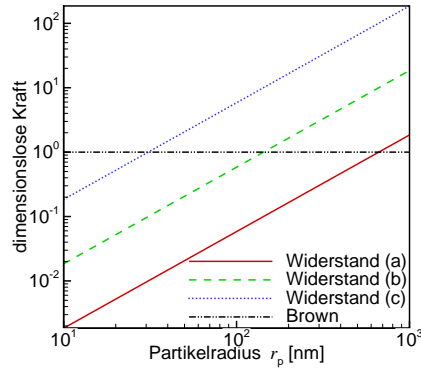


Abbildung 2.12.: Dimensionslose Widerstands-Kraft und Brownsche Zufalls-kraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

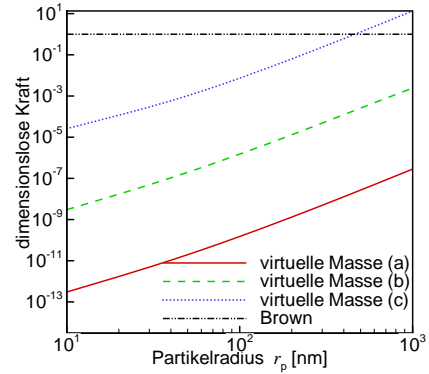


Abbildung 2.13.: Dimensionslose Virtuelle-Masse-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

In Abb. 2.12 ist das Verhältnis der Widerstandskraft (2.20) und der Kraft infolge Brownscher Bewegung (2.45) dargestellt. Da erstere proportional zur Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid und Partikel ist, ist die Partikelgeschwindigkeit variiert worden zwischen

$$(a) |v| = 1.01|u|, \quad (b) |v| = 1.1|u| \quad \text{und} \quad (c) |v| = 2|u|.$$

Es zeigt sich, dass selbst bei Geschwindigkeitsdifferenzen von 10% im Fall (b) die Zufallskraft bei Partikeln im niedrigen Nanometerbereich, also $r_p < 30 \text{ nm}$, deutlich überwiegt. Das bedeutet, dass für diese Partikelgrößen die Widerstandskraft in dem hier betrachteten Fluid unter Normalbedingungen keine entscheidende Rolle spielt. Mit Vergrößern des Partikelradius wächst der Einfluss dieser Kraft jedoch schnell an. In den folgenden Betrachtungen ist die Partikelgeschwindigkeit von $|v| = 2|u|$ aus dem Fall (c) angenommen worden.

Die Kraft der virtuellen Masse (2.48) ist proportional der Relativbeschleunigung zwischen Fluid und Partikel. Diese ist deswegen variiert worden zwischen

$$(a) a_{\text{rel}} \triangleq \frac{D|u|}{Dt} - \frac{d|v|}{dt} = 0.01 \text{ m/s}^2, \quad (b) a_{\text{rel}} = 100 \text{ m/s}^2 \quad \text{und} \quad (c) a_{\text{rel}} = 10^6 \text{ m/s}^2.$$

Nach Abb. 2.13 kann sie vernachlässigt werden, solange die Differenz klein ist. Erst bei einem Unterschied von 10^6 m/s^2 im dritten Fall ist ihr Einfluss bei einem Partikelradius $r_p > 0.5 \mu\text{m}$ größer als derjenige der Brownschen Zufallskraft. Diese Beschleunigung entspricht einer Geschwindigkeitsänderung von 0.1 m/s in einer Zeit von 10^{-7} s . Unter

den Voraussetzungen der hier verwendeten Geschwindigkeitsbeträge bedeutet dies eine Verdoppelung der Partikelgeschwindigkeit innerhalb von 200 ns.

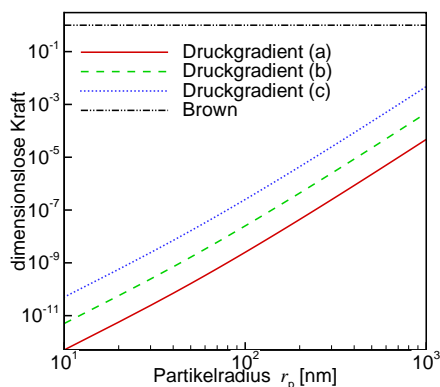


Abbildung 2.14.: Dimensionslose Druckgradienten-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

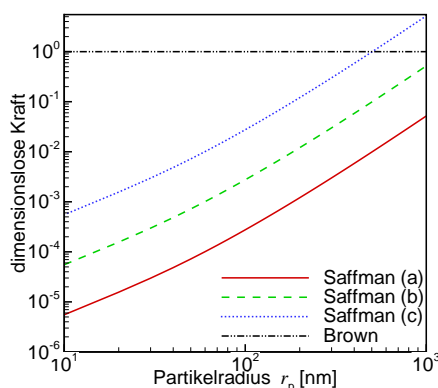


Abbildung 2.15.: Dimensionslose Saffman-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

Die Kraft infolge eines Druckgradienten hängt im wesentlichen von diesem ab. Folgende Werte sind für den Betrag gewählt worden

$$(a) |\nabla P| = 10^6 \text{ Pa}, \quad (b) |\nabla P| = 10^7 \text{ Pa} \quad \text{und} \quad (c) |\nabla P| = 10^8 \text{ Pa}.$$

Abb. 2.14 zeigt, dass diese Kraft, vgl. Gl. (2.37), in dem betrachteten Größenbereich der Partikel bei einem Gradienten kleiner als 10^8 Pa/m , was einer Druckänderung von 100 Pa über einer Strecke von $1 \mu\text{m}$ entspricht, vernachlässigt werden kann. Bei den gewählten Beispielrechnungen handelt es sich um inkompressible Fluide oder Strömungen bei niedriger Machzahl, bei denen nur kleine Druckänderungen auftreten. Der maximale Druckgradient in den betrachteten Filterumströmungen beträgt etwa $5 \cdot 10^4 \text{ Pa/m}$, d. h. er ist um etwa vier Größenordnungen kleiner als der obige minimale Grenzwert.

Die Saffman-Kraft, siehe Gl. (2.46), spielt erst ab Partikelradien von ca. $0.5 \mu\text{m}$ eine entscheidende Rolle, wenn gleichzeitig eine starke Scherströmung, also ein großer Geschwindigkeitsgradient vorliegt, vgl. Abb. 2.15 mit dem Parameter

$$(a) |\nabla \times \mathbf{u}| = 10^1 \text{ 1/s}, \quad (b) |\nabla \times \mathbf{u}| = 10^3 \text{ 1/s} \quad \text{und} \quad (c) |\nabla \times \mathbf{u}| = 10^5 \text{ 1/s}.$$

Dies trifft auf die in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsbeispiele nicht zu. Der maximale Geschwindigkeitsgradient bei der Anströmgeschwindigkeit von $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$ liegt bei ungefähr $4 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$.

Ähnliches trifft auf die Magnus-Kraft, vgl. Gl. (2.47), zu. Entscheidenden Einfluss auf die Partikelbewegung hat sie erst ab Partikelradien größer als $1 \mu\text{m}$ und relativen Rotationsgeschwindigkeiten mit $|\omega_{\text{rel}}| = |\frac{1}{2}\nabla \times \mathbf{u} - \omega_p| > 10^5 \text{ s}^{-1}$, siehe Abb. 2.16 mit

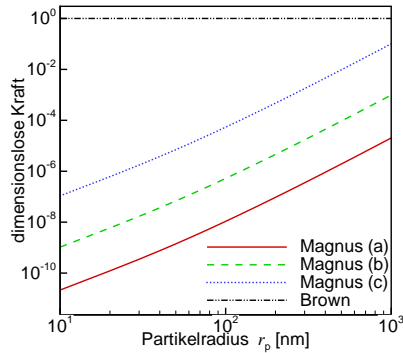


Abbildung 2.16.: Dimensionslose Magnus-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

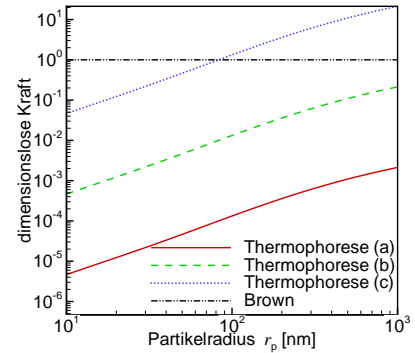


Abbildung 2.17.: Dimensionslose thermophoretische Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Partikelradius.

maximalem $|\omega_{\text{rel}}| = 5 \cdot 10^4 \text{ 1/s}$ im Fall (c). Diese Größenordnungen werden in den später betrachteten Beispielen nicht erreicht.

Abb. 2.17 zeigt das Verhältnis der thermophoretischen Kraft aus Gl. (2.33) zur Brownschen Zufallskraft aus Gl. (2.45) für einen Temperaturgradient

$$(a) |\nabla T| = 10^2 \text{ K/m}, \quad (b) |\nabla T| = 10^4 \text{ K/m} \quad \text{und} \quad (c) |\nabla T| = 10^6 \text{ K/m}.$$

Schon bei einem Temperaturgradienten vom Betrag 10^6 K/m , das entspricht einer Temperaturänderung von 1 K über eine Strecke von $1 \mu\text{m}$, erreicht sie bei einem Partikelradius von 100 nm den Größenbereich der Zufallskraft. Diese Temperaturgradienten können bereits bei kleinen Temperaturdifferenzen zwischen Eintrittsquerschnitt und Faser erreicht werden. Z. B. ergibt sich bei der Differenz von 30 K aus dem Anwendungsbeispiel in Fasernähe ein Betrag des Temperaturgradienten, der größer als $4 \cdot 10^5 \text{ K/m}$ ist. Demnach spielen auch geringe Temperaturdifferenzen bei der Partikelbewegung eine große Rolle. Aufgrund der betrachteten kleinen Temperaturdifferenzen sind die Temperaturabhängigkeiten der Dichte, der dynamischen Viskosität und der Wärmeleitfähigkeit des Fluids in den hier erfolgten Abschätzungen vernachlässigt worden.

Die bisher betrachteten Kräfte sind unabhängig vom Abstand des Partikels zur Oberfläche. Sie können in Abhängigkeit der äußeren Felder im gesamten Gebiet einen entscheidenden Beitrag zur Partikelgeschwindigkeit liefern. Die zwei folgenden Kräfte dagegen sind umgekehrt proportional zu diesem Abstand. Damit nimmt ihr Einfluss zu, je näher die Partikel der festen Oberfläche kommen. Die Verläufe dieser Kräfte werden beispielhaft für drei Partikelgrößen, $r_p = 10 \text{ nm}$, 100 nm und 1000 nm bei einem Abstand d zur Wand zwischen 0 und 1000 nm untersucht.

Abb. 2.18 zeigt den Verlauf der Bild-Kraft bei einem einfach geladenen Partikel. Je größer das Partikel ist, desto weniger Einfluss hat die Bild-Kraft. Dieser Effekt kann

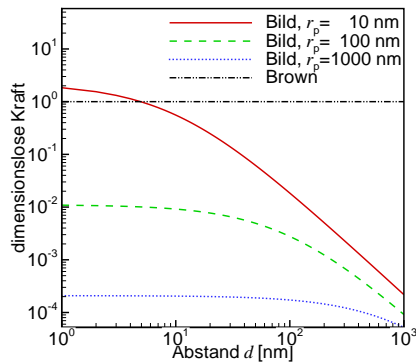


Abbildung 2.18.: Dimensionslose Bild-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Abstand zu einer Wand.

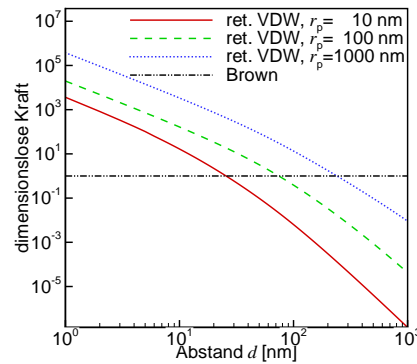


Abbildung 2.19.: Dimensionslose van-der-Waals-Kraft und Brownsche Zufallskraft in Abhängigkeit vom Abstand zu einer Wand.

durch den vom Partikelradius abhängenden Abstand zwischen der Ladung im Zentrum des Partikels und der Wandoberfläche $d + r_p$ erklärt werden. Der Einfluss der Bild-Kraft nimmt mit wachsendem Abstand d schnell ab. Bei mehrfach geladenen Partikeln bleibt der qualitative Verlauf erhalten, der Einflussbereich der Bildkraft verschiebt sich jedoch gering in Richtung des größeren Abstandes.

Eine weitere in Oberflächennähe wirkende Kraft ist die van-der-Waals-Kraft, die in Abb. 2.19 unter Berücksichtigung des Retardationsfaktors α_s aus Gl. (2.62) dargestellt ist. Auffallend ist, dass sie ab einem Abstand von etwa einem Partikelradius stark zunimmt, sodass sie in unmittelbarer Oberflächennähe die Brownsche Zufallskraft betragsmäßig um mehrere Größenordnungen übertrifft. Dieses Verhalten ist unabhängig von der Partikelgröße, tritt also auch bei kleinen Radien auf.

Im Folgenden werden die Verläufe der auf ein einzelnes Partikel wirkenden Kräfte in Abhängigkeit vom Oberflächenabstand d genauer untersucht. Berücksichtigt werden dabei auch die Vorzeichen der Kräfte, also ihre anziehenden, d. h. negativen bzw. abstoßenden, d. h. positiven Wirkungen. Neben den fest gewählten Parametern vom Anfang dieses Abschnitts ist zusätzlich die Partikelgeschwindigkeit zu $v = 2u$ gesetzt worden. Um den Einfluss der thermophoretischen Kraft besser aufzeigen zu können, ist ein Temperaturgradient vom Betrag $|\nabla T| = 10^6 \text{ K/m}$ gewählt worden. In Abb. 2.20 sind die Verläufe bei einem Partikelradius von 10 nm dargestellt. Weit entfernt von einer Oberfläche hat die Brownsche Zufallskraft den größten Einfluss auf die Partikelbewegung. Sie kann sowohl abstoßend als auch anziehend zur Oberfläche wirken und ist aus darstellerischen Gründen positiv gewählt worden. Wird der Abstand d kleiner als 100 nm, also dem zehnfachen Partikelradius, wachsen Bild- und van-der-Waals-Kraft stark an. Insbesondere die zuletzt erwähnte übertrifft die übrigen Kräfte betragsmäßig um Größenordnungen.

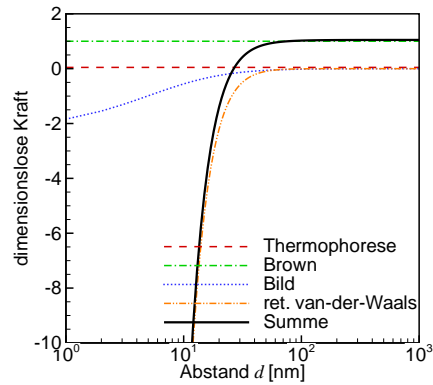


Abbildung 2.20.: Vergleich der auf ein Partikel mit $r_p = 10 \text{ nm}$ wirkenden Kräfte, abhängig vom Abstand d zur Oberfläche.

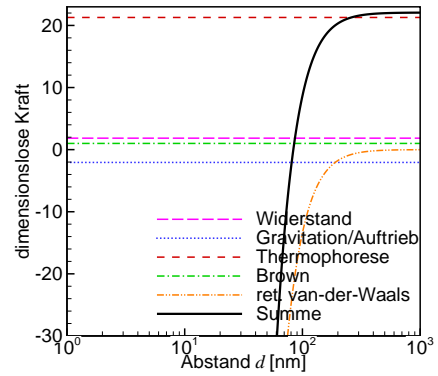


Abbildung 2.21.: Vergleich der auf ein Partikel mit $r_p = 1000 \text{ nm}$ wirkenden Kräfte, abhängig vom Abstand d zur Oberfläche.

Bei einem Partikelradius von 1000 nm spielen andere Kräfte eine wichtige Rolle, vgl. Abb. 2.21. Bei großem Wandabstand liefert die thermophoretische Kraft den größten Beitrag. Ihr folgen die Gravitationskraft, die bei isothermen Betrachtungen an die erste Stelle rückt und die Widerstandskraft, die trotz der geringen Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Fluid nicht vernachlässigt werden darf. Im Verhältnis zu diesen Kräften kann die Brownsche Zufallskraft außer Acht gelassen werden. In Oberflächennähe kann die Bild-Kraft aufgrund des großen Partikelradius vernachlässigt werden, die van-der-Waals-Kraft nimmt ab einem Abstand von etwa 200 nm stark zu und übertrifft wiederum bei abnehmendem Abstand alle übrigen Kräfte um Größenordnungen.

Coulomb- und magnetische Kraft sind bei den Vergleichen nicht berücksichtigt worden. Sie können bei entsprechend starken elektrischen bzw. magnetischen Feldern jedoch einen entscheidenden Einfluss auf die Partikelbewegung, auch im nicht wandnahen Bereich, haben.

3. Grundgleichungen der kontinuierlichen Felder

3.1. Erhaltungsgleichungen der Gasphase

Die Strömung eines Kontinuums lässt sich vollständig durch die allgemeinen Erhaltungsgleichungen eines kompressiblen Fluids, bestehend aus der Kontinuitäts-, der Impulserhaltungs- und der Energieerhaltungsgleichung beschreiben. Zur Schließung der Gleichungen müssen zusätzlich eine thermische Zustandsgleichung des Druck, eine kalorische Zustandsgleichung der inneren Energie und Ausdrücke für die Transportkoeffizienten der dynamischen Viskosität $\eta(T)$ und der Wärmeleitung $\lambda_f(T)$, die von der Temperatur T abhängen können, angegeben werden.

Da in dieser Arbeit Probleme bei kleinen Machzahlen bzw. Fluidgeschwindigkeiten betrachtet werden, kann die Dichte bei isothermen Strömungen als konstant angenommen werden. In solchen Fällen können die allgemeinen Erhaltungsgleichungen auf die Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide vereinfacht¹ werden.

3.1.1. Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide

Die Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide mit der konstanten Dichte ρ_0 können beschrieben werden durch die Massen- und Impulserhaltungsgleichungen in differentieller Form

$$\partial_\alpha u_\alpha = 0 \tag{3.1}$$

$$\partial_t u_\alpha + u_\beta \partial_\beta u_\alpha = -\partial_\alpha P / \rho_0 + \partial_\beta \frac{\eta}{\rho_0} (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta). \tag{3.2}$$

Hierbei bezeichnet η die dynamische bzw. $\nu = \eta / \rho_0$ die kinematische Viskosität. Als abhängige Variable tritt neben der Fluidgeschwindigkeit u_α der Druck bezogen auf die Dichte P / ρ_0 auf. Die Geschwindigkeit wird aus der Impulserhaltungsgleichung (3.2) bestimmt, wobei die Nebenbedingung der Kontinuitätsgleichung (3.1), die keine Zeitableitung enthält, zusätzlich erfüllt sein muss. Letzteres wird durch eine entsprechende

¹Der Ausdruck „vereinfacht“ bezieht sich hierbei auf die Darstellung des Spannungstensors. Aus numerischer Sicht sind diese Gleichungen nicht unbedingt einfacher zu lösen.

Einstellung des Druckes gewährleistet, der jedoch lediglich in der Impulsgleichung auftritt.

Die Energiegleichung wird zu einer passiven Transportgleichung für die Temperatur. Sie hat aufgrund der konstanten Dichte keine Rückwirkung auf die Kontinuitäts- und Impulserhaltungsgleichung.

Die Randbedingungen für nicht bewegte Wände S ergeben sich für die Geschwindigkeit aus der Haftbedingung und für den Druck aus der verschwindenden Normalenableitung mit dem Normalenvektor der Wand n_α zu

$$u_\alpha|_S = 0 \quad (3.3)$$

$$(n_\alpha \cdot \partial_\alpha P)|_S = 0. \quad (3.4)$$

3.1.2. Navier-Stokes-Gleichungen für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte

Treten bei einer Strömung mit kleinen Machzahlen große Temperaturgradienten auf, so kann die Änderung der Dichte nicht mehr vernachlässigt werden. In diesem Strömungsbereich versagen i. a. die Lösungsmethoden kompressibler Fluide. Die asymptotische Entwicklung der allgemeinen Erhaltungsgleichungen eines kompressiblen Fluids nach kleinen Machzahlen ergibt ein spezielles Gleichungssystem für diesen Bereich, die sog. „Low Mach number approximation“ (LMNA) der Navier-Stokes-Gleichungen, vgl. [91]

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0 \quad (3.5)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\beta u_\alpha) = -\partial_\alpha P^{(2)} + \partial_\beta \eta \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right). \quad (3.6)$$

Die Machzahl ist definiert als das Verhältnis von Strömungs- zu Schallgeschwindigkeit, also $M = \frac{u_0}{c_S}$. Die Schallgeschwindigkeit eines idealen Gases ist gegeben durch $c_S = \sqrt{\kappa R T}$ mit dem Isentropenexponent $\kappa = \frac{c_p}{c_v}$ bestehend aus dem Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Druck c_p und bei konstantem Volumen c_v . Die spezifische Gaskonstante $R = \mathcal{R}/M_f$ ergibt sich aus der allgemeinen Gaskonstanten \mathcal{R} und der Molmasse des Fluids M_f . Neben der Kontinuitäts- (3.5) und Impulserhaltungsgleichung (3.6) wird die Energiegleichung als Konvektions-Diffusions-Gleichung der Temperatur T formuliert

$$\partial_t (\rho c_p T) + \partial_\beta (\rho u_\beta c_p T) = \partial_\beta (\lambda_f \partial_\beta T) \quad (3.7)$$

wobei λ_f die Wärmeleitfähigkeit bezeichnet. Der Gesamtdruck kann in drei Terme aufgespalten werden

$$\underbrace{P(t, x_\alpha)}_{\text{Gesamtdruck}} = \underbrace{P^{(0)}(t)}_{\text{thermodynamischer}} + \underbrace{P^{(1)}(t, x_\alpha)}_{\text{akustischer}} + \underbrace{P^{(2)}(t, x_\alpha)}_{\text{hydrodynamischer}}. \quad (3.8)$$

Mit Hilfe der asymptotischen Analyse bzgl. der Machzahl M können die unterschiedlichen Größenordnungen der Terme verdeutlicht werden. Der auf die Schallgeschwindigkeit bezogene dimensionslose thermodynamische Druck $P^{*,(0)}$ ist von der Größenordnung $O(1)$ und bleibt nahezu räumlich konstant. In einem offenen, d. h. isobaren System ist er zusätzlich zeitunabhängig. Neben dem thermodynamischen kann auch der akustische Druck, der in dimensionsloser Form von der Größenordnung $O(M)$ ist, in der Impulsgleichung vernachlässigt werden. Der hydrodynamische Druck $P^{(2)}$ übernimmt die Aufgabe des Druckes aus den inkompressiblen Erhaltungsgleichungen. Da er wesentlich kleiner als der thermodynamische Druck ist, bei dimensionsloser Betrachtungsweise von der Größenordnung $O(M^2)$, kann er in der thermischen Zustandsgleichung vernachlässigt werden, so dass sich die Dichte umgekehrt proportional zur Temperatur verhält

$$\rho(t, x_\alpha) = \frac{P^{(0)}(t)}{RT(t, x_\alpha)}. \quad (3.9)$$

Hierbei bezeichnet R die spezifische Gaskonstante des Fluids.

3.2. Elektromagnetische Felder

Elektromagnetische Felder werden durch die Maxwell'schen Gleichungen beschrieben, vgl. z. B. [88, 45]. Diese lauten in Differentialform für $\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$

$$\partial_\alpha \times H_\beta = J_\gamma + \partial_t D_\gamma \quad (3.10)$$

$$\partial_\alpha \times E_\beta = -\partial_t B_\gamma \quad (3.11)$$

$$\partial_\alpha B_\alpha = 0 \quad (3.12)$$

$$\partial_\alpha D_\alpha = q_v. \quad (3.13)$$

mit der magnetischen Feldstärke H_α , der elektrischen Stromdichte J_α , der elektrischen Verschiebungsdichte D_α , der elektrischen Feldstärke E_α , der magnetischen Induktion B_α und der Raumladung q_v . An den Grenzflächen 1 und 2 zwischen elektrisch oder

magnetisch verschiedenen Medien müssen folgende Randbedingungen erfüllt werden:

$$n_\alpha \times (E_{2\beta} - E_{1\beta})|_S = 0 \quad (3.14)$$

$$n_\alpha \cdot (D_{2\alpha} - D_{1\alpha})|_S = q_l|_S \quad (3.15)$$

$$n_\alpha \times (H_{2\beta} - H_{1\beta})|_S = J_{s\gamma}|_S \quad (3.16)$$

$$n_\alpha \cdot (B_{2\alpha} - B_{1\alpha})|_S = 0. \quad (3.17)$$

Dabei bezeichnet n_α den Normaleneinheitsvektor der Grenzfläche von Medium 1 in Medium 2, q_l eine in der Grenzfläche liegende Flächenladungsdichte und $J_{s\gamma}$ eine in der Grenzfläche befindliche Flächenstromdichte. Schließlich werden noch die folgenden Materialgleichungen berücksichtigt

$$\begin{aligned} D_\alpha &= \epsilon_0 E_\alpha + P_\alpha & D_\alpha &= \epsilon E_\alpha \\ B_\alpha &= \mu_0 (H_\alpha + M_{F\alpha}) & \text{bei linearen Medien} & B_\alpha = \mu H_\alpha \\ J_\alpha &= \kappa_e E_\alpha \end{aligned} \quad (3.18)$$

mit der dielektrischen Polarisation P_α , der Dielektrizitätskonstanten des Mediums $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_{\text{rel}}$, der relativen Dielektrizitätskonstanten ϵ_{rel} , der Magnetisierung $M_{F\alpha}$, der Permeabilitätskonstanten des Mediums $\mu = \mu_0 \mu_{\text{rel}}$, der relativen Permeabilitätskonstanten μ_{rel} und der elektrischen Leitfähigkeit κ_e . Eine Magnetisierung $M_{F\alpha}$ entsteht, wenn die magnetischen Momente der Atome und Elektronen, aus denen der makroskopische Körper aufgebaut ist, so ausgerichtet sind, dass ihre Summe nicht verschwindet.

3.2.1. Elektrostatistisches Potentialfeld

In der vorliegenden Arbeit werden lediglich elektrostatische Felder betrachtet, d. h. es treten nur ruhende, also unbewegte Ladungen auf. Als Voraussetzung wird weiterhin angenommen, dass bei vorhandenem elektrostatischem Feld kein Magnetfeld vorliegt. Treten in dem elektrischen Feld E_α Quellen oder Senken auf, so handelt es sich um, ebenfalls unbewegte, Ladungen. Für die Rotation des Feldes gilt $\partial_\alpha \times E_\beta = 0$, daher ist es wirbelfrei und lässt sich durch ein skalares elektrisches Potential beschreiben

$$E_\alpha = -\partial_\alpha \phi. \quad (3.19)$$

Da nur die Potentialdifferenz eine physikalische Bedeutung hat, wird ϕ bei einer positiven Ladung positiv und bei einer negativen Ladung negativ gesetzt. Das negative Vorzeichen in Gl. (3.19) stellt die Konvention sicher, dass die Feldlinien von einer positiven zu einer negativen Ladung verlaufen. Positive Ladungen sind also Quellen und negative Senken

des elektrischen Feldes. Gl. (3.13) kann somit zu einer Poisson-Gleichung

$$\partial_{\alpha\alpha}\phi = -\frac{q_v}{\epsilon_0} \quad (3.20)$$

zur Bestimmung des elektrischen Potentials umgeformt werden mit der Raumladung q_v und der Dielektrizitätskonstanten des Vakuums ϵ_0 . Für jedes berücksichtigte Medium muss eine eigene Poisson-Gleichung aufgestellt werden. Da in dieser Arbeit nur ein ladungsfreier Raum betrachtet wird, verschwindet die rechte Seite von Gl. (3.20) und das elektrische Potential kann aus der Laplace-Gleichung

$$\partial_{\alpha\alpha}\phi = 0 \quad (3.21)$$

bestimmt werden.

Ein Körper heißt elektrisch leitend, falls sich elektrische Ladungen in ihm bewegen können. Innerhalb eines solchen Körpers sind die Ladungen nur dann ruhend, wenn keine Ladungsquellen oder -senken auftreten. Außerdem existiert dort kein elektrisches Feld, das entsprechende Potential ist also konstant. Daher genügt es, das Potential außerhalb des Körpers zu bestimmen. Nach Gl. (3.14) muss die Oberfläche S des Körpers eine Äquipotentialfläche des elektrischen Potentials sein und die Randbedingung wird zu

$$\phi|_S = \phi_0 = \text{const} \quad (3.22)$$

mit positivem oder negativem ϕ_0 , je nachdem welche Ladungen der Körper trägt. Wird ein dielektrischer Körper, also ein Isolator, betrachtet, so bleibt eine auf diesem aufgebrachte elektrische Ladung an einer festen Position. An der Oberfläche S des Körpers zwischen den Medien 1 und 2 ergeben sich als Randbedingungen für das innere Potential ϕ_1 und das äußere ϕ_2 :

$$\phi_1|_S = \phi_2|_S \quad \text{und} \quad \epsilon (n_\alpha \cdot \partial_\alpha \phi_1)|_S - (n_\alpha \cdot \partial_\alpha \phi_2)|_S = q_a \quad (3.23)$$

mit der freien Flächenladung q_a und dem Normaleneinheitsvektor n_α .

3.2.2. Magnetostatisches Potentialfeld

Es werden nur magnetostatische, also zeitlich konstante Felder, die von konstanten Strömen erzeugt werden, betrachtet. Da die magnetische Induktion nach Gl. (3.12) divergenzfrei ist, kann sie durch ein Vektorpotential $A_{m\gamma}$ mit $B_\alpha = \partial_\beta \times A_{m\gamma}$ beschrieben werden. Einsetzen in Gl. (3.10) liefert dann eine vektorwertige Poisson-Gleichung

$$\partial_{\beta\beta} A_{m\alpha} = -J_\alpha. \quad (3.24)$$

Liegt der stromführende Leiter außerhalb des betrachteten ladungsfreien Gebietes, so kann die magnetische Feldstärke $H_\alpha = -\partial_\alpha \psi$ durch ein skalares Potential ψ dargestellt werden, wobei das negative Vorzeichen als Konvention gewählt wird, um die Analogie zum elektrischen Feld zu erhalten. Gl. (3.12) wird damit zu einer Laplace-Gleichung

$$\partial_{\alpha\alpha}\psi = 0. \quad (3.25)$$

Die Randbedingungen für die Potentiale an einer Trennfläche S zwischen einem festen Medium 1 und einem Fluid 2 können nach [32] angegeben werden durch

$$(n_\alpha \times \partial_\beta \psi_1)|_S = (n_\alpha \times \partial_\beta \psi_2)|_S \quad (3.26)$$

$$\mu_0 (-n_\alpha \cdot \partial_\alpha \psi_1 + n_\alpha \cdot M_{F\alpha})|_S = -\mu_2 (n_\alpha \cdot \partial_\alpha \psi_2)|_S \quad (3.27)$$

mit dem Normalenvektor n_α , der Magnetisierung des Festkörpers $M_{F\alpha}$ und der Permeabilitätskonstanten μ_2 des Fluids.

4. Numerische Lösungsverfahren der Partikelphase

Ziel der Arbeit ist die numerische Simulation von Partikeltransport, Deposition und Ausbildung von Strukturen an Oberflächen unter Berücksichtigung der Gasphase und externer elektrischer, magnetischer oder thermophoretischer Kräfte. Um die Dendriten-artigen Strukturen auflösen zu können werden die Partikel als einzelne starre Kugeln betrachtet. Die Voraussetzung einer geringen Konzentration erlaubt die Vernachlässigung der Wechselwirkungen zwischen sich bewegenden Partikeln. Die Partikelbewegung wird beeinflusst durch die Strömung als Trägergas und als Quelle für Reibungskräfte, durch externe elektrische oder magnetische Kräfte und bei Nanopartikeln durch die Brownsche Diffusion. Die Partikeltrajektorien werden durch die Integration der Lagrangeschen Bewegungsgleichung bestimmt, sowohl für die Translations- als auch im Falle magnetischer Kräfte für die Rotationsbewegung.

4.1. Runge-Kutta-Verfahren

Spielt die Brownsche Diffusion bei der Partikelbewegung keine Rolle, beschreiben die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen, Gl. (2.1) und Gl. (2.2), den Transport eines einzelnen Partikels. Dabei handelt es sich um gewöhnliche Differentialgleichungen, die von der Zeit abhängen. Ein effizientes numerisches Lösungsverfahren ist das explizite vierstufige klassische Runge-Kutta-Verfahren

$$\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x}^n \quad \mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{v}^n \quad (4.1)$$

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} + \alpha_k \Delta t \mathbf{v}^{(k-1)} \quad \mathbf{v}^{(k)} = \mathbf{v}^{(k-1)} + \alpha_k \Delta t \mathbf{Res}^{(k-1)}, \quad k = 1, \dots, 4 \quad (4.2)$$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^{(4)} \quad \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^{(4)} \quad (4.3)$$

mit den Koeffizienten

$$\alpha_1 = \frac{1}{6}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{3}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{3}, \quad \alpha_4 = \frac{1}{6} \quad (4.4)$$

und dem Residuum

$$\mathbf{Res}^{(k)} = \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}^{(k)}. \quad (4.5)$$

Der Index n bezeichnet die zeitliche Diskretisierung und (k) bezeichnet die k -te Runge-Kutta-Stufe. $\mathbf{F}_{\text{ext}}^{(k)}$ stellt eine externe Kraft an der Position $\mathbf{x}^{(k)}$ dar. Die zu deren Berechnung benötigten skalaren und vektorwertigen Feldvariablen, wie z. B. die Fluid-dichte ρ , die Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} oder das elektrische Potential ϕ , werden aus den stationären Lösungen der Lattice-Boltzmann-Methoden für die entsprechende Position $\mathbf{x}^{(k)}$ mit Hilfe der acht nächsten Nachbarn des kartesischen Gitters trilinear interpoliert, vgl. dazu Anhang A.3.2. Insgesamt ist das Verfahren von vierter Ordnung in der Zeit $O(\Delta t^4)$, siehe [79].

4.2. Partikel-Monte-Carlo-Methode

Für sehr kleine Partikeldurchmesser kann der Einfluss der Brownschen Bewegung auf den Partikeltransport nicht mehr vernachlässigt werden. Da sowohl ihre Richtung als auch ihr Betrag zufallsverteilt sind, wird sie durch eine unstetige Funktion beschrieben. Diese Funktion kann nicht mittels des im vorangegangenen Abschnitts beschriebenen Verfahrens integriert werden, stattdessen muss auf ihre statistischen Eigenschaften zurückgegriffen werden.

Die Herleitung des Partikel-Monte-Carlo-(PMC)-Verfahrens wird im folgenden Unterabschnitt ausführlich für die Translationsbewegung beschrieben. Da die Vorgehensweise bei der Rotationsbewegung analog erfolgt, werden in dem entsprechenden Abschnitt lediglich die Ergebnisse angegeben.

4.2.1. Translatorische Bewegung

Die Translationsbewegung einzelner Partikel bei denen die Brownsche Bewegung nicht vernachlässigt werden kann, wird durch die Langevin-Gleichungen (2.8) und (2.9) beschrieben.

Diese Gleichungen können in ein inhomogenes lineares System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung transformiert werden

$$\begin{pmatrix} \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} \\ \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\beta_t \mathbf{I} & 0 \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}}_{\triangleq M_1} \begin{pmatrix} \mathbf{v}(t) \\ \mathbf{x}(t) \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} \beta_t \mathbf{u}(t, \mathbf{x}(t)) + \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}(t))/m_p \\ 0 \end{pmatrix}}_{\triangleq M_2} + \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{A}(t) \\ 0 \end{pmatrix}}_{\triangleq M_3} \quad (4.6)$$

mit der Einheitsmatrix \mathbf{I} . Die Widerstandskraft wird aus der Summe der externen Kräfte herausgenommen und einzeln aufgeführt, da sie linear von der Partikelgeschwindigkeit \mathbf{v} abhängt. Zur Bestimmung der Geschwindigkeit und der Position muss dieses System für jedes einzelne Partikel über die Zeit integriert werden.

Unter der Voraussetzung, dass der Zeitschritt $\Delta t = t - t_0$ in der Größenordnung der Relaxationszeit $\tau_{\text{Rt}} = \frac{1}{\beta_t}$ aus Gl. (2.25) liegt oder genügend klein ist, können die Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} und die externen Kräfte \mathbf{F}_{ext} als konstant über den Zeitschritt angenommen werden. Damit kann das System (4.6) ohne den Zufallsterm \mathbf{M}_3 analytisch gelöst werden, z. B. mit Hilfe der Methode der Variation der Konstanten, vgl. z. B. [86]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}(t) \\ \mathbf{x}(t) \end{pmatrix} = \Phi(t) \left[\begin{pmatrix} \mathbf{v}(t_0) \\ \mathbf{x}(t_0) \end{pmatrix} + \int_{t_0}^t \Phi^{-1}(\tau) \mathbf{M}_2(\tau) d\tau \right] \quad (4.7)$$

mit der Matrix $\Phi(t)$ und ihrer Inversen

$$\Phi(t) = \begin{pmatrix} e^{-\beta_t(t-t_0)} \mathbf{I} & 0 \\ \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \mathbf{I} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \Phi^{-1}(t) = \begin{pmatrix} e^{\beta_t(t-t_0)} \mathbf{I} & 0 \\ \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{\beta_t(t-t_0)}) \mathbf{I} & \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Die Lösung mit der Definition des Termes \mathbf{M}_2 , der inversen Relaxationszeit β_t aus Gl. (2.24) und der Partikelmasse m_p lautet dann

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}(t) \\ \mathbf{x}(t) \end{pmatrix} = \mathbf{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{v}(t_0) \\ \mathbf{u}(t_0) + \frac{1}{m_p \beta_t} \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t_0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{x}(t_0) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

mit

$$\mathbf{B}(t) = \begin{pmatrix} e^{-\beta_t(t-t_0)} \mathbf{I} & (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \mathbf{I} \\ \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \mathbf{I} & [(t - t_0) - \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)})] \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Der stochastische Anteil, also die Integrale

$$\int_{t_0}^t \mathbf{M}_3(\tau) d\tau = \begin{pmatrix} \int_{t_0}^t e^{-\beta_t(t-\tau)} \mathbf{A}(\tau) d\tau \\ \frac{1}{\beta_t} \int_{t_0}^t (1 - e^{-\beta_t(t-\tau)}) \mathbf{A}(\tau) d\tau \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(t) \\ \mathbf{B}_2(t) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

können wegen der un stetigen zufallsverteilten Funktion $\mathbf{A}(t)$ nicht direkt integriert werden. Die Vektoren \mathbf{B}_1 und \mathbf{B}_2 werden weiter unten erläutert. Unter den Voraussetzungen,

dass $A(t)$ unabhängig von v ist und dass zeitliche Variationen in $A(t)$ deutlich schneller verlaufen als diejenigen in v , kann zur Berechnung eine bivariate Normalverteilung mit der Dichtefunktion

$$w_D(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \left[4\pi^2 (EG - H^2)\right]^{-3/2} \exp \left[\frac{-(G(\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}) - 2H(\mathbf{X} \cdot \mathbf{V}) + E(\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}))}{2(EG - H^2)} \right], \quad (4.12)$$

verwendet werden, vgl. [7]. Die Dichtefunktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der sich ein Partikel, das zum Zeitpunkt t_0 an der Position $\mathbf{x}(t_0)$ mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t_0)$ und den auf es wirkenden Kräfte $\mathbf{F}_{\text{ext}}(t_0)$ angeordnet ist, zum Zeitpunkt t am Ort $\mathbf{x}(t)$ mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$ befindet. Die von t abhängigen Koeffizienten können beschrieben werden durch

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t) &= \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(t_0) - \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \mathbf{v}(t_0) \\ &\quad - \left(t - t_0 - \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \right) \left(\mathbf{u}(t_0) + \frac{1}{m_p \beta_t} \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t_0) \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(t) &= \mathbf{v}(t) - e^{-\beta_t(t-t_0)} \mathbf{v}(t_0) \\ &\quad - (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)}) \left(\mathbf{u}(t_0) + \frac{1}{m_p \beta_t} \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}(t_0) \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$G(t) = \frac{k_b T}{m_p} (1 - e^{-2\beta_t(t-t_0)}) \quad (4.15)$$

$$H(t) = \frac{k_b T}{m_p \beta_t} (1 - e^{-\beta_t(t-t_0)})^2 \quad (4.16)$$

$$E(t) = \frac{k_b T}{m_p \beta_t^2} (2\beta_t(t-t_0) - 3 + 4e^{-\beta_t(t-t_0)} - e^{-2\beta_t(t-t_0)}) \quad (4.17)$$

mit der Temperatur T und der Boltzmann-Konstanten k_b . Für die Erwartungswerte über das gewählte Zeitintervall $[t_0, t]$ der stochastischen Ortsverschiebung \mathbf{X} , der Geschwindigkeitsverschiebung \mathbf{V} und deren Skalarprodukte gilt

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{X} \rangle (t) &= 0, & \langle \mathbf{V} \rangle (t) &= 0, \\ \langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{X} \rangle (t) &= 3E(t), & \langle \mathbf{V} \cdot \mathbf{V} \rangle (t) &= 3G(t), & \langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{V} \rangle (t) &= 3H(t) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Daraus folgt für die Kovarianz der Zufallsgrößen $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{V}(t)$

$$\text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{V})(t) = \langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{V} \rangle (t) - \langle \mathbf{X} \rangle (t) \cdot \langle \mathbf{V} \rangle (t) = 3H(t). \quad (4.19)$$

Da $3H(t) > 0 \quad \forall t > t_0$ gilt, sind $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{V}(t)$ korreliert.

Nach [18] können die stochastischen Verschiebungen \mathbf{X} und \mathbf{V} durch zufallsverteilte

Funktionen der Zeit $\mathbf{B}_1(t)$, $\mathbf{B}_2(t)$, vgl. Gl. (4.11), mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (t) &= \langle \mathbf{B}_2 \rangle (t) = 0, & \langle \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2 \rangle (t) &= 3H(t), \\ \langle \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_1 \rangle (t) &= 3G(t), & \langle \mathbf{B}_2 \cdot \mathbf{B}_2 \rangle (t) &= 3E(t) \end{aligned} \quad (4.20)$$

ersetzt werden. Die Brownsche Bewegung kann demnach durch bivariat normalverteilte Zufallszahlen mit vorgegebenen Erwartungswerten $\langle \mathbf{B}_1 \rangle (t)$, $\langle \mathbf{B}_2 \rangle (t)$, Varianzen $\text{var}(\mathbf{B}_1)(t)$, $\text{var}(\mathbf{B}_2)(t)$ und Kovarianz beschrieben werden.

Diese Zufallszahlen können mit Hilfe der Cholesky-Zerlegung der Kovarianzmatrix folgendermaßen erzeugt werden: Gesucht ist ein Zufallsvektor $(\mathbf{B}_1(\Delta t), \mathbf{B}_2(\Delta t))^T$ mit den vorgegebenen Eigenschaften (4.20) im Zeitintervall $[t_0, t_0 + \Delta t]$. Unter diesen Voraussetzungen kann die symmetrische und positiv definite Kovarianzmatrix

$$\Sigma = 3 \begin{pmatrix} G(\Delta t) \mathbf{I} & H(\Delta t) \mathbf{I} \\ H(\Delta t) \mathbf{I} & E(\Delta t) \mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

aufgestellt werden, ihre Cholesky-Zerlegung \mathbf{L} mit der Eigenschaft $\mathbf{L}\mathbf{L}^T = \Sigma$ lautet

$$\mathbf{L} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} \sigma_v \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \frac{\sigma_{vx}}{\sigma_v} \mathbf{I} & \sqrt{\sigma_x^2 - \frac{\sigma_{vx}^2}{\sigma_v^2}} \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

wobei

$$\sigma_v = \sqrt{G(\Delta t)} = \sqrt{\frac{k_b T}{m_p} (1 - e^{-2\beta_t \Delta t})} \quad (4.23)$$

$$\sigma_x = \sqrt{E(\Delta t)} = \frac{1}{\beta_t} \sqrt{\frac{k_b T}{m_p} (2\beta_t \Delta t - 3 + 4e^{-\beta_t \Delta t} - e^{-2\beta_t \Delta t})} \quad (4.24)$$

$$\sigma_{vx} = H(\Delta t) = \frac{k_b T}{m_p \beta_t} (1 - e^{-\beta_t \Delta t})^2. \quad (4.25)$$

Dann ist der Vektor

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\Delta t) \\ \mathbf{B}_2(\Delta t) \end{pmatrix} = \mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_2 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

bivariat normalverteilt mit den gewünschten Eigenschaften, falls die Komponenten von

$z_{s,1}$ und $z_{s,2}$ standardnormalverteilt sind. Denn es gilt

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\Delta t) \\ \mathbf{B}_2(\Delta t) \end{pmatrix} \right\rangle &= \left\langle \mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_2 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} \right\rangle \\ &= \mathbf{L} \underbrace{\left\langle \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} \right\rangle}_{=(\mathbf{0},\mathbf{0})^T} + \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_2 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_2 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.27)$$

und

$$\begin{aligned} \text{var} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\Delta t) \\ \mathbf{B}_2(\Delta t) \end{pmatrix} \right) &= \text{cov} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\Delta t) \\ \mathbf{B}_2(\Delta t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\Delta t) \\ \mathbf{B}_2(\Delta t) \end{pmatrix} \right) \\ &= \left\langle \left[\mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} \right] \left[\mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \\ \langle \mathbf{B}_1 \rangle (\Delta t) \end{pmatrix} \right]^T \right\rangle \\ &= \left\langle \left[\mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} \right] \left[\mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} \right]^T \right\rangle \\ &= \left\langle \left[\mathbf{L} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix}^T \mathbf{L}^T \right] \right\rangle \\ &= \mathbf{L} \left\langle \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_{s,1} \\ z_{s,2} \end{pmatrix}^T \right\rangle \mathbf{L}^T \\ &= \mathbf{L} \mathbf{L}^T = \mathbf{L} \mathbf{L}^T = \mathbf{\Sigma}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Außerdem ist $(\mathbf{B}_1(\Delta t), \mathbf{B}_2(\Delta t))^T$ als Linearkombination von standardnormalverteilten Zufallszahlen $(z_{s,1}, z_{s,2})^T$ selbst normalverteilt, siehe Satz A.2.1 aus Anhang A.2. Dies liefert schließlich folgende Formulierung der Brownschen Bewegung:

$$\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \mathbf{M}_3(\tau) d\tau = \begin{pmatrix} \sigma_v z_{s,1} \\ \frac{\sigma_{vx}}{\sigma_v} z_{s,1} + \sqrt{\sigma_x^2 - \frac{\sigma_{vx}^2}{\sigma_v^2}} z_{s,2} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Insgesamt ergibt sich dann die Lösung von (4.6) durch Superposition von Gl. (4.9) und Gl. (4.29) zu

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ \mathbf{x}^{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{B}^n \begin{pmatrix} \mathbf{v}^n \\ \mathbf{u}^n + \frac{1}{m_p \beta_t} \sum \mathbf{F}_{\text{ext}}^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{x}^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_v z_{s,1} \\ \frac{\sigma_{vx}}{\sigma_v} z_{s,1} + \sqrt{\sigma_x^2 - \frac{\sigma_{vx}^2}{\sigma_v^2}} z_{s,2} \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

mit

$$\mathbf{B}^n = \begin{pmatrix} e^{-\beta_t \Delta t} \mathbf{I} & (1 - e^{-\beta_t \Delta t}) \mathbf{I} \\ \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t \Delta t}) \mathbf{I} & [\Delta t - \frac{1}{\beta_t} (1 - e^{-\beta_t \Delta t})] \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Dabei ist n der Index der zeitlichen Diskretisierung. Die Terme σ_v , σ_x und σ_{vx} hängen unter der Voraussetzung einer isothermen Strömung nur vom Zeitschritt Δt ab.

Die beschriebene Methode ist nur gültig für Zeitschritte Δt in einem Bereich

$$\tau_s \ll \Delta t \approx \tau_{Rt} = \beta_t^{-1} < \tau_k. \quad (4.32)$$

Einerseits muss Δt kleiner sein als die charakteristische Relaxationszeit der äußeren Kräfte τ_k , d. h. die maximale Zeitspanne, in der die äußeren Kräfte als konstant angenommen werden können. Andererseits müssen innerhalb des Zeitschrittes genügend Moleküle mit dem Partikel kollidieren, um die statistischen Mittelungen zu erfüllen. Das bedeutet, dass Δt deutlich größer als die mittlere Kollisionszeit $\tau_s \triangleq \nu_s^{-1}$ zwischen Partikel und Molekülen sein muss. Die Kollisionsfrequenz ν_s kann mittels gaskinetischer Ansätze, siehe z. B. [37, 85], bestimmt werden aus

$$\nu_s = \pi d_{fp}^2 n_f \sqrt{\frac{4k_b T}{\pi m_{fp}^*}}. \quad (4.33)$$

Dabei bezeichnet $d_{fp} = \frac{d_f + d_p}{2}$ den über ein Gasmolekül und ein Partikel gemittelten Durchmesser, n_f die Teilchendichte der Gasmoleküle und $m_{fp}^* = \frac{m_f m_p}{m_f + m_p}$ die mittlere Masse. Abb. 4.1 zeigt den Verlauf der mittleren Kollisionszeit zwischen Stickstoff-Molekülen und Nickel-Partikeln für verschiedene Partikeldurchmesser bei einer Temperatur von 298.15 K und zwei unterschiedlichen Drücken von 101 325 Pa bzw. 200 Pa. Ist der Druck in der Größenordnung von einem bar und gilt für den Zeitschritt $\Delta t \gtrsim 10^{-10}$ s, so ist das obige Verfahren für die Simulation des Partikeltransportes mit Durchmessern $d_p > 5$ nm geeignet. Liegt ein niedriger Druck vor, muss bei der Wahl des Zeitschrittes berücksichtigt werden, dass die mittlere Kollisionszeit um einige Zehnerpotenzen größer ist.

4.2.2. Rotatorische Bewegung

Die Bewegungsgleichungen für die Winkelgeschwindigkeit ω der Partikel, Gl. (2.12), und für die Drehwinkel θ , Gl. (2.13), sind in Abschnitt 2.2 beschrieben worden. Die Gleichung

$$\mathbf{m} = M_D(\theta) \mathbf{m}_0 \quad (4.34)$$

beschreibt die Drehung des magnetischen Partikelmoments \mathbf{m} . Da \mathbf{m} fest mit dem Partikel verbunden ist, stellt Gl. (4.34) auch die Drehung des Partikels dar. Nach Abschnitt 2.5

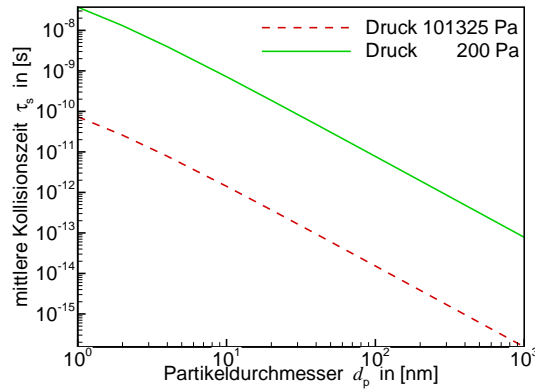


Abbildung 4.1.: Mittlere Kollisionszeit τ_s von Stickstoff-Molekülen mit Nickel-Partikeln aufgetragen über dem Partikeldurchmesser d_p bei einer Temperatur von 298.15 K und einem Druck von 101 325 Pa bzw. 200 Pa.

muss unter den in dieser Arbeit betrachteten Partikeldurchmessern und Strömungsbedingungen die Rotationsbewegung kugelförmiger Partikel lediglich bei Berücksichtigung magnetischer Eigenschaften betrachtet werden, so dass die Drehbewegung an das magnetische Partikelmoment gekoppelt werden kann. Es bezeichnet m_0 das magnetische Moment des Partikels bei der Initialisierung der Drehbewegung und M_D die von den Euler-Winkeln θ abhängende Drehmatrix. Die durch den Index n symbolisierte zeitlich diskretisierte Lösung der Bewegungsgl. (2.12) und (2.13) ergeben sich durch analoges Vorgehen wie im vorherigen Abschnitt, d. h. Transformation auf ein System und Integration über einen Zeitschritt $\widetilde{\Delta t} \approx \tau_{Rr} = \beta_r^{-1}$ mit τ_{Rr} , β_r aus Gl. (2.73) zu

$$\begin{pmatrix} \omega^{n+1} \\ \theta^{n+1} \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{B}}^n \begin{pmatrix} \omega^n \\ \omega_f^n + \frac{1}{I_p \beta_r} \sum \mathbf{T}_{\text{ext}}^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \theta^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_\omega z_{s,3} \\ \frac{\sigma_{\omega r}}{\sigma_\omega} z_{s,3} + \sqrt{\sigma_r^2 - \frac{\sigma_{\omega r}^2}{\sigma_\omega^2}} z_{s,4} \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{B}}^n = \begin{pmatrix} e^{-\beta_r \widetilde{\Delta t}} \mathbf{I} & (1 - e^{-\beta_r \widetilde{\Delta t}}) \mathbf{I} \\ \frac{1}{\beta_r} (1 - e^{-\beta_r \widetilde{\Delta t}}) \mathbf{I} & \left[\widetilde{\Delta t} - \frac{1}{\beta_r} (1 - e^{-\beta_r \widetilde{\Delta t}}) \right] \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Hierbei werden die Drehgeschwindigkeit des Partikels mit ω , diejenige des Fluids mit ω_f , die Drehwinkel mit θ und die externen Momente mit \mathbf{T}_{ext} bezeichnet. Die Brownsche Rotation wird beschrieben durch standardnormalverteilte Zufallszahlen $z_{s,3}$ und $z_{s,4}$ multipliziert mit den bei einer isothermen Strömung nur vom Zeitschritt abhängenden

Konstanten σ_ω , σ_r und $\sigma_{\omega r}$

$$\sigma_\omega = \sqrt{\frac{k_b T}{I_p} (1 - e^{-2\beta_r \widetilde{\Delta t}})} \quad (4.37)$$

$$\sigma_r = \frac{1}{\beta_r} \sqrt{\frac{k_b T}{I_p} (2\beta_r \widetilde{\Delta t} - 3 + 4e^{-\beta_r \widetilde{\Delta t}} - e^{-2\beta_r \widetilde{\Delta t}})} \quad (4.38)$$

$$\sigma_{\omega r} = \frac{k_b T}{I_p \beta_r} (1 - e^{-2\beta_r \widetilde{\Delta t}})^2. \quad (4.39)$$

Aufgrund des geringen Trägheitsmomentes von Nanopartikeln wird die Relaxationszeit τ_{Rr} und damit auch der Zeitschritt der Integration sehr klein, in der Größenordnung von $O(10^{-10} \text{ s})$.

Die Drehung des Partikels, die durch die Rotation des magnetischen Momentes \mathbf{m} dargestellt wird, erfolgt durch Multiplikation der Drehmatrix \mathbf{M}_D^n , die in jedem Zeitschritt n für die berechneten drei Euler-Winkel θ^n aufgestellt wird, mit dem zur Zeit der Initialisierung ausgerichteten magnetischen Partikelmoment \mathbf{m}_0 :

$$\mathbf{m}^n = \mathbf{M}_D^n \mathbf{m}_0 \quad (4.40)$$

mit

$$\mathbf{M}_D^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_x^n & -\sin \theta_x^n \\ 0 & \sin \theta_x^n & \cos \theta_x^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_y^n & 0 & \sin \theta_y^n \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta_y^n & 0 & \cos \theta_y^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_z^n & -\sin \theta_z^n & 0 \\ \sin \theta_z^n & \cos \theta_z^n & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

5. Lattice-BGK-Methode

Die Lattice-Boltzmann-Methode ist das Basisverfahren für die Kontinuumsmodelle zur Beschreibung der auf die Partikel wirkenden Kräfte und Momente, d. h. sowohl für die Beschreibung viskoser Strömungen durch die Navier-Stokes-Gleichungen¹, als auch zur Lösung der Poisson-Gleichungen elektrischer und magnetischer Felder.

Die Lattice-Boltzmann-Methoden sind relativ neue, numerische Entwicklungen, die aus der Lattice-Gas-Methode, vgl. [31], entstanden sind. Letztere basiert auf der Simulation eines vereinfachten molekularen Systems, bei dem sich die Moleküle auf einem diskreten Gitter bewegen. Jeder Knoten wird durch einen Zustand „0“ oder „1“ bzw. „frei“ oder „belegt“ beschrieben. Treffen zwei oder mehr Moleküle an einem Knoten aufeinander, so werden sie mittels eines Masse und Impuls erhaltenden Kollisionsmodells auf die umliegenden Knoten verteilt. Makroskopische Größen wie Dichte oder Strömungsgeschwindigkeit werden als Momente am jeweiligen Knoten bestimmt. Ein wesentlicher Nachteil dieser Methode ist das statistische Rauschen, das wegen der Beschränkung auf lediglich zwei mögliche Zustände pro Knoten und der damit verbundenen Statistik während des Kollisionsschrittes auftritt. Um dieses in den makroskopischen Größen zu eliminieren, muss über große Teilmengen des Gitters, große Zeitintervalle und verschiedene Ausgangskonfigurationen gemittelt werden.

Diese Probleme führten zur Entwicklung der Lattice-Boltzmann-Methoden, siehe [67, 46]. Neben der oben aufgeführten historischen Betrachtungsweise können sie auch als diskrete Form der Boltzmann-Gleichung aufgefasst werden, die sich aus Finite-Differenzen-Ansätzen für Ort und Zeit entlang jeder diskreten Geschwindigkeitsrichtung ergeben, vgl. [42, 43]. Das zugrunde liegende Gitter, welches den Phasenraum approximiert ist kartesisch äquidistant, als molekulare Geschwindigkeitsrichtungen werden neben den Koordinatenachsen zusätzlich die Diagonalen berücksichtigt. In jedem Knoten wird für jede molekulare Geschwindigkeitsrichtung eine diskrete Verteilungsfunktion in Form einer Fließkommazahl angesetzt. Die makroskopischen Variablen werden durch Momentenbildung bestimmt.

Anstelle des komplexen Kollisionsintegrals der Boltzmann-Gleichung wird das mathematisch einfachere BGK-Modell aus [4] verwendet. Damit ergibt sich die Lattice-BGK-

¹Ein weiteres Verfahren zur Lösung der Erhaltungsgleichungen viskoser Strömungen, die sogenannte Monte-Carlo-Direktsimulationsmethode (DSMC) wird im Anhang A.6 kurz erläutert. Dieses eignet sich besonders bei verdünnten Gasen oder bei Körpergeometrien in Größenordnung der mittleren freien Weglänge.

(LBGK)-Methode, vgl. [74, 9]. Aus der kinetischen Gastheorie ist bekannt, siehe z. B. [85, 37], dass trotz des einfachen Ansatzes wesentliche Eigenschaften der Boltzmann-Gleichung wie die Erfüllung des H -Theorems und die Herleitung der Euler-, Navier-Stokes- und Burnett-Gleichungen erhalten bleiben. Dieses Kollisionsmodell kann als Relaxationsansatz bzgl. einer lokalen Gleichgewichtsverteilung, die von einer Maxwell-Verteilungsfunktion unter der Voraussetzung kleiner Machzahlen abgeleitet worden ist, interpretiert werden. Unter der, bei den in dieser Arbeit vorliegenden Problemen gegebenen Voraussetzung kleiner Mach- und Strouhalzahlen ist das Verfahren von zweiter Ordnung genau in Raum und Zeit.

Im Allgemeinen kann das Konzept der Lattice-Boltzmann-Methoden als Klasse von Lösungsmethoden für partielle Differentialgleichungen angesehen werden, die über ein weites Feld an Anwendungsmöglichkeiten verfügt. In den folgenden Abschnitten werden einige Beispiele näher beschrieben. Eine detaillierte Übersicht über Lattice-Boltzmann-Methoden wird z. B. in [90] gegeben.

Wesentliche numerische Vorteile der kinetischen Lattice-Boltzmann-Methoden gegenüber „konventionellen“ Finite-Differenzen- oder Finite-Volumen-Methoden sind der einfache Algorithmus, die Verwendung quasi-kartesischer Gitter, die explizite Formulierung der Methode und der hohe Parallelisierungsgrad, vgl. dazu Abschnitt A.5, was zusammen effiziente Lösungsverfahren ermöglicht. Besonderer Vorteil der Lattice-Boltzmann-Methode für die vorliegenden Problemstellungen ist die große Flexibilität bei komplexen Geometrien, die durch die Einführung der boundary-fitting Randbedingungen nach [23] und das Konzept der lokalen Gitterverfeinerung nach [24] ermöglicht wird. Damit ist die Lattice-Boltzmann-Methode besonders geeignet, die Wechselwirkungen zwischen Strömungs- oder Kraftfelder und sich ändernden Körperkonturen durch bereits deponierte Partikel zu berücksichtigen, wie dies typischerweise bei den hier betrachteten Depositionsvorgängen auftritt. Die in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsbeispiele behandeln überwiegend Strömungen mit niedrigen Fluidgeschwindigkeiten und geometrischen Abmessungen, die auf kleine Reynoldszahlen führen. Beides sind ideale Voraussetzung für eine effiziente Anwendung dieser Methode.

In den folgenden Abschnitten sind die Ausführungen in kartesischer Tensornotation gehalten, vgl. Anhang A.1.

5.1. Grundlagen der LBGK-Methode

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der LBGK-Methode mit zusätzlichen, vorläufig noch unbestimmten, Parametern \tilde{P} , $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ und $s_{pi}^{(k)}$ beschrieben. Diese werden schließlich so gewählt, dass das LBGK-Modell die gewünschten Gleichungen approximiert, vgl. [39, 40].

Der diskrete Phasenraum wird durch ein quasi-kartesisches Gitter der Schrittweite δ_x

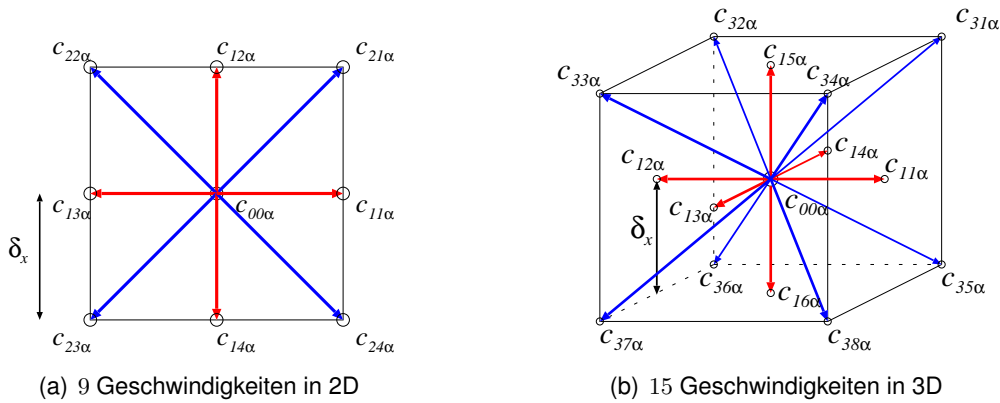


Abbildung 5.1.: Diskreter Phasenraum

repräsentiert. Die molekularen Geschwindigkeiten $c_{pi\alpha}$, $\alpha = 1, 2, 3$ zeigen in Richtung i der Koordinaten und Diagonalen mit dem Betrag $c_0\sqrt{p}$. Hierbei ist $p = c_{pi\alpha}^2/c_0^2$ das Betragsquadrat bezogen auf die molekulare Einheitsgeschwindigkeit c_0 . Abb. 5.1 zeigt den diskreten Phasenraum für 2D mit 9 Geschwindigkeiten, $p = 0, 1, 2$ und für 3D mit 15 Geschwindigkeiten und $p = 0, 1, 3$. Die Zeitschrittweite δ_t ist gegeben durch $\delta_t = \delta_x/c_0$. Die Änderung im Ort x_α , $\alpha = 1, 2, 3$ und in der Zeit t einer diskreten Geschwindigkeitsverteilungsfunktion f_{pi} an einem Knoten im Phasenraum in Richtung pi der molekularen Geschwindigkeit wird beschrieben durch

$$\underbrace{f_{pi}(t + \delta_t, x_\alpha + \delta_t c_{pi\alpha}) - f_{pi}(t, x_\alpha)}_{\text{Transport}} = \omega \delta_t \underbrace{[f_{pi}^{\text{eq}}(t, x_\alpha) - f_{pi}(t, x_\alpha)]}_{\text{Kollision}} + \underbrace{\delta_t s_{pi}^{(k)}}_{\text{Quellterme}}. \quad (5.1)$$

Diese sogenannte Lattice-Boltzmann-Gleichung kann mittels Taylorreihen in eine partielle Differentialgleichung

$$\underbrace{\partial_t f_{pi}(t, x_\beta) + c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi}(t, x_\beta)}_{\text{Transport}} = \omega \underbrace{[f_{pi}^{\text{eq}}(t, x_\beta) - f_{pi}(t, x_\beta)]}_{\text{Kollision}} + \underbrace{s_{pi}^{(k)}}_{\text{Quellterme}} \quad (5.2)$$

transformiert werden. $\Omega \triangleq \omega \delta_t$ ist die dimensionslose Kollisionsfrequenz, die auch als Relaxationsparameter betrachtet werden kann. Gl. (5.1) kann unterteilt werden in einen Kollisions- und einen Transportschritt, dargestellt durch zwei Verteilungsfunktionen, f_{pi}^{prae} vor und f_{pi}^{post} nach dem Kollisionsschritt. Umgesetzt wird dies im Algorithmus durch die folgenden Schritte:

$$f_{pi}^{\text{post}}(t, x_\alpha) - f_{pi}^{\text{prae}}(t, x_\alpha) = \Omega [f_{pi}^{\text{eq}}(t, x_\alpha) - f_{pi}^{\text{prae}}(t, x_\alpha)] \quad (5.3)$$

$$f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha + \delta_t c_{pi\alpha}) = f_{pi}^{\text{post}}(t, x_\alpha). \quad (5.4)$$

Ein Vorteil der Gl. (5.2) gegenüber den Navier-Stokes-Gleichungen (3.1) und (3.2) mit dem in der Strömungsgeschwindigkeit nicht-linearen Konvektionsterm ist der im Phasenraum lineare Konvektionsoperator. Die zusätzlichen Terme $s_{pi}^{(k)} = s_{pi}^{(1)} + \delta_t s_{pi}^{(2)}$ werden später beschrieben. Ω ist mit der kinematischen Viskosität ν des Fluids und somit auch mit der Reynoldszahl verknüpft durch

$$\nu = \left(\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \delta_t, \quad (5.5)$$

wobei $c_s = \sqrt{RT}$ die isotherme Schallgeschwindigkeit beschreibt. Aus der physikalischen Bedingung $\nu > 0$ lässt sich der Stabilitätsbereich der LBGK-Methode für die Werte $0 < \Omega < 2$ ableiten. In der Praxis treten jedoch nicht-lineare Instabilitäten auf, falls $\Omega > \Omega^{\max} \approx 1.98$ und somit die Viskosität gegen Null, also gegen den Grenzfall einer reibungsfreien Strömung, geht. Diese Grenze hängt nach [82] mit der Bedingung der Positivität der Verteilungsfunktionen, $f_{pi} > 0$, zusammen, die insbesondere bei großen Gradienten der Momente nicht immer erfüllt ist. Das Verfahren kann in diesem Falle durch Wahl eines kleineren Gitterabstands δ_x und damit nach Gl. (5.5) mit einem kleineren Relaxationsparameter bei gleicher Viskosität stabilisiert werden. Eine weitere Möglichkeit der Stabilisierung besteht darin, bei vorgegebener Strömungsgeschwindigkeit u_0 die künstliche Machzahl $M^{\text{art}} = \frac{u_0}{c_0}$ zu erhöhen, um somit c_0 zu verkleinern und ein verringertes Ω wählen zu können. Dabei muss jedoch beachtet werden, dass die Bedingung $M^{\text{art}} \ll c_s/c_0$ eingehalten wird, die eine Voraussetzung für die Stabilität des Verfahrens ist. In der Praxis haben sich Werte von $M^{\text{art}} \leq 0.3$ als geeignet erwiesen.

Für „konventionelle“ Finite-Differenzen- oder Finite-Volumen-Verfahren zur Lösung einer skalaren passiven Konvektions-Gleichung muss als Stabilitätskriterium zur Wahl des diskreten Zeitschritts die Courant-Friedrichs-Levi-(CFL)-Bedingung

$$\text{CFL} = |u_\alpha| \frac{\delta_t}{\delta_x} \leq 1 \quad (5.6)$$

erfüllt werden, siehe z. B. [48]. $|u_\alpha|$ bezeichnet den Betrag der Konvektionsgeschwindigkeit. Der Transportterm der LBGK-Gleichung (5.2) und damit auch der Gl. (5.1) bezieht sich auf die molekulare Geschwindigkeit c_0 . Es folgt also

$$\text{CFL} = c_0 \frac{\delta_t}{\delta_x} = c_0 \frac{\delta_x/c_0}{\delta_x} = 1, \quad (5.7)$$

d. h. die CFL-Bedingung ist für die LBGK-Gleichung generell erfüllt.

Die Gleichgewichtsverteilungsfunktion f_{pi}^{eq} hängt von den lokalen Momenten \tilde{P} und u_α ab und ist das diskrete Analogon einer Maxwell-Verteilungsfunktion. Letztere kann unter der Voraussetzung kleiner Machzahlen $M = |u_\alpha|/c_s$ in eine Taylorreihe bis zur Ordnung zwei um die lokale Geschwindigkeit u_α entwickelt werden. Für schwach kompressible

Strömungen mit nahezu konstanter Dichte $\rho = \rho_0 + \delta\rho \approx \rho_0$ ergibt sich damit nach [41]

$$f_{pi}^{\text{eq}}(\tilde{P}, u_\alpha) = t_p \left(\tilde{P} + \frac{\rho_0 u_\alpha c_{pi\alpha}}{c_s^2} + \frac{\rho_0 u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right) + f_{pi}^{\text{eq,corr}} \quad (5.8)$$

mit den Gewichtungsfaktoren t_p . Die lokalen makroskopischen Größen \tilde{P} und u_β werden durch das diskrete nullte und erste Moment der Verteilungsfunktion an jedem Gitterknoten bestimmt

$$\tilde{P}(t, x_\alpha) = \sum_{p,i} f_{pi}(t, x_\alpha) \quad \text{und} \quad \rho_0 u_\beta(t, x_\alpha) = \sum_{p,i} c_{p,i\beta} f_{pi}(t, x_\alpha). \quad (5.9)$$

Da diese Momente auch von der Gleichgewichtsverteilung erfüllt werden müssen, ergeben sich zwei Gleichungen zur Bestimmung der noch unbekanntenen Terme c_s und t_p :

$$\sum_{p,i} f_{pi}^{\text{eq}} \stackrel{!}{=} \tilde{P} \Rightarrow \sum_{p,i} t_p = 1 \quad (5.10)$$

und

$$\sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{\text{eq}} \stackrel{!}{=} \rho_0 u_\alpha \Rightarrow \sum_{p,i} t_p \frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta}}{c_s^2} = \delta_{\alpha\beta} \quad (5.11)$$

mit dem Kroneckersymbol $\delta_{\alpha\beta} = 0$ für $\alpha \neq \beta$ und $\delta_{\alpha\beta} = 1$ für $\alpha = \beta$. Eine weitere Gleichung ergibt sich aus dem zweiten Moment

$$\begin{aligned} \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{\text{eq}} &\stackrel{!}{=} \tilde{P} c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho_0 u_\alpha u_\beta + \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{\text{eq,corr}} \\ &\Rightarrow \sum_{p,i} t_p \frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta} c_{pi\gamma} c_{pi\theta}}{c_s^4} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\theta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\theta} + \delta_{\alpha\theta} \delta_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Aus Symmetriegründen verschwinden die Summen für eine ungerade Anzahl an Geschwindigkeitskomponenten, also

$$\sum_{p,i} t_p \frac{c_{pi\alpha}}{c_s^2} = 0 \quad (5.13)$$

und

$$\sum_{p,i} t_p \frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta} c_{pi\gamma}}{c_s^4} = 0. \quad (5.14)$$

Die drei Gl. (5.10), (5.11) und (5.12) ergeben ein lineares Gleichungssystem, das

eindeutig lösbar ist. Mit der molekularen Einheitsgeschwindigkeit c_0 liefert es für 2D

$$c_s = c_0/\sqrt{3}, \quad t_0 = \frac{4}{9}, \quad t_1 = \frac{1}{9}, \quad t_2 = \frac{1}{36} \quad (5.15)$$

und für 3D

$$c_s = c_0/\sqrt{3}, \quad t_0 = \frac{2}{9}, \quad t_1 = \frac{1}{9}, \quad t_3 = \frac{1}{72}. \quad (5.16)$$

Damit sind die allgemeinen Parameter des Basis-Verfahrens bestimmt. Die zusätzlichen Terme \tilde{P} , $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ und $s_{pi}^{(k)}$ müssen in Abhängigkeit von den zu lösenden Gleichungen jeweils individuell angepasst werden.

5.2. Konsistenz der LBGK-Gleichung mit den Navier-Stokes-Gleichungen

In diesem Abschnitt wird die Konsistenz der LBGK-Gleichung mit den Navier-Stokes-Gleichungen gezeigt. Die freien Parameter $s_{pi}^{(1)}$, $s_{pi}^{(2)}$, $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ und \tilde{P} müssen jeweils den entsprechenden Modellgleichungen angepasst werden, wie in den nachfolgenden Abschnitten näher erläutert wird. Im Hinblick auf die Erweiterung des LBGK-Modells auf unstrukturierte Gitter, vgl. Anhang A.4, wird eine allgemeine Formulierung gewählt. Dazu wird das Verhältnis zwischen physikalischer Transportgeschwindigkeit c_0 und numerischer Geschwindigkeit δ_x/δ_t , also die CFL-Zahl, variabel angesetzt. Die Konsistenzüberprüfung für das Standard-LBGK-Modell auf uniformen kartesischen Gittern ergibt sich bei der Wahl von $\text{CFL} = 1$.

Betrachtet wird nun die LBGK-Gleichung (5.2) in Form einer partiellen Differentialgleichung. Der Quellterm wird dargestellt als

$$s_{pi}^{(k)} = s_{pi}^{(1)} + \delta_t s_{pi}^{(2)}. \quad (5.17)$$

Mit dem charakteristischen Gitterabstand δ_x als Referenzlänge L , der Dichte ρ_0 und der molekularen Einheitsgeschwindigkeit c_0 kann Gl. (5.2) unter Berücksichtigung der Beziehungen

$$\begin{aligned} f_{pi} &= f_{pi}^* \rho_0, & c_{pi\alpha} &= c_{pi\alpha}^* c_0, & \omega &= \omega^* \frac{c_0}{L}, \\ t &= t^* \frac{L}{c_0}, & x_\beta &= x_\beta^* L, & s_{pi}^{(k)} &= s_{pi}^{*,(k)} \frac{\rho_0 c_0}{L} \end{aligned} \quad (5.18)$$

in ihre dimensionslose Form

$$\underbrace{\partial_t^* f_{pi}^*(t^*, x_\beta^*) + c_{pi\alpha}^* \partial_\alpha^* f_{pi}^*(t^*, x_\beta^*)}_{\mathcal{T}(f_{pi}^*)} = \underbrace{\omega^* [f_{pi}^{*,eq}(t^*, x_\beta^*) - f_{pi}^*(t^*, x_\beta^*)]}_{\mathcal{K}(f_{pi}^*)} + \underbrace{s_{pi}^{*,(k)}}_{\mathcal{Q}} \quad (5.19)$$

überführt werden. Dabei bezeichnet $\mathcal{T}(\cdot)$ den Transport-, $\mathcal{K}(\cdot)$ den Kollisionsoperator und \mathcal{Q} die Quellterme. Die dimensionslose Kollisionsfrequenz $\omega^* = \omega L/c_0$ kann als Damköhlerzahl interpretiert werden, die das Verhältnis der charakteristischen Zeiten des Transportes L/c_0 und der Kollision $1/\omega$ beschreibt.

Der dimensionslose Zeitschritt wird definiert als

$$\delta_t^* = \frac{\delta_t c_0}{L} = \frac{\delta_t c_0}{\underbrace{\delta_x}_{=CFL}} \frac{\delta_x}{L} \triangleq \epsilon \ll 1. \quad (5.20)$$

Damit ergibt sich der dimensionslose Ortsschritt in den kartesischen Richtungen α zu

$$\delta_{x,pi\alpha}^* = \frac{c_{pi\alpha}^* \epsilon}{CFL}. \quad (5.21)$$

Auf uniformen Gittern, d. h. $CFL = 1$, stimmt ϵ mit dem dimensionslosen Gitterabstand $\delta_x^* = \frac{\delta_x}{L} = \frac{\delta_t c_0}{L} = \epsilon$ überein. Dieser Größenordnungsparameter wird als diskrete Knudsenzahl bezeichnet.

Im folgenden entfällt zur Vereinfachung der Schreibweise der obere Index \star zur Kennzeichnung der dimensionslosen Größen. Die räumliche Diskretisierung mit dem Index j und die zeitliche Diskretisierung mit dem Index n der Gl. (5.19) erfolgt mittels Differenzenansätzen von erster Ordnung. Konvektions- und Kollisionsschritt werden getrennt behandelt. Dargestellt wird dies durch die prae- und post-Kollisionswerte der Verteilungsfunktionen:

1. $\frac{f_{pi,j}^{prae} - f_{pi,j}^{post,n}}{\epsilon} + c_{pi\alpha} \frac{f_{pi,j}^{post,n} - f_{pi,j-1}^{post,n}}{\delta_{x,pi\alpha}} = 0$
2. $\frac{f_{pi,j}^{post,n+1} - f_{pi,j}^{prae}}{\epsilon} = \omega [f_{pi,j}^{prae,eq} - f_{pi,j}^{prae}] + s_{pi,j}^{(k),n}$

Die zweite Gleichung wird nach $f_{pi,j}^{post,n+1}$ aufgelöst, wobei die prae-Kollisionsverteilungsfunktionen mit Hilfe der ersten Gleichung ersetzt werden. Da die prae-Kollisionsverteilungsfunktionen nur Hilfsfunktionen sind und im folgenden nicht mehr benötigt werden, fällt im weiteren Verlauf der Index $post$ weg. Die Terme $f_{pi,j}^{n+1}$ und $f_{pi,j-1}^n$ werden durch Taylorreihen, entwickelt um die Zeitstufe n und den Punkt j , mit einem Abbruchfehler

der Ordnung $O(\epsilon^3)$ approximiert:

$$f_{pi,j}^n = f_{pi,j}^n - \frac{\epsilon}{\text{CFL}} c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi,j}^n + \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{\text{CFL}^2} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} \partial_{\alpha\beta} f_{pi,j}^n + O(\epsilon^3) \quad (5.22)$$

und

$$f_{pi,j}^{n+1} = f_{pi,j}^n + \epsilon \partial_t f_{pi,j}^n + \frac{\epsilon^2}{2} \partial_{tt} f_{pi,j}^n + O(\epsilon^3). \quad (5.23)$$

Nach ein wenig algebraischer Umformung ergibt sich die Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t f_{pi,j}^n + c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi,j}^n - \omega [f_{pi,j}^{\text{eq},n} - f_{pi,j}^n] \\ = -\frac{\epsilon}{2} \partial_{tt} f_{pi,j}^n - \epsilon c_{pi\alpha} \partial_{t\alpha} f_{pi,j}^n \\ + \epsilon \left(\frac{1}{2\text{CFL}} - 1 \right) c_{pi\alpha} c_{pi\beta} \partial_{\alpha\beta} f_{pi,j}^n + s_{pi,j}^{(k),n} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.24)$$

Da sich alle Terme auf die Zeitstufe n und auf den Punkt j beziehen, werden diese Indizes im folgenden aus Übersichtlichkeitsgründen vernachlässigt.

Mittels der Chapman-Enskog-Entwicklung wird die allgemeine Verteilungsfunktion in die lokale Gleichgewichtsverteilung und einen Nichtgleichgewichtsanteil $f_{pi}^{(1)}$, der kleine Abweichungen vom Gleichgewicht beschreibt, angenähert

$$f_{pi} = f_{pi}^{\text{eq}} + \epsilon f_{pi}^{(1)} + O(\epsilon^2). \quad (5.25)$$

$f_{pi}^{(1)}$ wird auch als Störverteilung bezeichnet. Sie ergibt sich als Näherung in erster Ordnung durch Einsetzen des Ansatzes (5.25) in Gl. (5.24), anschließendem Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ und unter Berücksichtigung von $\omega\epsilon \triangleq \Omega = O(1)$ zu

$$f_{pi}^{(1)} = -\frac{1}{\Omega} \left(\partial_t f_{pi}^{\text{eq}} + c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi}^{\text{eq}} - s_{pi}^{(k)} \right) + O(\epsilon). \quad (5.26)$$

Die Kombination der Gl. (5.24), (5.25) und (5.26) liefert schließlich folgende Gleichung bis zur Fehlerordnung $O(\epsilon^2)$

$$\begin{aligned} \partial_t f_{pi}^{\text{eq}} + c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi}^{\text{eq}} + \Omega f_{pi}^{(1)} + \epsilon \left(\partial_t f_{pi}^{(1)} + c_{pi\alpha} \partial_\alpha f_{pi}^{(1)} \right) \\ = s_{pi}^{(k)} - \frac{\epsilon}{2} \partial_{tt} f_{pi}^{\text{eq}} - \epsilon c_{pi\alpha} \partial_{t\alpha} f_{pi}^{\text{eq}} - \epsilon \left(1 - \frac{1}{2\text{CFL}} \right) c_{pi\alpha} c_{pi\beta} \partial_{\alpha\beta} f_{pi}^{\text{eq}} \\ + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Die dimensionslosen makroskopischen Momente

$$\tilde{P}^* c_s^{*,2} = \frac{\tilde{P} c_s^2}{\rho_0 c_0^2}, \quad \rho^* u_\alpha^* = \rho u_\alpha \frac{1}{\rho_0 c_0} \quad \text{und} \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (5.28)$$

die im folgenden zur Vereinfachung ohne den Index \star dargestellt werden, ergeben sich nach den Gl. (5.10) – (5.12). Das Moment dritter Ordnung lautet

$$\sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} = \rho c_s^2 (u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\alpha \delta_{\beta\gamma}). \quad (5.29)$$

Da die Invarianten \tilde{P} und ρu_α schon für die Gleichgewichtsverteilung erfüllt werden, folgt für die entsprechenden Momente der Störverteilung

$$\sum_{p,i} f_{pi}^{(1)} = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{(1)} = 0. \quad (5.30)$$

Dagegen verschwindet das zweite Moment der Störverteilung nicht, also

$$\sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{(1)} \neq 0, \quad (5.31)$$

und wird mit Gl. (5.26) ersetzt durch

$$\sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{(1)} = -\frac{1}{\Omega} \left(\partial_t \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{\text{eq}} + \partial_\gamma \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} - \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} s_{pi}^{(k)} \right). \quad (5.32)$$

Unter diesen Voraussetzungen können jetzt die auf molekularen Skalen normierten Gleichungen für die makroskopischen Momente formuliert werden. Die Gleichung des nullten Momentes ergibt sich aus Gl. (5.27) durch Summation über pi der jeweiligen Terme und anschließendem Vertauschen von Summation und Differentiation zu

$$\begin{aligned} \partial_t \sum_{p,i} f_{pi}^{\text{eq}} + \partial_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{\text{eq}} + \Omega \sum_{p,i} f_{pi}^{(1)} + \epsilon \left(\partial_t \sum_{p,i} f_{pi}^{(1)} + \partial_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{(1)} \right) \\ = \sum_{p,i} s_{pi}^{(k)} - \frac{\epsilon}{2} \partial_{tt} \sum_{p,i} f_{pi}^{\text{eq}} - \epsilon \partial_{t\alpha} \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{\text{eq}} \\ - \epsilon \left(1 - \frac{1}{2 \text{ CFL}} \right) \partial_{\alpha\beta} \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{\text{eq}} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.33)$$

und liefert nach einigen Umformungen die folgende Gleichung

$$\begin{aligned}
\partial_t \tilde{P} + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= \sum_{p,i} s_{pi}^{(k)} - \epsilon \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\Omega} \right) \partial_{tt} \tilde{P} - \epsilon \left(1 - \frac{2}{\Omega} \right) \partial_{t\alpha} (\rho u_\alpha) \\
&- \epsilon \left(1 - \frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2 \text{CFL}} \right) \partial_{\alpha\beta} \left(\tilde{P} c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta + \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} f_{pi}^{\text{eq,corr}} \right) \\
&+ O(\epsilon^2). \tag{5.34}
\end{aligned}$$

In der Kontinuitätsgleichung auf molekularen Skalen tritt im Vergleich zu derjenigen eines inkompressiblen Fluids, vgl. Gl. (3.1), zusätzlich eine Zeitableitung des nullten Momentes auf. Dieser Term ist, wie später gezeigt wird, nach Umskalierung auf Strömungsskalen von der Größenordnung des Abbruchfehlers.²

Analog ergibt sich die Gleichung des ersten Momentes zu

$$\begin{aligned}
\partial_t \sum_{p,i} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} + \partial_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} + \Omega \sum_{p,i} c_{pi\gamma} f_{pi}^{(1)} \\
+ \epsilon \left(\partial_t \sum_{p,i} c_{pi\gamma} f_{pi}^{(1)} + \partial_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} f_{pi}^{(1)} \right) \\
= \sum_{p,i} c_{pi\gamma} s_{pi}^{(k)} - \frac{\epsilon}{2} \partial_{tt} \sum_{p,i} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} - \epsilon \partial_{t\alpha} \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} \\
- \epsilon \left(1 - \frac{1}{2 \text{CFL}} \right) \partial_{\alpha\beta} \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\beta} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq}} + O(\epsilon^2) \tag{5.35}
\end{aligned}$$

Diese wird nach Einsetzen von Gl. (5.32) umgeformt zu

$$\begin{aligned}
\partial_t (\rho u_\gamma) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\gamma + \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq,corr}} \right) + \partial_\alpha (\tilde{P} c_s^2) \\
- \partial_\alpha \left(\frac{1}{\Omega} - 1 + \frac{1}{2 \text{CFL}} \right) \epsilon c_s^2 [\partial_\alpha (\rho u_\gamma) + \partial_\gamma (\rho u_\alpha) + \delta_{\alpha\gamma} \partial_\theta (\rho u_\theta)] \\
= \sum_{p,i} c_{pi\gamma} s_{pi}^{(1)} + \epsilon \sum_{p,i} c_{pi\gamma} s_{pi}^{(2)} - \frac{\epsilon}{\Omega} \left(\partial_t \sum_{p,i} c_{pi\gamma} s_{pi}^{(1)} + \partial_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} s_{pi}^{(1)} \right) \\
+ \epsilon \left(\frac{2}{\Omega} - 1 \right) \partial_{t\alpha} \left(\tilde{P} c_s^2 \delta_{\alpha\gamma} + \rho u_\alpha u_\gamma + \sum_{p,i} c_{pi\alpha} c_{pi\gamma} f_{pi}^{\text{eq,corr}} \right) \\
+ \epsilon \left(\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right) \partial_{tt} (\rho u_\gamma) + O(\epsilon^2). \tag{5.36}
\end{aligned}$$

²Die Methode der künstlichen Kompressibilität zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen verwendet einen ähnlichen Ansatz in der Kontinuitätsgleichung, um die Einstellung des Druckes zu erleichtern, siehe z. B. [49].

Die linken Seiten von Gl. (5.34) und (5.36) ähneln stark der Kontinuitäts- bzw. der Impulserhaltungsgleichung eines schwach kompressiblen Fluids. Störend wirken noch die Terme $\propto \epsilon$. Der Term, der dem Verformungsanteil des Spannungstensors ähnelt, ist ebenfalls proportional zu ϵ und somit eine Größenordnung kleiner als der Konvektionsterm. Sein Vorfaktor

$$\left(\frac{1}{\Omega} - 1 + \frac{1}{2\text{CFL}}\right) \epsilon c_s^2 \triangleq \eta \quad (5.37)$$

entspricht dann einer dimensionslosen dynamischen Zähigkeit.

Die charakteristische Zeitskala $t_{\text{Strömung}}$ über die sich eine schwach kompressible Strömung ändert ist proportional der Strömungsgeschwindigkeit u_0 . Ein Maß dafür ist die Strouhalzahl $St = \frac{L/u_0}{t_{\text{Strömung}}}$, die in diesem Fall von der Größenordnung $O(1)$ ist. Um die richtige Zeitskala zu erfassen werden Gl. (5.34) und (5.36) durch Änderung der Referenzgeschwindigkeit von c_0 auf u_0 skaliert. Damit werden die dimensionslosen makroskopischen Größen zu

$$\begin{aligned} \tilde{P}^* &= \tilde{P} = \widehat{P}, & \rho^* &= \frac{1}{\rho_0} \rho = \hat{\rho}, \\ u_\alpha^* &= \frac{1}{c_0} u_\alpha = M^{\text{art}} \hat{u}_\alpha, & s_{pi}^{*,(k)} &= \frac{L}{\rho_0 c_0} s_{pi}^{(k)} = M^{\text{art}} \hat{s}_{pi}^{(k)}, \\ \partial_t^* &= \frac{L}{c_0} \partial_t = M^{\text{art}} \hat{\partial}_t, & \partial_\alpha^* &= L \partial_\alpha = \hat{\partial}_\alpha \end{aligned} \quad (5.38)$$

mit der Machzahl $M^{\text{art}} = \frac{u_0}{c_0}$, die nicht auf die Schallgeschwindigkeit c_s sondern auf die molekulare Geschwindigkeit c_0 bezogen wird. Beide sind von der gleichen Größenordnung, also $O(c_0/c_s) = O(1)$. Der Index \star kennzeichnet die dimensionslosen Größen auf molekularen und das Dach $\widehat{}$ diejenigen auf Strömungsskalen. Vorausgesetzt wird im folgenden noch $\partial_t \widehat{P} \propto M^{\text{art}2}$, $\hat{s}_{pi}^{(k)} \propto M^{\text{art}}$ und $\sum_{p,i} \widehat{c_{pi\alpha}^* c_{pi\beta}^* f_{pi}^{\text{eq,corr}}} \propto M^{\text{art}2}$, was bei der Wahl der Parameter zu beachten ist.

Die umskalierte Gleichung des nullten Momentes lautet dann

$$\begin{aligned} M^{\text{art}3} \hat{\partial}_t \widehat{P} + M^{\text{art}} \hat{\partial}_\alpha (\hat{\rho} \hat{u}_\alpha) &= M^{\text{art}} \sum_{p,i} \hat{s}_{pi}^{(k)} - M^{\text{art}4} \epsilon \left(\frac{\epsilon}{2} - \frac{1}{\Omega} \right) \hat{\partial}_{tt} \widehat{P} \\ &\quad - M^{\text{art}2} \epsilon \left(1 - \frac{2}{\Omega} \right) \hat{\partial}_{t\alpha} (\hat{\rho} \hat{u}_\alpha) \\ &\quad - M^{\text{art}2} \epsilon \left(1 - \frac{1}{2\text{CFL}} - \frac{1}{\Omega} \right) \hat{\partial}_{\alpha\beta} \left(\widehat{P} c_s^{*2} \delta_{\alpha\beta} \right. \\ &\quad \left. + \hat{\rho} \hat{u}_\alpha \hat{u}_\beta + \sum_{p,i} \widehat{c_{pi\alpha}^* c_{pi\beta}^* f_{pi}^{\text{eq,corr}}} \right) \\ &\quad + O(M^{\text{art}2} \epsilon^2). \end{aligned} \quad (5.39)$$

Die Voraussetzung $M^{\text{art}} \sim \epsilon \ll 1$ und Division durch M^{art} liefern schließlich

$$\hat{\partial}_\alpha (\hat{\rho} \hat{u}_\alpha) = \sum_{p,i} \hat{s}_{pi}^{(1)} + O(\epsilon^2). \quad (5.40)$$

Für die Gleichung des ersten Momentes ergibt sich in analoger Weise

$$\begin{aligned} M^{\text{art}2} \hat{\partial}_t (\hat{\rho} \hat{u}_\gamma) + M^{\text{art}2} \hat{\partial}_\alpha \left(\hat{\rho} \hat{u}_\alpha \hat{u}_\gamma + \sum_{p,i} \widehat{c_{pi\alpha}^* c_{pi\gamma}^* f_{pi}^{\text{eq,corr}}} \right) + M^{\text{art}2} \hat{\partial}_\gamma \left(\widehat{P} c_s^{*2} \right) \\ - M^{\text{art}} \hat{\partial}_\alpha \left(\frac{1}{\Omega} - 1 + \frac{1}{2 \text{CFL}} \right) \epsilon c_s^{*2} \left[\hat{\partial}_\alpha (\hat{\rho} \hat{u}_\gamma) + \hat{\partial}_\gamma (\hat{\rho} \hat{u}_\alpha) + \delta_{\alpha\gamma} \hat{\partial}_\theta (\hat{\rho} \hat{u}_\theta) \right] \\ = M^{\text{art}} \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} + M^{\text{art}} \epsilon \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(2)} \\ - M^{\text{art}} \frac{\epsilon}{\Omega} \left(\hat{\partial}_t \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} + \hat{\partial}_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha}^* c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} \right) \\ + M^{\text{art}3} \epsilon \left(\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right) \hat{\partial}_{tt} (\hat{\rho} \hat{u}_\gamma) \\ + M^{\text{art}3} \epsilon \left(\frac{2}{\Omega} - 1 \right) \hat{\partial}_{t\alpha} \left(\widehat{P} c_s^{*2} \delta_{\alpha\gamma} + \hat{\rho} \hat{u}_\alpha \hat{u}_\gamma + \sum_{p,i} \widehat{c_{pi\alpha}^* c_{pi\gamma}^* f_{pi}^{\text{eq,corr}}} \right) \\ + O(M^{\text{art}2} \epsilon^2). \end{aligned} \quad (5.41)$$

Die Schallgeschwindigkeit c_s^* bleibt dabei weiterhin auf die molekulare Referenzgeschwindigkeit bezogen, da $c_s^* = c_s/c_0 = O(1)$. Bei erneuter Annahme von $M^{\text{art}} \sim \epsilon \ll 1$ und Division durch $M^{\text{art}2}$ erhält man somit

$$\begin{aligned} \hat{\partial}_t (\hat{\rho} \hat{u}_\gamma) + \hat{\partial}_\alpha \left(\hat{\rho} \hat{u}_\alpha \hat{u}_\gamma + \sum_{p,i} \widehat{c_{pi\alpha}^* c_{pi\gamma}^* f_{pi}^{\text{eq,corr}}} \right) + \hat{\partial}_\gamma \left(\widehat{P} c_s^{*2} \right) \\ - \hat{\partial}_\alpha \left(\frac{1}{\Omega} - 1 + \frac{1}{2 \text{CFL}} \right) \frac{\epsilon}{M^{\text{art}}} c_s^{*2} \left[\hat{\partial}_\alpha (\hat{\rho} \hat{u}_\gamma) + \hat{\partial}_\gamma (\hat{\rho} \hat{u}_\alpha) + \delta_{\alpha\gamma} \hat{\partial}_\theta (\hat{\rho} \hat{u}_\theta) \right] \\ = \frac{1}{M^{\text{art}}} \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} + \frac{\epsilon}{M^{\text{art}}} \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(2)} \\ - \frac{\epsilon}{M^{\text{art}}} \frac{1}{\Omega} \left(\hat{\partial}_t \sum_{p,i} c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} + \hat{\partial}_\alpha \sum_{p,i} c_{pi\alpha}^* c_{pi\gamma}^* \hat{s}_{pi}^{(1)} \right) \\ + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (5.42)$$

Damit ist der „Reibungsanteil“ proportional zu $\frac{\epsilon}{M^{\text{art}}} = O(1)$, ist also von gleicher Größenordnung wie der Konvektionsterm. Die Herleitung der Quellterme $s_{pi}^{(k)}$ werden in den jeweiligen Abschnitten genauer erläutert.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die diskrete LBGK-Gleichung (5.1) die den Modellen entsprechenden kontinuierlichen Gleichungen bis auf die Fehlerordnung $O(\epsilon^2)$ in Raum und Zeit approximieren, wenn für die künstliche Machzahl vorausgesetzt wird $M^{\text{art}} \sim \epsilon \ll 1$. Je kleiner ϵ und damit δ_x ist, desto kleiner wird der Approximationsfehler der diskreten Gleichungen. Gleichzeitig wird damit aber auch die räumliche Auflösung feiner, der Zeitschritt verringert sich und der Rechenaufwand des Verfahrens erhöht sich, so dass ein geeigneter Kompromiss zwischen Diskretisierungsfehler und Rechenaufwand gefunden werden muss.

5.3. LBGK-Methode für viskose, inkompressible Strömungen

Viskose, inkompressible Strömungen werden durch die Navier-Stokes-Gl. (3.1) und (3.2) beschrieben, die hier mit Hilfe der LBGK-Methode gelöst werden sollen. Die als Basis dienende Lösungsmethode ist in Abschnitt 5.1 ausführlich erläutert worden. Die drei noch offenen Parameter $s_{pi}^{(k)}$, $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ und \tilde{P} müssen jedoch noch bestimmt werden. Im Falle der dreidimensionalen inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in kartesischen Koordinaten aus Abschnitt 3.1.1 werden sie folgendermaßen gewählt:

$$s_{pi}^{(1)} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.43)$$

$$\delta_t s_{pi}^{(2)} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.44)$$

$$f_{pi}^{\text{eq,corr}} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.45)$$

$$\tilde{P} = P^{(2)}/c_s^2. \quad (5.46)$$

Dabei bezeichnet $P^{(2)}$ den hydrodynamischen Druck aus Abschnitt 3.1.2.

In Abschnitt 5.2 ist gezeigt worden, dass dieses Lösungsverfahren die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen approximiert. Mit den gewählten Parametern ergibt sich die Kontinuitätsgleichung (5.40) in dimensionsbehafteter Form bei konstanter Dichte ρ_0 zu

$$\partial_\alpha u_\alpha = O(\delta_t^2) \quad (5.47)$$

und die Impulserhaltungsgleichung wird nach Einsetzen der Kontinuitätsgleichung in Gl. (5.42) und Division durch ρ_0 zu

$$\partial_t u_\gamma + u_\alpha \partial_\alpha u_\gamma = -\partial_\gamma P^{(2)}/\rho_0 + \partial_\alpha (\nu \partial_\alpha u_\gamma) + O(\delta_t^2) \quad (5.48)$$

mit der kinematischen Zähigkeit ν aus Gl. (5.5).

5.4. LBGK-Methode für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte

Das spezielle Gleichungssystem zur Beschreibung von Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte ist in Abschnitt 3.1.2 näher beschrieben worden. Die zugrunde liegende Physik ist in [27] in ein Lattice-BGK-Verfahren umgesetzt worden. Zusätzliche skalare Transportgleichungen, wie z. B. die Energiegleichung zur Berechnung des Temperaturfeldes oder die Gleichungen der Massenbrüche der verschiedenen Spezies bei chemisch reagierenden Strömungen, können mit dem Lattice-BGK-Verfahren gekoppelt werden.

Das Verfahren beruht auf einem ähnlichen Ansatz zur Berechnung einer Verteilungsfunktion f , wie er in Abschnitt 5.1 erläutert wurde. Damit die LBGK-Methode die Gleichungen beschreibt, werden die freien Parameter folgendermaßen gewählt:

$$s_{pi}^{(1)} = \begin{cases} \partial_t \rho & \text{für } p = 0, i = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.49)$$

$$\delta_t s_{pi}^{(2)} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.50)$$

$$f_{pi}^{\text{eq,corr}} = \frac{t_p}{c_s^2} \nu u_\alpha \partial_\beta \rho \left(\frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \quad \forall p, i \quad (5.51)$$

$$\tilde{P} = \left(P^{(2)} + \frac{2}{3} \eta \partial_\alpha u_\alpha + \nu \partial_\alpha (\rho u_\alpha) \right) / c_s^2. \quad (5.52)$$

In der diskreten Gleichgewichtsverteilung f_{pi}^{eq} wird die sich ändernde Dichte berücksichtigt, sie ist dann gegeben durch

$$f_{pi}^{\text{eq}}(\tilde{P}, u_\alpha) = t_p \left(\tilde{P} + \frac{\rho u_\alpha c_{pi\alpha}}{c_s^2} + \frac{\rho u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right) + f_{pi}^{\text{eq,corr}}. \quad (5.53)$$

Die Korrekturverteilung $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ passt den Reibungsterm aus Gl. (5.42) an denjenigen aus Gl. (3.6) hinsichtlich der variablen Dichte an.

Das nullte Moment \tilde{P} beschreibt hier eine Kombination aus dem hydrodynamischen Druck und der Divergenz der Geschwindigkeiten und des Flusses, wodurch der Spannungstensor der makroskopischen Impulsgleichung korrigiert wird, vgl. Gl. (5.42). Lediglich am Gebietsrand muss es durch den zweiten und dritten Summanden korrigiert werden, innerhalb des Rechengebietes genügt die Bestimmung des Momentes nach (5.9), da der Druck $P^{(2)}$ explizit nur in der Impulsgleichung auftritt. Das erste Moment repräsentiert den Fluss

$$\rho(t, x_\alpha) u_\beta(t, x_\alpha) = \sum_{p,i} c_{pi\beta} f_{pi}(t, x_\alpha). \quad (5.54)$$

Die dimensionslose Kollisionsfrequenz Ω ist mit der kinematische Viskosität verknüpft durch

$$\nu = \frac{\eta(T)}{\rho} = \left(\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right) \delta_t c_s^2. \quad (5.55)$$

Offensichtlich ist sie jetzt variabel über dem gesamten Integrationsbereich, da sie auch bei Annahme einer temperaturunabhängigen dynamischen Viskosität η über die Dichte von der Temperatur abhängt.

5.5. LBGK-Methode für Konvektions-Diffusions-Gleichungen

Konvektions-Diffusions-Gleichungen treten z. B. als Modellgleichungen für die Energie- oder Speziesgleichungen bei chemisch reagierenden Strömungen im Bereich kleiner Machzahlen mit variabler Dichte auf. Zur Lösung dieser Gleichungen kann das folgende LBGK-Verfahren, ähnlich dem aus Abschnitt 5.3, angewendet werden.

Die Gleichgewichtsverteilung wird nur bis zum linearen Glied angesetzt

$$f_{pi}^{\text{eq}} = t_p \varphi \rho \left[1 + \frac{u_\alpha c_{pi\alpha}}{c_s^2} \right] + f_{pi}^{\text{eq,corr}} \quad (5.56)$$

und die freien Parameter werden folgendermaßen gewählt

$$s_{pi}^{(1)} = t_p \dot{q}(\varphi) \quad \forall p, i \quad (5.57)$$

$$\delta_t s_{pi}^{(2)} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.58)$$

$$f_{pi}^{\text{eq,corr}} = \frac{t_p}{c_s^2} \chi c_{pi\alpha} \frac{\partial_\beta \rho}{\rho} \left(\frac{c_{pi\alpha} c_{pi\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \quad \forall p, i \quad (5.59)$$

$$\tilde{P} = \rho \varphi. \quad (5.60)$$

Hierbei stellt \dot{q} einen von φ abhängenden Quellterm dar. Dann ergibt sich mit dem nullten Moment

$$\sum_{p,i} f_{pi} = \sum_{p,i} f_{pi}^{\text{eq}} = \rho \varphi \quad (5.61)$$

aus der „Kontinuitätsgleichung“ (5.34) eine Konvektions-Diffusions-Gleichung, vgl. dazu auch Gl. (3.7) mit $\varphi = c_p T$. Zu beachten ist, das die Konvektionsgeschwindigkeit u_α mittels einer entkoppelten Gleichung bestimmt worden ist und hier vorgegeben wird. Aus dem „Diffusionskoeffizienten“ χ , z. B. $\chi = \lambda_f$ in Gl. (3.7),

$$\chi/\rho = \delta_t c_s^2 \left(\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (5.62)$$

kann der Relaxationsparameter Ω bestimmt werden.

5.6. LBGK-Methode zur Lösung von Poisson-Gleichungen

Ausgangspunkt zur Entwicklung einer LBGK-Methode zur Lösung von Poisson-Gleichungen ist die stationäre Impulserhaltungsgleichung eines inkompressiblen reibungsbehafteten Fluids gewesen. Nach Elimination der Konvektions- und Druckterme und Hinzufügen eines Quelltermes $Q_{pi\alpha}^{rs}$ ergibt sich eine Poisson-Gleichung für ein Vektorpotential, das aus dem ersten Moment bestimmt wird.

Dieses Verfahren ermöglicht die Nutzung der Vorteile des LBGK-Verfahrens, wie die Übernahme der Gitterstruktur und der einfachen Behandlung komplexer Geometrien durch die gaskinetische Formulierung der Randbedingungen oder die einfache Parallelisierung. Da sich die Anwendungen in der vorliegenden Arbeit auf skalare Laplace-Gleichungen beziehen bieten Finite-Differenzen-Verfahren einen Vorteil hinsichtlich des benötigten Rechenaufwands. Angewendet wird deshalb ein beschleunigtes Gauß-Seidel-Verfahren. Werden jedoch Vektorpotentiale betrachtet, besteht mit den LBGK-Verfahren die Möglichkeit zwei bzw. drei Gleichungen simultan zu lösen, was einen Vorteil bzgl. der Rechenzeit zu den herkömmlichen Verfahren liefern kann. Allerdings muss berücksichtigt werden, dass die Potentiale über die Gleichung des nullten Momentes (5.71) und über die Randbedingungen miteinander gekoppelt sind.

Die offenen Parameter $s_{pi}^{(k)}$, $f_{pi}^{\text{eq,corr}}$ und \tilde{P} werden folgendermaßen gewählt:

$$s_{pi}^{(1)} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.63)$$

$$\delta_t s_{pi}^{(2)} = \left(1 - \frac{\Omega}{2}\right) t_p c_{pi\alpha} \left(2\partial_\alpha M_0 + \frac{\delta_t}{\Omega} Q_{pi}^{rs}(t, x_\alpha)\right) \quad \forall p, i \quad (5.64)$$

$$f_{pi}^{\text{eq,corr}} = 0 \quad \forall p, i \quad (5.65)$$

$$\tilde{P} = M_0. \quad (5.66)$$

Das nullte und erste Moment der Nichtgleichgewichtsverteilung werden gebildet aus

$$M_0(t, x_\alpha) = \sum_{p,i} f_{pi}(t, x_\alpha) \quad \text{und} \quad M_{1\beta}(t, x_\alpha) = \sum_{p,i} c_{pi\beta} f_{pi}(t, x_\alpha). \quad (5.67)$$

$M_{1\alpha}$ ist die Funktion, die die Poisson-Gleichung erfüllt, M_0 ist eine Hilfsgröße. Der konvektive Anteil der Ausgangsgleichung entfällt, wenn die Gleichgewichtsverteilung aus Gl. (5.8) nur bis zum linearen Glied betrachtet wird

$$f_{pi}^{\text{eq}}(M_{1\alpha}) = t_p \left(1 + \frac{M_{1\alpha} c_{pi\alpha}}{c_s^2}\right) + f_{pi}^{\text{eq,corr}}. \quad (5.68)$$

Außerdem wird das nullte Moment in diesem Ausdruck der Einfachheit halber durch eine

Konstante ersetzt. Dies hat zur Folge, dass das nullte Moment der Nichtgleichgewichtsverteilung ungleich dem nullten Moment der Gleichgewichtsverteilung ist, d. h. es ist keine Invariante mehr. Mit der Chapman-Enskog Entwicklung ergibt sich dann für das nullte Moment der Störverteilung

$$M_0 = \sum_{p,i} f_{pi} = \underbrace{\sum_{p,i} f_{pi}^{\text{eq}}}_{=1} + \epsilon \sum_{p,i} f_{pi}^{(1)} \Rightarrow \sum_{p,i} f_{pi}^{(1)} = \frac{1}{\epsilon} (M_0 - 1) + O(\epsilon). \quad (5.69)$$

Da das erste Moment invariant gegenüber der Momentenbildung ist gilt weiterhin

$$M_{1\alpha} = \underbrace{\sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{\text{eq}}}_{=M_{1\alpha}} + \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{(1)} \Rightarrow \sum_{p,i} c_{pi\alpha} f_{pi}^{(1)} = 0. \quad (5.70)$$

Unter diesen Voraussetzungen wird die Kontinuitätsgleichung (5.33) zu

$$\partial_\alpha M_{1\alpha} = -\frac{\Omega}{\epsilon} (M_0 - 1) + O(\epsilon). \quad (5.71)$$

Anwendung dieser Gleichung auf diejenige des ersten Momentes, vgl. Gl. (5.35), liefert schließlich die Poisson-Gleichung

$$\partial_{\alpha\alpha} M_{1\gamma} = Q_{pi\gamma}^{\text{rs}} + O(\epsilon^2). \quad (5.72)$$

5.7. Randbedingungen der LBGK-Methode

Die LBGK-Methode gehört zu den gaskinetischen Methoden, d. h. ihre Variablen sind Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen, aus denen die makroskopischen Strömungsgrößen durch Momentenbildung bestimmt werden. Aus diesem Grund werden auch die Randbedingungen auf molekularer Ebene formuliert, was auf einfache und sehr flexible Formulierungen führt. Insbesondere durch Einführung der boundary-fitting-Randbedingung nach [23, 24] wird die Berechnung komplexer Geometrien ermöglicht, wie sie zum Beispiel durch deponierte Partikel entstehen.

Im Algorithmus werden die Randwerte an Zusatzknoten innerhalb der Körperkonturen gespeichert, die in den Abb. 5.2 und 5.3 als ausgefüllte Kreise dargestellt sind. Auf diesen Knoten werden die post-Kollisionswerte der Verteilungsfunktionen f_{pi}^{post} für die entsprechende Richtung pi abgelegt. Der Transportschritt kann somit für jeden Knoten im Fluid ausgeführt werden ohne randnahe Punkte gesondert behandeln zu müssen.

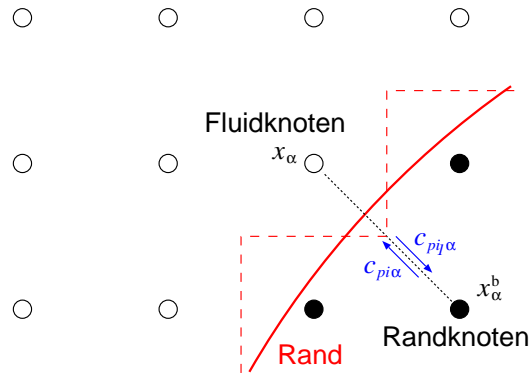


Abbildung 5.2.: Molekulare Reflektionsrandbedingung.

5.7.1. Molekulare Reflektionsrandbedingung (bounce-back)

Sie ist die elementarste Randbedingung und ist von den Lattice-Gas-Automaten übernommen worden. Trifft eine Verteilungsfunktion nach dem Konvektions- und vor dem Kollisionsschritt auf einen Randpunkt, so wird das Vorzeichen der Geschwindigkeitsrichtung umgekehrt und der Betrag beibehalten. Es gilt also

$$f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha) \equiv f_{pi}^{\text{post}}(t, x_\alpha^b) = f_{pi_1}^{\text{prae}}(t, x_\alpha^b) \equiv f_{pi_1}^{\text{post}}(t - \delta_t, x_\alpha) \quad (5.73)$$

mit $c_{pi_1\alpha} = -c_{pi\alpha}$. Die makroskopischen Größen am Randpunkt erfüllen die Randbedingungen einer festen Wand mit Haftbedingung: die Ableitung des nullten Momentes in Normalenrichtung der Wand und die Werte des ersten Momentes verschwinden. Wird dagegen die Geschwindigkeit in tangentialer Richtung zum Rand beibehalten und nur in normaler Richtung umgekehrt, ergibt sich eine von Null verschiedene tangentielle Geschwindigkeit am Rand. Damit kann z. B. ein Symmetrierand beschrieben werden.

Nachteil dieser Randbedingung ist die Reduktion des Verfahrens auf erste Ordnung, falls der zu beschreibende Rand nicht genau in der Mitte zweier Punkte liegt, vgl. [44]. Geometrisch betrachtet wird der Verlauf des Randes durch eine Treppenfunktion beschrieben, die als gestrichelte Linie in Abb. 5.2 dargestellt ist.

5.7.2. Gleichgewichtsrandbedingung

Unter der Voraussetzung, dass die Verteilungsfunktionen, die einen Rand treffen, unmittelbar den lokalen Gleichgewichtszustand annehmen, kann eine weitere Möglichkeit zur Behandlung der Ränder formuliert werden. Dabei werden am Rand einströmende Verteilungsfunktionen als Gleichgewichtsverteilungen angesetzt. Diese werden mittels der vorgegebenen Werte für die Momente am Wandpunkt x_α^w bestimmt. Somit ergibt

sich

$$f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha) \equiv f_{pi}^{\text{post}}(t, x_\alpha^b) = f_{pi}^{\text{eq}}(\tilde{P}(t, x_\alpha^w), u_\beta(t, x_\alpha^w)). \quad (5.74)$$

Es können sowohl Wände als auch Ein- bzw. Austrittsränder beschrieben werden, je nachdem welche Werte oder Gradienten der Momente vorgegeben werden.

Auch hier ist zu beachten, dass die Formulierung der Randbedingung nur dann von zweiter Ordnung genau ist, wenn der Rand exakt durch den jeweiligen Knoten verläuft.

5.7.3. Periodische Randbedingung

Diese Art Randformulierung kann angewendet werden, wenn das Integrationsgebiet periodisch fortgesetzt werden kann und somit auf einen kleinen Ausschnitt einer größeren Geometrie beschränkt werden kann. Betrachtet wird zum Beispiel die Strömung um einen Filter, der sich aus mehreren hintereinander liegenden Gittern zusammensetzt, die wiederum aus regelmäßig angeordneten Fasern bestehen. Um jedes Faserkreuz wird sich bei geeigneten Abständen der Gitter die gleiche Geschwindigkeitsverteilung einstellen, so dass es für deren Berechnung genügt ein einzelnes zu betrachten und die Ränder periodisch fortzusetzen. Für die LBGK-Methode bedeutet dies, dass die Verteilungsfunktionen, die an einer Seite, z. B. links, aus dem Gebiet während des Konvektionsschrittes heraus transportiert werden auf der entgegengesetzten, rechten, wieder einströmen, also mit $c_{pi_1\alpha} = -c_{pi\alpha}$

$$f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha^{\text{links}}) = f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha^{\text{rechts}}) \quad (5.75)$$

und

$$f_{pi_1}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha^{\text{rechts}}) = f_{pi_1}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha^{\text{links}}). \quad (5.76)$$

5.7.4. Randbedingung höherer Ordnung (boundary-fitting)

In diesem Abschnitt werden die boundary-fitting-Randbedingungen nach [23] erläutert, die die Diskretisierung der Randbedingungen mit Genauigkeit zweiter Ordnung ermöglichen.

In Abb. 5.3 ist eine krummlinige Randkontur dargestellt. δ_x bezeichnet den Gitterabstand zwischen zwei Knoten und Δ den dimensionslosen Abstand in kartesischer Richtung zwischen dem Fluidknoten und der Wandoberfläche entlang der diskreten Richtung pi

$$\Delta = \frac{|x_\alpha - x_\alpha^w|}{|x_\alpha - x_\alpha^b|}, \quad 0 \leq \Delta \leq 1. \quad (5.77)$$

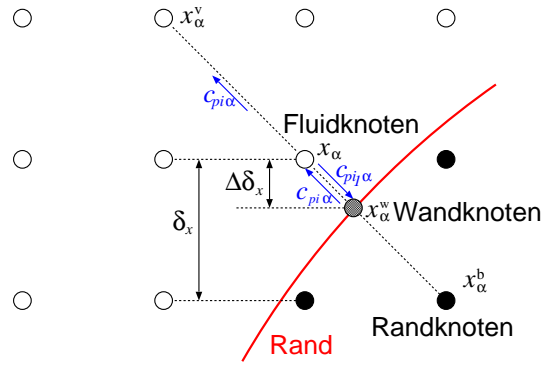


Abbildung 5.3.: Boundary-fitting Randbedingung.

Die Verteilungsfunktion f_{pi}^{post} , die vom Randknoten x_α^b auf den Fluidknoten x_α transportiert wird, kann beschrieben werden durch

$$\begin{aligned}
 f_{pi}^{\text{prae}}(t + \delta_t, x_\alpha) &\equiv f_{pi}^{\text{post}}(t, x_\alpha^b) \\
 &= (1 - \Omega^i) f_{pi_1}^{\text{prae}}(t, x_\alpha^b) + \Omega^i f_{pi_1}^{\text{eq}}(t, x_\alpha^b) - 2t_p \frac{u_\alpha^w c_{pi_1\alpha}}{c_s^2} \\
 &\equiv (1 - \Omega^i) f_{pi_1}^{\text{post}}(t - \delta_t, x_\alpha) + \Omega^i f_{pi_1}^{\text{eq}}(t, x_\alpha^b) - 2t_p \frac{u_\alpha^w c_{pi_1\alpha}}{c_s^2}, \quad (5.78)
 \end{aligned}$$

mit $c_{pi_1\alpha} = -c_{pi\alpha}$.

Es handelt sich dabei um eine Linearkombination aus molekularer Reflektions- und Gleichgewichtsrandbedingung die mit einem künstlichen Parameter Ω^i gewichtet sind. u_α^w bezeichnet die Oberflächengeschwindigkeit am Schnittpunkt zwischen Wand und diskreter Geschwindigkeitsrichtung. Für feste Wände gilt $u_\alpha^w = 0$. Die Gleichgewichtsverteilung am Randknoten x_α^b wird angesetzt als

$$f_{pi_1}^{\text{eq}}(t, x_\alpha^b) = t_p \left(\tilde{P}(t, x_\alpha) + \frac{\rho u_\beta^i c_{pi_1\beta}}{c_s^2} + \frac{\rho u_\beta(t, x_\alpha) u_\gamma(t, x_\alpha)}{2c_s^2} \left(\frac{c_{pi_1\beta} c_{pi_1\gamma}}{c_s^2} - \delta_{\beta\gamma} \right) \right) \quad (5.79)$$

wobei die Geschwindigkeit u_β^i entweder als extrapolierte Geschwindigkeit des Randknotens oder als Geschwindigkeit des Fluidknotens gewählt wird, je nachdem welchen Wert der dimensionslose Abstand Δ annimmt:

$$\begin{aligned}
 \text{für } \Delta \geq 0.5 : \quad \Omega^i &= \Omega(2\Delta - 1), \quad u_\beta^i = u_\beta(t, x_\alpha^b) = \frac{\Delta-1}{\Delta} u_\beta(t, x_\alpha) + \frac{u_\beta^w}{\Delta} \\
 \text{für } \Delta < 0.5 : \quad \Omega^i &= \Omega \frac{2\Delta-1}{1-\Omega}, \quad u_\beta^i = u_\beta(t, x_\alpha)
 \end{aligned} \quad (5.80)$$

Ω ist der Relaxationsparameter aus dem LBGK-Modell. In [24] ist nachgewiesen worden, dass diese Formulierung von zweiter Ordnung genau ist, was mit derjenigen des LBGK-

Verfahrens übereinstimmt.

Eine Verbesserung der Formulierung für den Fall $\Delta < 0.5$ wird in [68] vorgeschlagen. Mittels einer Stabilitätsanalyse wird nachgewiesen, dass

$$\text{für } \Delta < 0.5: \quad \Omega^i = \Omega \frac{2\Delta-1}{\Omega-2}, \quad u_\beta^i = u_\beta(t, x_\alpha + \delta_t c_{pi\alpha}) \quad (5.81)$$

einen deutlich größeren Stabilitätsbereich besitzt. Die Geschwindigkeit u_β^i wird nicht vom Fluidknoten x_α sondern von dem um $\delta_t c_{pi\alpha}$ versetzten Knoten x_α^v übernommen, siehe Abb. 5.3.

5.8. Lokale Gitterverfeinerung

Lösungsverfahren auf uniformen kartesischen Gittern benötigen zusätzliche algorithmische Erweiterungen, um anisotrope Strömungsfelder um komplexe Geometrien behandeln zu können. Neben einer genauen Randformulierung, wie sie z. B. in Abschnitt 5.7.4 beschrieben worden ist, wird eine Möglichkeit zur Gitterverfeinerung benötigt. Diese wurde in [24] als lokales Gitterverfeinerungskonzept entwickelt und in [28] für LBGK-Methoden auf allgemeine Mehrskalprobleme erweitert. Eine andere Möglichkeit zur effizienten Berechnung anisotroper Felder mittels einer LBGK-Methode wird im Anhang A.4 erläutert.

Um Teilgebiete mit signifikanten Änderungen in den Strömungsgrößen besser auflösen zu können, wird hier die Gitterschrittweite δ_x lokal verfeinert. Dadurch wird eine deutliche CPU-Zeit- und Speichereinsparung gegenüber einer globalen Verfeinerung der Schrittweite erreicht. Auf dem feinen Gitter beträgt die Schrittweite dann $\delta_x^k = \delta_x/n$ mit einem ganzzahligen Verfeinerungsfaktor n . Ebenso wird die Zeitschrittweite auf dem verfeinerten Gitter verringert zu $\delta_t^k = \delta_t/n$. Nach Gl. (5.5) hängt die kinematische Zähigkeit vom Zeitschritt ab. Um dieselbe Viskosität und somit Reynoldszahl auf grobem und feinem Gitter zu gewährleisten, muss der Relaxationsparameter auf dem feinen Gitter Ω^k umskaliert werden zu

$$\Omega^k = \frac{2}{1 + n(2/\Omega - 1)}. \quad (5.82)$$

Auf dem feinen Gitter wird der Algorithmus analog zu dem des groben Gitters ausgeführt. Zu beachten ist jedoch, dass die Werte der post-Kollisions-Verteilungsfunktionen von beiden Gittern nicht einfach übertragen werden können, weil der Nichtgleichgewichtsanteil der Verteilungsfunktion in der Chapman-Enskog-Entwicklung, siehe Abschnitt 5.2, von Ω abhängt. Da sich der Relaxationsparameter mit dem Gitterabstand ändert und weil die Momente und deren erste Ableitungen stetig über die Grenzfläche der beiden Gitter verlaufen müssen, können folgende Formeln zum Umskalieren der Verteilungsfunktionen

hergeleitet werden:

$$f_{pi}^{\text{post},k} = \tilde{f}_{pi}^{\text{eq},g} + (\tilde{f}_{pi}^{\text{post},g} - \tilde{f}_{pi}^{\text{eq},g}) \frac{\Omega(1 - \Omega^k)}{(1 - \Omega)\Omega^k n} \quad (5.83)$$

$$f_{pi}^{\text{post},g} = \tilde{f}_{pi}^{\text{eq},k} + (\tilde{f}_{pi}^{\text{post},k} - \tilde{f}_{pi}^{\text{eq},k}) \frac{(1 - \Omega)\Omega^k n}{\Omega(1 - \Omega^k)} \quad (5.84)$$

Gl. (5.83) bestimmt die Verteilungsfunktionen auf dem feinen Gitter aus denen des groben und Gl. (5.84) umgekehrt diejenigen auf dem groben Gitter. Die Tilde $\tilde{}$ bezeichnet dabei räumlich und zeitlich interpolierte Werte. Z. B. werden die durch ausgefüllte Quadrate dargestellten Randpunkte des feinen Gitters in Abb. 5.4 durch die sie umgebenden vier Knoten des groben Gitters, dargestellt als Kreise, bilinear interpoliert.

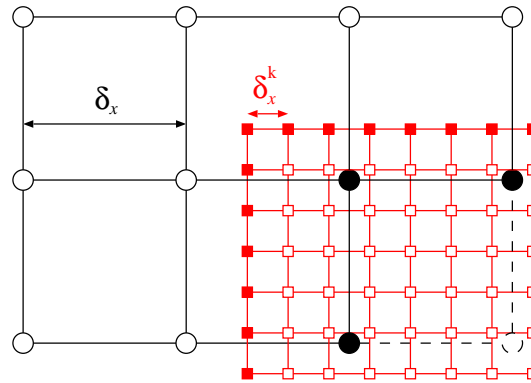


Abbildung 5.4.: Gitterverfeinerung mit dem Faktor $n = 4$, nicht konformes Verfeinerungsgebiet.

Algorithmisch wird die Gitterverfeinerung zwischen Kollisions- und Konvektionsschritt des groben Gitters folgendermaßen ausgeführt:

1. Kollisionsschritt auf dem groben Gitter, $\rightarrow f_{pi}^{\text{post},g}$ zum Zeitpunkt t
2. Umskalieren der Randpunkte des feinen Gitters, die durch ausgefüllte Quadrate in Abb. 5.4 dargestellt sind, nach Gl. (5.83), $\rightarrow f_{pi}^{\text{post},k}$ zum Zeitpunkt t
3. Konvektionsschritt auf dem feinen Gitter, $\rightarrow f_{pi}^{\text{prae},k}$ zum Zeitpunkt $(t - \delta_t) + \delta_t^k$
4. Randbedingungen auf dem feinen Gitter
5. Kollisionsschritt auf dem feinen Gitter, $\rightarrow f_{pi}^{\text{post},k}$ zum Zeitschritt $(t - \delta_t) + \delta_t^k$
6. Umskalieren der Randpunkte des groben Gitters, ausgefüllte Kreise, nach Gl. (5.84), $\rightarrow f_{pi}^{\text{post},g}$ zum Zeitpunkte t
7. Konvektionsschritt auf dem groben Gitter, $\rightarrow f_{pi}^{\text{prae},g}$ zum Zeitpunkte $t + \delta_t$.

Die Schritte 3 bis 5 werden n -mal durchgeführt, damit der Zeitlevel des feinen Gitters mit demjenigen des unterliegenden groben übereinstimmt. Die Umskalierungen beziehen sich nur auf diejenigen Gebietsrandpunkte der Gitter, die Werte für den jeweils folgenden Transportschritt benötigen. Die Verknüpfung zwischen beiden Gittern findet nur über die Randpunkte statt.

Eine Beschleunigung des Gitterverfeinerungskonzeptes ist in [26] veröffentlicht worden. Darin ist nachgewiesen worden, dass die zeitliche Genauigkeit auch dann von der Ordnung zwei ist, wenn bei zeitabhängigen Problemen anstatt n nur $n/2$ Schritte auf dem feinen Gitter ausgeführt werden. Bei stationären Problemen genügt sogar ein einziger Schritt. Diese Erweiterung liefert bezüglich der Rechenzeit eine deutliche Beschleunigung.

6. Finite-Differenzen-Verfahren

Die Energieerhaltungsgleichung der Navier-Stokes-Gleichungen für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte, die Kontinuitätsgleichung einer kontinuierlichen Partikelphase sowie die Laplace-Gleichung zur Beschreibung eines elektrostatischen bzw. magnetostatischen Feldes sind jeweils lineare partielle Differentialgleichungen in einer skalaren Variablen. Für Gleichungen dieses Typs haben insbesondere auf äquidistanten kartesischen Gittern, wie sie in dieser Arbeit verwendet werden, Finite-Differenzen-Verfahren gegenüber den LBGK-Verfahren aus den Abschnitten 5.5 und 5.6 einen deutlichen Vorteil hinsichtlich der benötigten Rechenzeit. Da sich ändernde Randbedingungen aufgrund deponierter Partikel durch entsprechende Anpassung der betroffenen Differenzensterne relativ einfach in die Verfahren einbinden lassen, werden in den nachfolgend aufgelisteten Fällen die beschriebenen Finite-Differenzen-Verfahren zur numerischen Lösung verwendet, falls es nicht anders angegeben wird.

6.1. Gleichungen einer kontinuierliche Partikelphase

Neben der in Kapitel 2 beschriebenen diskreten Betrachtungsweise kann die Partikelphase auch als kontinuierliche Phase modelliert werden. Diese wird in einem ortsfesten Eulerschen Koordinatensystem betrachtet. Im allgemeinen Fall treten neben der Partikelmasse noch die -geschwindigkeit und die -temperatur als Variablen auf. Damit lassen sich Kontinuitäts-, Impulserhaltungs- und Energieerhaltungsgleichungen für die Partikelphase aufstellen, analog zu denen der Fluidphase, vgl. Abschnitt 3.1. Die bekannten numerischen Lösungsmethoden der Gasphasengleichungen können vielfach für die Gleichungen der Partikelphase übernommen werden. Bei geeigneter Modellierung können die wesentlichen Rückwirkungen zwischen Partikel- und Fluidphase berücksichtigt werden. Der Vorteil dieser Betrachtungsweise besteht in der Möglichkeit im Vergleich zum Partikeldurchmesser großräumige Effekte auflösen zu können. Die durch deponierende Partikel an festen Wänden entstehende Partikelgrenzschicht kann z. B. als Grenzschichtdicke angegeben werden. Genauere Aussagen über das Depositionsverhalten einzelner Partikel, wie sie in dieser Arbeit untersucht werden sollen, können jedoch nicht getroffen werden, da die kontinuierliche Sichtweise keine Details über einzelne Partikel liefert.

Bei Nanopartikeln können häufig folgende Vereinfachungen für die Partikelphase angenommen werden: die Geschwindigkeit und die Temperatur der Partikelphase stim-

men mit denjenigen der Gasphase überein, da die Relaxationszeiten beider Prozesse sehr klein sind. Außerdem kann aufgrund des geringen Partikelvolumens die Rückwirkung der Partikelphase auf den Gasdruck vernachlässigt werden. Damit fallen für eine kontinuierliche Partikelphase die Impuls- und Energieerhaltungsgleichung weg und die Kontinuitätsgleichung kann durch eine Konvektions-Diffusions-Gleichung für die Partikeldichte ρ_p oder für die Partikelkonzentration c mit der Einheit $\#/m^3$

$$\partial_t(\rho c) + \partial_\alpha(u_\alpha \rho c) = \partial_\alpha(\rho D_{Br,t} \partial_\alpha c) \quad (6.1)$$

beschrieben werden. Dabei sind ρ und u_α die bereits bestimmte Fluidichte bzw. Fluidgeschwindigkeit und $D_{Br,t}$ ist der in Abschnitt 2.3.3 beschriebene größenabhängige Partikeldiffusionskoeffizient.

Auf analoge Weise kann auch die Temperaturgleichung der Navier-Stokes-Gleichungen bei kleinen Machzahlen und variabler Dichte, vgl. Gl. (3.7), dargestellt werden, sodass die Aussagen des folgenden Unterabschnitts über die Diskretisierung einer Konvektions-Diffusions-Gleichung auf diese übertragen werden können.

6.1.1. Diskretisierung der Konvektions-Diffusions-Gleichung

Die Konvektions-Diffusions-Gleichung (6.1) kann mittels der Kontinuitätsgleichung (3.5) umgeformt werden zu

$$\partial_t c + \underbrace{u_\alpha \partial_\alpha c}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{1/\rho \partial_\alpha(\rho D_{Br,t} \partial_\alpha c)}_{\text{Diffusion}}. \quad (6.2)$$

Die diskretisierte Form dieser Gleichung kann mit dem Index n der zeitlichen und den Indizes i, j, k der räumlichen Diskretisierung dargestellt werden als

$$\frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k}^n}{\Delta t} = \text{Res}_{i,j,k}. \quad (6.3)$$

Das Residuum $\text{Res}_{i,j,k}$ setzt sich aus den diskretisierten Konvektions- und Diffusionsanteilen aus Gl. (6.2) zusammen. Die Diskretisierung des Konvektionstermes erfolgt in Hauptströmungsrichtung aus Stabilitätsgründen durch eine einseitige Rückwärtsdifferenz und in den anderen Richtungen durch eine Zentraldifferenz. Der Diffusionsterm wird im gesamten Rechengebiet durch eine zweifache Zentraldifferenz pro kartesischer Richtung diskretisiert. An den Rändern wird bei allen Termen auf einseitige Differenzen in der jeweiligen Richtung zurückgegriffen. Die Differenzenformulierungen sind so gewählt worden, dass das gesamte Verfahren von zweiter Ordnung im Raum ist. Die zeitliche Integration erfolgt mit dem Vorwärts-Euler-Verfahren, das nur von erster Ordnung in der Zeit ist. Der hierbei verwendete diskrete Zeitschritt wird aus dem LBGK-Verfahren über-

nommen, also $\Delta t = \delta_t$, da alle Gleichungen simultan gelöst werden. Dieser Zeitschritt ist sehr klein und führt für die diskrete Konvektions-Diffusions-Gleichung auf CFL-Zahlen in der Größenordnung $10^{-3} \leq \text{CFL} \leq 10^{-2}$. Dies liefert die Einhaltung der Zeitgenauigkeit, auch bei Anwendung des Verfahrens erster Ordnung.

6.2. Poisson-Gleichung

Alternativ zum LBGK-Verfahren zur Lösung von Gleichungen des Poisson-Typs, vgl. Abschnitt 5.6, können Gleichungen dieses Typs mittels Finite-Differenzen-Verfahren gelöst werden. Effizienter sind diese insbesondere bei skalaren Gleichungen, wie sie in der vorliegenden Arbeit zur Bestimmung des elektrostatischen bzw. magnetostatischen Potentials auftreten. Mit Hilfe eines relaxierten Gauß-Seidel-Verfahrens, bei dem die Richtungen alternierend abgearbeitet werden, können sie effektiv gelöst werden. Die sich ändernden Randkonturen können bei diesem Verfahren durch angepasste Differenzenschemata an den Rändern berücksichtigt werden.

6.2.1. Relaxiertes Gauß-Seidel-Verfahren

Betrachtet werde die folgende Poisson-Gleichung

$$\partial_{\alpha\alpha}\phi + Q^{\text{rs}} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (6.4)$$

im dreidimensionalen Raum mit einer skalaren Feldvariablen ϕ und dem Quellterm Q^{rs} . Die Diskretisierung des Raumes erfolgt äquidistant mit dem Gitterabstand aus dem LBGK-Verfahren $\Delta x = \delta_x$ in den drei kartesischen Richtungen x , y und z . Dargestellt wird dies durch die drei Indizes $1 \leq i \leq i_{\text{max}}$, $1 \leq j \leq j_{\text{max}}$ und $1 \leq k \leq k_{\text{max}}$. Die Anteile des Laplace-Operators $\partial_{\alpha\alpha}$ in den kartesischen Richtungen werden jeweils durch ein zentrales Differenzenschema diskretisiert. Zur einfacheren Darstellung wird ein neuer Index $1 \leq \ell \leq \ell_{\text{max}} \triangleq i_{\text{max}}j_{\text{max}}k_{\text{max}}$ über die Vorschrift

$$\ell = (k - 1)j_{\text{max}}i_{\text{max}} + (j - 1)i_{\text{max}} + i \quad (6.5)$$

eingeführt, der die dreidimensionalen Variablen durch eindimensionale ersetzt. Damit kann das auf die beschriebene Diskretisierung angepasste relaxierte Gauß-Seidel-Verfahren oder auch SOR-Verfahren (successive overrelaxation) mit dem Relaxationsparameter ξ und dem Iterationsindex $\nu = 0, 1, 2, \dots$ in Komponentenschreibweise

beschrieben werden durch

$$\begin{aligned} \phi_\ell^{\nu+1} = & (1 - \xi)\phi_\ell^\nu \\ & + \frac{\xi}{6} \left(\phi_{\ell-j_{\max}i_{\max}}^{\nu+1} + \phi_{\ell-i_{\max}}^{\nu+1} + \phi_{\ell-1}^{\nu+1} \right. \\ & \left. + \phi_{\ell+j_{\max}i_{\max}}^{\nu+1} + \phi_{\ell+i_{\max}}^{\nu+1} + \phi_{\ell+1}^{\nu+1} + \Delta x^2 Q_\ell^{\text{rs}} \right). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Der Relaxationsparameter $\xi = 1.93$ wurde aus mehreren Vergleichsrechnungen eines Anwendungsbeispiels experimentell ermittelt.

6.2.2. Diskretisierung der Randbedingungen

Dirichletsche Randbedingungen, wie sie z. B. bei dem elektrostatischen Potential um eine elektrisch leitende Oberfläche auftreten, vgl. Gl. (3.22), können relativ einfach berücksichtigt werden, indem die Differenzenformel mittels der Abstände in den kartesischen Richtungen zwischen Randknoten und der Oberfläche angepasst wird, siehe z. B. [79]. Beachtet werden muss dabei, dass die Differenzenformeln die Lösung mit gleicher Ordnung approximieren, wie die Diskretisierung im Innern des Feldes.

Im folgenden wird beispielhaft die Formulierung der Randbedingungen (3.26) und (3.27) der magnetostatischen Potentiale näher erläutert. Eine analoge Diskretisierung kann bei elektrostatischen Potentialen im Falle dielektrischer Oberflächen für die Randbedingungen (3.23) formuliert werden.

Die Randbedingungen werden hier für das Finite-Differenzen-Verfahren beschrieben. Sie können jedoch ähnlich für das LBGK-Verfahren aus Abschnitt 5.6 angesetzt werden. Dabei werden die Randbedingungen des ersten Momentes auf die lokale Gleichgewichtsverteilung übertragen und es ergeben sich Randwerte für die Verteilungsfunktionen.

Wie früher bereits erwähnt worden ist, muss zur Bestimmung des skalaren magnetischen Potentials um einen Körper sowohl das äußere als auch das innere Potential berechnet werden, da beide über die Randbedingungen miteinander gekoppelt sind. In Abb. 6.1 ist eine Körperkontur dargestellt mit einem äußeren Knoten x^a und zugehörigem Potential ψ_2 sowie einem inneren Punkt x^i mit dem Potential ψ_1 .

Um den Wert des äußeren Potentials am äußeren Knoten mit dem Verfahren neu berechnen zu können, wird derjenige am inneren Knoten benötigt. Zur Berechnung des Wertes $\psi_2(x^i)$ wird der Richtungsvektor r_α vom Knoten x^a zu x^i definiert, der sich mit Hilfe des normierten Normalen- n_α und Tangentenvektors τ_α der Oberfläche am Punkte x^w darstellen lässt als

$$r_\alpha = (r_\beta \cdot n_\beta) n_\alpha + (r_\beta \cdot \tau_\beta) \tau_\alpha. \quad (6.7)$$

Weiterhin werden die Längen $l^a \triangleq |x^w - x^a|$ und $l^i \triangleq |x^i - x^w| = |r_\alpha| - l^a$ definiert.

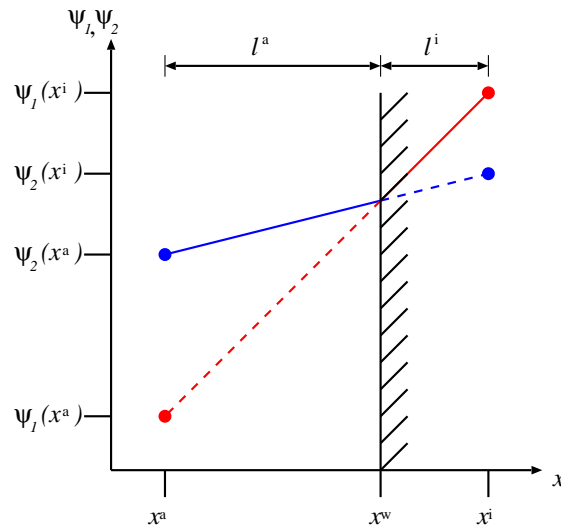


Abbildung 6.1.: Zur Formulierung der Randbedingungen für das innere und äußere skalare magnetische Potential

Dann gilt mit der Permeabilitätskonstanten des Vakuums μ_0 , derjenigen des Fluids μ_2 und der Körpermagnetisierung $M_{F\alpha}$

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x^i) &= \psi_2(x^a) + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot r_\alpha) \frac{l^a}{|r_\gamma|} + (\partial_\alpha \psi_1|_{x^w} \cdot r_\alpha) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \\
 &\stackrel{(6.7)}{=} \psi_2(x^a) + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^a}{|r_\gamma|} + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot \tau_\alpha) (r_\beta \cdot \tau_\beta) \frac{l^a}{|r_\gamma|} \\
 &\quad + (\partial_\alpha \psi_1|_{x^w} \cdot n_\alpha) (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} + (\partial_\alpha \psi_1|_{x^w} \cdot \tau_\alpha) (r_\beta \cdot \tau_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \\
 &\stackrel{(3.27)}{=} \psi_2(x^a) + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^a}{|r_\gamma|} + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot \tau_\alpha) (r_\beta \cdot \tau_\beta) \frac{l^a}{|r_\gamma|} \\
 &\quad + \left[\frac{\mu_2}{\mu_0} (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) + (M_{F\alpha} \cdot n_\alpha) \right] (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \\
 &\quad + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot \tau_\alpha) (r_\beta \cdot \tau_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \\
 &= \psi_2(x^a) + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) (r_\beta \cdot n_\beta) + (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot \tau_\alpha) (r_\beta \cdot \tau_\beta) \\
 &\quad + \left[\left(\frac{\mu_2}{\mu_0} - 1 \right) (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) + (M_{F\alpha} \cdot n_\alpha) \right] (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \\
 &= \psi_2(x^i) + \left[\left(\frac{\mu_2}{\mu_0} - 1 \right) (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) + (M_{F\alpha} \cdot n_\alpha) \right] (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|}. \quad (6.8)
 \end{aligned}$$

Umformen nach der Unbekannten $\psi_2(x^i)$ liefert schließlich

$$\psi_2(x^i) = \psi_1(x^i) - \left[\left(\frac{\mu_2}{\mu_0} - 1 \right) (\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha) + (M_{F\alpha} \cdot n_\alpha) \right] (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^i}{|r_\gamma|} \quad (6.9)$$

Die Ableitung in Normalenrichtung der Wand $\partial_\alpha \psi_2|_{x^w} \cdot n_\alpha$ wird zentral diskretisiert, sodass auf den unbekanntem Wert $\psi_2(x^i)$ zugegriffen wird. Damit kann dieser mittels eines eindeutig lösbar linearen Gleichungssystems bestimmt werden, dessen Dimension sich aus der Anzahl der auf der inneren Seite liegenden Knoten ergibt. Berücksichtigt werden hierbei lediglich die Knoten, die in einem Abstand der Gitterschrittweite δ_x in den kartesischen Richtungen um den betrachteten Knoten liegen. Für die in dieser Arbeit gewählte Geometrie der durchstoßenen Fasern liegt diese Anzahl zwischen eins und drei, so dass die Lösung direkt analytisch angegeben werden kann.

Für den Wert des inneren Potentials ψ_1 am Punkt x^a liefert ein analoges Vorgehen die der Gl. (6.9) entsprechende Formel

$$\psi_1(x^a) = \psi_2(x^a) - \left[\left(\frac{\mu_0}{\mu_2} - 1 \right) (\partial_\alpha \psi_1|_{x^w} \cdot n_\alpha) - \frac{\mu_0}{\mu_2} (M_{F\alpha} \cdot n_\alpha) \right] (r_\beta \cdot n_\beta) \frac{l^a}{|r_\gamma|}. \quad (6.10)$$

7. Implementierung

In diesem Kapitel werden die beiden Methoden zur Berechnung der Partikelbewegung (PMC-Verfahren) und der kontinuierlichen Felder (LBGK-Verfahren) algorithmisch beschrieben. Dabei werden einige Details der Implementierung näher erläutert. Abschließend wird der iterative Aufbau des gesamten Programms dargestellt.

7.1. Algorithmische Beschreibung der PMC-Methode

Der Algorithmus der Partikel-Monte-Carlo-Methode besteht im wesentlichen aus zwei Schleifen, siehe Abb. 7.1: die äußere mit dem Index k beschreibt den zeitlichen Verlauf, die innere mit dem Index n läuft über die Anzahl der sich bewegenden Partikel während dieses Zeitschrittes. Die Vernachlässigung der Partikel-Partikel-Wechselwirkungen während des Fluges erlaubt es, einen individuellen Zeitschritt Δt je Partikel zu wählen. Gegenüber einem globalen, über alle Partikel konstanten, Zeitschritt wird eine Reduktion der Anzahl an Zeitschritten für die Trajektorienbestimmung und damit eine deutliche Verkürzung der Rechenzeit erzielt, da die Beschränkung der Zeitschritte auf den minimal möglichen entfällt. Gleichzeitig ist jedoch die zeitlich exakte Simulation des Aufbaus der Depositionsschicht nicht mehr möglich.¹ Da die Zeitintegration mittels eines Einschritt-Euler-Verfahrens durchgeführt wird, muss Δt in der Größenordnung des Minimums der Relaxationszeiten $\min(\tau_{Rt}, \tau_{Rr})$, vgl. Gl. (2.25) und Gl. (2.73), gewählt werden, falls die Kraft infolge der Brownschen Bewegung entscheidend in den Transportprozess eingreift. Dies führt auf sehr große Rechenzeiten. Unter den folgenden Voraussetzungen kann ein größerer Zeitschritt gewählt werden: bei Partikeldurchmessern $d_p > 100 \text{ nm}$ in einem Fluid unter Normalbedingungen, bei Strömungen mit Knudsenzahlen $Kn \gg 1$ oder bei genügend großer Fluidgeschwindigkeit kann die Zufallsbewegung vernachlässigt werden. In diesem Fall wird die Partikelbewegung durch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben, dessen Integration mit einem Mehrschritt-Verfahren wie z. B. dem Runge-Kutta-Verfahren aus Abschnitt 4.1 erfolgen kann. Eine weitere Beschleunigung des Partikelalgorithmus wird erreicht, indem bis zu zehn Partikel pro Zeitschritt gestartet werden. Im Experiment ist die Partikelkonzentration so gering, dass die Partikel im wesentlichen nacheinander

¹Angemerkt sei hier, dass eine solche zeitgenaue Simulation nur dann sinnvoll ist, wenn die stochastische Brownsche Bewegung bei dem Partikeltransport keine entscheidende Rolle spielt.

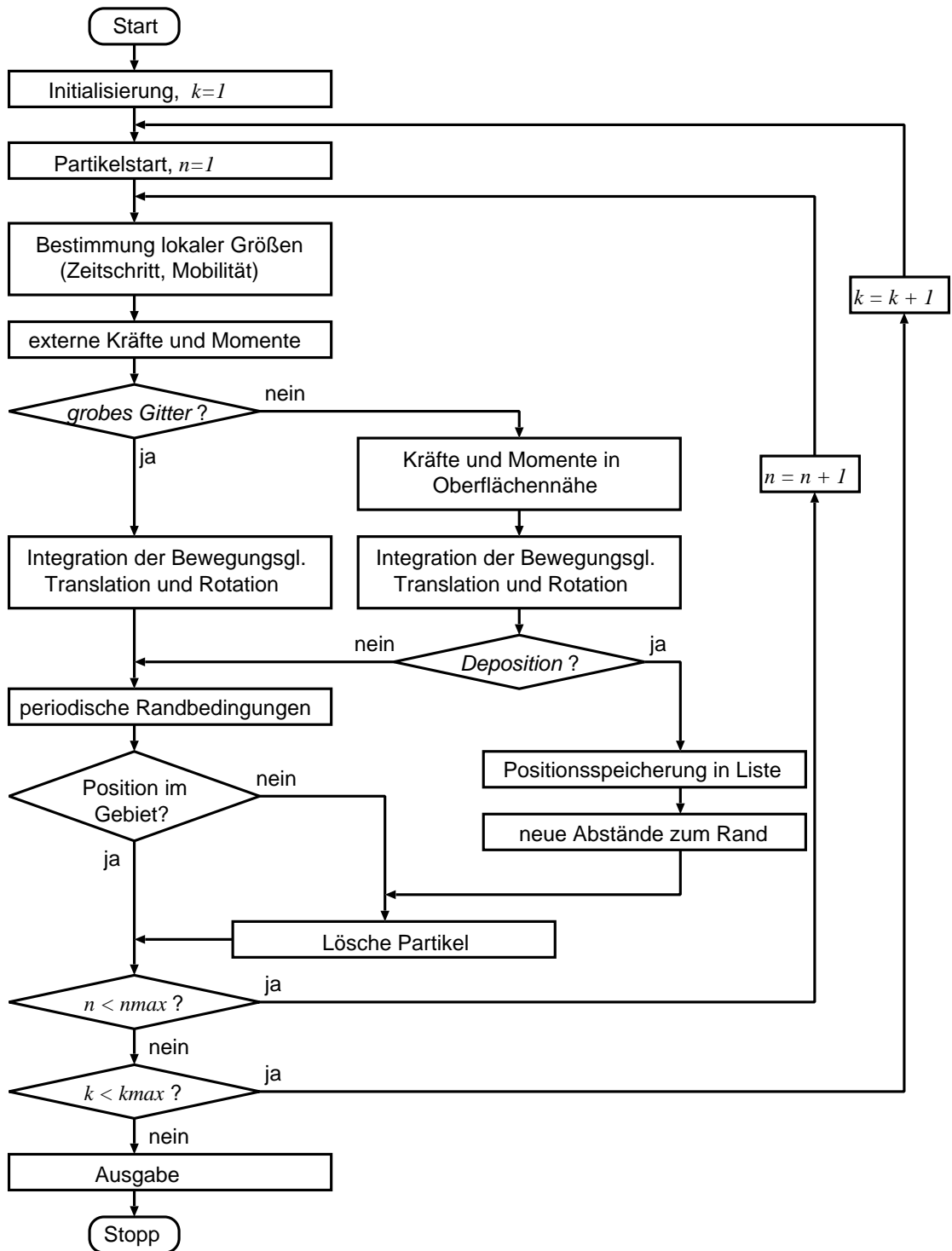


Abbildung 7.1.: Flussdiagramm der PMC-Methode.

zum Filter transportiert werden. Ist eine zeitlich exakte Berechnung der Entstehung der Depositionsschicht gewünscht, müssen die Trajektorien der Partikel ebenfalls nacheinander bestimmt werden, d. h. die innere Schleife mit dem Index n nimmt den Platz der äußeren mit dem Index k ein und umgekehrt. Dies führt auf ein deutliches Anwachsen der Rechenzeit, da die Trajektorien seriell, also hintereinander, abgearbeitet werden.

Beim Start werden die Variablen des jeweiligen Partikels initialisiert. Die Position wird dabei festgelegt durch eine fest vorgegebene Komponente x_0 , die die Lage der Startebene beschreibt, sowie zufallsmäßig in dieser Ebene gleichverteilte Komponenten y_0 und z_0 . Die Geschwindigkeitskomponenten u_0 , v_0 und w_0 werden von der Strömungsgeschwindigkeit am Startpunkt $(x_0, y_0, z_0)^T$ übernommen. Zusätzlich wird sie überlagert von einer normalverteilten Geschwindigkeit mit dem Mittelwert Null und der Varianz $2 \frac{k_B T}{m_p}$. Dieser Wert entspricht der mittleren Geschwindigkeit im thermischen Gleichgewicht, vgl. [36, 7]. Weitere Partikeleigenschaften sind die drei eulerschen Drehwinkel θ und die Drehgeschwindigkeit ω . Erstere werden mit zufälligen Winkeln und letztere wird mit dem Wert Null initialisiert. Außerdem wird bei Berücksichtigung der magnetischen Eigenschaften das anfängliche magnetische Moment an dem äußeren magnetischen Feld H ausgerichtet. Schließlich besitzt jedes Partikel noch zwei Indizes. Einen fortlaufend durchnummerierten zur Identifizierung und einen, der den Partikeldurchmesser beschreibt. Der Durchmesser wird durch eine diskrete Normalverteilung festgelegt, die durch den Erwartungswert, die Varianz und die Anzahl der Stützstellen eindeutig beschrieben wird.

Während des Durchlaufs der inneren Schleife, Index n , über die Anzahl der fliegenden Partikel, werden für das aktuelle Partikel als erstes die Werte der zur Berechnung der auf das Partikel wirkenden Kräfte und Momente benötigten Größen wie die Fluidgeschwindigkeit, die Temperatur, das elektrische bzw. magnetische Potential aus den bekannten Werten der acht nächsten Nachbarpunkte trilinear interpoliert, vgl. Anhang A.3.2. Mit Hilfe der so erhaltenen Fluidtemperatur werden anschließend die lokalen, d. h. vom Ort abhängigen, Größen, wie Mobilität und Zeitschritt, berechnet. Damit können die Terme der Zufallsbewegung, (4.23) – (4.25) und (4.37) – (4.39), bestimmt werden. Die dabei benötigten standardnormalverteilten Zufallszahlen werden aus gleichverteilten Zufallszahlen mittels der Polarmethode nach Marsaglia, vgl. Anhang A.3.1, berechnet. Anschließend werden die im Feld auf das Partikel wirkenden Kräfte, beispielsweise die Gravitations-, Coulomb- oder magnetische Kraft, bestimmt. Diese Kräfte werden mittels Multiplikation mit der Mobilität aus Gl. (2.44) analog zu Gl. (2.45) in Driftgeschwindigkeiten umgerechnet, die während der Integration zur Fluidgeschwindigkeit addiert werden, vgl. Gl. (4.30). Analoge Umformungen werden bei den betrachteten Drehmomenten durchgeführt.

Der nächste Schritt hängt vom Gitter ab. Befindet sich das Partikel auf dem groben Gitter werden die Bewegungsgleichungen der Translation und der Rotation nach (4.30) und (4.35) integriert. Haben die neuen Partikelkoordinaten in y - oder z -Richtung, den

maximalen bzw. minimalen Wert über- bzw. unterschritten, so werden sie aufgrund der periodischen Randbedingungen mit den Werten der gegenüberliegenden Seite überschrieben. Bewegt sich ein Partikel über die vorgegebene Austrittsebene, also der entsprechenden x -Koordinate, hinter der Faser hinaus, wird es als „nicht deponiert“ markiert und gelöscht.

Auf dem feinen Gitter werden vor dem Integrationsvorgang zusätzlich die nur in Oberflächennähe eine wesentliche Rolle spielenden Kräfte, wie van-der-Waals- und Bild-Kraft, bestimmt. Bewirkt die bei der Integration auftretende Beschleunigung aufgrund der verschiedenen Kräfte eine Ortsverschiebung, die größer als der Gitterabstand δ_x des groben Netzes ist, wird der Zeitschritt für dieses Partikel verringert und der Algorithmus wird mit der Neuberechnung der lokalen Größen fortgesetzt. Dadurch wird eine übermäßige Beschleunigung der Partikel aufgrund eines sehr kleinen Wandabstandes in der van-der-Waals- bzw. Bild-Kraft verhindert.

Durchfliegt ein Partikel während der Integration eine Oberfläche, deponiert es direkt an dem Schnittpunkt. Das Partikel wird gelöscht und in die Liste der deponierten Partikel aufgenommen. Befindet sich ein Knoten des Netzes innerhalb des abgeschiedenen Partikels, so ändert sich seine Markierung von „Fluid“ zu „Festkörper“. Für jeden nächsten Nachbarknoten, der innerhalb des Fluids liegt, wird der Abstand zur veränderten Körperoberfläche neu bestimmt. Berücksichtigt werden hierbei alle Knoten, die in Richtung einer diskreten molekularen Geschwindigkeit des LBGK-Verfahrens liegen. Die Suche des Depositionsplatzes eines anfliegenden Partikels in Wandnähe erfolgt mittels eines effizienten Algorithmus. Im Laufe der Rechnung bauen sich baumartige Partikelstrukturen auf, die eine sehr komplexen Oberfläche bilden. Durch die Zufallsbewegung des Partikels kann erst im letzten Schritt entschieden werden, wo das Partikel deponiert. Die deponierten Partikel werden mittels eines Gitters, dessen Schrittweite von der Größe der Partikel abhängt, in Gruppen eingeteilt. In dieser Arbeit ist das verfeinerte kartesische Grundgitter des LBGK-Verfahrens verwendet worden. Um den Rechenaufwand gering zu halten, sollten sich nur wenige Partikel in einer Zelle befinden. Dadurch wird die Suche nach deponierten Partikeln, die die aktuelle Partikeltrajektorie beeinflussen, auf die umliegenden maximal 27 Zellen beschränkt. Der Rechenaufwand dieser Methode ist von der Größenordnung $O(N_{\text{dep}})$, wobei N_{dep} die Anzahl der deponierten Partikel bezeichnet. Wird ein Partikel in einem Zeitschritt nicht abgeschieden, so werden, analog zum Algorithmus auf dem groben Gitter, die periodischen Randbedingungen überprüft.

Damit ist der innerer Schleifendurchlauf beendet und das nächste sich in diesem Zeitschritt bewegende Partikel wird betrachtet. Sind die Bewegungsgleichungen für alle fliegenden Partikel gelöst worden, so ist der Zeitschritt abgeschlossen und ein weiterer kann ausgeführt werden.

7.2. Algorithmische Beschreibung der LBGK-Methode

Der schematische Ablauf der LBGK-Methode für Strömungen kleiner Machzahlen mit Gitterverfeinerung wird in Abb. 7.2 gezeigt. Bei der LBGK-Methode für inkompressible Strömungen entfällt der Schritt zur Lösung der Temperaturgleichung.

Die Implementierung erfolgte unter dem Gesichtspunkt der Optimierung von Speicher- und Rechenzeit. So werden lediglich die Verteilungsfunktionen abgespeichert, die Momente wie Druck und Strömungsgeschwindigkeiten können jederzeit aus ihnen berechnet werden.

Zuerst werden die Variablen, also die Verteilungsfunktionen, initialisiert oder mit eingelesenen Werten einer alten Lösung beschrieben. Danach beginnt die Zeitschleife mit dem Laufindex k . Darin werden als erstes die gesamten Randbedingungen auf dem groben Gitter gesetzt. Da die Körperkonturen durch Gebiete mit Gitterverfeinerung überdeckt werden, müssen hier keine Randbedingungen für die Verteilungsfunktionen gesetzt werden. Analoge Aussagen gelten für die Randwerte der Temperatur, die auf einen festen Wert gesetzt werden. Am Eintrittsrand werden die Geschwindigkeiten und die Temperatur vorgegeben und der Druck aus dem Feld extrapoliert. Damit können für die einströmenden Verteilungsfunktionen Gleichgewichtszustände berechnet werden. Der Austrittsrand zeichnet sich durch einen vorgegebenen konstanten Druckverlauf aus, die Geschwindigkeiten und die Temperatur werden aus dem inneren Feld extrapoliert und die hier einströmenden Verteilungsfunktionen werden wiederum durch die entsprechenden Gleichgewichtsverteilungen beschrieben. An den seitlichen Gebietsrändern werden für alle Größen periodische Randbedingungen angesetzt. Im nächsten Schritt wird die Temperaturgleichung, die sich als Konvektions-Diffusions-Gleichung darstellen lässt, mittels des Finite-Differenzen-Verfahrens aus Abschnitt 6.1.1 mit dem diskreten Zeitschritt aus dem LBGK-Verfahren gelöst. In den in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsbeispielen treten nur geringe Temperaturdifferenzen auf, so dass die Temperaturabhängigkeiten der Wärmeleitfähigkeit λ_f und der spezifischen Wärmekapazität c_p des Fluids vernachlässigt werden können. Dennoch sind diese Terme als Polynomansatz in der Temperatur nach [53, 54] folgendermaßen

$$\ln \lambda_f(T) = \sum_{n=1}^4 b_n (\ln T)^{n-1} \quad \text{bzw.} \quad c_p(T) = R \sum_{n=1}^5 c_n T^{n-1} \quad (7.1)$$

mit den vom Fluid abhängenden Konstanten b_n , $n = 1, \dots, 4$ und c_n , $n = 1, \dots, 5$ sowie der spezifischen Gaskonstanten R implementiert worden. Somit kann neben der Temperaturabhängigkeit der Dichte auch diejenige von λ_f und c_p bei großen Temperaturdifferenzen berücksichtigt werden. Der folgende Kollisionsschritt liefert die post-Kollisionswerte der Verteilungsfunktionen auf dem groben Gitter. Zur Bestimmung der dimensionslosen Kollisionsfrequenz Ω wird die dynamische Viskosität η des Fluids benötigt, vgl. Gl. (5.55).

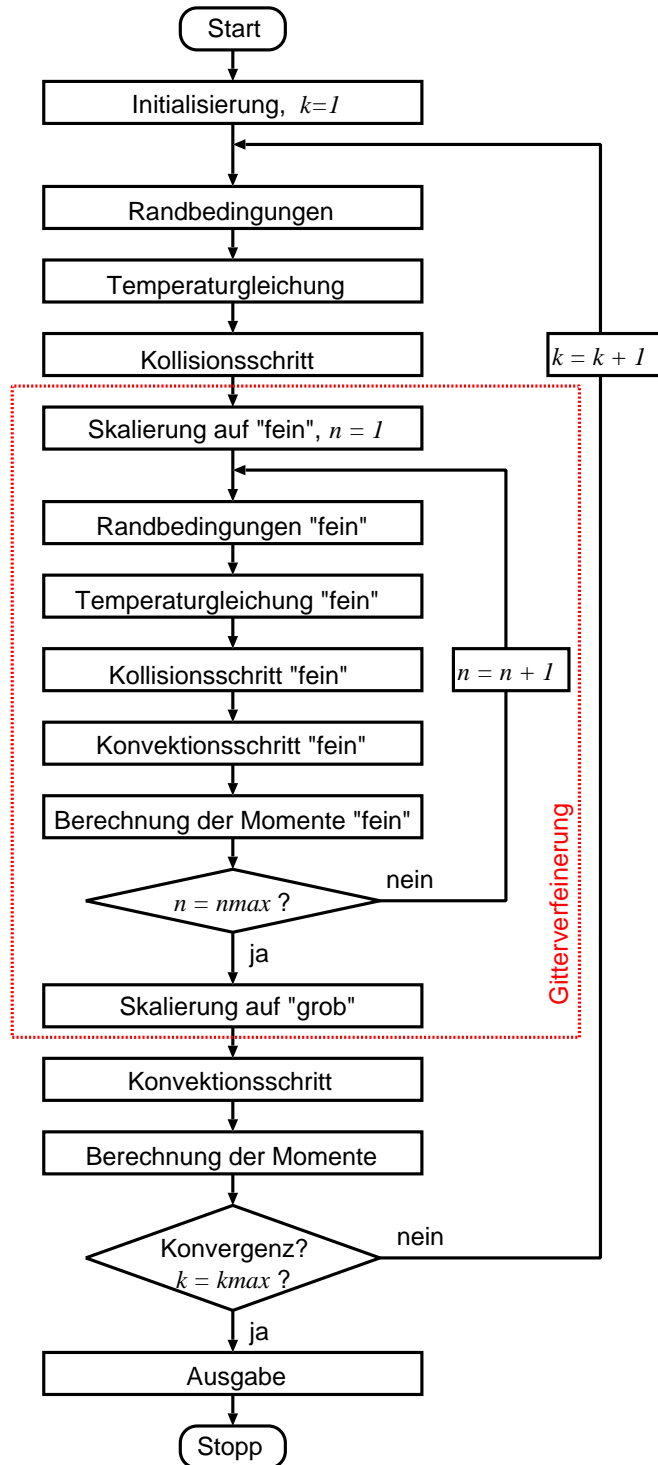


Abbildung 7.2.: Flussdiagramm der LBGK-Methode für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte.

Für Stickstoff kann η in Abhängigkeit von der Temperatur nach [53] in der Form

$$\ln \eta(T) = \sum_{n=1}^4 a_n (\ln T)^{n-1} \quad (7.2)$$

mit Konstanten a_n , $n = 1, \dots, 4$ dargestellt werden. Anschließend erfolgt die Berechnung der Lösung auf dem verfeinerten Gitter, deren Ablauf in Abschnitt 5.8 ausführlich beschrieben worden ist. Gleichzeitig wird die Temperaturgleichung mit dem Finite-Differenzen-Verfahren auf dem feinen Gitter gelöst. Die Randbedingungen an den Körperkonturen für die Verteilungsfunktionen werden durch die boundary-fitting-Formulierung aus Abschnitt 5.7.4 gesetzt. Nach dem Umskalieren der Verteilungsfunktionen auf das grobe Gitter wird der Algorithmus mit einem Konvektionsschritt auf selbigem fortgesetzt. Der Zeitschritt endet schließlich mit der Berechnung der Momente und der Überprüfung auf Konvergenz der Lösung. Dazu wird die Differenz zwischen alten und neuen Werten der Momenten mit der vorgegebenen Fehlertoleranz verglichen. Wird diese minimale Fehlertoleranz erreicht, stoppt das Verfahren mit der Ausgabe der Strömungsgrößen, ansonsten wird zum Anfang der Zeitschrittschleife zurückgesprungen und ein weiterer berechnet.

7.3. Kombination der beiden Teilprogramme

Um die sich ändernden Randkonturen durch deponierte Partikel in der Berechnung der kontinuierlichen Felder berücksichtigen zu können, werden beide Teilprogramme über eine iterative Prozedur miteinander verknüpft.

Zuerst werden die stationären Lösungen des Fluid- und des Temperaturfeldes sowie des elektrischen bzw. magnetischen Potentials berechnet. Auf dieser Grundlage werden die berücksichtigten Kräfte und Momente, die auf die einzelnen Partikel wirken bestimmt, so dass sich durch Integration die jeweilige Trajektorie ergibt.

Deponiert ein Partikel an einer Oberfläche, ändert es deren Kontur und somit auch den Verlauf der kontinuierlichen Felder. Dieser Effekt wird in dem Programm berücksichtigt, in dem die stationären kontinuierlichen Felder unter Einbeziehung der geänderten Randbedingungen wiederholt bestimmt werden. Haben einzelne abgeschiedene Partikel nur geringen Einfluss auf diese Felder, so können zur Beschleunigung des Algorithmus die Neuberechnungen nach einer fest vorgegebenen Anzahl an deponierten Partikeln N_{ite} erfolgen. Diese Anzahl N_{ite} muss so gewählt werden, dass die Bestimmung der kontinuierlichen Felder spätestens dann erfolgt, wenn die Rückwirkungen nicht mehr vernachlässigbar sind. Die räumliche Auflösung spielt bei der Wahl in Form des Verhältnisses $\alpha_{\text{dis}} \triangleq d_p / \delta_x^k$ von Partikeldurchmesser d_p zu Gitterabstand δ_x^k eine wesentliche Rolle. In den Lösungsverfahren zur Berechnung der kontinuierlichen Felder wird ein deponiertes Partikel bzw. seine Auswirkungen nur dann berücksichtigt, wenn innerhalb dieses

Partikels mindestens ein Knoten der räumlichen Diskretisierung liegt, vgl. grau markierte Knoten x_α^b in Abb. 7.3. In diesem Fall wird der Abstand $\Delta\delta_x^k$ zwischen dem Fluidknoten x_α und der Partikeloberfläche entlang der kartesischen Richtung, die zum neuen Randknoten x_α^b zeigt, bestimmt. Er geht anschließend in die diskreten Randbedingungen der Lösungsverfahren ein. Bei einem kleinen Verhältnis α_{dis} in der Größenordnung von $O(10^{-2})$ oder kleiner ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine solche Überlagerung eintritt sehr gering und die Anzahl N_{ite} kann groß gewählt werden, vgl. Abb. 7.3 (a). Der Grenzfall $N_{\text{ite}} = N_{\text{max}}$ mit der Gesamtanzahl an Partikeln N_{max} bedeutet hierbei, dass die Rückwirkungen auf die einzelnen Felder vernachlässigt werden. Umgekehrt gilt: je größer das Verhältnis α_{dis} ist, desto kleiner muss die Anzahl N_{ite} gewählt werden, siehe dazu Abb. 7.3 (b). Der minimal wählbare Wert liegt bei $N_{\text{ite}} = 1$, was einer Neurechnung nach jedem deponierten Partikel entspricht. Diese Betrachtungen zeigen, dass die fest vorzugebende Anzahl N_{ite} nur schwer über das Verhältnis α_{dis} abgeschätzt werden kann. Eine geeignetere Größe zur Festlegung des Zeitpunktes der Neuberechnung der kontinuierlichen Felder ist dagegen die Anzahl N_{ik} der Knoten der räumlichen Diskretisierung, die innerhalb eines in der aktuellen Iterationsstufe deponierten Partikels liegen. Das Programm ist auf die Verwendung dieses Parameters umgestellt worden.

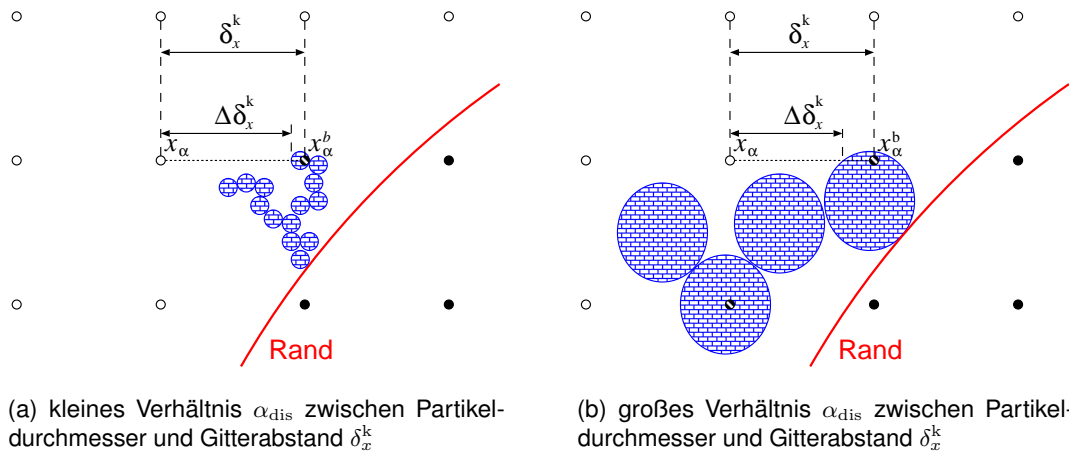


Abbildung 7.3.: Zur Wahl der Anzahl N_{ite} zur Neuberechnung der kontinuierlichen Felder.

Nach Erreichen der neuen stationären Lösungen werden die Partikeltrajektorien an den Positionen fortgesetzt, an denen sie unterbrochen worden sind. Nach der Trajektorienberechnung des letzten sich bewegenden Partikels endet das Programm mit der abschließenden Bestimmung des Fluid- und Temperaturfeldes sowie der Potentiale.

8. Ergebnisse

Da in diesem Kapitel überwiegend Partikeltransport und -deposition in Filtern als Anwendungsbeispiel betrachtet wird, werden im ersten Abschnitt einige Grundbegriffe der Filtration näher erläutert. Für einen tieferen Einblick in das Thema wird auf [6, 47] verwiesen. In den folgenden Abschnitten werden zunächst die beschriebenen Lösungsverfahren für die kontinuierlichen Felder anhand wohldefinierter Benchmarkfälle validiert. Anschließend wird das Partikel-Monte-Carlo-Verfahren an theoretischen Grenzfällen wie auch an experimentellen Daten validiert. Als Anwendungsbeispiel wird neben der Partikelfiltration die Partikelabscheidung auf einer ebenen glatten Oberfläche gewählt. Untersucht wird sowohl der Einfluss äußerer, wie z. B. elektrischer, magnetischer oder thermophoretischer, Kräfte auf die Partikelbewegung als auch derjenige von Oberflächenkräften, wie z. B. van-der-Waals- oder Bild-Kraft, beim Depositionsvorgang. Das Kapitel endet mit Überprüfungen der Auswirkungen von Wechselwirkungen zwischen deponierten Partikeln und äußeren Feldern.

8.1. Grundbegriffe der Filtration

Eine wesentliche Kennzahl der Filtration ist der Filterwirkungsgrad η_F . Er ist definiert als $\eta_F \triangleq \frac{N_{\max} - N_h}{N_{\max}}$, wobei N_{\max} die Gesamtanzahl der gestarteten Partikel und N_h diejenige der nicht deponierten Partikel ist. Beide Werte unterscheiden sich um die Anzahl der am Filter deponierten Partikel. Der häufig verwendete Begriff der Penetration ist definiert als $P \triangleq 1 - \eta_F$.

Zur schnellen Abschätzung der Effektivität eines Filters existieren bereits seit einiger Zeit einfache Formeln, die für eine Einzelfaser entwickelt worden sind. Mit Hilfe von geometrischen Parametern wie dem Faserdurchmesser d_F , dem Partikeldurchmesser d_p oder der Packungsdichte $c_F \triangleq \frac{\text{Faservolumen}}{\text{Filtervolumen}}$ können diese Formeln auf „reale“ Filtergeometrien übertragen werden. Da die Faseroberfläche immer als rein angesehen wird, können bei diesen Abschätzungen instationäre Effekte, die durch deponierte Partikel im Filter auftreten, nicht berücksichtigt werden. Beispielsweise können abgeschiedene Partikel die Faserzwischenräume mit der Zeit verringern bzw. verstopfen, was zu einer stetigen Erhöhung der Druckdifferenz über dem Filter führt. Ebenso wenig wird die Interaktion zwischen abgeschiedenen und sich bewegenden Partikeln betrachtet. Diese kann jedoch beim Depositionsvorgang einen entscheidenden Einfluss haben. Je größer

die Anzahl der deponierten Partikel wird, desto kleiner werden die Faserzwischenräume und desto wahrscheinlicher wird die Deposition eines nachfolgenden Partikels.

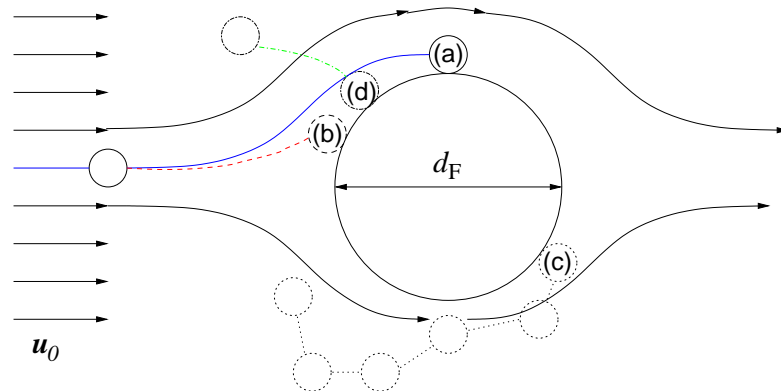


Abbildung 8.1.: Mechanische Abscheidemechanismen: (a) Abscheidung durch Interzeption, (b) Abscheidung durch Impaktion, (c) Abscheidung durch Diffusion, (d) Abscheidung durch Sedimentation.

In Abb. 8.1 sind verschiedene Abscheidemechanismen dargestellt. Sie können in zwei Gruppen eingeteilt werden: die mechanischen und die durch externe Kräfte hervorgerufenen. Zur ersten Gruppe zählt die Abscheidung durch Interzeption, (a). Dabei bewegt sich ein Partikel entlang einer Stromlinie auf die Faser zu. Führt die Stromlinie in einem Abstand kleiner dem Partikelradius an der Faser vorbei, so wird das Partikel beim Kontakt mit der Oberfläche abgeschieden. Der Filterwirkungsgrad aufgrund Interzeption ist proportional dem quadratischen Partikelradius $\eta_{iz} \propto r_p^2$. Ein weiterer Mechanismus ist die Deposition aufgrund Impaktion, (b). Verläuft eine Stromlinie in Nähe der Faser, so reagiert ein Partikel in Abhängigkeit von seiner Trägheit langsamer auf das Hindernis. Es nähert sich der Oberfläche und wird dort abgeschieden. Der Filterwirkungsgrad durch Impaktion verhält sich linear in der Stokeszahl

$$\text{Stk} = \frac{u_0 \tau_{Rt}}{d_F}, \quad (8.1)$$

worin u_0 die Anströmgeschwindigkeit und τ_{Rt} die Relaxationszeit aus Gl. (2.25) bezeichnet, $\eta_{ip} \propto \text{Stk}$, vgl. [81]. Der dritte mechanische Abscheidemechanismus ist die diffusionsbedingte Deposition, (c). Aufgrund der Brownschen Bewegung führt das Partikel zufallsverteilte isotrope Bewegungen aus, die es in Fasernähe und damit zur Deposition bringen können. Der Filterwirkungsgrad aufgrund Diffusion kann mittels der Pecletzahl

$$\text{Pe} = \frac{u_0 d_F}{D_{Br,t}} \quad (8.2)$$

abgeschätzt werden durch $\eta_D \propto \text{Pe}^{-2/3}$. Hierbei bezeichnet u_0 die mittlere Anström-

geschwindigkeit, d_F den Faserdurchmesser und $D_{Br,t}$ den Diffusionskoeffizienten des Partikels, siehe Gl. (2.41).

Die durch externe Kräfte bedingte Deposition wie Sedimentation aufgrund der Gravitation, (d), sowie Abscheidung durch elektrische oder magnetische Kräfte bilden die zweite Gruppe der Abscheidemechanismen.

8.2. Validierung der LBGK-Verfahren

Um die angestrebte Genauigkeit und damit die Güte der Lösungen zu überprüfen werden die Verfahren zur Lösung der Gleichungen der kontinuierlichen Felder an wohldefinierten Benchmarkfällen getestet.

8.2.1. LBGK-Verfahren für viskose, inkompressible Fluide

Zur Überprüfung des LBGK-Verfahrens für viskose, inkompressible Fluide werden zwei Fälle des bekannten Benchmarktests aus [78] gewählt. Für dieses Problem sind verschiedene Referenzwerte aus mehreren Vergleichsrechnungen tabelliert. Berechnet wird die zweidimensionale inkompressible Strömung um einen asymmetrisch in einem Kanal angeordneten Zylinder. Die Geometrie ist in Abb. 8.2 dargestellt. Zusätzlich zu den angegebenen Größen sind die Dichte $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ und die kinematische Viskosität $\nu = 0.001 \text{ m}^2/\text{s}$ gegeben. Am Eintritt ist die Geschwindigkeit in x -Richtung als Parabelprofil mit der maximalen Geschwindigkeit u_{\max} vorgegeben.

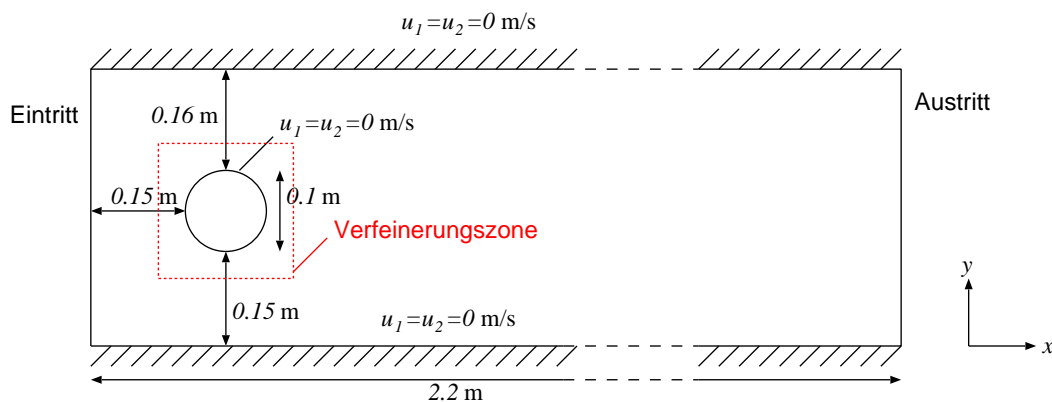


Abbildung 8.2.: Geometrie und Randbedingungen des Testfalls.

Beim ersten Fall handelt es sich um eine stationäre Strömung. Die maximale Eintrittsgeschwindigkeit beträgt dabei $u_{\max} = 0.3 \text{ m/s}$, dies liefert bei einem Zylinderdurchmesser $d = 0.1 \text{ m}$ die Reynoldszahl $Re = 20$. Als Vergleichswerte werden der Widerstands- und

Auftriebskoeffizient

$$c_D = \frac{2 \int_S (\rho \nu \frac{\partial u_t}{\partial n} n_2 - P n_1) dS}{\rho u_0^2 d} \quad \text{und} \quad c_L = - \frac{2 \int_S (\rho \nu \frac{\partial u_t}{\partial n} n_1 + P n_2) dS}{\rho u_0^2 d}, \quad (8.3)$$

die Druckdifferenz ΔP zwischen vorderem und hinterem Staupunkt und die Ablöselänge ℓ_a hinter dem Zylinder bestimmt. Es bezeichnet S die Zylinderoberfläche, $\mathbf{n} = n_\alpha$, $\alpha = 1, 2$ deren Normaleneinheitsvektor, u_t die tangentielle Geschwindigkeit an der Oberfläche S und $\boldsymbol{\tau} = \tau_\alpha = (-n_2, n_1)^T$ den Tangenteneinheitsvektor. Die mittlere Anströmgeschwindigkeit des Parabelprofils ergibt sich zu $u_0 = \frac{2}{3} u_{\max}$.

Verfeinerungsfaktor n	c_D	c_L	ΔP	ℓ_a
2	5.53	0.0101	0.1159	0.0839
4	5.61	0.0097	0.1166	0.0842
6	5.63	0.0096	0.1168	0.0842
8	5.64	0.0095	0.1168	0.0842
10	5.65	0.0095	0.1168	0.0842
Referenzwerte				
unterer Wert	5.57	0.0104	0.1172	0.0842
oberer Wert	5.59	0.0110	0.1176	0.0852

Tabelle 8.1.: Widerstandskoeffizient c_D , Auftriebskoeffizient c_L , Druckdifferenz ΔP und Ablöselänge ℓ_a bei variierenden Verfeinerungsfaktoren n , sowie die Bandbreite der Referenzwerte aus [78] für den Fall $Re = 20$.

In Tabelle 8.1 sind die aus den Simulationen erhaltenen Werte bei unterschiedlichen Verfeinerungsfaktoren n der Zone um den Zylinder angegeben. Zusätzlich sind die Referenzwerte aus [78] eingetragen. Die berechneten Werte liegen knapp außerhalb der vorgegebenen Bandbreite, sie können als zufriedenstellend angesehen werden. Als mögliche Ursache für die Differenzen kommt die Position der Verfeinerungszone infrage, die nur in unmittelbarer Umgebung des Zylinders liegt. Dadurch werden bei der quadratischen Extrapolation der Geschwindigkeit und des Druckes auf die geometrisch exakte Oberfläche auch ungenauere Grobgitterwerte verwendet.

Wird eine maximale Eintrittsgeschwindigkeit von $u_{\max} = 1.5 \text{ m/s}$ gewählt, ergibt sich eine Reynoldszahl $Re = 100$. Die Strömung wird instationär, es entsteht eine von Karmansche Wirbelstraße. Tabelle 8.2 zeigt die Werte der Simulationen für den maximalen Widerstands- bzw. Auftriebskoeffizienten, die Druckdifferenz zwischen vorderem und hinterem Staupunkt zum Zeitpunkt $t_0 + \frac{1}{2} \frac{1}{f_L}$ und die Strouhalzahl $Sr = \frac{d f_L}{u_{\max}}$. Hierbei bezeichnet t_0 einen Zeitpunkt, an dem der Auftriebskoeffizient maximal ist, f_L die Frequenz des Auftriebskoeffizienten, d den Zylinderdurchmesser und u_{\max} die maximale Eintrittsgeschwindigkeit.

Verfeinerungsfaktor n	c_D	c_L	ΔP	S_r
2	2.9596	0.9898	2.4603	0.2965
4	3.1892	1.0073	2.4823	0.2974
6	3.2276	1.0076	2.4844	0.2973
8	3.2360	1.0072	2.4858	0.2974
10	3.2395	1.0060	2.4862	0.2974
Referenzwerte				
unterer Wert	3.2200	0.9900	2.4600	0.2950
oberer Wert	3.2400	1.0100	2.5000	0.3050

Tabelle 8.2.: Maximaler Widerstandskoeffizient c_D , maximaler Auftriebskoeffizient c_L , Druckdifferenz ΔP und Strouhalzahl S_r bei variierenden Verfeinerungsfaktoren n , sowie die Bandbreite der Referenzwerte aus [78] für den Fall $Re = 100$.

Offensichtlich sind die mittels der LBGK-Methode bestimmten Werte innerhalb der Bandbreite der Referenzwerte. Am Beispiel der Auftriebskoeffizienten für die Verfeinerungsfaktoren $n = 2, 4, 8$ kann die räumliche Ordnung des Verfahrens nach der Richardson-Formel aus [21] abgeschätzt werden zu $O(\epsilon^p)$ mit $p = 2.30$, vgl. auch Abschnitt 5.2.

Abb. 8.3 zeigt die Ergebnisse bei einem Verfeinerungsfaktor $n = 6$ für die Verläufe des Auftriebs- bzw. Widerstandskoeffizienten und der Druckdifferenz über der Zeit. Die Druckdifferenz zum Zeitpunkt $t = t_0 + \frac{1}{2} \frac{1}{f_L}$ wird durch das Symbol \times verdeutlicht. Alle drei Vergleichswerte liegen innerhalb der vorgegebenen Grenzwerte, die jeweils durch gestrichelte Linien gekennzeichnet sind.

8.2.2. LBGK-Verfahren für Strömungen kleiner Machzahlen

Um die Güte der Lösung des LBGK-Verfahrens für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Dichte abschätzen zu können, wird das Beispiel aus [70] betrachtet und die Lösung mit dem dort angegebenen Ergebnis eines Druckkorrekturverfahrens verglichen. Bei dem Problem handelt es sich um einen Testfall für freie Konvektion.

Die Geometrie ist in Abb. 8.4 dargestellt. Betrachtet wird eine zweidimensionale ruhende geschlossene Kiste. Die seitlichen Wände sind isotherm, wobei an der linken eine höhere Temperatur T_h als an der rechten T_k vorgegeben ist. Die obere und untere Wand sind adiabat, d. h. dort ist kein Wärmestrom vorhanden. Damit sich eine Strömung ausbildet wird außerdem die Gravitation berücksichtigt, die in negative y -Richtung wirkt. Charakterisiert wird der Testfall durch die Rayleighzahl, die durch

$$Ra = Pr \frac{g \rho_0^2 (T_h - T_k) L^3}{T_0 \eta^2} \quad (8.4)$$

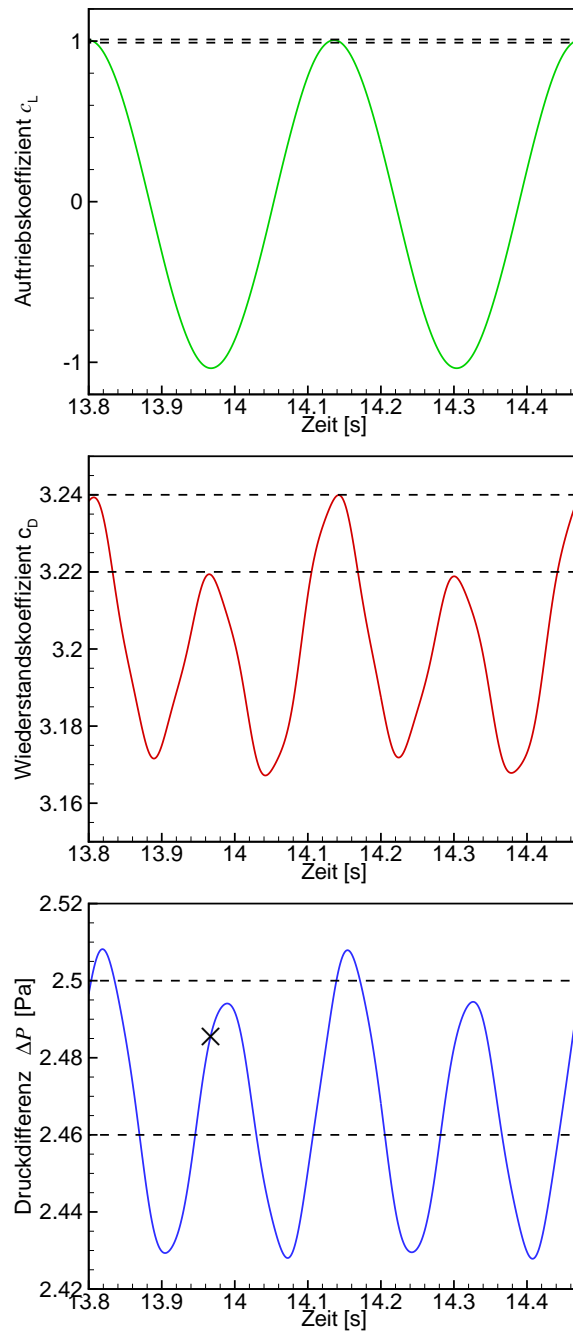


Abbildung 8.3.: Auftriebskoeffizient (oben), Widerstandskoeffizient (mitte) und Druckdifferenz bei minimalem Auftriebskoeffizienten (unten), aufgetragen über der Zeit für den Fall $Re = 100$ und $n = 6$. Die gestrichelten Linien stellen die jeweiligen Referenzwerte aus [78] dar.

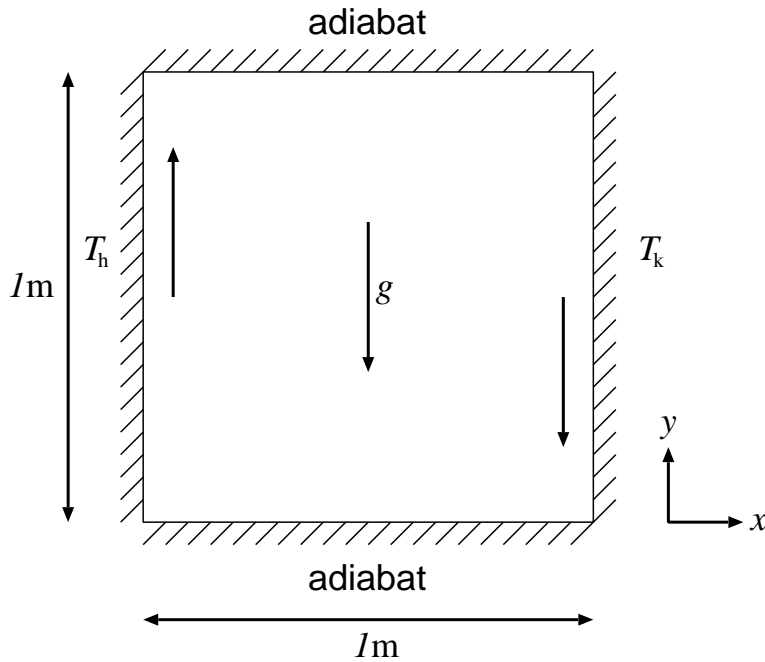


Abbildung 8.4.: Geometrie und Randbedingungen des Testfalls.

definiert wird. Hierbei bezeichnet $Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda_f}$ mit der Wärmeleitfähigkeit λ_f und der spezifischen Wärmekapazität c_p die Prandtlzahl, g die Erdbeschleunigung, L die Länge der Kiste und η die dynamische Viskosität. Die Referenztemperatur T_0 wird bestimmt aus $T_0 = (T_h + T_k)/2$, die Referenzdichte ρ_0 entspricht der Dichte bei der Temperatur T_0 . Die Temperaturdifferenz wird durch den dimensionslosen Parameter $\varepsilon = (T_h - T_k)/(T_h + T_k)$ dargestellt. Der Wärmetransport zu den Wänden wird durch die lokale bzw. gemittelte Nusseltzahl Nu bzw. Nu_m charakterisiert, die durch

$$Nu(y) = \frac{L}{\lambda_{f,0}(T_h - T_k)} \lambda_f \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_w \quad \text{bzw.} \quad Nu_m = \frac{1}{L} \int_0^L Nu(y) dy \quad (8.5)$$

bestimmt werden. Dabei ist $\lambda_f(T)$ die Wärmeleitfähigkeit und $\lambda_{f,0} = \lambda_f(T_0)$. Die Transportkoeffizienten $\eta(T)$ und $\lambda_f(T)$ werden über das gesamte Rechengebiet als konstant angenommen und bestimmen sich aus dem Sutherland-Ansatz für $T = T_0$

$$\frac{\eta(T)}{\eta^*} = \left(\frac{T}{T^*} \right)^{3/2} \frac{T^* + S}{T + S} \quad \text{und} \quad \lambda_f(T) = \frac{\eta(T) \kappa R}{(\kappa - 1) Pr} \quad (8.6)$$

mit $T^* = 273 \text{ K}$, $S = 110.5 \text{ K}$, $\eta^* = 1.68 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m s}$, $\kappa = 1.4$ und $R = 287 \text{ J/kg K}$.

Die Initialisierung der Rechnung erfolgt mit $P^{(0)} = 101\,325 \text{ Pa}$, $T_0 = 600 \text{ K}$, $R = 287 \text{ J/kg K}$, $\rho_0 = P^{(0)}/(R T_0)$, $Pr = 0.71$, $\kappa = 1.4$, $T_h = T_0(1 + \varepsilon)$ und $T_k = T_0(1 - \varepsilon)$.

Im Feld werden konstante Bedingungen gesetzt, also $T(x, y) = T_0$, $\rho(x, y) = \rho_0$ und $u_1(x, y) = u_2(x, y) = 0$.

Vergleichswert	LBGK-Verfahren	Druckkorrekturverfahren
P_{\max}	86 379 Pa	86 291 Pa
ρ_{\max}	1.2254 kg/m ³	1.2528 kg/m ³
ρ_{\min}	0.3160 kg/m ³	0.3132 kg/m ³
$u_{1,\max}$	0.1193 m/s	0.1261 m/s
$u_{1,\min}$	-0.0868 m/s	-0.0945 m/s
$u_{2,\max}$	0.1830 m/s	0.1884 m/s
$u_{2,\min}$	-0.1444 m/s	-0.1543 m/s
$Nu_{\max,h}$	8.4317	8.3903
$Nu_{\min,h}$	0.8302	0.8410
$Nu_{m,h}$	4.5440	4.5574
$Nu_{\max,k}$	7.3912	7.1721
$Nu_{\min,k}$	0.6261	0.6179
$Nu_{m,k}$	4.5866	4.5501

Tabelle 8.3.: Vergleich verschiedener Referenzwerte des LBGK-Verfahrens mit den Ergebnissen des Druckkorrekturverfahrens aus [70].

Für den Vergleich wird der Fall mit den Parametern $\varepsilon = 0.6$ und $Ra = 10^5$ bei einer räumlichen Auflösung von 81×81 Punkten gewählt. Die Integration zur Ermittlung der gemittelten Nusseltzahl erfolgt mittels der summierten Simpson-Regel, vgl. Def. A.3.3. Da es sich bei diesem Testfall um ein geschlossenes System handelt, ist der thermodynamische Druck $P^{(0)}(t)$ zeitabhängig. In jedem Zeitschritt wird er aus der Bedingung der Massenerhaltung über die Gleichung

$$P^{(0)}(t) = \frac{R M_0}{\iint_D (d(x, y)/T(t, x, y))} \quad (8.7)$$

bestimmt. M_0 bezeichnet die bei der Initialisierung vorhandene Gesamtmasse und D das gesamte Rechengebiet. Tabelle 8.3 zeigt die Ergebnisse der Vergleichswerte für beide Verfahren. Sie unterscheiden sich jeweils leicht, können aber noch als zufriedenstellend angesehen werden. Werden diese Werte jedoch mit denen des kompressiblen Verfahrens aus [70] verglichen, zeigen sich deutlich größere Unterschiede.

In den folgenden zwei Abbildungen sind Variablen über das gesamte Rechengebiet dargestellt. Sie zeigen einen ähnlichen Verlauf wie in [70]. Die Isolinien der Temperatur und einige Stromlinien werden in Abb. 8.5 abgebildet, während Abb. 8.6 die Isolinien der Wirbelstärke verdeutlicht.

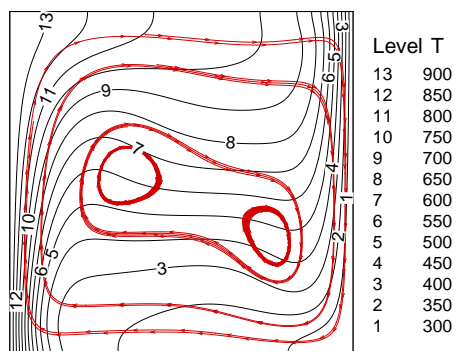


Abbildung 8.5.: Isolines der Temperatur und Stromlinien.

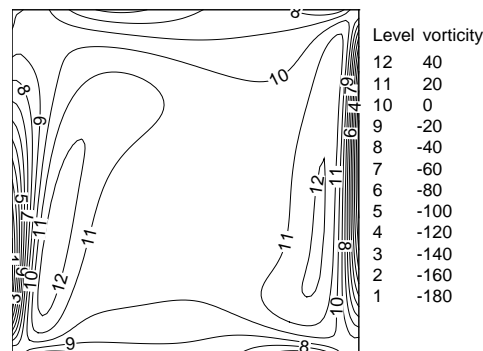


Abbildung 8.6.: Isolines der Wirbelstärke.

8.2.3. LBGK-Verfahren zur Lösung einer Poisson-Gleichung

Zur Validierung des LBGK-Verfahrens zur Lösung von Gleichungen des Poisson-Typs wird eine zweidimensionale Vergleichsrechnung zwischen diesem und einem Finite-Differenzen-Verfahren, dem Jacobi-Verfahren, durchgeführt. Gelöst wird die Laplace-Gleichung um einen Kreis, der sich in einem quadratischen Gebiet befindet. An der Kreisoberfläche und an der linken bzw. rechten Seite sind Dirichletsche Randbedingungen vorgegeben worden, während am oberen und unteren Rand des Integrationsgebietes periodische Randbedingungen angenommen worden sind. Dies entspricht der zweidimensionalen Reduktion eines Problems, wie es zum Beispiel bei der Bestimmung eines elektrischen Feldes um einen Faserfilter auftritt. Die Ergebnisse des LBGK-Verfahrens, dargestellt als durchgezogene Linie, in Form der Isolines des Potentials und diejenigen des Jacobi-Verfahrens, dargestellt als gestrichelte Linie, sind in Abb. 8.7 dargestellt. Der Vergleich der Lösungen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung, sie variieren nur unwesentlich. Der Unterschied liegt im Bereich des Abbruchfehlers der LBGK-Methode.

Eine weitere Rechnung wird bei gleicher Geometrie aber mit geänderten Randbedingungen durchgeführt. Am Kreis werden von-Neumann-Randbedingungen angenommen und an dem Rand des Integrationsgebietes Dirichlet-Randbedingungen. Beide Ergebnisse sind in Abb. 8.8 dargestellt: die durchgezogenen Isolines des Potentials stellen die Lösung des LBGK-Verfahrens dar und die gestrichelten Isolines diejenige des Jacobi-Verfahrens. Auch in diesem Fall stimmen die Lösungen sehr gut überein.

Die Rechenzeiten der beiden Verfahren sind nicht genauer untersucht worden. Das für ein Finite-Differenzen-Verfahren eher langsam konvergierende Jacobi-Verfahren hat jedoch deutlich weniger Rechenzeit benötigt als das LBGK-Verfahren.

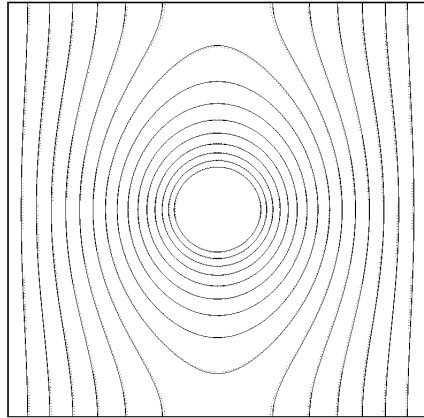


Abbildung 8.7.: Isolinien des Potentials mit Dirichletschen Randbedingungen an der Zylinderoberfläche.

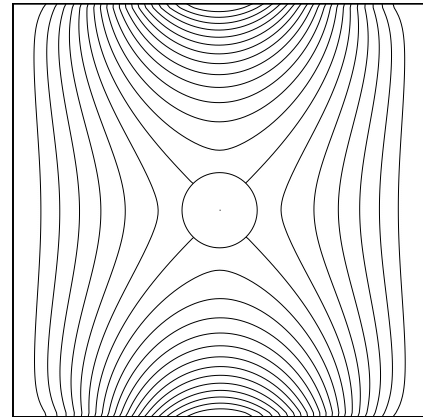


Abbildung 8.8.: Isolinien des Potentials mit von Neumannschen Randbedingungen an der Zylinderoberfläche.

8.3. Validierung des Partikelmodells

In Experimenten zur Erzeugung der Partikel sind die Vorgänge zwischen Partikelerzeugung und deren Ablagerung bzw. Entnahme nur in wenigen Fällen messtechnisch erfassbar. Das Endprodukt, d. h. die Partikel, sind meist erst extern, z. B. unter einem Mikroskop, analysierbar. Aus diesem Grunde gestaltet sich die Modellierung und Simulation der internen Vorgänge z. T. schwierig, da oft wenige oder nur integrale Validierungsmöglichkeiten bestehen. Deswegen erfolgt die Validierung des Partikelmodells in diesem Abschnitt anhand theoretisch bekannter Gleichungen bzw. Grenzfälle.

Um das stochastische Modell der Brownschen Bewegung zu validieren sind Vergleiche zwischen dem theoretischen und dem mit Hilfe der Simulation berechneten Diffusionskoeffizienten durchgeführt worden. Dadurch konnte nachgewiesen werden, dass ein zuerst favorisierter Ansatz mittels einer zufälligen Diffusionsgeschwindigkeit für die Simulation nicht geeignet ist.

Der Diffusionskoeffizient der Partikel lässt sich aus der Stokes-Einstein-Gleichung

$$D_{\text{Br},t} = \frac{k_b T}{\zeta_t} \quad (8.8)$$

mit der Boltzmann-Konstanten k_b , der Temperatur T , und dem Reibungskoeffizienten ζ_t aus Abschnitt 2.3 bestimmen. Die Simulationen der Brownschen Bewegung erfolgen für 2000 Partikel, die jeweils im Ursprung gestartet werden und keine Interaktion untereinander besitzen. Jedes Partikel bewegt sich nur unter dem Einfluss der Brownschen Diffusion bei einem vorgegebenen konstanten Zeitschritt Δt bis ein ebenfalls vorgegebener Zeitpunkt T_g erreicht wird. Mit den zu diesem Zeitpunkt erreichten Positionen der

Partikel wird das arithmetische Mittel des quadratischen Abstandes zum Ursprung $\overline{x^2}$ bestimmt. Damit kann auf den Diffusionskoeffizienten nach

$$\overline{x^2} = 6 D_{\text{Br},t} \Delta t \quad (8.9)$$

geschlossen werden, vgl. Abschnitt 2.3.3.

Zuerst wird die Simulation mit einem einfachen Modell durchgeführt. Dabei werden in Gl. (4.9) die in diesem Abschnitt vernachlässigte Fluidgeschwindigkeit und externen Kräfte durch eine Diffusionsgeschwindigkeit $v_{\text{diff}} = \sqrt{6D_{\text{Br},t}/\Delta t} z_g$ ersetzt, die sich nur auf die Partikelposition auswirkt. Die Komponenten des normierten Zufallsvektors z_g sind jeweils gleichverteilt auf dem Intervall $[0, 1]$. Der Diffusionsansatz beruht auf der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Partikels aus Abschnitt 2.3.3. Hieraus ergibt sich die mittlere quadratische Strecke $\overline{x^2}$ aus Gl. (8.9), die ein Partikel in einem Zeitschritt Δt zurücklegt. Dieses Modell setzt voraus, dass der Diffusionskoeffizient $D_{\text{Br},t}$ bekannt ist, z. B. aus der Stokes-Einstein-Gleichung (8.8). Als zweites wird das in Abschnitt 4.2.1 beschriebene PMC-Verfahren eingesetzt, bei dem die Brownsche Bewegung zusätzlich zur Position auch mit der Partikelgeschwindigkeit gekoppelt ist.

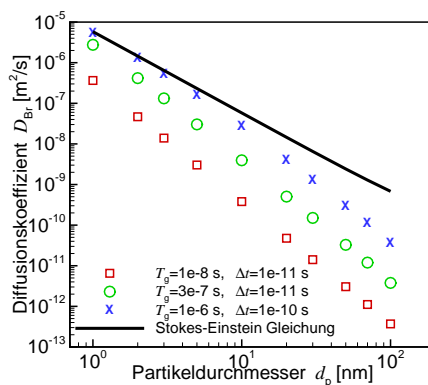


Abbildung 8.9.: Vergleich zwischen dem mittels einer Diffusionsgeschwindigkeit berechneten Diffusionskoeffizienten und dem theoretischen Wert aus der Stokes-Einstein-Gleichung.

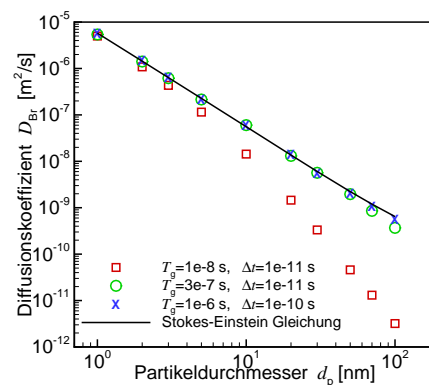


Abbildung 8.10.: Vergleich zwischen dem mittels der PMC-Methode berechneten Diffusionskoeffizienten und dem theoretischen Wert aus der Stokes-Einstein-Gleichung.

Abb. 8.9 zeigt, dass der mit der ersten Methode berechnete Diffusionskoeffizient in allen Fällen große Abweichungen, die mehrere Größenordnungen betragen können, gegenüber den theoretischen Werten aus der Stokes-Einstein-Gleichung aufweist. Beim zweiten Ansatz liegt er in guter Übereinstimmung mit diesen, falls die Anzahl der Zeitschritte genügend groß ist, vgl. Abb. 8.10. Im Falle der quadratischen Symbole ist die Zeitspanne zu klein, um den korrekten Diffusionskoeffizienten einstellen zu können. Wird sie jedoch um einen Faktor 30 vergrößert, kreisförmige Symbole, so stimmen die Werte

wieder gut mit den theoretischen überein. Die verwendete Zeitschrittweite liegt in der Größenordnung der Relaxationszeit τ_{Rr} aus Gl. (2.73), wie sie in den später betrachteten Anwendungsbeispielen auftritt.

Abb. 8.11 verdeutlicht die Abhängigkeit des Filterwirkungsgrades von dem Partikeldurchmesser. In der Simulation wird dieser zwischen 1 nm und 30 nm variiert. Der Partikeltransport und der Depositionsprozess werden von der Strömungsgeschwindigkeit, der Brownschen Bewegung und der van-der-Waals-Kraft beeinflusst. Der Faserdurchmesser beträgt $d_{\text{F}} = 650 \text{ nm}$, um Deposition von Partikeln auf bereits abgeschiedenen Partikeln betrachten zu können. Die Reynoldszahl beträgt $Re = 0.89$ und die mittlere Anströmgeschwindigkeit ist $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$. Die berechneten Wirkungsgrade sind jeweils aus 60 000 simulierten Partikeln ermittelt worden. Ausgehend von dem größten Partikeldurchmesser verkleinert sich der Filterwirkungsgrad mit abnehmendem Durchmesser bis zu einem Minimum bei etwa 8 nm. Ursache hierfür ist die direkte Interzeption, deren Einfluss mit abnehmender Partikelgröße deutlich nachlässt. Bei Partikeldurchmessern kleiner als 8 nm steigt der Filterwirkungsgrad stark an aufgrund des wachsenden Einflusses der Brownschen Diffusion. Die eingezeichneten Geraden stellen die asymptotischen Grenzwerte der Diffusion, vgl. die durchgezogene Linie, ($\propto Pe^{-2/3}$) und der direkten Interzeption, vgl. die gestrichelte Linie, ($\propto r_{\text{p}}^2$) dar, die für kleine Stokeszahlen St_{k} gelten, siehe [30]. Diese Bedingung werden in den Rechnungen erfüllt, die Stokeszahlen liegen zwischen $10^{-4} < St_{\text{k}} < 0.09$. Da die Asymptoten für eine Einzelfaser abgeschätzt werden, gehen Parameter wie z. B. die Form des Filters oder der Faserabstand nicht ein. Deswegen sind die Asymptoten bezüglich dieses speziellen Falles mittels Addition einer Konstanten angepasst worden. Die Steigungen der Asymptoten, auf die diese Korrektur keine Auswirkungen hat, stimmen gut mit den berechneten Werten überein. Änderung der Randkonturen und damit Änderungen der Randbedingungen für das Fluidfeld, Rechnung (a), nach jedem fünfzigsten deponierten Partikel hat kaum Einfluss auf den Depositionsprozess. Lediglich für Partikel mit einem Durchmesser größer als 8 nm treten vernachlässigbare Unterschiede beim Filterwirkungsgrad auf. Im Falle des festgehaltenen Fluidfeldes, Rechnung (b), ist er nur unwesentlich größer.

Bei experimentell gemessenen Verläufen des Filterwirkungsgrades liegt das Minimum für verschiedene Filtergeometrien in der Größenordnung von $O(100 \text{ nm})$, siehe z. B. [6]. Die Ursache der Differenz liegt u. a. an den deutlich unterschiedlichen Beträgen der Anströmgeschwindigkeiten $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$ bzw. $u_0 \approx 0.1 \text{ m/s}$. Je größer die Anströmgeschwindigkeit ist, desto weiter wird das Minimum in Richtung eines niedrigen Partikeldurchmessers verschoben bei ansonsten übereinstimmenden Strömungsbedingungen.

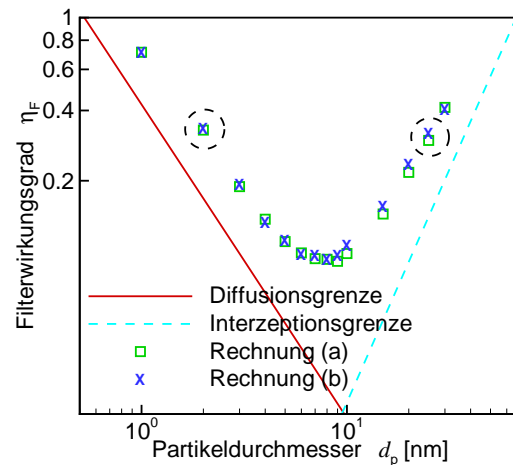


Abbildung 8.11.: Berechnete Filterwirkungsgrade verschiedener Partikeldurchmesser bei einem Faserdurchmesser von 650 nm. Vergleich zwischen den Rechnungen mit (a) und ohne (b) Berücksichtigung der geänderten Randkonturen und den asymptotischen Grenzfällen.

8.4. Deposition von Mikropartikeln an einem Faserfilter

In diesem Abschnitt werden Partikel betrachtet, die einen Durchmesser größer als $0.5 \mu\text{m}$ haben. In dem Fall nicht rotierender Partikel setzt sich die Lagrangesche Bewegungsgleichung aus der Trägheitskraft, der Widerstandskraft sowie der Gravitations- und Auftriebskraft zusammen.¹ Die Brownsche Diffusion kann dagegen bei der Modellierung der Partikelbewegung vernachlässigt werden, sodass die numerische Integration der Bewegungsgleichung mittels eines der bekannten Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen erfolgen kann, hier mit dem im Abschnitt 4.1 beschriebenen Runge-Kutta-Verfahren. Nach Abschnitt 2.6 kann die Modellierung der van-der-Waals-Kraft bei den betrachteten Partikelgrößen stark vereinfacht werden. Im Flug muss sie nicht berücksichtigt werden, erst wenn ein Partikel eine Wand berührt, wird es aufgrund der van-der-Waals-Kraft an der Oberfläche festgehalten. In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse aus [22] und [58] zusammengefasst.

Betrachtet wird eine mit dem LBGK-Verfahren berechnete dreidimensionale Strömung um eine zylindrische Einzelfaser bei einer Reynoldszahl $Re = 0.5$. Das Verhältnis von Faserdurchmesser zu Partikeldurchmesser beträgt 7.25. Abb. 8.12 zeigt die unterschiedlichen Einzelfaserabscheidegrade für zwei Simulationen mit verschiedenen Randbedingungen der Fluidphase: die molekulare Reflektions- bzw. boundary-fitting-Randbedingungen. Der Einzelfaserabscheidegrad ist definiert als das Verhältnis zwi-

¹Der Einfluss äußerer Felder wie elektrisches bzw. magnetisches Feld oder Temperaturfeld wird in diesem Abschnitt nicht berücksichtigt.

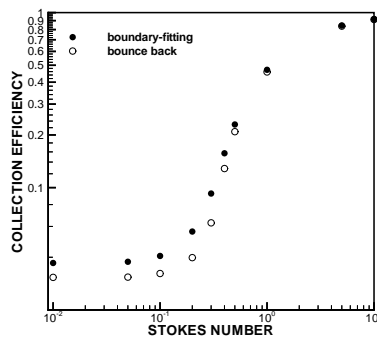


Abbildung 8.12.: Über der Stokeszahl aufgetragener Einzelfaserabscheidegrad bei unterschiedlichen Randbedingungen des Strömungsfeldes, $Re = 0.5$

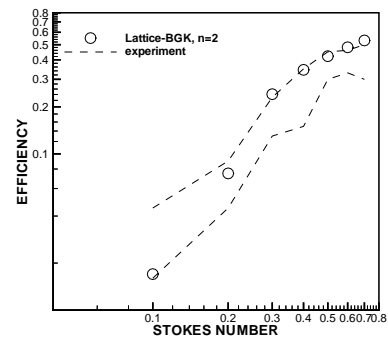


Abbildung 8.13.: Filterwirkungsgrad aufgetragen über die Stokeszahl, $Re = 2$. Vergleich zwischen Simulation (Kreise) und Experiment (Linien) aus [19].

schen dem Abstand der beiden Grenztrajektorien am Partikeleintritt, bei denen die Partikel gerade noch deponieren und der Summe aus Faser- und Partikeldurchmesser. Aufgrund der vernachlässigbaren Zufallsbewegung können die Grenztrajektorien eindeutig bestimmt werden. Für einen Cunningham-Faktor $C_c = 1$ kann die Stokeszahl aus Gl. (8.1) mit dem Radius r_p und der Dichte ρ_p des Partikel sowie dem Faserradius r_F und der Fluidichte ρ mit Hilfe der Reynoldszahl $Re = \frac{\rho u_0 d_F}{\eta}$ umgeformt werden zu $Stk = \left(\frac{r_p}{r_F}\right)^2 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right) \frac{Re}{18}$. Die Variation der Stokeszahl wird durch das Anpassen der Partikeldichte erzielt. Offensichtlich treten in den Ergebnissen bei Stokeszahlen $Stk \leq 0.4$ deutliche Differenzen von bis zu 30% für die unterschiedlichen Randbedingungen auf. Daraus kann abgeleitet werden, dass die Strömung in Fasernähe einen großen Einfluss auf das Depositionsverhalten der deterministisch bewegten Partikel hat.

Die Validierung der Partikelmethode erfolgt mittels der experimentellen Daten aus [19]. Dazu wird die Strömung mit $Re = 2$ um eine periodisch angeordnete in Achsenrichtung unendlich ausgedehnte zylindrische Faser mit dem LBGK-Verfahren aus Abschnitt 5.3 simuliert. Das Verhältnis zwischen dem Faserdurchmesser und dem Abstand zwischen zwei Fasern beträgt 0.69, die Partikel haben eine Durchmesser von $0.79 \mu\text{m}$. Abb. 8.13 zeigt, dass die Ergebnisse der Simulationen, dargestellt als Kreise, mit den Messergebnissen, dargestellt als Linien der begrenzenden minimalen und maximalen Werte, gut übereinstimmen.

Um den Einfluss der Anpassung des Strömungsfeldes auf die Partikelbewegung zu untersuchen, wird die Strömung um drei hintereinander angeordnete periodisch fortgesetzte Faserkreuze bei einer Reynoldszahl $Re = 2$ betrachtet. Für die Partikel wird eine Stokeszahl von $Stk = 0.3$ angenommen, das Verhältnis von Faserdurchmesser zu Partikeldurchmesser beträgt 9.8. Abb. 8.14 veranschaulicht die Ergebnisse mit Ver-

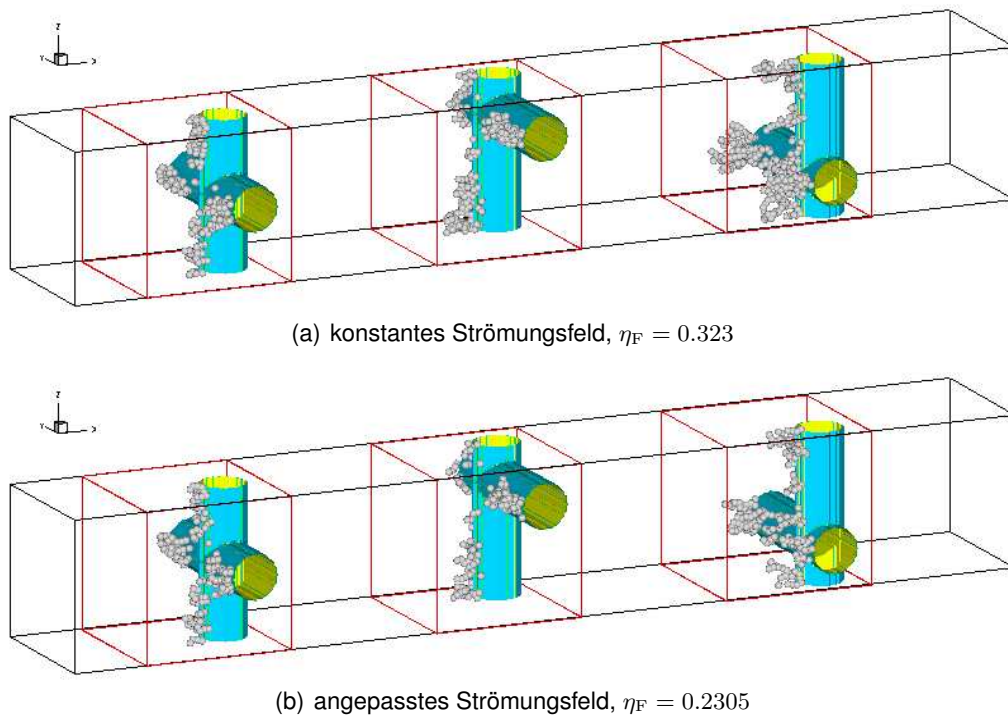


Abbildung 8.14.: Filtergitter mit deponierten Partikeln, $Re = 2$, $Stk = 0.3$

feinerungszonen um die jeweiligen Filterfasern. Im Fall (a) ist das Strömungsfeld um die ursprünglichen Fasern ermittelt und bei der Partikelbewegung konstant gehalten worden. Die Partikel deponieren überwiegend auf bereits vorher abgeschiedenen Partikeln und bilden lang gestreckte Strukturen, die entgegen der Hauptströmungsrichtung anwachsen. Der Filterwirkungsgrad über die drei Gitter beträgt $\eta_F = 0.323$. Deutlich weniger Partikel ($\eta_F = 0.2305$) deponieren im Fall (b), bei dem das Strömungsfeld nach jeweils 20 deponierten Partikeln neu berechnet worden ist. Die entstandenen Partikelstrukturen sind dichter als im ersten Fall. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Stromlinien des geänderten Feldes um die Partikel herumlaufen, während sie bei konstantem Geschwindigkeitsfeld durch die Depositionsschicht hindurch führen können.

Abb. 8.15 zeigt die zeitliche Änderung des Filterwirkungsgrades für ein konstantes und ein angepasstes Fluidfeld. Dazu wird die Gesamtanzahl der Partikel von 2000 in zehn Gruppen zu je 200 Partikeln eingeteilt. Nachdem die Trajektorien der Partikel einer Gruppe bestimmt worden sind, wird der Filterwirkungsgrad für die jeweilige Gruppe berechnet. In dem Fall des angepassten Strömungsfeldes wird zu diesen Zeitpunkten das Geschwindigkeitsfeld unter Berücksichtigung der deponierten Partikel neu ermittelt. Schon nach einer geringen Anzahl deponierter Partikel ist der Filterwirkungsgrad bei konstantem Strömungsfeld fast doppelt so groß. Diese Differenz vergrößert sich umso

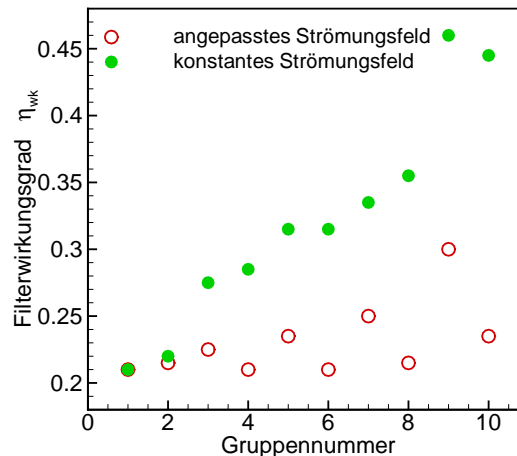


Abbildung 8.15.: Filterwirkungsgrad aufgetragen über die Nummer der Partikelgruppe, bestehend aus jeweils 200 Partikeln, $Re = 2$, $Stk = 0.3$

stärker, je mehr Partikel deponieren.

8.5. Deposition von Nanopartikeln an einem Faserfilter

Nachdem sich bei Mikropartikeln deutliche Differenzen zwischen den Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen beiden Phasen gezeigt haben, sollen nun ähnliche Untersuchungen bei kleineren Partikeldurchmessern erfolgen. Die im folgenden beschriebenen Ergebnisse, vgl. auch [62, 38], beziehen sich auf die Simulation von Transport- und Depositionsprozessen von Nanopartikeln, die einen Faserfilter, wie er in [52] verwendet wird, um- bzw. durchströmen. Der experimentelle Filter besteht aus 20 hintereinander angeordneten Gitterscheiben. Dabei ist der Abstand zwischen zwei Scheiben so groß gewählt worden, dass jede Scheibe mit dem gleichen ungestörten Blockprofil der Geschwindigkeit u_0 angeströmt wird. Jede Filterscheibe besteht aus regelmäßig angeordneten, verwobenen Fasern mit einem Durchmesser von $65 \mu\text{m}$, vgl. Abb. 8.16 (a). In den nachfolgenden Simulationen wird die Filtergeometrie vereinfacht durch zwei sich kreuzende und somit durchstoßende Fasern dargestellt. Um den Rechenaufwand in einen handhabbaren Rahmen zu halten, werden die Fasern in y - und z -Richtung periodisch fortgesetzt. D. h. der Filter wird in diesen Richtungen als unendlich ausgedehnt betrachtet. Die Hauptströmungsrichtung fällt mit der x -Achse zusammen, das Fluid strömt von links nach rechts, vgl. Abb. 8.16 (b). Als Trägergas wird Stickstoff bei einem Druck von einer Atmosphäre und einer Temperatur von 298.15 K eingesetzt. Wird ein nicht konstantes Temperaturfeld betrachtet, wird neben der Eintrittstemperatur $T_0 = 298.15 \text{ K}$ die Fasertemperatur T_F festgelegt. Zusätzlich zu dem Einfluss von Strömungsgeschwindigkeit und Brownscher Bewegung werden in weiteren

Schritten auch die Einflüsse von äußeren, z. B. elektrischen oder magnetischen, Feldern untersucht.

Für die Testrechnungen werden im wesentlichen zwei Fälle betrachtet. Der erste entspricht der oben beschriebenen Filtergeometrie. Die Anströmgeschwindigkeit beträgt $u_0 = 0.2126 \text{ m/s}$, damit ergibt sich eine Reynoldszahl $Re = 0.89$. Im zweiten Fall wird der Faserdurchmesser auf 650 nm reduziert, um die Wahrscheinlichkeit der Deposition von Partikeln auf bereits vorher abgeschiedenen Partikeln zu erhöhen.² Um in beiden Fällen dieselbe Reynolds- und Pecletzahl zu erhalten, wird die Anströmgeschwindigkeit auf $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$ erhöht.

Das Strömungsfeld wird mittels der beschriebenen LBGK-Methode berechnet, elektrisches und magnetisches Potential sowie das Temperaturfeld werden, falls vorhanden, mittels eines Finite-Differenzen-Verfahrens bestimmt. Die Partikelbewegung wird durch Integration der Langevin-Gleichungen für die Translations- (2.8) und die Rotationsbewegung (2.12), wie in Abschnitt 4.2.1 bzw. 4.2.2 beschrieben, durchgeführt. Die Penetration P wird aus einer Simulation mit 60 000 Partikeln bestimmt. Für 6 bis 100 nm Partikel liegt der diskrete Zeitschritt, in Abhängigkeit von der Partikelgröße, bei Berücksichtigung der Rotationsbewegung zwischen $3 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ und $8 \cdot 10^{-9} \text{ s}$, bei reiner Translationsbewegung variiert er zwischen $4 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ und $3 \cdot 10^{-7} \text{ s}$. Die während der Simulationen durchlaufenen Zeitspannen lagen zwischen $4.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ bei minimalem und $6.7 \cdot 10^{-2} \text{ s}$ bei maximalem Zeitschritt.

8.5.1. Einfluss von Strömung und Brownscher Bewegung

Um den Rechen- und Speicheraufwand zu optimieren werden zwei Filtergeometrien mit einander verglichen. Die erste komplexere Variante stellt die verwobenen Fasern in ähnlicher Weise dar, wie sie in dem realen Filter vorliegen, vgl. Abb. 8.16 (c). Mathematisch wird diese Geometrie mittels einer \sin - bzw. \cos -Funktion und einer kreisförmigen Faserquerschnittsfläche beschrieben. Um periodische Randbedingungen zu erhalten, müssen jeweils zwei horizontale und vertikale Fasern betrachtet werden. Der während der Simulation des Transportes in Oberflächennähe benötigte Abstand zwischen ankommendem Partikel und der Faseroberfläche kann bei der verwendeten nicht-linearen Beschreibung der Geometrie nicht analytisch angegeben werden und muss mittels eines Fixpunktverfahrens, z. B. dem Regula-falsi-Verfahren aus Abschnitt A.3.3, bestimmt werden. Die Anzahl der Iterationsschritte wird auf maximal 100 beschränkt. Analoges

²Obwohl die Knudsenzahl der Strömung damit in der Größenordnung $O(0.1)$ liegt, wird Haftbedingung an den Wänden in den Simulationen angenommen. Wie in Abschnitt 8.7.1 näher erläutert wird, spielen in Oberflächennähe bei den hier betrachteten Partikelgrößen von der Strömungsgeschwindigkeit beeinflusste Kräfte keine Rolle. Die unter den beschriebenen Bedingungen durchgeführten Rechnungen sollen den Einfluss, den die veränderten Felder auf die Partikelbewegung und -deposition nehmen können, verdeutlichen. Validierungen mit einem Experiment sind für den hier betrachteten Faserfilter nicht möglich, da er in dieser Größe nicht hergestellt wird.

trifft auf die Bestimmung des Depositionsortes eines Partikels zu. Aufgrund des großen Rechengbietes, bestehend aus 1 506 793 Gitterpunkten, und des damit benötigten Arbeitsspeichers von 798.3 MB, kann ein maximaler Faktor von vier für die lokale Verfeinerungszone um die Fasern gewählt werden.

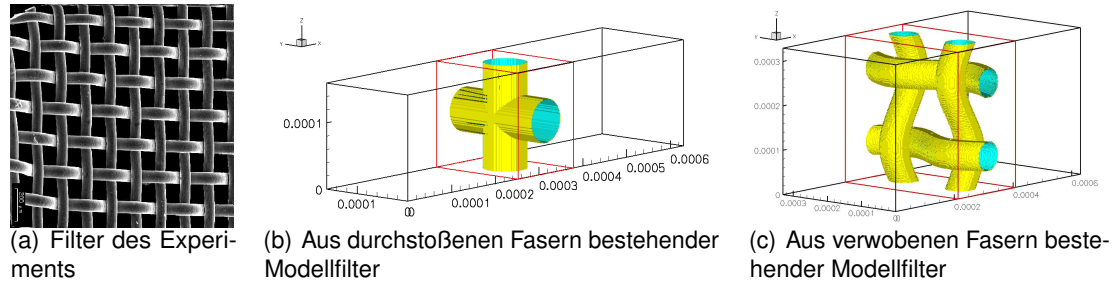


Abbildung 8.16.: Geometrien des Filters.

Ein deutlich kleineres Integrationsgebiet kann verwendet werden, falls die Filtergeometrie vereinfacht dargestellt wird. Dabei wird ein Faserkreuz durch zwei sich durchstoßende Fasern dargestellt, vgl. Abb. 8.16 (b). In dem Fall kann das lokale Gitter um die Fasern mit einem maximalen Verfeinerungsfaktor $n = 6$ mit 761 807 Gitterpunkten bei einer Arbeitsspeicherbelegung von 463.7 MB höher aufgelöst werden. Außerdem kann bei dieser vereinfachten Beschreibung der Geometrie die Partikelposition des Depositionsortes und diejenige des minimalen Abstandes zur Faseroberfläche sehr einfach analytisch bestimmt werden.

Die Vergleichsrechnungen zwischen beiden Geometrien beziehen sich auf den beschriebenen ersten Testfall mit einem Faserdurchmesser von $65 \mu\text{m}$ und einer Anströmgeschwindigkeit von $u_0 = 0.2126 \text{ m/s}$. Der Partikeldurchmesser wird zu 15 nm gewählt. Als Vergleichswert dient die Penetration einer Gitterscheibe des Filters. Zu deren Bestimmung werden in den Simulationen eine Gesamtanzahl von 10 000 Partikel betrachtet. Die Trajektorien werden durch Brownsche Bewegung, Widerstandskraft und im Nahbereich der Oberfläche auch durch die van-der-Waals-Kraft beeinflusst. Die Simulation über die vereinfachte Geometrie der durchstoßenen Fasern wird mit zwei verschiedenen Verfeinerungsfaktoren durchgeführt. Um einen Vergleich mit der komplexen verwobenen Geometrie zu ermöglichen, wird der Faktor $n = 4$ gewählt. Damit werden 242 421 Gitterpunkte und 145.2 MB des Arbeitsspeichers belegt. Über das Faserkreuz ergibt sich eine Penetration von $P = 0.9271$ bei den durchstoßenen Fasern und eine von $P = 0.9289$ bei den verwobenen. Daraus lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass der Unterschied zwischen den Ergebnissen aufgrund der unterschiedlichen Geometrien vernachlässigt werden kann. Beide Werte weichen jedoch deutlich vom experimentell gemessenen Wert von $P = 0.9651$ ab. Die Rechnung um die vereinfachte Geometrie mit einem Verfeinerungsfaktor von $n = 6$ liefert eine Penetration von $P = 0.9662$, die mit dem experimentellen Wert gut übereinstimmt. Aufgrund dieses Ergebnisses kann angenom-

men werden, dass der verwendete Verfeinerungsfaktor geeignet ist, das Fluidfeld mit der gewünschten Genauigkeit zu approximieren. Die im folgenden durchgeführten Simulationen beziehen sich deswegen auf die vereinfachte Geometrie der durchstoßenen Fasern mit einem Faktor $n = 6$ für das lokal verfeinerte Gitter.

In den Experimenten aus [52] sind die Penetrationen über den gesamten Filter für mehrere monodisperse Partikelverteilungen und unterschiedliche Eintrittsvolumenströme \dot{Q} des Trägergases gemessen worden. Der Partikeldurchmesser ist zwischen 9 und 20 nm variiert worden, der Faserdurchmesser beträgt jeweils $65 \mu\text{m}$. Der Volumenstrom des Trägergases am Eintritt des experimentellen Aufbaus liegt zwischen 0.5 und 2.0 Litern pro Minute, was einer Anströmgeschwindigkeit von 0.02655 m/s bis 0.1062 m/s entspricht. Die übrigen Parameter stimmen mit denen aus Abschnitt 8.5 überein.

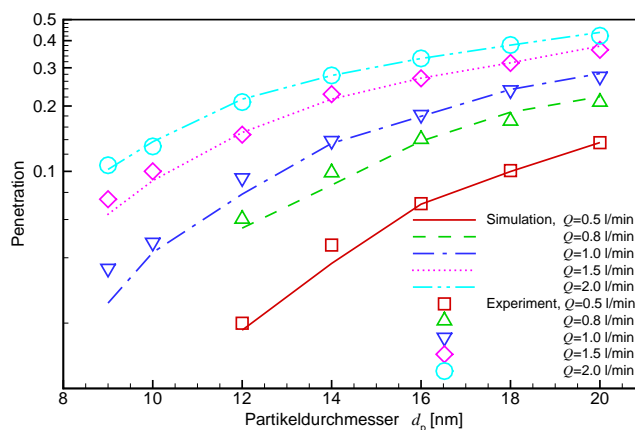
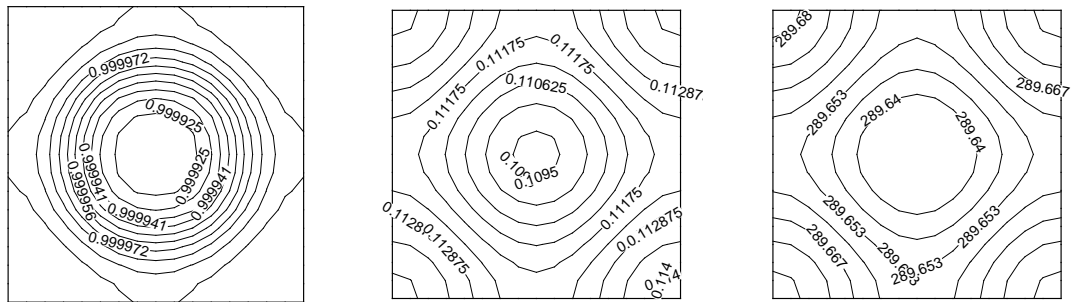


Abbildung 8.17.: Berechnete und gemessene Filterpenetrationen in Abhängigkeit von Partikeldurchmesser und Volumenstrom \dot{Q} des Trägergases.

In den Simulationen werden neben der Brownschen Diffusion, die Widerstandskraft und die van-der-Waals-Kraft beim Transport- und Depositionsvorgang berücksichtigt. Da das Verhältnis $\alpha_A \triangleq \frac{A_F}{A_q}$ von Faseroberfläche A_F zur Querschnittsfläche der Partikel A_q sehr groß ist, $\alpha_A = 5.5 \cdot 10^7$ bis $\alpha_A = 2.7 \cdot 10^8$, kann die Partikel-Partikel-Wechselwirkung bei der Deposition vernachlässigt werden. Dieses Verhältnis α_A liefert eine Abschätzung der maximalen Anzahl an Partikeln, die direkt auf der Faseroberfläche deponieren können. Die experimentellen Ergebnisse beziehen sich auf den gesamten Filter, der aus 20 einzelnen Scheiben aufgebaut ist. Die Simulationen dagegen wurden nur für ein Faserkreuz durchgeführt, welches einer Filterscheibe entspricht. Um die Ergebnisse für die Penetration vergleichen zu können müssen die aus den Simulationen erhaltenen Werte mit der Anzahl der im Experiment vorhandenen Scheiben potenziert werden. Dadurch werden jedoch auch etwaige Abweichungen entsprechend vergrößert. Die Simulationen werden mit einer Partikelanzahl von 10 000 durchgeführt. In Abb. 8.17 sind die Ergebnisse für den gesamten Filter bei unterschiedlichen Volumenströmen des

Trägergases und für verschiedene Partikeldurchmesser dargestellt. Die berechneten Penetrationen stimmen sehr gut mit den gemessenen Werten überein. Wird der Partikeldurchmesser von 20 nm auf 9 nm verringert, so nimmt auch die Penetration sukzessive ab. Dies ist durch diffusionsbedingte Partikelabscheidung aufgrund des ansteigenden Diffusionskoeffizienten zu erklären. Die Erhöhung der Anströmgeschwindigkeit führt zu einer größeren Penetration. Bei konstantem Partikeldurchmesser nimmt unter diesen Bedingungen der Einfluss des Diffusionsprozesses auf die Partikelbewegung und -deposition ab.



(a) Konzentrationsverteilung der 10 nm Partikeln

(b) Geschwindigkeitsverteilung

(c) Temperaturverteilung

Abbildung 8.18.: Verteilungsfunktionen über der Querschnittsfläche, die 142,5 μm vor dem Faserkreuz liegt.

Obwohl eine kontinuierliche Partikelphase nur geringe Aussagen über das Depositionsverhalten einzelner Partikel liefert, wird die entsprechende Konvektions-Diffusions-Gleichung (6.1) diskretisiert und mittels des in Abschnitt 6.1 beschriebenen Finite-Differenzen-Verfahrens gelöst. Ziel ist die Validierung der Koordinate x_0 der Startebene der Partikel. Die Koordinate x_0 muss genügend weit vor dem Filter liegen, um die Annahme einer ungestörten und damit gleichverteilten Partikelkonzentration über der Querschnittsfläche in y - und z -Richtung zu erlauben.

Abb. 8.18 (a) zeigt die Lösung der Konzentration der kontinuierlichen Partikelphase bei einem Durchmesser von 10 nm für die y - z -Ebene in einem Abstand von 142,5 μm vor dem Fasergitter. Dies entspricht etwa dem 2,2-fachen des Faserdurchmessers von 65 μm . Offensichtlich ist die Bedingung der Gleichverteilung der Partikelphase gegeben. Gleiches gilt auch für die Geschwindigkeitsverteilung bei einer mittleren Anströmgeschwindigkeit $u_0 = 0,1062 \text{ m/s}$, Abb. 8.18 (b), und für die Temperaturverteilung mit den Randbedingungen am Eintritt $T_0 = 298,15 \text{ K}$ und an der Faser $T_F = 268,15 \text{ K}$, Abb. 8.18 (c).

Um die Deposition auf bereits vorher abgeschiedenen Partikeln genauer untersuchen zu können, werden in den nun folgenden Simulationen die Bedingungen des zweiten Testfalls gewählt, also ein Faserdurchmesser von 650 nm und eine Anströmgeschwin-

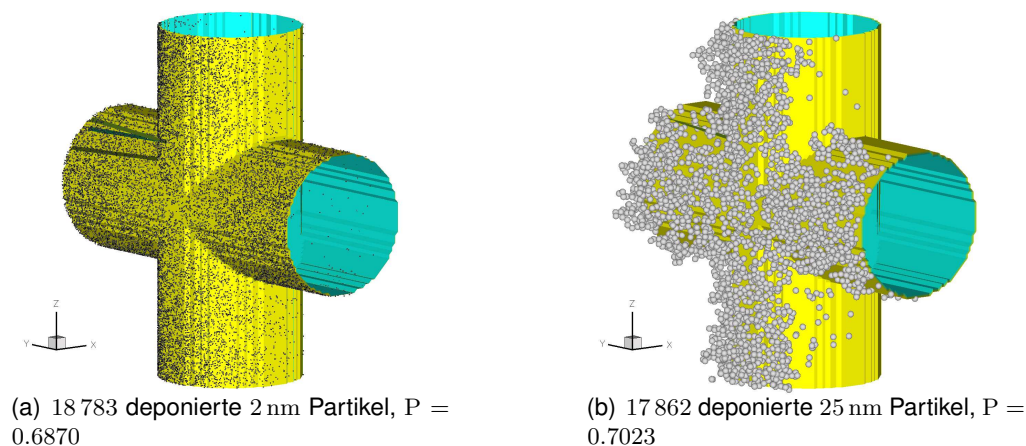


Abbildung 8.19.: Depositionsschichten am Faserkreuz.

digkeit von 21.26 m/s. Die in Abb. 8.11 eingekreisten Fälle mit ungefähr gleich großen Penetrationen über das Faserkreuz werden im folgenden näher untersucht. Abb. 8.19 (a) zeigt das Simulationsergebnis der Depositionsschicht im Falle von 2 nm Partikeln. Es deponieren 18 783 Partikel, die auf eine Penetration von $P = 0.6870$ führen. Diese kleinen Partikel werden im wesentlichen durch Diffusion abgeschieden, was durch eine gleichmäßige Verteilung auch auf der der Hauptströmungsrichtung abgewandten Faseroberfläche deutlich wird. Das Verhältnis $\alpha_{kd} \triangleq \frac{u_0 \Delta t}{v_{Br} \Delta t}$, v_{Br} aus Gl. (2.43), zwischen der Partikelverschiebung aufgrund der Strömungsgeschwindigkeit und derjenigen aufgrund der Brownschen Diffusion beträgt 0.05, woraus sich ebenfalls auf eine stark diffusiv bedingte Partikelbewegung schließen lässt. Deposition von Partikeln auf bereits abgeschiedenen Partikeln tritt kaum auf, da das oben beschriebene Flächenverhältnis α_A groß ist, $\alpha_A > 5.0 \cdot 10^6$. Abb. 8.19 (b) stellt die auf der Faser deponierten Partikel mit einem Durchmesser von 25 nm dar. Bei 17 862 abgeschiedenen Partikeln ergibt sich eine Penetration von $P = 0.7023$. Der entscheidende Prozess der Deposition ist hier die direkte Interzeption, die Partikel sind überwiegend im vorderen Bereich der Fasern deponiert. Das Verhältnis $\alpha_{kd} = 0.57$ ist nun deutlich größer. In diesem Fall tritt die Deposition von Partikeln auf anderen Partikeln häufig auf, da das Verhältnis von Faseroberfläche zu Partikelquerschnittsfläche nur etwa $\alpha_A = 3\,500$ beträgt. Es haben sich in beiden Testfällen Dendriten-ähnliche komplexe Depositionsstrukturen gebildet.

In den bisherigen Simulationen ist stets eine monodisperse Größenverteilung der Partikelphase vorausgesetzt worden, d. h. alle Partikel haben den gleichen Durchmesser. Um auch unterschiedliche Partikelgrößen innerhalb einer Simulation berücksichtigen zu können, ist der Partikelcode dahingehend erweitert worden, dass eine Verteilungsfunktion für den Partikeldurchmesser vorgegeben werden kann. Als Beispiel wird die durch eine Linie dargestellte diskrete Verteilungsfunktion in Abb. 8.20 (a) gewählt. Sie entspricht

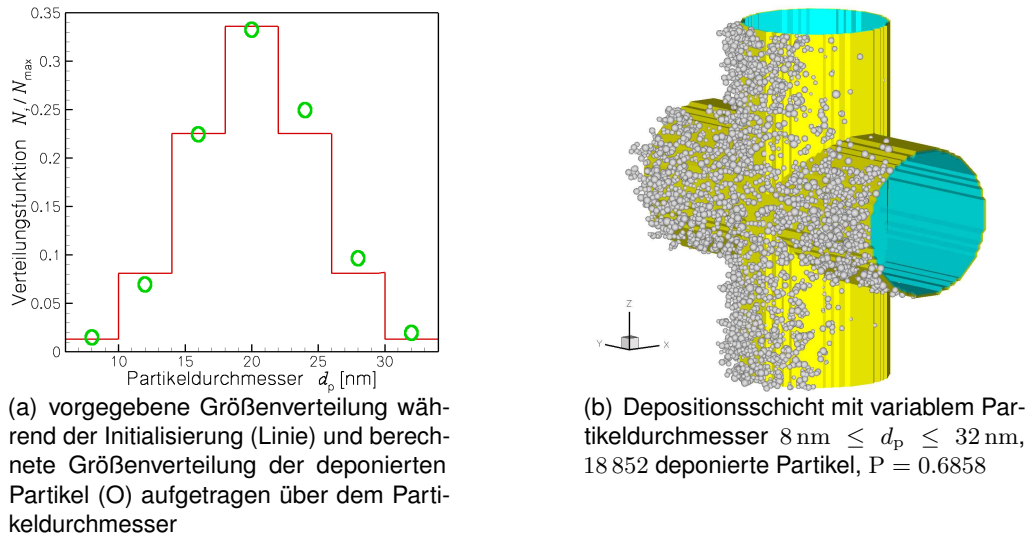
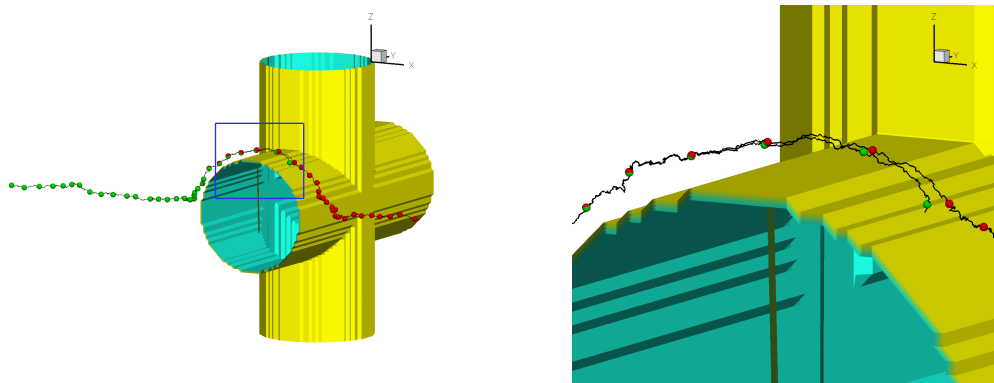


Abbildung 8.20.: Simulation mit variabler Partikelgröße.

einer Normalverteilung mit dem Erwartungswert von 20 nm und der Standardabweichung von 4.667 nm . Die übrigen Parameter stimmen mit denen der vorherigen Simulation überein, also Faserdurchmesser $d_p = 650 \text{ nm}$ und $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$. Abb. 8.20 (b) zeigt das Ergebnis nach 18 852 deponierten Partikel. Es ergibt sich bei Anpassung des Fluidfeldes nach jedem fünfzigsten deponierten Partikel eine Penetration von $P = 0.6858$. Im Vergleich mit Abb. 8.11 entspricht das Ergebnis einer Simulation mit einem konstanten Partikeldurchmesser in der Größenordnung von etwa $20 - 25 \text{ nm}$. Die Größenverteilung der deponierten Partikel ist in Abb. 8.20 (a) durch kreisförmige Symbole dargestellt. Insbesondere bei Partikeldurchmessern, die größer als der angesetzte Mittelwert sind, zeigen sich Abweichungen zur vorgegebenen Größenverteilung der Partikel während der Initialisierung.

Zum Schluss dieses Abschnittes soll der Einfluss der van-der-Waals-Kraft auf die Partikel untersucht werden, der, wie sich gezeigt hat, insbesondere nahe der Oberflächen nicht vernachlässigt werden darf. Die Kraft wird mit dem in Unterabschnitt 2.4.2 durch das Lennard-Jones-Potential beschriebene Modell bestimmt. Um die Bedeutung der Fluidgeschwindigkeit, die mit $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$ bei einem Faserdurchmesser von $d_F = 650 \text{ nm}$ sehr groß ist, auf die Partikelbewegung zu verringern, wird die Anströmgeschwindigkeit auf $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$ und damit auch die Reynoldszahl auf $Re = 0.0042$ reduziert. Abb. 8.21 (a) zeigt zwei Trajektorien eines 10 nm -Partikels mit bzw. ohne Berücksichtigung der van-der-Waals-Kraft. Nähert sich das Partikel der Faseroberfläche, hier ab einem Abstand von etwa 100 nm , so wird es durch die van-der-Waals-Kraft in Richtung Oberfläche abgelenkt, wo es schließlich deponiert. Bei Vernachlässigung dieser Kraft wird das Partikel nicht abgeschieden. Einen vergrößerten Ausschnitt des



(a) Trajektorie eines 10 nm Partikels mit und ohne Einfluss der van-der-Waals Kraft

(b) Vergrößerung eines Ausschnittes in unmittelbarer Oberflächennähe

Abbildung 8.21.: Einfluss der van-der-Waals-Kraft auf die Partikeltrajektorie.

Gebietes, in dem sich die beiden Trajektorien unterscheiden zeigt Abb. 8.21 (b). Um den Einfluss der Brownschen Bewegung während des Vergleichs zu eliminieren, ist in beiden Rechnungen die gleiche Folge an Zufallszahlen verwendet worden. Die Penetrationen über das Faserkreuz, die über 30 000 Partikel gemittelt worden sind, zeigen nur einen geringen Unterschied: mit Berücksichtigung der van-der-Waals-Kraft ergibt sich ein Wert von $P = 0.9380$, bei Vernachlässigung der Kraft ist die Penetration $P = 0.9304$.

8.5.2. Einfluss eines elektrostatischen Feldes

Untersucht werden soll nun der Einfluss, den ein elektrisches Feld auf den Transport und die Deposition geladener Partikel hat. Sind die Partikel z. B. negativ geladen, so kann durch Anlegen eines positiven Feldes um einen Filter die Anzahl der abgeschiedenen Partikel deutlich erhöht und der Filterwirkungsgrad somit verbessert werden.

Betrachtet wird zunächst das zweite Testbeispiel aus Abschnitt 8.5 mit einem Faserdurchmesser von 650 nm und einer Anströmgeschwindigkeit von $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$. Um die elektrisch leitenden Fasern wird ein elektrisches Feld der Stärke 600 kV/m angelegt. Dieses kann nach Gl. (3.22) durch ein fest vorgegebenes Potential an der Oberfläche beschrieben werden. Ein- und Austritt des betrachteten Integrationsgebietes werden mit einem konstanten Potential belegt, so dass ein nicht verschwindendes Gradientenfeld des Potentials entsteht. Abb. 8.22 (a) zeigt die Äquipotentialflächen dieses elektrischen Potentials um das Faserkreuz. Die Partikel haben einen Durchmesser von 10 nm und sind einfach geladen. Sie besitzen das Potential des Ein- bzw. Austritts, so dass sie aufgrund der Coulomb-Kraft in Richtung Faser bewegt werden. Deponiert ein Partikel an der Faser oder an einem vorher abgeschiedenen Partikel, so übernimmt es das Potential dieser Oberfläche. Neben der Coulomb-Kraft wird in Oberflächennähe

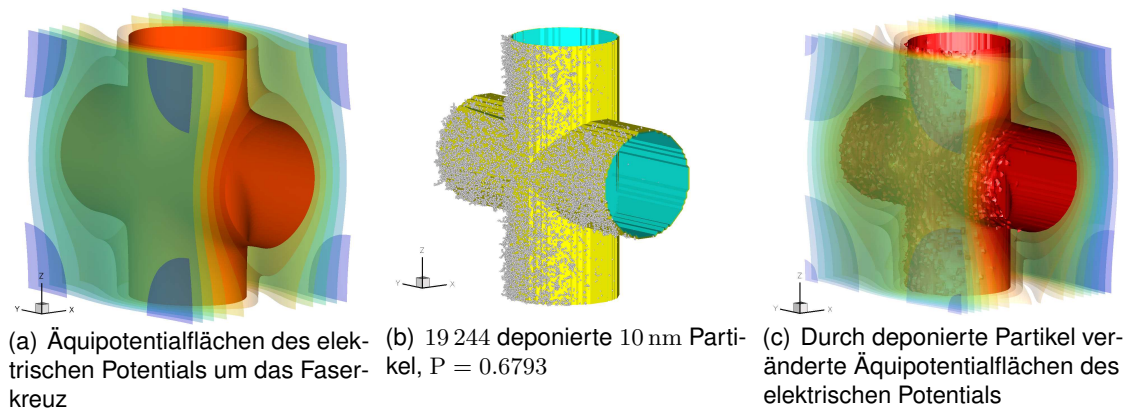
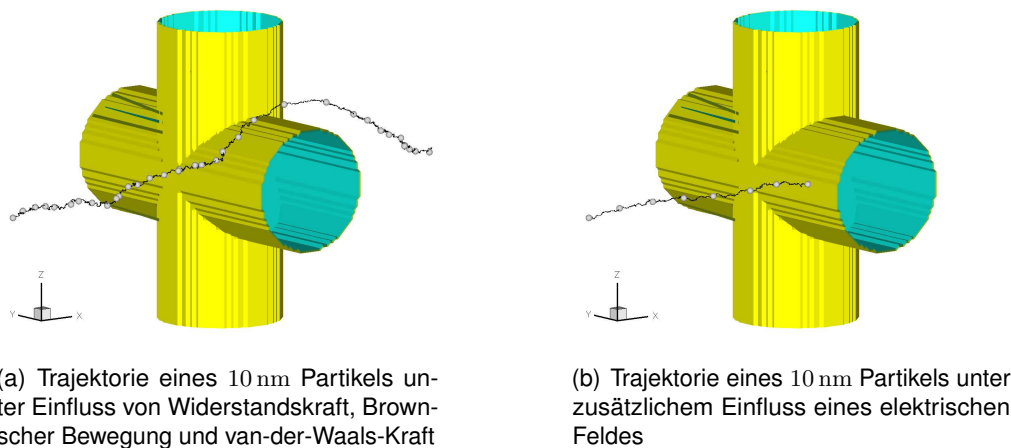


Abbildung 8.22.: Simulation mit elektrischem Feld E der Stärke 600 kV/m .

auch die Bild-Kraft zwischen Partikel und Faser bzw. zwischen bereits deponiertem und ankommendem Partikel berücksichtigt. Auf Abb. 8.22 (b) ist die Depositionsschicht um das Faserkreuz dargestellt. Die entstandenen Partikelstrukturen sind hier wesentlich größer als diejenigen auf Abb. 8.19 (b) ohne Berücksichtigung elektrischer Kräfte. Werden sowohl das Strömungs- als auch das elektrische Feld nach jeweils 50 deponierten Partikeln unter Berücksichtigung der veränderten Ränder neu berechnet, so ergibt sich eine Penetration über das Faserkreuz von $P = 0.6793$. Bei konstanten Feldern verringert sich die Anzahl der abgeschiedenen Partikel leicht, die Penetration wird zu 0.6821 . Werden die Einflüsse der elektrischen Kräfte vernachlässigt, so werden deutlich weniger Partikel abgeschieden, die Penetration ist $P = 0.9025$. In diesem Fall sind die Partikel nicht geladen, damit die Bild-Kraft vernachlässigt werden kann. Es zeigt sich also, dass Coulomb- und Bild-Kraft einen wesentlichen Einfluss auf elektrisch geladene Partikel haben können. Die Änderung der äußeren Felder durch deponierte Partikel spielt jedoch im Falle der Übertragung des Faserpotentials auf die Partikel nur eine untergeordnete Rolle. Den Einfluss der deponierten Partikel auf das elektrische Potential wird in Abb. 8.22 (c) dargestellt. Die Äquipotentialflächen in Oberflächennähe zeigen im Vergleich zur Lösung um die sauberen Fasern, Abb. 8.22 (a), leicht veränderte Verläufe in Form von „Beulen“.

Der beschriebene Einfluss der elektrischen Kräfte auf die Partikelphase soll nun anhand der Trajektorie eines einzelnen Partikels mit dem Durchmesser $d_p = 10 \text{ nm}$ verdeutlicht werden. Um einen Eindruck von der Partikelbewegung in dem experimentellen Filter zu bekommen, werden daher dessen Abmessungen übernommen, also die Parameter aus dem ersten Testbeispiel mit $d_F = 65 \text{ }\mu\text{m}$ und $u_0 = 0.2126 \text{ m/s}$. Die deutlich größere Anströmgeschwindigkeit des zweiten Beispiels würde zu einem geringeren Einfluss der Brownschen Bewegung auf die Trajektorie führen und diese würde sich, zumindest im Falle ohne Berücksichtigung elektrischer Kräfte, der Stromlinie annähern.



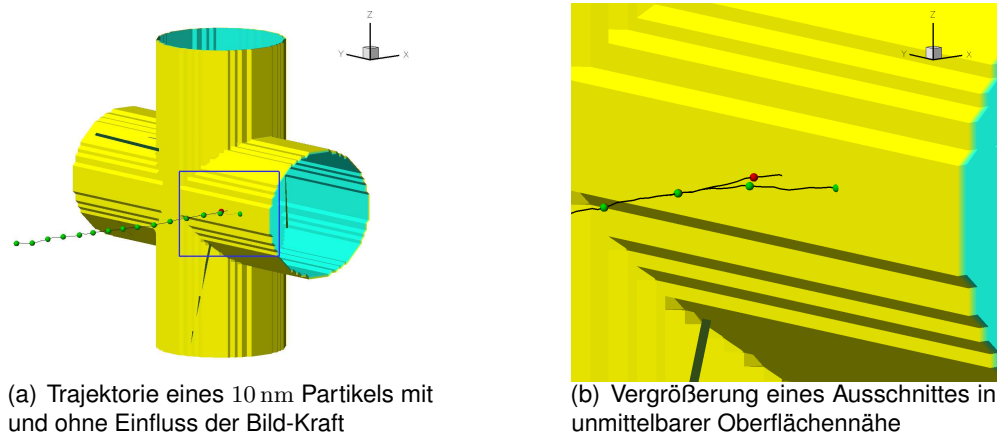
(a) Trajektorie eines 10 nm Partikels unter Einfluss von Widerstandskraft, Brownscher Bewegung und van-der-Waals-Kraft

(b) Trajektorie eines 10 nm Partikels unter zusätzlichem Einfluss eines elektrischen Feldes

Abbildung 8.23.: Einfluss eines elektrischen Feldes auf die Partikeltrajektorie.

Abb. 8.23 (a) zeigt die Trajektorie eines nicht geladenen Partikels nach 4 218 955 Zeitschritten unter dem Einfluss von Strömungsfeld, van-der-Waals-Kraft und Brownscher Diffusion. Letztere wird als irreguläre zufällige Bewegung verdeutlicht. Da die zu durchströmende Querschnittsfläche in der Faserebene wesentlich kleiner ist als außerhalb, erhöht sich dort die Fluidgeschwindigkeit im Vergleich zur Anströmgeschwindigkeit. Dadurch wird das Partikel aufgrund der Widerstandskraft beim Durchfliegen der Faser zunächst beschleunigt und dahinter wieder abgebremst. Dargestellt ist dieser Effekt durch den Abstand zwischen den Partikelpositionen, die jeweils nach einer festen Anzahl an konstanten Zeitschritten bestimmt worden sind. Die gleiche Simulation wird nun mit einem einfach geladenen Partikel und einem zusätzlich anziehend wirkenden elektrischen Feld der Stärke $E = 600 \text{ kV/m}$ um die Fasern durchgeführt. Das Partikel startet von der gleichen Position. Bei Vernachlässigung der elektrischen Kräfte fliegt das Partikel an der Faser vorbei, wohingegen es bei berücksichtigter anziehender elektrischer Kraft an dem Filter deponiert, vgl. Abb. 8.23 (b). Die zufällige Diffusionsbewegung wird in diesem Fall deutlich reduziert, die Rechnung benötigt deswegen lediglich 139 783 Zeitschritte. Für die Bestimmung beider Trajektorien ist die gleiche Sequenz von Zufallszahlen verwendet worden.

Im folgenden soll der Einfluss der Bild-Kraft auf die Partikelbewegung in unmittelbarer Oberflächennähe genauer untersucht werden. Dazu wird der Faserradius auf $d_F = 650 \text{ nm}$ und die Fluidgeschwindigkeit auf $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$ reduziert, was auf eine Reynoldszahl $Re = 0.0042$ führt. Die angelegte elektrische Feldstärke beträgt 600 kV/m , das Partikel hat einen Durchmesser von $d_p = 10 \text{ nm}$, ist einfach geladen und wird aufgrund der Coulomb-Kraft von der Faser angezogen. In Abb. 8.24 (a) sind zwei Trajektorien unter Berücksichtigung von Strömungsgeschwindigkeit, Brownscher Bewegung, van-der-Waals-Kraft sowie Coulomb-Kraft für ein einfach geladenes Partikel dargestellt.



(a) Trajektorie eines 10 nm Partikels mit und ohne Einfluss der Bild-Kraft

(b) Vergrößerung eines Ausschnittes in unmittelbarer Oberflächennähe

Abbildung 8.24.: Einfluss der Bild-Kraft auf die Partikeltrajektorie.

Die Berechnungen der Trajektorien erfolgen mit und ohne Einfluss der Bild-Kraft. Während beide weit vor der Faser übereinstimmen, verlaufen sie in Nähe der Oberfläche, in diesem Fall ab einer Entfernung von etwa 100 nm, unterschiedlich. Durch die Berücksichtigung der Bild-Kraft wird das Partikel deutlich früher zur Oberfläche hin bewegt und deponiert an einer anderen Position im Vergleich zum Fall bei Vernachlässigung dieser Kraft. Abb. 8.24 (b) zeigt einen vergrößerten Ausschnitt des Bereiches.

8.5.3. Einfluss eines magnetostatischen Feldes

Bestehen die Partikel aus ferromagnetischer Materie, z. B. Eisen, Kobalt oder Nickel, so besitzen sie ein ausgerichtetes magnetisches Moment, das in den folgenden Betrachtungen fest mit dem Partikel verbunden ist. Durch das Anlegen eines äußeren Magnetfeldes und die bei geeignetem Filtermaterial dadurch induzierte Magnetisierung der Fasern kann somit über die magnetische Kraft, vgl. Gl. (2.32), und das magnetische Drehmoment, vgl. Gl. (2.76), Einfluss auf die Partikeltrajektorien ausgeübt werden. Unter diesen Voraussetzungen darf die Rotationsbewegung der Partikel, auch bei sphärischer Geometrie, nicht vernachlässigt werden.

Betrachtet wird wiederum der beschriebene Siebfilter bestehend aus zwei sich kreuzenden ferromagnetischen Nickel-Filterfasern, die durch ein in Hauptströmungsrichtung x ausgerichtetes äußeres Magnetfeld \mathbf{H}_0 magnetisiert werden. Das Magnetfeld $\mathbf{H} = -\nabla\psi$ um die Fasern kann als Gradient eines skalaren magnetischen Potentials ψ dargestellt werden, welches aus einer Laplace-Gleichung mit den entsprechenden Randbedingungen bestimmt werden kann, vgl. Abschnitt 3.2.2. Die Lösung der Gleichung wird mittels des Finite-Differenzen-Verfahrens aus Kap. 6 berechnet mit entsprechenden Parametern für das äußere Magnetfeld \mathbf{H}_0 und die Fasermagnetisierung \mathbf{M}_F . Bei der Partikelbewegung muss wegen des nicht beweglichen magnetischen Momentes des Par-

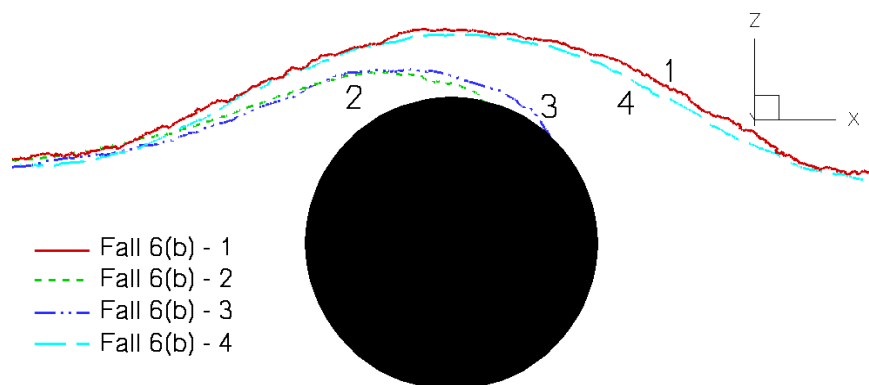


Abbildung 8.25.: Partikeltrajektorien bei unterschiedlichen Durchmessern und magnetischen Momenten, nach [92]: 1 – $d_p = 40$ nm, $|\mathbf{m}| = 10^{-19}$ A m²; 2 – $d_p = 100$ nm, $|\mathbf{m}| = 1.55 \cdot 10^{-17}$ A m²; 3 – $d_p = 200$ nm, $|\mathbf{m}| = 2.25 \cdot 10^{-17}$ A m²; 4 – $d_p = 500$ nm, $|\mathbf{m}| = 6.5 \cdot 10^{-17}$ A m², $u_0 = 0.09$ m/s, $|\mathbf{H}_0| = 3.3 \cdot 10^4$ A/m, $|\mathbf{M}_F| = 1.4 \cdot 10^5$ A/m.

tikels neben der translatorischen, Gl. (2.8), auch die rotatorische Bewegungsgleichung, Gl. (2.12), berücksichtigt werden.

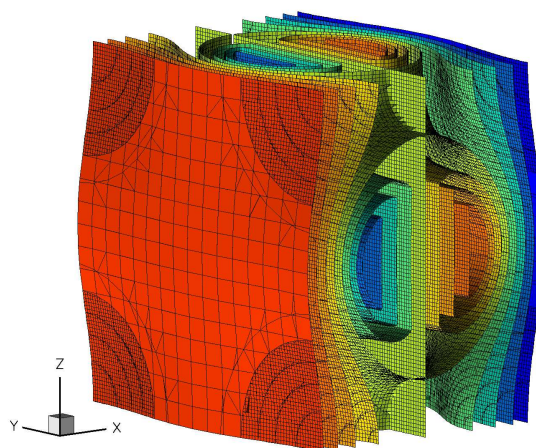


Abbildung 8.26.: Äquipotentialflächen des skalaren magnetischen Potentials um ein Faserkreuz bei einer magnetischen Feldstärke $|\mathbf{H}_0| = 1.19 \cdot 10^6$ A/m und einer Fasermagnetisierung $|\mathbf{M}_F| = 489\,830$ A/m.

Um einen ersten Anhaltspunkt für die korrekte der Berechnung des Magnetfeldes und der Trajektorienbestimmung zu erhalten, werden zunächst die in [92] verwendeten Simulationsparameter eingestellt. Als Ergebnis sollen einige Trajektorien mit den dort dargestellten verglichen werden. Dazu wird die zweidimensionale Umströmung einer periodisch angeordneten einzelnen Faser mit dem LBGK-Verfahren aus Abschnitt 5.3

und das zugehörige magnetische Potentialfeld mit dem Finite-Differenzen-Verfahren aus Kapitel 6 bestimmt. In der y -Richtung, also entlang der Zylinderachse, genügt eine Diskretisierung bestehend aus drei Punkten, damit die periodischen Randbedingungen erfüllt sind. Der Faserdurchmesser beträgt $65 \mu\text{m}$, die Anströmgeschwindigkeit ist $u_0 = 0.09 \text{ m/s}$, die magnetische Feldstärke liegt bei $|\mathbf{H}_0| = 3.3 \cdot 10^4 \text{ A/m}$ und die Fasermagnetisierung ist $|\mathbf{M}_F| = 1.4 \cdot 10^5 \text{ A/m}$. Der Partikeldurchmesser d_p und das magnetische Moment des Partikels werden in den Simulationen variiert. Abb. 8.25 zeigt die nach Einstellung der jeweiligen Parameter berechneten Trajektorien. Die Ergebnisse des in dieser Arbeit entwickelten 3D-Codes mit denen des 2D-Codes aus [92] stimmen gut überein.

u_0 [m/s]	d_p [nm]	α_{cm}	P_{kal}	P_{exp}	u_0 [m/s]	d_p [nm]	α_{cm}	P_{kal}	P_{exp}
0.04248	20	0.8	0.657	0.738	0.0531	20	0.8	0.725	0.780
	18	1.0	0.651	0.754		18	1.0	0.695	0.794
	16	1.3	0.472	0.769		16	1.3	0.547	0.809
	14	1.9	0.739	0.788		14	1.9	0.744	0.821
	12	2.8	0.738	0.806		12	2.8	0.780	0.833
0.07965	20	0.8	0.811	0.816	0.1062	20	0.8	0.848	0.846
	18	1.0	0.785	0.830		18	1.0	0.860	0.858
	16	1.3	0.822	0.845		16	1.3	0.840	0.870
	14	1.9	0.837	0.858		14	1.9	0.878	0.882
	12	2.8	0.828	0.865		12	2.8	0.866	0.889

Tabelle 8.4.: Berechnete und gemessene Penetrationen eines magnetisierten Filters bei unterschiedlichen Anströmgeschwindigkeiten und Partikeldurchmessern.

Mit dem gleichen Programm werden Vergleichsrechnungen mit den in [52] gemessenen Werten für die Penetration durchgeführt. Die Filtergeometrie wird wieder auf zwei sich kreuzende Fasern mit einem Durchmesser von $65 \mu\text{m}$ erweitert. Die magnetische Feldstärke liegt bei $|\mathbf{H}_0| = 1.19 \cdot 10^6 \text{ A/m}$ und die Fasermagnetisierung bei $|\mathbf{M}_F| = 489\,830 \text{ A/m}$. Abb. 8.26 zeigt das skalare magnetische Potential um das Faserkreuz. Die Messungen erfolgten für Anströmgeschwindigkeiten zwischen $u_0 = 0.04248 \text{ m/s}$ und $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$, der Partikeldurchmesser wurde zwischen zwölf und 20 nm variiert. Das größenabhängige magnetische Moment der Nickel-Partikel wird nach Gl. (2.30) bestimmt. Es zeigen sich jedoch große Differenzen zwischen den für ein Filtergitter gemessenen Penetrationen P_{exp} und den berechneten P_{kal} . Mit Hilfe eines vom Partikeldurchmesser abhängenden Fitparameters α_{cm} , vgl. Tab. 8.4, wird das jeweilige magnetische Moment der Partikel bei der höchsten Anströmgeschwindigkeit so angepasst, dass die berechneten Penetrationen ungefähr den gemessenen Werten entsprechen. Bei Variation der Anströmgeschwindigkeit u_0 mit für jede Partikelgröße konstantem Fitparameter α_{cm}

treten jedoch erneut deutliche Unterschiede zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen auf, die in Tab. 8.4 dargestellt sind.

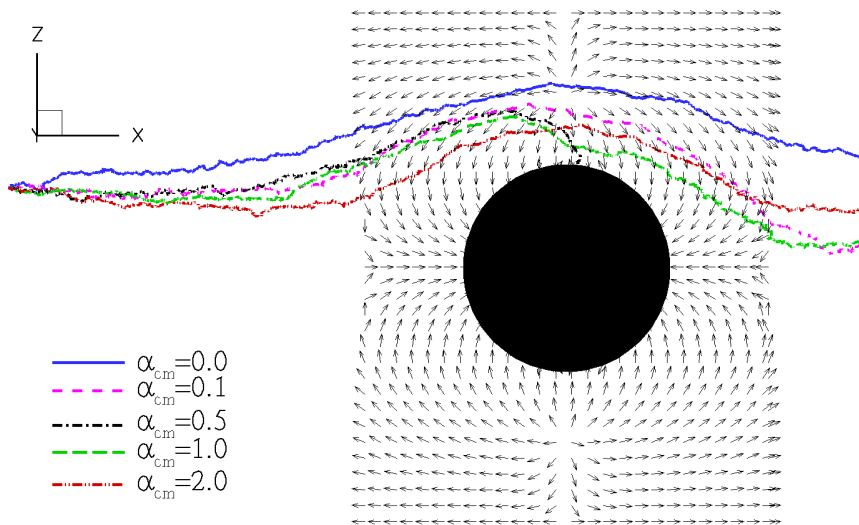


Abbildung 8.27.: Partikeltrajektorien eines 20 nm Partikels bei unterschiedlichen magnetischen Momenten und Vektoren von $\nabla|\mathbf{H}|$.

Um die für die Unterschiede verantwortlichen Effekte genauer untersuchen zu können, werden Sensitivitätsanalysen bzgl. der Fasermagnetisierung und des magnetischen Momentes der Partikel durchgeführt. Dabei wird auf die vereinfachte zweidimensionale Filtergeometrie mit einer periodisch angeordneten unendlich ausgedehnten Faser und auf die Partikeltrajektorien als Ergebnisse aus [92] zurückgegangen. In Abb. 8.27 sind fünf Trajektorien eines 20 nm Partikels mit $|\mathbf{H}_0| = 1.19 \cdot 10^6 \text{ A/m}$, $|\mathbf{M}_F| = 4.9 \cdot 10^5 \text{ A/m}$ und $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$ dargestellt. Das magnetische Moment des Partikels $|\mathbf{m}| = 1.87 \cdot 10^{-19} \text{ A m}^2$ wird durch Multiplikation mit dem Fitparameter α_{cm} , der Werte zwischen 0.0 und 2.0 annimmt, variiert. Die dargestellten Vektoren um die Faser zeigen den Term $\nabla|\mathbf{H}|$, der in die magnetische Kraft eingeht, vgl. Gl. (2.32). Diese Untersuchung verdeutlicht, dass kleine Änderungen des magnetischen Momentes des Partikels nicht vorhersehbare Auswirkungen auf die Partikelbewegung haben können. Bei $\alpha_{cm} = 0.5$ wird das Partikel abgeschieden, während es in allen anderen Fällen an der Faser vorbei fliegt. Die Ursache für dieses Verhalten liegt in den Singularitäten, ähnlich von Quellen, im dargestellten Vektorfeld. Deren Positionen hängen von der Fasermagnetisierung \mathbf{M}_F und der magnetischen Feldstärke \mathbf{H}_0 ab. Sie nehmen über die magnetische Kraft direkten Einfluss auf die Partikeltrajektorie.

Abb. 8.28 zeigt vier Trajektorien eines 100 nm Partikels mit $|\mathbf{H}_0| = 3.3 \cdot 10^4 \text{ A/m}$, $|\mathbf{m}| = 1.55 \cdot 10^{12} \text{ A m}^2$ und $u_0 = 0.09 \text{ m/s}$. Die Fasermagnetisierung wird variiert zwischen $|\mathbf{M}_F| = 0 \text{ A/m}$, $|\mathbf{M}_F| = 7.0 \cdot 10^4 \text{ A/m}$, $|\mathbf{M}_F| = 1.4 \cdot 10^5 \text{ A/m}$ und $|\mathbf{M}_F| = 2.8 \cdot 10^5 \text{ A/m}$. In den ersten beiden Fällen fliegt das Partikel an der Faser vorbei, während es in den beiden

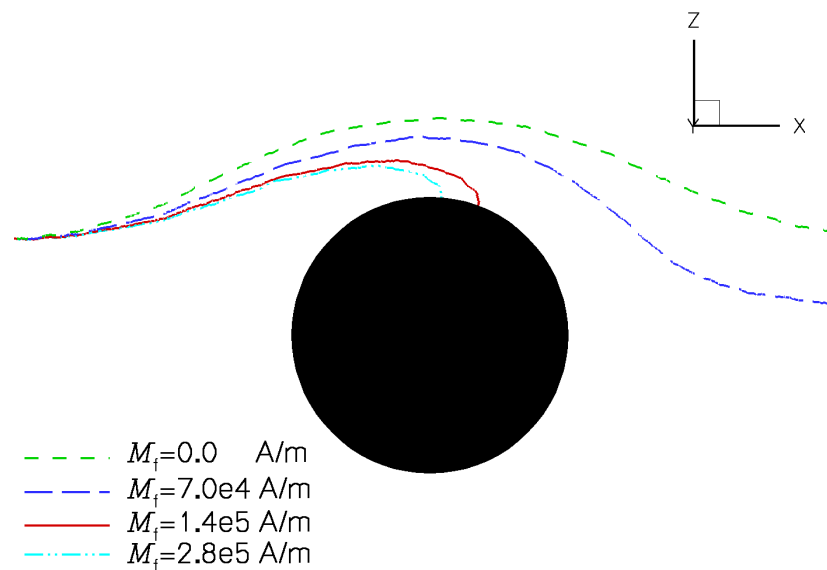


Abbildung 8.28.: Partikeltrajektorien eines 100 nm Partikels bei verschiedenen Fasermagnetisierungen.

letzten abgeschlossen wird. Es lässt sich ein Zusammenhang zwischen Partikelbewegung und Fasermagnetisierung erkennen: je größer die Fasermagnetisierung ist, desto näher wird das Partikel zu der Faseroberfläche hin abgelenkt.

8.5.4. Einfluss eines Temperaturfeldes

Liegt in dem Gebiet, das die Partikel durchqueren ein Temperaturgradient vor, so kann dieser durch die thermophoretische Kraft, Gl. (2.33), Einfluss auf die Partikelbewegung nehmen. Als Anwendungsbeispiel dient erneut die Filtergeometrie mit den durchstoßenden Fasern. Folgende Parameter werden gewählt: für die Anströmgeschwindigkeit gilt $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$, der Partikeldurchmesser ist $d_p = 10 \text{ nm}$ und die Eintrittstemperatur wird auf $T_0 = 298.15 \text{ K}$ festgelegt. Die Navier-Stokes-Gleichungen für Strömungen kleiner Machzahlen und variabler Temperatur bzw. Dichte werden mit Hilfe des in Abschnitt 5.4 beschriebenen LBGK-Verfahrens gelöst. Für die Temperaturgleichung wird ein Finite-Differenzen-Verfahren mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung verwendet. Unter diesen Voraussetzungen werden zwei Fälle näher untersucht.

Fall 1:

Bei einem Faserdurchmesser von $d_F = 65 \mu\text{m}$ ergibt sich eine Reynoldszahl $Re = 0.424$, es wird eine Fasertemperatur von $T_F = 268.15 \text{ K}$ gewählt. Nach einem Durchlauf von

jeweils 30 000 Partikeln werden die Penetrationen über das Faserkreuz ohne und mit Berücksichtigung der thermophoretischen Kraft bestimmt. Bei Vernachlässigung der Thermophorese ergibt sich eine Penetration von $P = 0.9691$. Nach Zuschalten dieses Termes verringert sich die Penetration sehr gering auf $P = 0.9663$. Dieses Ergebnis zeigt die physikalisch richtige Tendenz: an einer gekühlten Faser scheiden sich mehr Partikel ab als an einer ungekühlten. Der Effekt ist jedoch zu klein, um allein auf die zusätzliche Kraft zurückgeführt werden zu können. Die gemessene Differenz liegt in der Größenordnung des statistischen Rauschens, das durch die Brownsche Bewegung eingeführt worden ist. Erklären lässt sich dieser geringe Unterschied durch einen Vergleich der jeweiligen Driftgeschwindigkeiten der Partikel. Diese Geschwindigkeiten entstehen aus der Brownschen Bewegung, v_{Br} aus Gl. (2.43), und aus der thermophoretischen Kraft F_{therm} aus Gl. (2.33), $v_{\text{therm}} = B |F_{\text{therm}}|$ mit der Mobilität B aus Gl. (2.44). Unter den beschriebenen Bedingungen ergibt sich in der Nähe der Faseroberfläche ein Geschwindigkeitsverhältnis von

$$\frac{v_{\text{Br}}}{v_{\text{therm}}} \approx \frac{1.5 \text{ m/s}}{0.004 \text{ m/s}} = 375. \quad (8.10)$$

D. h. die Kraft aufgrund der Brownschen Diffusion hat unter den gewählten Voraussetzungen einen deutlich größeren Einfluss auf die Partikelbewegung als die thermophoretische Kraft.

Werden die Parameter variiert, kann sich das Verhältnis entscheidend ändern:

Fall 2:

Der Faserdurchmesser beträgt jetzt $d_{\text{F}} = 650 \text{ nm}$, was auf eine Reynoldszahl $Re = 0.0042$ führt, die Fasertemperatur wird erneut auf $T_{\text{F}} = 268.15 \text{ K}$ festgesetzt. Wiederum werden die Penetrationen über das Faserkreuz ohne und mit Einfluss der Thermophorese nach der Berechnung von 30 000 Partikeltrajektorien bestimmt. Ohne thermophoretische Kraft ergibt sich eine Penetration von $P = 0.9380$, die in der Größenordnung der Ergebnisse aus Fall 1 liegt. Der Wert der Penetration ändert sich jedoch entscheidend unter Berücksichtigung der Thermophorese, er liegt dann bei $P = 0.7747$. Aufgrund der niedrigen Fasertemperatur werden deutlich mehr Partikel auf der Faser deponiert. Das Ergebnis kann mit Hilfe des oben beschriebenen Verhältnisses der Driftgeschwindigkeiten in Oberflächennähe aufgrund Brownscher Diffusion und Thermophorese erklärt werden, das sich zu

$$\frac{v_{\text{Br}}}{v_{\text{therm}}} \approx \frac{1.5 \text{ m/s}}{0.4 \text{ m/s}} = 3.75 \quad (8.11)$$

ergibt. Beide Kräfte haben betragsmäßig etwa den gleichen Einfluss auf die Partikelbewegung. Während die erstgenannte jedoch eine zufällige Richtung annimmt treibt letztere

die Partikel in Richtung des negativen Temperaturgradienten, also zur Faseroberfläche hin.

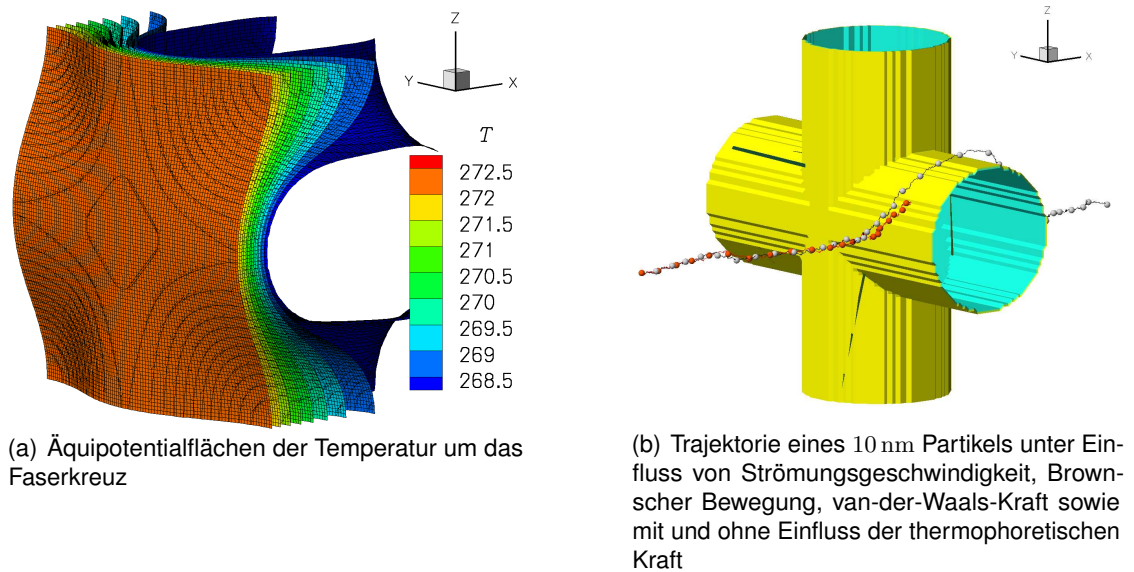


Abbildung 8.29.: Einfluss der Thermophorese auf die Partikelbewegung.

Für den zuletzt betrachteten Fall mit einem Faserdurchmesser von $d_F = 650\text{ nm}$ wird der Einfluss der thermophoretischen Kraft anhand einer Partikeltrajektorie weiter verdeutlicht. Die Äquipotentialflächen der Temperatur um die gekühlten Faseroberflächen sind in Abb. 8.29 (a) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der betragsmäßig größte Temperaturgradient in Anströmrichtung unmittelbar vor der Oberfläche auftritt. Abb. 8.29 (b) zeigt die unterschiedlichen Partikeltrajektorien unter Berücksichtigung bzw. Vernachlässigung der thermophoretischen Kraft. Zusätzlich nehmen die Strömungsgeschwindigkeit, die Brownsche Bewegung und die van-der-Waals-Kraft Einfluss auf die Bewegung des 10 nm Partikels. Im ersten Fall deponiert das Partikel nach 2 072 906 Zeitschritten an der Faseroberfläche, wohingegen es im zweiten Fall ohne thermophoretische Auswirkungen nach 3 700 344 Zeitschritten an den Fasern vorbei geflogen ist. Bei beiden Trajektorienberechnungen ist die gleiche Zufallszahlenfolge verwendet worden.

8.6. Deposition von Nanopartikeln auf ebenen glatten Oberflächen

Aus verschiedenen Gründen werden in der Praxis Nanopartikel auf einer ebenen glatten Oberfläche deponiert. Um Partikel gezielt in einem vorgegebenen begrenzten Bereich abscheiden zu können, kann z. B. der Versuchsaufbau aus [29] verwendet werden.

Der entscheidende Vorgang findet in einer geschlossenen Depositionskammer, dem sogenannten elektrostatischen Präzipitator (ESP) statt. Am oberen Ende wird ein mit monodispersen elektrisch geladenen Partikeln beladener Gasstrom mittels einer Düse zugeführt. Dieser trifft auf die im Zentrum angeordnete Depositionsfläche, die auf einer Elektrode befestigt ist. Mittels dieser wird ein elektrostatisches Feld erzeugt, das die Partikel über die Coulomb-Kraft in Richtung der Elektrode treibt. Es bildet sich eine Staupunktströmung aus. Am unteren Ende des ESP wird das Gas abgesaugt. Bei Nanopartikeln mit ihrer geringen Masse hat unter Normalbedingungen die Trägheitskraft kaum Einfluss auf die Partikelbewegung. Ohne die anziehend wirkenden elektrischen Kräfte werden die Partikel überwiegend entlang der Stromlinien transportiert und somit nicht abgeschieden. Sind die Partikel genügend klein, übt zusätzlich die Kraft infolge der Brownschen Bewegung Einfluss auf deren Bewegung aus. Durch ihre Zufallseigenschaft erschwert diese Kraft jedoch eine gezielte Abscheidung. Um ihren Einfluss bei gleichen Strömungsbedingungen zu verringern, kann die externe elektrische Kraft entsprechend erhöht werden. Werden die Partikel mit einer hohen Belegungsdichte deponiert, müssen auch Wechselwirkungen mit bereits abgeschiedenen Partikeln berücksichtigt werden.

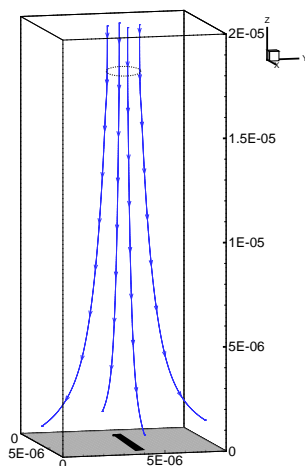


Abbildung 8.30.: Geometrie, elektrisches Potential und Stromlinien einer Staupunktströmung.

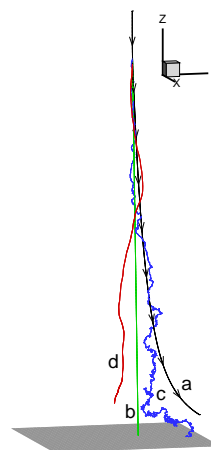


Abbildung 8.31.: Stromlinie (a) und Trajektorien bei hoher (b) bzw. niedriger (c und d) Fluidgeschwindigkeit.

In diesem Abschnitt werden Simulationen innerhalb eines ESP mit einer vereinfachten Geometrie, vgl. Abb. 8.30, betrachtet. Als Trägergas wird Stickstoff bei einer Temperatur von 298.15 K verwendet. Die Parameter für den Betrag der Strömungsgeschwindigkeit $u_{z,0}$, den Gasdruck und die angelegte elektrische Feldstärke sind in den entsprechenden Unterkapiteln angegeben. Das Rechengebiet wird durch ein kartesisches Gitter bestehend aus 228 830 Knoten diskretisiert und beschreibt ein Volumen von $8 \mu\text{m} \times 8 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$. Es wird eine Staupunktströmung des Fluids in negativer z -

Richtung mit dem LBGK-Verfahren aus Abschnitt 5.3 bestimmt. Die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_0 = (0, 0, -u_{z,0})^T$ wird über dem oberen Eintrittsrand als konstant angesetzt. Um den Eintritt der Partikel durch eine Düse zu simulieren, starten die Partikel $2 \mu\text{m}$ unterhalb des Eintrittsrandes innerhalb eines kreisförmigen Gebietes mit einem Durchmesser von $1.2 \mu\text{m}$. Bei der Initialisierung stimmen ihre Geschwindigkeiten mit denjenigen des Fluids an gleicher Stelle überein. Liegt ein elektrisches Feld vor, so wird die Laplace-Gleichung des elektrischen Potentials mittels des in Abschnitt 5.6 beschriebenen LBGK-Verfahrens gelöst. Als Randbedingungen werden die Potentiale auf der Platte und am oberen Rand vorgegeben. Das Potential der seitlichen Ränder wird aus dem Feldinnern extrapoliert. Deponiert ein Partikel an der Platte oder an einem bereits vorher abgeschiedenen Partikel, so übernimmt es das Potential des Kontaktpunktes. Nach jeweils 20 deponierten Partikeln werden das elektrische Potential und die Strömung neu bestimmt. Änderungen der Randbedingungen aufgrund der abgeschiedenen Partikel werden also sowohl für das Strömungsfeld als auch für das elektrische Potential berücksichtigt.

8.6.1. Deposition auf einer ebenen Platte mit einer Potentialdifferenz

Anhand einer ebenen Platte, die mit zwei unterschiedlichen elektrischen Potentialen belegt ist, soll der große Einfluss der elektrischen Kräfte auf das Depositionsverhalten der Partikel verdeutlicht werden. Die elektrische Feldstärke beträgt 300 kV/m . Der größte Teil der Platte und der Eintrittsrand sind z. B. negativ geladen. Lediglich ein schmaler Streifen in der Mitte des Depositionsbereiches ist mit dem entgegengesetzten Potential belegt, das auf eine positive Ladung führt. Die Breite dieses Streifens beträgt 200 nm , siehe Abb. 8.30.

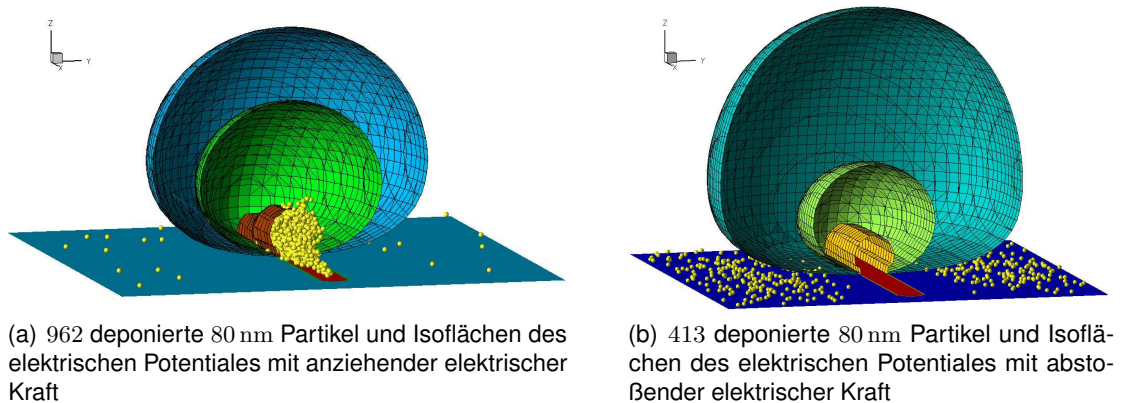


Abbildung 8.32.: Partikeldeposition auf einer mit unterschiedlichen elektrischen Potentialen belegten ebenen Platte.

Die Partikel haben einen Durchmesser von 80 nm und sind einfach positiv oder negativ geladen. Ihre Bewegung wird beeinflusst von Widerstandskraft, Kraft infolge Brownscher

Bewegung und Coulomb-Kraft. In Oberflächennähe spielen außerdem die van-der-Waals- und die Bild-Kraft eine Rolle. Die Fluidgeschwindigkeit am oberen Eintrittsrand beträgt 3 m/s bei einem Druck von 1 bar .

Abb. 8.32 (a) zeigt das Ergebnis für Partikel, deren elektrisches Potential sich von demjenigen des Mittelstreifens unterscheidet. Auf der Platte sind 962 Partikel deponiert worden, die sich überwiegend auf dem anziehend wirkenden Mittelstreifen angeordnet haben. Nur wenige befinden sich in dem Bereich der Platte, der mit dem gleichen Potential wie die Partikel belegt ist. Obwohl die Coulomb-Kraft in diesem Bereich abstoßend auf die Partikel wirkt, werden einige wenige infolge der Brownsche Diffusion, die bei der betrachteten Partikelgröße allerdings nur einen geringen Einfluss auf die Partikelbewegung hat, abgeschieden. Die innerste der dargestellten Äquipotentialflächen des elektrostatischen Potentials zeigt eine Störung in dem Bereich, an dem sich viele deponierte Partikel befinden. Hierdurch wird die Rückwirkung der Partikel auf das elektrische Potential verdeutlicht. Sind die Partikel entgegengesetzt geladen, ergibt sich ein anderes Bild, vgl. Abb. 8.32 (b). Dabei werden die Partikel von dem Mittelstreifen, der jetzt die gleiche Ladung wie die Partikel hat, abgestoßen. Die meisten werden auf den äußeren, anziehend wirkenden Bereichen der Platte abgeschieden.

8.6.2. Vergleich bei unterschiedlichen Strömungsbedingungen

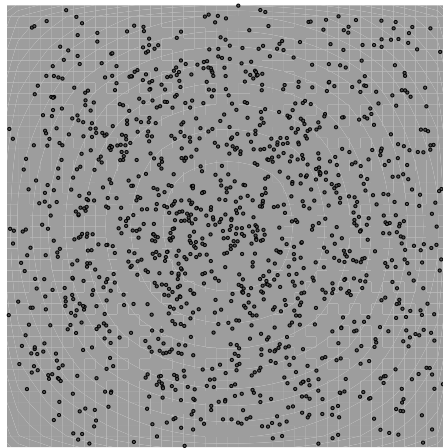
Durch weitere Simulationen soll der Einfluss der Strömungsbedingungen auf den Partikeltransport und das Depositionsverhalten aufgezeigt werden. Dazu wird die Bewegung von 20 nm Partikeln in drei Fällen unter den folgenden unterschiedlichen Voraussetzungen betrachtet:

1. Fall: $u_{z,0} = 3 \text{ m/s}$, $P = 1 \text{ bar}$, $|\mathbf{E}| = 300 \text{ kV/m}$
2. Fall: $u_{z,0} = 300 \text{ m/s}$, $P = 10 \text{ mbar}$, $|\mathbf{E}| = 0 \text{ kV/m}$
3. Fall: $u_{z,0} = 3 \text{ m/s}$, $P = 10 \text{ mbar}$, $|\mathbf{E}| = 300 \text{ kV/m}$

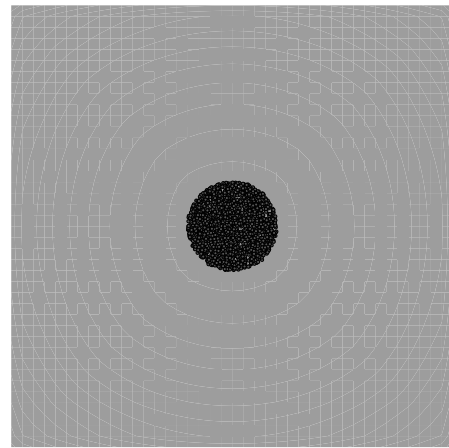
Der erste Fall simuliert die Bedingungen in einem ESP wie er im vorherigen Abschnitt beschrieben worden ist. Die Voraussetzungen des zweiten Falles stellen die Bedingungen in einem Niederdruckimpaktor vereinfacht dar. Bei gleicher Geometrie wird der Druck in der Depositionskammer mittels einer Vakuumpumpe stark verringert. Dies bewirkt eine deutliche Erhöhung der Einströmgeschwindigkeit an der Düse und somit eine Beschleunigung der Partikel. Aufgrund ihrer Trägheit werden sie in einem begrenzten Bereich der Depositionsfläche abgeschieden. Der dritte Fall behandelt eine Kombination aus einer niedrigen Geschwindigkeit und einem niedrigen Druck, die jedoch nicht experimentell verwendet wird und hier nur zum Vergleich gewählt wird. Die Prozessbedingungen in der Simulation des ersten Falles stimmen mit denen des vorigen Abschnitts fast überein. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Depositionsfläche jetzt mit einem konstan-

ten elektrischen Potential belegt ist, das eine anziehende Wirkung zwischen Partikeln und Substrat erzeugt. Die einfach geladenen Partikel werden somit auf der gesamten Platte abgeschieden. Neben der Widerstands-, Coulomb-Kraft und der Brownschen Bewegung werden auch Bild- und van-der-Waals-Kraft bei der Trajektorienbestimmung berücksichtigt.

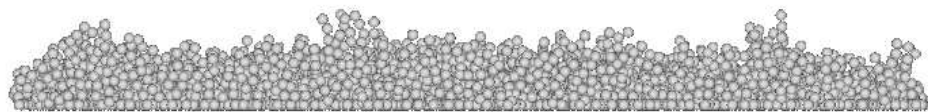
Abb. 8.31 zeigt den Vergleich zwischen einer Stromlinie, Fall (a), und einer Partikeltrajektorie, Fall (c), bei gleichen Startkoordinaten. Das Verhältnis von Konvektions- zu Brownscher Geschwindigkeit beträgt 5.2, d. h. beide sind von gleicher Größenordnung. Deutlich ist der große Einfluss der Brownschen Bewegung auf die Trajektorie im Bereich niedriger Geschwindigkeiten durch zufällige Querbewegungen zu erkennen. In Oberflächennähe spielt zusätzlich die elektrische Kraft eine wichtige Rolle und sorgt für die Abscheidung des Partikels. Das Ergebnis nach 1 312 deponierten Partikeln ist in Abb. 8.33 (a) dargestellt. Sie sind überwiegend getrennt angeordnet, was auf die stark zufallsverteilte Bewegung zurückzuführen ist.



(a) 1 312 deponierte Partikel auf einer elektrisch geladenen ebenen Platte bei einer Anströmgeschwindigkeit von 3 m/s



(b) 6 551 deponierte Partikel auf einer ebenen Platte bei einer Anströmgeschwindigkeit von 300 m/s



(c) Seitenansicht auf die deponierten Partikel

Abbildung 8.33.: Partikeldeposition auf einer ebenen Platte.

Im Fall des Niederdruckimpaktors, Fall 2, werden keine elektrischen Kräfte berücksichtigt, da die Trägheitskraft hier einen wesentlichen Einfluss auf den Depositionsvorgang hat und deswegen die Coulomb-Kraft für die Partikelabscheidung nicht benötigt wird. In der Depositionskammer herrscht ein Unterdruck von 10 mbar vor. Die Strömungsge-

schwindigkeit wird auf 300 m/s erhöht, was in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit liegt. Das in Abschnitt 5.3 beschriebene LBGK-Verfahren ist unter diesen Voraussetzungen zur Lösung des Strömungsfeldes nicht geeignet. Es ist das bei kleinerer Anströmgeschwindigkeit berechnete Strömungsfeld übernommen und auf die hier vorgegebene Werte umskaliert worden. Dadurch ergibt sich ein nicht zu den physikalischen Bedingungen passendes Fluidfeld, z. B. vergrößert sich die Reibungsschichtdicke deutlich. Dennoch können mit diesem akademischen Beispiel die wesentlichen Unterschiede der Partikelbewegung im Vergleich zum ersten Fall verdeutlicht werden.

Aufgrund des niedrigen Druckes und der damit von $\rho = 1.13 \text{ kg/m}^3$ auf $\rho = 1.13 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ reduzierten Gasdichte stoßen nur wenige Gasmoleküle mit den Partikeln, die Brownsche Diffusion zeigt keine Auswirkungen auf die Partikeltrajektorien, vgl. Fall (b) in Abb. 8.31. Das Verhältnis zwischen Konvektions- und Brownscher Geschwindigkeit beträgt in diesem Fall 521.5. Unter den beschriebenen Bedingungen, hat trotz der geringen Partikelmasse die Trägheitskraft einen Einfluss auf die Partikelbewegung. In der Nähe der ebenen Oberfläche folgt das Partikel nicht mehr den Stromlinien, sondern hält seine Bewegungsrichtung bei und deponiert in einem deutlich begrenzten Bereich des Substrates. Abb. 8.33 (b) zeigt eine Aufsicht auf den kreisförmigen Depositionsfleck nach 6 551 abgeschiedenen Partikeln. Er hat einen Durchmesser von $d_{\text{depo}} = 1.68506 \mu\text{m}$. Eine Seitenansicht ist in Abb. 8.33 (c) dargestellt. Sie verdeutlicht die ausgebildeten Dendriten-ähnlichen Strukturen, die vom äußeren Rand in Richtung Mittelpunkt wachsen.

Die Trajektorie des Falles (d) in Abb. 8.31 zeigt die Partikelbewegung mit den Parametern des dritten Falles. Unter diesen Bedingungen beträgt die mittlere freie Weglänge der Gasmoleküle $\lambda = 67.2 \mu\text{m}$ und das Verhältnis zwischen Konvektions- und Brownscher Geschwindigkeit liegt bei 5.2. Da die Gasdichte jedoch sehr gering ist, $\rho = 1.13 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$, macht das beobachtete Partikel deutlich weniger Querbewegungen und ändert seine Bewegungsrichtung seltener als im Falle 1 bei hohem Druck. Nach 1 645 deponierten Partikeln ergibt sich ein Ergebnis, das demjenigen des ersten Falles in Abb. 8.33 (a) entspricht. Die Partikel sind über die gesamte Platte verteilt und überwiegend getrennt angeordnet.

8.7. Untersuchungen der Wechselwirkungen zwischen Partikelstrukturen und äußeren Feldern

In diesem Abschnitt werden die Wechselwirkungen zwischen den deponierten Partikeln und den äußeren Feldern genauer untersucht. Der erste Abschnitt fasst dazu die Ergebnisse des letzten Absatzes aus Kapitel 8.3 kurz zusammen. In den folgenden beiden Abschnitten werden die Auswirkungen auf das elektrische Potential und das Temperaturfeld unter der Berücksichtigung verschiedener Randbedingungen näher betrachtet.

8.7.1. Einfluss auf das Strömungsfeld

Untersucht wird der Einfluss, den die bereits deponierten Partikel auf das Strömungsfeld nehmen. Dazu wird die Umströmung eines Faserfilters, der aus zwei sich kreuzenden zylindrischen Fasern besteht, simuliert. Der Faserdurchmesser liegt bei 650 nm und die Anströmgeschwindigkeit ist $u_0 = 21.26 \text{ m/s}$, vgl. Abschnitt 8.3. Es ist eine Simulation mit konstantem Fluidfeld und eine mit Anpassung des Fluidfeldes nach jeweils 50 deponierten Partikeln durchgeführt worden. Die Ergebnisse beider Rechnungen zeigen keine wesentlichen Unterschiede. Dieses Resultat lässt sich durch den geringen Partikeldurchmesser erklären, der wesentlich kleiner als die Dicke der Reibungsschicht des Fluids an der Faseroberfläche ist. Die Fluidgeschwindigkeit verschwindet hier nahezu, so dass die Partikel im wesentlichen durch die Brownsche Bewegung angetrieben werden. Aus den Simulationsergebnissen lässt sich schließen, dass für den Depositionsvorgang der Nanopartikel in diesem Bereich der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit gegenüber anderen Effekten, wie z. B. Diffusion oder van-der-Waals-Kraft, vernachlässigt werden kann.

8.7.2. Einfluss auf das elektrostatische Feld

Übernehmen die deponierten Partikel das elektrische Potential der Oberfläche, an der sie abgeschieden worden sind, so sind die Rückwirkungen auf das Potential nur gering, vgl. Abschnitt 8.5.2 und Abb. 8.22 (c). Der Einfluss wird dagegen entscheidend, wenn die Partikel ihr Potential behalten und somit das Potential in Oberflächennähe ändern, oder falls geladene Partikel auf einem Isolator deponieren.

Um den durch die geänderten Randbedingungen hervorgerufenen Effekt zu verdeutlichen, wird ein akademisches Beispiel gewählt, vgl. Abb. 8.34. Es wird die Strömung von Stickstoff unter Normalbedingungen um die bekannte Geometrie eines aus zwei durchstoßenen Fasern bestehenden Siebfilters simuliert. Der Faserdurchmesser liegt bei 650 nm, die Partikel besitzen einen Durchmesser von 20 nm. Die Anströmgeschwindigkeit von $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$ liefert eine Reynoldszahl von $Re = 0.0042$. Zusätzlich werden die Fasern mit einem elektrischen Potential belegt, das einer Feldstärke von 600 kV/m entspricht und die einfach geladenen Partikel in Richtung Faser treibt. Mit dieser Konfiguration werden solange Partikeltrajektorien bestimmt, bis 4 949 Partikel an der Vorderseite der Faseroberfläche deponiert sind. Als Randbedingung wird zunächst das elektrische Potential abgeschiedener Partikel durch den Wert an der Faseroberfläche ersetzt. Die so entstandene Depositionsschicht wird als Ausgangskonfiguration des folgenden Vergleiches zweier Partikeltrajektorien gewählt.

Zunächst wird mit den oben beschriebenen Randbedingungen des elektrischen Potentials, also die deponierten Partikel übernehmen das Potential des Depositionsortes, die Coulomb-Kraft auf das Partikel berechnet. Die Äquipotentialflächen des elektrischen

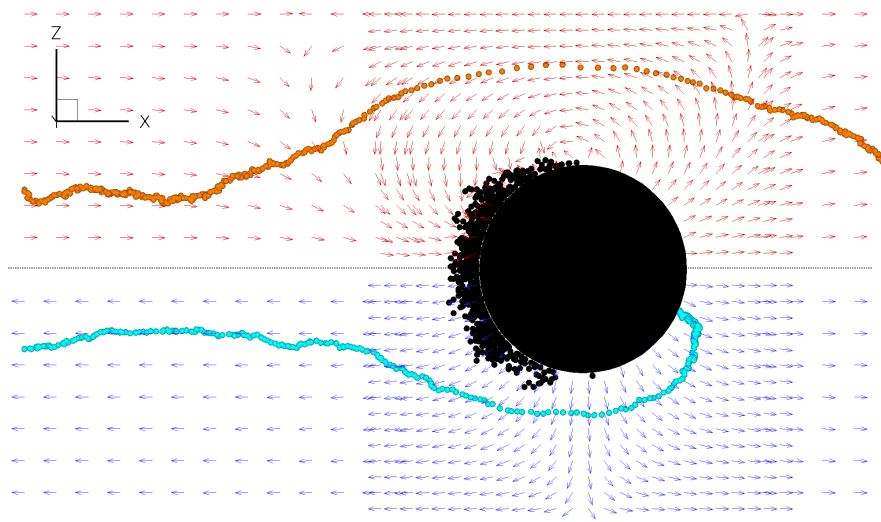


Abbildung 8.34.: Partikeltrajektorien und Vektoren des elektrostatischen Feldes bei wechselndem (oben) und konstantem (unten) elektrischem Potential der deponierten Partikel.

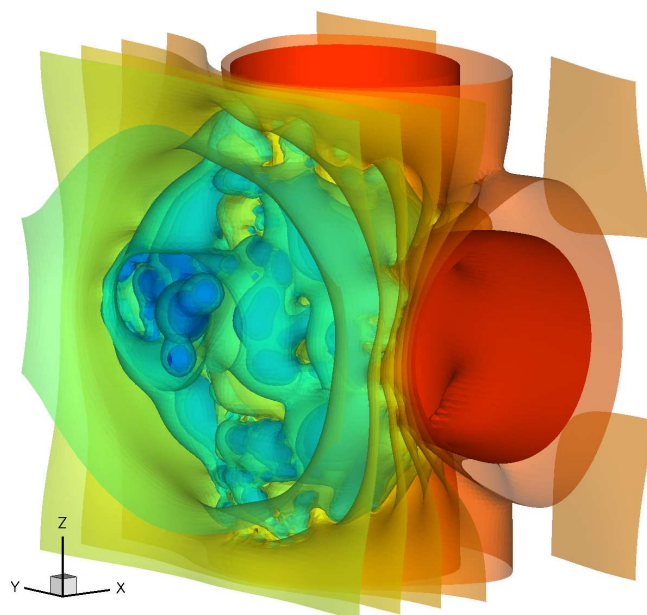


Abbildung 8.35.: Äquipotentialflächen des elektrischen Potentials unter Berücksichtigung deponierter Partikel, die ihr eigenes Potential behalten.

Potentiale verlaufen ähnlich zu denen in Abb. 8.22 (c). Die elektrische Kraft sorgt dafür, dass das Partikel von der Faser angezogen wird und auf der Rückseite deponiert, vgl. unterer Teil der Abb. 8.34. In der zweiten Simulation behalten die deponierten Partikel ihr eigenes Potential. Das elektrische Potential und damit auch die elektrische Kraft um die Fasern ändert sich wesentlich, vgl. Abb. 8.35. Dargestellt ist diese Kraft in Form von Vektoren auf dem oberen Teil der Abb. 8.34. Während das Partikel von der Vorderseite der Faser abgestoßen wird, wirkt das unveränderte Potential an der Rückseite immer noch anziehend. Das Partikel ist jedoch zu weit von der Faser entfernt, um infolge der im hinteren Bereich anziehend wirkende Coulomb-Kraft noch abgeschieden zu werden. Das Testpartikel startete in beiden Fällen von der gleichen Position. Der erste Fall wird zur besseren Visualisierung an der gestrichelten Linie gespiegelt dargestellt. Dieses Beispiel zeigt, dass der Einfluss der deponierten Partikel auf die nachfolgenden Trajektorien sowohl durch die Geometrieänderung als auch aufgrund des veränderten elektrischen Potentials an der Oberfläche eine wesentliche Rolle spielen kann. Mittels des entwickelten Programms können diese Effekte in der Simulation berücksichtigt werden.

8.7.3. Einfluss auf das Temperaturfeld

Zur Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen den deponierten Partikeln und dem Temperaturfeld wird die Umströmung des Faserkreuzes unter folgenden Bedingungen gewählt:

- Anströmgeschwindigkeit $u_0 = 0.1062 \text{ m/s}$,
- Partikeldurchmesser $d_p = 10 \text{ nm}$,
- Eintrittstemperatur $T_0 = 298.15 \text{ K}$,
- Reynoldszahl $Re = 0.0042$,
- Faserdurchmesser $d_F = 650 \text{ nm}$,
- Fasertemperatur $T_F = 268.15 \text{ K}$.

Die Werte der Parameter sind so gewählt worden, da somit die Partikelbewegung in Fasernähe trotz einer geringen Temperaturdifferenz von 30 K durch die thermophoretische Kraft stark beeinflusst wird.

Bei der Partikelbewegung wird neben der in den vorherigen Abschnitten einbezogenen Strömungsgeschwindigkeit, Brownsche Bewegung und van-der-Waals-Kraft zusätzlich die Thermophorese berücksichtigt. Die Trajektorien von 30 000 Partikeln werden mit der Partikel-Monte-Carlo-Methode aus Abschnitt 4.2.1 berechnet. Das Strömungsfeld wird mit dem in Abschnitt 5.4 beschriebenen LBGK-Verfahren für Strömungen mit variabler

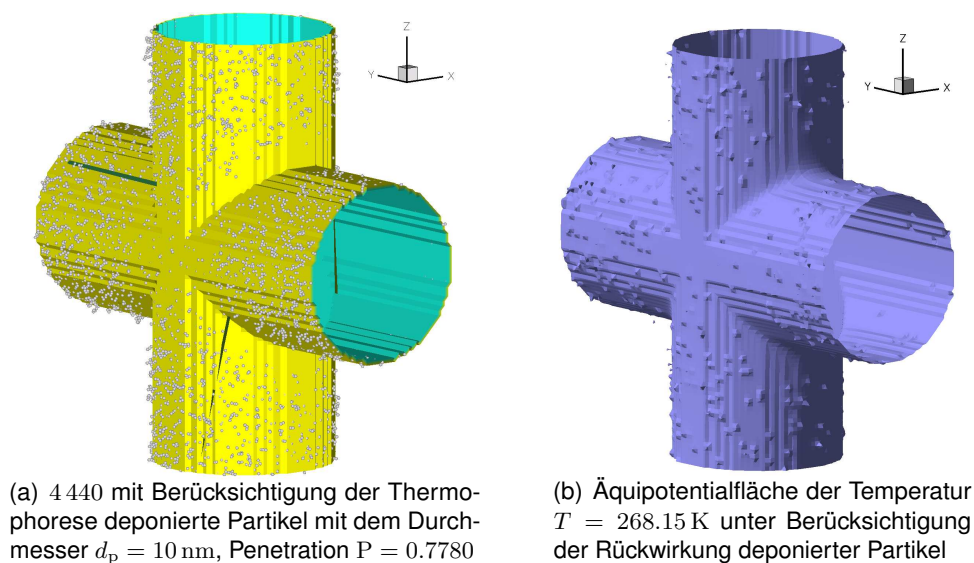


Abbildung 8.36.: Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen deponierten Partikeln und Temperaturfeld.

Dichte bestimmt. Die Temperaturgleichung wird mittels des Finite-Differenzen-Verfahrens aus Abschnitt 6.1.1 gelöst. Als Randbedingung übernehmen die deponierten Partikel die Temperatur ihres Depositionsplatzes. In Abb. 8.36 (a) sind 4 440 abgeschiedene Partikel dargestellt, die sich gleichmäßig um das Faserkreuz angeordnet haben. Nach jeweils 50 deponierten Partikeln ist das Temperaturfeld mit den geänderten Randbedingungen neu bestimmt worden. Die Äquipotentialflächen der Temperatur mit Berücksichtigung der deponierten Partikel, die durch kleine Störungen an der Oberfläche dargestellt sind, zeigt Abb. 8.36 (b). Über die Partikelanzahl gemittelt ergab sich eine Penetration über das Faserkreuz von $P = 0.7780$. Zum Vergleich dazu wird eine Simulation unter den gleichen Bedingungen durchgeführt, in der die deponierten Partikel jedoch keine Rückwirkung auf das Temperaturfeld ausüben. Diese Simulation mit festgehaltener Temperaturverteilung lieferte eine Penetration von $P = 0.7747$. Sie unterscheidet sich kaum von der obigen, die Differenz liegt unter 0.5 %. Diese Größenordnung trat auch für die Differenz zwischen zwei Durchläufen unter gleichen Bedingungen aber mit unterschiedlichen Zufallszahlenfolgen auf. Die Wechselwirkung zwischen relativ wenigen deponierten Partikeln und Temperaturfeld zeigt nur geringe Auswirkungen auf gemittelte Größen wie die Penetration. Bei der Betrachtung einzelner Partikel oder nach Ausbildung einer dickeren Depositionsschicht kann ein wachsender Einfluss erwartet werden.

9. Zusammenfassung und Ausblick

Die Modellierung und numerische Simulation der Transport- und Anlagerungsvorgänge nanostrukturierter Partikelmaterialien an komplexen Oberflächen ist das Ziel dieser Arbeit. Dazu ist ein Lösungskonzept erarbeitet worden, das die Simulation von Transport- und Depositionsprozessen kleiner (Nano-)Partikel in der Gasphase für realistische, dreidimensionale Problemstellung ermöglicht. Um zeitgenaue Simulationen durchführen zu können, sind diese Forderungen für die hier verwendeten Methoden berücksichtigt worden.

Die Voraussetzung einer kleinen Partikelkonzentration erlaubt die Entkopplung der Partikelphase von den externen Feldern. Um die Entstehung und den Aufbau der Partikelablagerungsschichten genauer untersuchen zu können, ist eine Lagrangesche Beschreibung der Partikelphase gewählt worden. Die Partikel werden als Kugeln beschrieben, die während der Bewegung keine Wechselwirkungen miteinander ausüben. Mittels der Partikel-Monte-Carlo-Methode werden die Langevin-Gleichungen für die Translations- und Rotationsbewegung integriert. Diese Gleichungen beschreiben die Bewegung einzelner Partikel in externen Feldern, wie Strömungs- oder Temperaturfeld sowie elektrischem oder magnetischem Potential. Berücksichtigt werden für die Translationsbewegung die Widerstandskraft, die Kraft infolge der Brownschen Diffusion, thermophoretische Kraft, Coulomb-Kraft und magnetische Kraft. Die Rotationsbewegung wurde durch das Reibungsdrehmoment, die Brownsche Rotationsbewegung und das magnetische Drehmoment beeinflusst.

Aufgrund makroskopischer Körper (Faserfilter als Anwendungsbeispiel) und sich ändernder Oberflächengeometrien infolge deponierter Partikel entstehen komplexe Geometrien. Die relativ einfache Behandlung dieser Oberflächenkonturen ist ein Vorteil der Lattice-Boltzmann-Methoden gegenüber Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Methoden. Aus diesem Grund sind sie zur Modellierung der kontinuierlichen Phasen eingesetzt worden. Neben dem Standard-LBGK-Verfahren zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen ist ein LBGK-Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen bei kleinen Machzahlen und variabler Dichte/Temperatur implementiert worden. Das elektrostatische bzw. magnetostatische Potentialfeld kann jeweils durch eine Laplace-Gleichung beschrieben werden. Zur Lösung dieser Gleichungen ist ein Verfahren auf der Basis des LBGK-Algorithmus entwickelt worden. Die verwendeten LBGK-Verfahren beinhalten wichtige Erweiterungen, wie die Berücksichtigung krummliniger Konturen in den Randbedingungen oder die Einführung lokal verfeinerter Gitter in Gebieten mit

betragsmäßig großen Gradienten. Die Lösungen der kontinuierlichen Felder erlauben die Modellierung der auf die Partikel wirkenden externen Kräfte und Drehmomente. Zur Lösung der skalaren Potentialfelder wurde als Alternative ein Finite-Differenzen-Verfahren implementiert, welches unter den in dieser Arbeit auftretenden Bedingungen Vorteile bezüglich der Rechenzeit liefert.

Das Depositionsmodell berücksichtigt in Wandnähe auftretende Kräfte wie die verzögerte (retarded) van-der-Waals-Kraft. Diese haben insbesondere bei Nanopartikeln einen wesentlichen Einfluss auf die Bewegung in Oberflächennähe. Liegen elektrisch geladene Partikel vor werden im unmittelbaren Nahbereich fester Oberflächen zusätzlich Bild-Kräfte berücksichtigt.

Die Wechselwirkungen zwischen den Phasen werden über die deponierten Partikel ermöglicht. In einer iterativen Prozedur werden die Randbedingungen der äußeren Felder angepasst und erlauben so eine Rückwirkung der daraus abgeleiteten Kräfte und Momente auf die zu berechnenden Partikeltrajektorien.

Das entwickelte Lösungskonzept, das aus der Partikel-Monte-Carlo-Methode und den unterschiedlichen LBGK-Methoden besteht, ist anhand mehrerer Anwendungsbeispiele sowohl für Mikro- als auch für Nanopartikel demonstriert worden. Die Formulierung der Brownschen Bewegung ist mit Hilfe eines Vergleichs zwischen dem Diffusionskoeffizienten aus der Stokes-Einstein-Gleichung und demjenigen aus einer Simulation über den mittleren Abstand bestimmten validiert worden. Beide Werte stimmen für die gewählten Zeitschritte und Zeitperioden gut überein. Die Validierung des kombinierten Programms erfolgte durch Vergleich mit experimentellen Daten für die Penetration eines Faserfilters. Die Grenzfälle für die Partikelabscheidung durch reine Diffusion und durch reine Interzeption stimmen sehr gut mit den theoretischen Asymptoten überein. Für „größere“ Partikel (Durchmesser $d_p = 0.79 \mu\text{m}$) und für Nanopartikel ($9 \text{ nm} \leq d_p \leq 20 \text{ nm}$) konnte eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erzielt werden.

Die Simulation des Transports magnetischer Partikel um einen magnetisierten Faserfilter zeigt gute Übereinstimmungen mit aus der Literatur bekannten Werten. Jedoch zeigten sich große Differenzen zwischen den Ergebnissen der Simulation und den Messungen eines Experimentes, die nicht eindeutig geklärt werden konnten. Eine Ursache liegt in der Sensibilität des äußeren Magnetfeldes gegenüber den gewählten Parametern.

Insbesondere während des Depositionsvorganges konnten die wichtigen Einflüsse der van-der-Waals- und, im Falle elektrisch geladener Partikel, der Bild-Kraft auf die Partikelbewegung dargestellt werden.

Während die Wechselwirkungen zwischen deponierten Partikeln und Strömungsfeld im Falle von Nanopartikeln aufgrund der kleinen geometrischen Abmessungen vernachlässigt werden können, spielen sie bei Partikeldurchmessern im Mikrometerbereich eine entscheidende Rolle. Instationäre Effekte wie das stetige Zusetzen eines Filters durch abgeschiedene Partikel und deren Einfluss auf die nachfolgenden Partikeltrajektorien sind simuliert worden.

Die Rückwirkung deponierter Partikel auf das Temperaturfeld kann bei wenigen ab-
geschiedenen Nanopartikeln vernachlässigt werden, da die Partikel fast instantan die
Temperatur ihrer Umgebung annehmen. Bei elektrisch geladenen Partikeln treten je
nach Randbedingung unterschiedliche Änderungen bei dem elektrischen Potential auf.
Übernehmen die deponierten Partikel das Potential des Depositionsplatzes, so zeigen
sich nur geringe Einflüsse. Behalten sie hingegen ihr eigenes elektrisches Potential, so
hat dies einen entscheidenden Einfluss auf den weiteren Verlauf der Partikeltrajektorien.

Anhand der Deposition von Nanopartikeln auf einer ebenen glatten Oberfläche ist der
Einfluss eines anziehenden bzw. abstoßenden Bereichs auf die Abscheideposition der
Partikel gezeigt worden. Die Auswirkungen unterschiedlicher Strömungsbedingungen auf
das Depositionsverhalten sind untersucht worden. Während die Partikel unter Normalbe-
dingungen zufallsmäßig auf der ganze Platte verteilt deponierten, trat bei Unterdruck
und erhöhter Strömungsgeschwindigkeit ein deutlich begrenzter Depositionsbereich
bzw. -fleck auf. Dies lässt sich durch den unter diesen Bedingungen großen Einfluss der
Trägheitskraft auf die Partikelbewegung erklären.

Die Integration der Langevin-Gleichungen erfolgt mittels eines Einschritt-Euler-Ver-
fahrens. Dieses liefert unter den gegebenen Voraussetzungen eine Genauigkeit von
erster Ordnung, sodass aus Stabilitätsgründen auf sehr kleine Zeitschritte zurückgegrif-
fen werden muss. Werden experimentelle Aufbauten, deren geometrische Abmessungen
in der Größenordnung von Millimetern oder größer liegen betrachtet, so führt dieses
Verfahren schon bei der Simulation weniger Partikel zu inakzeptablen Rechenzeiten.
Neben der notwendigen Parallelisierung kann der Übergang auf ein Verfahren höherer
Ordnung, wie z. B. dem bilinearen Taylor-Verfahren von 2. Ordnung aus [57], Abhilfe
schaffen.

Für die gezielte Positionierung von Partikeln, z. B. auf Leiterbahnen, kann es von
Vorteil sein diese auch nach der Deposition durch Wechselwirkungen mit anderen
Kräften zu bewegen. Typischerweise sind dies magnetische oder elektrische Kräfte,
die gegen „Haftkräfte“, wie z. B. die van-der-Waals-Kraft, wirken. Zusätzlich müssen
dabei noch mikroskopische Rauigkeiten der Oberflächen berücksichtigt werden. Die
entsprechende Erweiterung des vorhandenen Programms erscheint möglich, wobei dazu
eine Einschränkung auf einige wenige Partikel erfolgen muss, um den Rechenaufwand
handhabbar zu halten.

Zur Zeit werden häufig Diskussionen über das Thema „Feinstaub“, dessen Wirkung auf
die Gesundheit und die Reduktion z. B. durch Filter geführt. Unter Feinstaub werden Par-
tikel mit aerodynamischen Durchmessern, die kleiner als $10\mu\text{m}$ sind, verstanden. Solche
Partikel werden z. B. in modernen Dieselmotoren oder durch Gummiabrieb der Autoreifen
auf dem Asphalt erzeugt, treten aber auch in der Natur z. B. in Form von Pollen auf. Das
vorliegende Simulationsprogramm kann im gegenwärtigen Entwicklungszustand zu des-
sen Filtration nur bedingt Aussagen liefern. Eine wesentliche Voraussetzung ist die gerin-
ge Partikelkonzentration, die die Vernachlässigung der Partikel-Partikel-Wechselwirkung

während des Fluges erlaubt. Diese Bedingung ist für die Konzentration des Feinstaubes jedoch nicht notwendigerweise erfüllt. Bei hohen Partikelkonzentrationen entstehen durch Koagulation im Flug wachsende Agglomerate, die einen wesentlichen Einfluss auf die Penetration eines Filters haben. Die Simulation dieses Prozesses ist allerdings sehr rechenzeitintensiv und deswegen nur bei einer moderaten Partikelanzahl möglich. Ein weiteres Problem entsteht durch die Geometrie der sich bildenden Agglomerate. Diese sind nicht mehr kugelförmig, sodass für Parameter wie z. B. der Widerstandsbeiwert C_W keine analytischen Ausdrücke vorliegen.

A. Anhang

A.1. Tensornotation

Die Tensornotation erlaubt die Darstellung von Vektoren und Matrizen ohne sich auf die Raumdimension festlegen zu müssen. Der griechische Index durchläuft dabei die räumliche Dimension, entspricht also im 3D den x -, y - und z -Komponenten. Es werden nur die in dieser Arbeit verwendeten Grundlagen der Tensornotation aufgeführt.

Vektoren oder **Tensoren erster Stufe** werden dargestellt durch kleine lateinische Buchstaben mit griechischem Index, z. B.

- der Vektor der Strömungsgeschwindigkeit

$$\mathbf{u} = (u, v, w)^T = u_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (\text{A.1})$$

- der Ortsvektor

$$\mathbf{x} = (x, y, z)^T = x_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (\text{A.2})$$

- der Gradient eines Skalars

$$\nabla T = (\partial_x T, \partial_y T, \partial_z T)^T = \partial_\alpha T, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (\text{A.3})$$

Wird der Index fest vorgegeben, handelt es sich bei dem Ausdruck um die entsprechende Vektorkomponente.

Matrizen oder **Tensoren zweiter Stufe** werden durch große lateinische Buchstaben mit zwei griechischen Indizes beschrieben, z. B.

- der Einheitstensor wird durch das Kronecker-Symbol $\delta_{\alpha\beta}$ dargestellt

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \text{falls } \alpha = \beta \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3 \quad (\text{A.4})$$

- das dyadische Produkt zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} lautet

$$\mathbf{ab} = (a_x, a_y, a_z)^T (b_x, b_y, b_z) = \begin{pmatrix} a_x b_x & a_x b_y & a_x b_z \\ a_y b_x & a_y b_y & a_y b_z \\ a_z b_x & a_z b_y & a_z b_z \end{pmatrix} = a_\alpha b_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3 \quad (\text{A.5})$$

- der Gradient eines Vektors \mathbf{a}

$$\nabla \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \partial_x a_x & \partial_y a_x & \partial_z a_x \\ \partial_x a_y & \partial_y a_y & \partial_z a_y \\ \partial_x a_z & \partial_y a_z & \partial_z a_z \end{pmatrix} = \partial_\alpha a_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3 \quad (\text{A.6})$$

Das **Skalarprodukt** zweier Vektoren lässt sich darstellen als

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = (a_x, a_y, a_z) \cdot (b_x, b_y, b_z)^T = a_\alpha \cdot b_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (\text{A.7})$$

Dabei gilt die **Einsteinsche Summenkonvention**: tritt ein Index in einem Term doppelt auf, so wird über die Raumdimension summiert.

Das **Kreuzprodukt** oder **Vektorprodukt** zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} lässt sich darstellen als

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_x, a_y, a_z)^T \times (b_x, b_y, b_z)^T = \begin{pmatrix} a_y b_z - a_z b_y \\ a_z b_x - a_x b_z \\ a_x b_y - a_y b_x \end{pmatrix} = a_\alpha \times b_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3. \quad (\text{A.8})$$

Die **Rotation** eines Vektors lautet

$$\text{rot } \mathbf{a} = \nabla \times \mathbf{a} = \partial_\alpha \times a_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3. \quad (\text{A.9})$$

A.2. Multivariate Verteilungen

In diesem Abschnitt werden einige Definitionen, die sich auf multivariate Verteilungen beziehen, kurz wiederholt. Grundbegriffe der Stochastik werden als bekannt vorausgesetzt, sie können z. B. in [84] nachgelesen werden.

Definition A.2.1 Sei (Ω, \mathcal{A}, P) ein Wahrscheinlichkeitsraum. Eine Abbildung $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ heißt multivariate (n -dimensionale) Zufallsvariable $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)^T$, wenn gilt

$$\{\omega \in \Omega | X_1(\omega) \leq x_1, X_2(\omega) \leq x_2, \dots, X_n(\omega) \leq x_n\} \in \mathcal{A} \quad \forall x_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, n. \quad (\text{A.10})$$

Definition A.2.2 Sei \mathbf{X} eine multivariate (n -dimensionale) Zufallsvariable. Weiterhin sei $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Vektor mit Ereignissen aus \mathbf{X} . Dann heißt

$$F_{X_1 X_2 \dots X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) \triangleq P(X_1 \leq x_1, X_2 \leq x_2, \dots, X_n \leq x_n) \quad (\text{A.11})$$

Verteilungsfunktion von \mathbf{X} .

Definition A.2.3 Eine multivariate Zufallsvariable \mathbf{X} heißt stetig-verteilt, wenn eine reellwertige uneigentlich integrierbare Funktion $f_{X_1 \dots X_n} : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ existiert mit

$$P(X_1 \leq x_1, X_2 \leq x_2, \dots, X_n \leq x_n) = \int_{-\infty}^{x_n} \dots \int_{-\infty}^{x_1} f_{X_1 \dots X_n}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n. \quad (\text{A.12})$$

$f_{X_1 \dots X_n}$ heißt gemeinsame Dichte der Verteilung von \mathbf{X} .

Die Dichte einer Komponente X_i , $i = 1, \dots, n$ von \mathbf{X} erhält man durch Integration über die anderen Variablen:

$$f_{X_i}(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1 X_2 \dots X_n}(\xi_1, \dots, \xi_{i-1}, \xi_{i+1}, \dots, \xi_n) d\xi_1 \dots d\xi_{i-1} d\xi_{i+1} \dots d\xi_n. \quad (\text{A.13})$$

Diese Funktion wird Dichte der Randverteilung von X_i genannt.

Definition A.2.4 Sei \mathbf{X} eine multivariate stetig-verteilte Zufallsvariable mit der Dichte $f_{X_1 \dots X_n}$. Ist $X_i \geq 0$ oder X_i integrierbar $\forall i = 1, \dots, n$, so heißt der Vektor

$$\langle \mathbf{X} \rangle \triangleq \int_{-\infty}^{\infty} \tau (f_{X_1}(\tau), \dots, f_{X_n}(\tau))^T d\tau = (\langle X_1 \rangle, \dots, \langle X_n \rangle)^T \quad (\text{A.14})$$

der Erwartungswert von \mathbf{X} .

Definition A.2.5 Sei \mathbf{X} eine multivariate integrierbare Zufallsvariable. Dann heißt

$$\sigma_{ii} = \text{var}(X_i) \triangleq \langle (X_i - \langle X_i \rangle)^2 \rangle, \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{A.15})$$

die Varianz der i -ten Komponente von \mathbf{X} . $\sqrt{\text{var}(X_i)}$ wird als Standardabweichung der i -ten Komponente von \mathbf{X} bezeichnet.

Definition A.2.6 Seien X_i, X_j univariate Zufallsvariablen mit $\langle X_i^2 \rangle, \langle X_j^2 \rangle < \infty$. Dann heißt

$$\sigma_{ij} = \text{cov}(X_i, X_j) \triangleq \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle \quad (\text{A.16})$$

Kovarianz von X_i und X_j . Gilt $\text{cov}(X_i, X_j) = 0$, so nennt man X_i und X_j unkorreliert. Für eine multivariate Zufallsvariable \mathbf{X} werden die Varianzen und Kovarianzen in der Kovarianzmatrix Σ zusammengefasst, für die gilt

$$\Sigma = \langle \mathbf{X} \mathbf{X} \rangle - \langle \mathbf{X} \rangle \langle \mathbf{X} \rangle. \quad (\text{A.17})$$

Definition A.2.7 Eine multivariate (n -dimensionale) Zufallsvariable \mathbf{X} besitzt eine multivariate (n -dimensionale) Normalverteilung, in Zeichen $\mathbf{X} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$, falls sie die Dichte

$$f_{X_1 X_2 \dots X_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det(\Sigma)}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right] \quad (\text{A.18})$$

hat. Dabei ist Σ die symmetrische und positiv definite Kovarianzmatrix, Σ^{-1} deren Inverse und $\boldsymbol{\mu} = \langle \mathbf{X} \rangle$ der Erwartungswert von \mathbf{X} .

Satz A.2.1 Sei $\mathbf{X} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ ein n -dimensionaler normalverteilter Zufallsvektor mit Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}$ und mit Kovarianzmatrix Σ . Weiterhin sei \mathbf{A} eine reguläre $n \times n$ -dimensionale Matrix und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger n -dimensionaler Vektor. Dann ist $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{b}$ ein n -dimensionaler normalverteilter Zufallsvektor mit

$$\mathbf{Y} \sim N(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}^T). \quad (\text{A.19})$$

A.3. Numerische Hilfsmittel

In diesem Abschnitt werden numerische Verfahren für verschiedene Problemstellungen kurz erläutert. Es handelt sich dabei um gängige Algorithmen, die in Lehrbüchern über numerische Mathematik, wie z. B. [79], ausführlich beschrieben werden.

A.3.1. Erzeugung von normalverteilten Zufallszahlen

$N(0, 1)$ -standardnormalverteilte Zufallszahlen $z_{s,1}, z_{s,2}$ lassen sich aus auf dem Intervall $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahlen $z_{g,1}, z_{g,2}$ berechnen. Beliebige $N(\mu, \sigma)$ -normalverteilte Zufallszahlen $z_{n,1}, z_{n,2}$ mit dem Erwartungswert μ und der Standardabweichung σ erhält man durch die Transformation

$$z_{n,i} = \sigma z_{s,i} + \mu, \quad i = 1, 2. \quad (\text{A.20})$$

Die folgenden zwei Methoden sind z. B. in [57] beschrieben und sind in numerischen Anwendungen weit verbreitet.

Box-Muller-Methode

Mit der Box-Muller-Methode können aus zwei stochastisch unabhängigen gleichverteilten Zufallszahlen $z_{g,1}, z_{g,2}$ zwei stochastisch unabhängige standardnormalverteilte Zufallszahlen $z_{s,1}, z_{s,2}$ erzeugt werden durch

$$z_{s,1} = \sqrt{-2 \ln z_{g,1}} \cos(2\pi z_{g,2}) \quad (\text{A.21})$$

$$z_{s,2} = \sqrt{-2 \ln z_{g,1}} \sin(2\pi z_{g,2}). \quad (\text{A.22})$$

Die Bedingung $z_{g,1} > 0$ muss beachtet werden, da $\ln(0)$ nicht existiert.

Polar-Methode von Marsaglia

Im Vergleich zur Box-Muller-Methode erzeugt die Polar-Methode von Marsaglia mit geringerem Rechenaufwand zwei stochastisch unabhängige standardnormalverteilte Zufallszahlen $z_{s,1}, z_{s,2}$ aus zwei vorgegebenen stochastisch unabhängigen gleichverteilten Zufallszahlen $z_{g,1}, z_{g,2}$. Es muss neben der Wurzelfunktion nur ein Logarithmus ausgewertet werden, im Gegensatz zur erstgenannten, bei der zusätzlich zwei trigonometrische Funktionen bestimmt werden müssen. Die Zufallszahlen bestimmen sich aus

$$z_{s,i} = (2z_{g,i} - 1)p, \quad i = 1, 2 \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{\frac{-2 \ln q}{q}} \quad \text{und} \quad q = (2z_{g,1} - 1)^2 + (2z_{g,2} - 1)^2,$$

(A.23)

wobei nur Zahlenpaare $z_{g,1}, z_{g,2}$ berücksichtigt werden, für die $0 < q \leq 1$ gilt.

A.3.2. Trilineare Interpolation

Werte, die nicht unmittelbar auf den diskreten Knoten liegen müssen interpoliert werden. Bei dreidimensionalen kartesischen Gittern kann dies mit der trilinearen Interpolation aus den benachbarten acht Knoten erfolgen. Dabei wird der gesuchte Wert in jeder Koordinatenrichtung linear interpoliert. Gegeben seien die Funktionswerte $f_i \triangleq f(P_i)$ der Knoten P_i , $i = 1, \dots, 8$ mit

$$\begin{aligned} P_1 &= (x_0, y_0, z_0)^T & P_2 &= (x_1, y_0, z_0)^T & P_3 &= (x_1, y_1, z_0)^T & P_4 &= (x_0, y_1, z_0)^T \\ P_5 &= (x_0, y_0, z_1)^T & P_6 &= (x_1, y_0, z_1)^T & P_7 &= (x_1, y_1, z_1)^T & P_8 &= (x_0, y_1, z_1)^T, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

siehe Abb. A.1. Dann ergibt sich der trilinear interpolierte Funktionswert $f_Q \triangleq f(Q)$ am Punkt $Q = (x, y, z)^T$ mit $x_0 \leq x < x_1$, $y_0 \leq y < y_1$ und $z_0 \leq z < z_1$ sowie $f_i \triangleq f(P_i)$, $i = 1, \dots, 8$ durch

$$\begin{aligned} f_Q &= \left(1 - \frac{u}{\Delta x}\right) \left(1 - \frac{v}{\Delta y}\right) \left(1 - \frac{w}{\Delta z}\right) f_1 + \frac{u}{\Delta x} \left(1 - \frac{v}{\Delta y}\right) \left(1 - \frac{w}{\Delta z}\right) f_2 \\ &\quad + \frac{u}{\Delta x} \frac{v}{\Delta y} \left(1 - \frac{w}{\Delta z}\right) f_3 + \left(1 - \frac{u}{\Delta x}\right) \frac{v}{\Delta y} \left(1 - \frac{w}{\Delta z}\right) f_4 \\ &\quad + \left(1 - \frac{u}{\Delta x}\right) \left(1 - \frac{v}{\Delta y}\right) \frac{w}{\Delta z} f_5 + \frac{u}{\Delta x} \left(1 - \frac{v}{\Delta y}\right) \left(1 - \frac{w}{\Delta z}\right) f_6 \\ &\quad + \frac{u}{\Delta x} \frac{v}{\Delta y} \frac{w}{\Delta z} f_7 + \left(1 - \frac{u}{\Delta x}\right) \frac{v}{\Delta y} \frac{w}{\Delta z} f_8, \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

wobei

$$u = x - x_0, \quad v = y - y_0, \quad w = z - z_0, \quad \Delta x = x_1 - x_0, \quad \Delta y = y_1 - y_0, \quad \Delta z = z_1 - z_0. \quad (\text{A.26})$$

A.3.3. Regula-falsi

Sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige Funktion. Gesucht werden die Nullstellen $x \in \mathbb{R}$ der Funktion f mit

$$f(x) = 0. \quad (\text{A.27})$$

Definition A.3.1 Gegeben sei eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Existiert ein Intervall $[a, b]$ mit $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ und $f(a) f(b) < 0$, so gibt es mindestens eine Lösung x' der Gl. (A.27). Mit den Startwerten $x^{(0)} = a$ und $x^{(1)} = b$ lautet die Berechnungsvorschrift

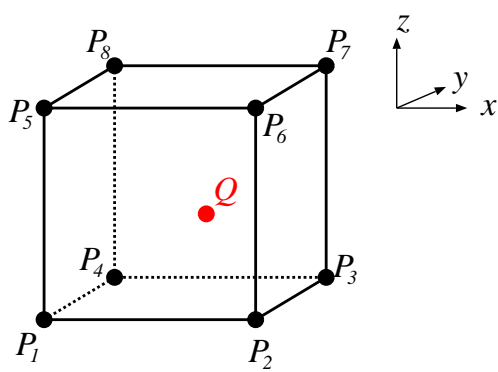


Abbildung A.1.: Trilineare Interpolation auf einem Quader.

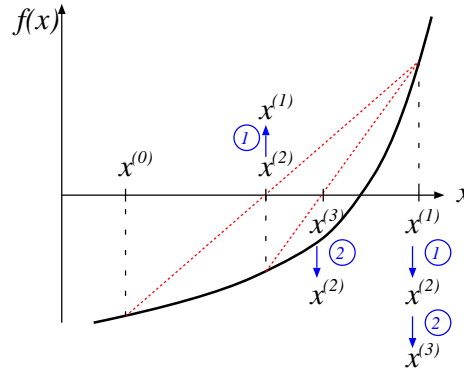


Abbildung A.2.: Regula-falsi für eine konvexe Funktion.

der Regula-falsi für $n = 1, 2, \dots$, vgl. Abb. A.2:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} f(x^{(n)}) \tag{A.28}$$

$$x^{(n)} = x^{(n-1)}, \quad \text{falls } f(x^{(n+1)}) f(x^{(n)}) > 0. \tag{A.29}$$

Satz A.3.1 Es gelten die Voraussetzungen und Bezeichnungen aus Definition A.3.1. Gibt es nur eine einzige Nullstelle im Innern des Intervalls $[a, b]$ und gilt

$$f \in C^2[a, b], \quad f(x') = 0, \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x'} \neq 0 \quad \text{und} \quad \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x'} \neq 0, \tag{A.30}$$

so konvergiert die Regula-falsi für alle Startwerte a, b linear, vgl. [79].

A.3.4. Simpson-Regel

Für eine auf dem Intervall $[a, b]$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ und $a \leq b$ integrierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ soll das bestimmte Integral

$$I(f) \triangleq \int_a^b f(x) dx. \tag{A.31}$$

durch einen Näherungswert $\tilde{I}(f)$ bestimmt werden, so dass für die vorgegebene Fehler-toleranz $\epsilon_{\text{tol}} > 0$ gilt $|I(f) - \tilde{I}(f)| < \epsilon_{\text{tol}}$.

Definition A.3.2 Sei $n \in \mathbb{N}$ und $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine auf dem Intervall $[a, b]$ mit $a, b \in \mathbb{R}$, $a \leq b$ integrierbare Funktion mit dem bestimmten Integral $I(f)$ aus Gl. (A.31). Dann heißt die

Näherungslösung $Q(f)$ des Integrals $I(f)$ mit

$$I(f) \sim Q(f) \triangleq \sum_{i=1}^n a_i f(x_i) \quad (\text{A.32})$$

eine Quadraturformel. Die Stützstellen x_i , $i = 1, \dots, n$ mit $x_i \in [a, b]$ und $a \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq b$ heißen die Knoten der Quadraturformel und a_i , $i = 1, \dots, n$ die Gewichte der Quadraturformel. Man nennt

$$R(f) \triangleq \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=1}^n a_i f(x_i) \quad (\text{A.33})$$

das Restglied bzw. den Quadraturfehler.

Definition A.3.3 Gegeben sei eine auf dem Intervall $[a, b]$ integrierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ und $a \leq b$. Weiterhin seien $n \in \mathbb{N}$ und die Schrittweite $h \in \mathbb{R}$ mit $h \triangleq \frac{b-a}{2n}$ gegeben, so dass sich die äquidistant-verteilten Knoten ergeben zu

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \dots, 2n. \quad (\text{A.34})$$

Dann heißt die Quadraturformel

$$\int_a^b f(x) dx \sim Q_h^{\text{Simpson}}(f) = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f(x_1) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \{ f(x_{2i}) + 2f(x_{2i-1}) \} \right] \quad (\text{A.35})$$

die summierte Simpson-Regel. Die Elementarformel ergibt sich mit $n = 1$ zu

$$\int_a^b f(x) dx \sim Q^{\text{Simpson}}(f) = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(x_1) + f(b)]. \quad (\text{A.36})$$

Satz A.3.2 Ist $f \in C^4[a, b]$ mit $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ und sind $n \in \mathbb{N}$ sowie die Schrittweite $h = \frac{b-a}{2n}$ gegeben, so gilt für das Restglied $R^{\text{Simpson}}(f)$ der Simpson-Regel

$$R^{\text{Simpson}}(f) = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\zeta) \quad \text{mit} \quad \zeta \in \mathbb{R}, \quad a < \zeta < b, \quad (\text{A.37})$$

siehe z. B. [79].

A.4. LBGK-Methode auf beliebigen Gittern

Die in Kapitel 5 beschriebenen LBGK-Methoden approximieren den Phasenraum durch äquidistante quasi-kartesische Gitter, um so die Symmetrie des Spannungstensors zu gewährleisten. Die zugehörigen theoretischen Betrachtungen sind in Abschnitt 5.2 behandelt worden. Das führt jedoch auf einen für alle Richtungen konstanten Gitterabstand δ_x , der jeweils dem Problem anzupassen ist. Nachteilig wirkt sich dies insbesondere bei anisotropen Strömungen, z. B. bei Ausbildung einer Grenzschicht, auf die Anzahl der Gitterpunkte aus, die sehr groß werden kann. Mehrere Lösungsvorschläge dieses Problems sind in der Literatur bekannt. Filippova und Hänel [23, 24] entwickelten ein Konzept zur lokalen Gitterverfeinerung, das in Abschnitt 5.8 näher beschrieben wird. Im Gegensatz dazu werden in [72] und [64] LBGK-Methoden auf körperangepassten unstrukturierten Gittern vorgeschlagen. In diesem Abschnitt wird die LBGK-Methode auf beliebige Gitter erweitert, vgl. [63]. Dieses Konzept ist als Modul integriert in der Finite-Volumen-Plattform MOUSE, [1]. Numerische Grundlage dieses Lösungspaketes ist ein konservativer Finite-Volumen-Ansatz für Erhaltungsgleichungen auf Gittern beliebiger Elementstruktur.

Die Idee des entwickelten LBGK-Verfahrens besteht darin, den Phasenraum für die molekularen Geschwindigkeiten und den Ortsraum unabhängig voneinander zu diskretisieren. Dadurch werden Rechnungen auf unstrukturierten räumlichen Netzen ermöglicht. Die diskreten Geschwindigkeitsvektoren werden weiterhin in den quasi-kartesischen Richtungen aus Abb. 5.1 gewählt. Der Transport der Verteilungsfunktionen wird mittels einer Upwind-Formulierung eines Finite-Volumen-Ansatzes diskretisiert. Die diskreten Verteilungsfunktionen werden als Vektor $f_\alpha = f_{pi}$ mit den Komponenten pi aus Abschnitt 5.3 zusammengefasst, außerdem wird definiert

$$\Xi_{\alpha\beta} = \begin{cases} f_\alpha, & \text{falls } \beta = \alpha \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und} \quad H_{\alpha\gamma} = \Xi_{\alpha\beta} \cdot c_{\beta\gamma}. \quad (\text{A.38})$$

Damit lautet die LBGK-Gleichung in integraler Schreibweise

$$\int_V \partial_t f_\alpha dV + \oint_A H_{\alpha\gamma} \cdot n_\gamma dA = \int_V \omega (f_\alpha^{\text{eq}} - f_\alpha) dV \quad (\text{A.39})$$

mit der Kollisionsfrequenz ω . Die Indizes α und β beziehen sich auf die diskreten Geschwindigkeitsrichtungen, γ auf die kartesischen Richtungen des Ortsraumes. Die Gleichgewichtsverteilungsfunktion f_α^{eq} stimmt mit Gl. (5.8) überein. Gl. (A.39) beschreibt ein Ensemble von linearen partiellen Differentialgleichungen, die über die Momente in der Gleichgewichtsverteilung des Kollisionstermes miteinander gekoppelt sind.

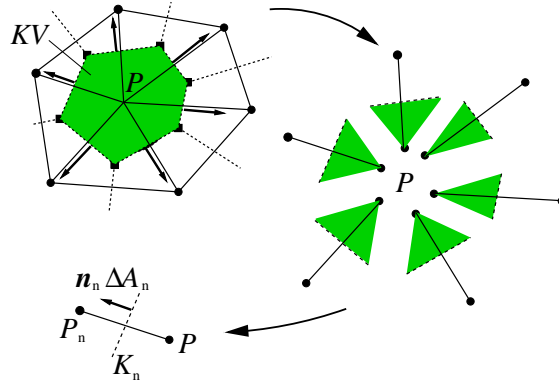


Abbildung A.3.: Diskretisierung des Schemas.

Für die Diskretisierung von Gl. (A.39) wird ein Finite-Volumen-Ansatz verwendet

$$\left. \frac{\Delta f_\alpha}{\delta_t} \right|_{KV} + Res_{\alpha,\Delta,KV}^{\text{konv}} = Res_{\alpha,\Delta,KV}^{\text{koll}} \quad \text{mit} \quad Res_{\alpha,\Delta,KV}^{\text{konv}} = \frac{1}{V_{KV}} \sum_{n=1}^{n_k} (H_{\alpha\gamma} \cdot n_{n\gamma} \Delta A_n). \quad (\text{A.40})$$

Diese diskrete Gleichung wird in zwei Schritten gelöst, den Transport und die Kollision. Zuerst wird der Transport zwischen den Kontrollvolumina, also das Residuum $Res_{\alpha,\Delta,KV}^{\text{konv}}$ bestimmt. Bei dem hier gewählten diskreten, knotenzentrierten Ansatz des Ortsraumes wird die Summe zur Berechnung des Residuums über alle an einem Knoten P anhängenden Kanten K , Anzahl n_k gebildet. Jede Kante trägt hierbei ein Segment der Oberfläche des Kontrollvolumens, Index KV , mit der Größe V_{KV} , vgl. Abb. A.3. Die Werte des Flussvektors $H_{\alpha\gamma}$ werden durch ein Upwind Schema höherer Ordnung mit MUSCL-Extrapolation berechnet. Mit den neuen Werten der Verteilungsfunktionen wird danach der Kollisionsschritt punktweise ausgeführt, also $Res_{\alpha,\Delta,KV}^{\text{koll}}$ als Quellterm auf dem Punkt P bestimmt. Es handelt sich dabei um eine explizit formulierte Relaxation zum lokalen Gleichgewicht, das von den Momenten \tilde{P} und u_γ abhängt. Die Zeitintegration erfolgt mit einem expliziten dreistufigen Runge-Kutta-Verfahren. Der Zeitschritt δ_t wird aus $\delta_t = CFL \delta_x / c_0$ mit der vorgegebenen CFL-Zahl und einem charakteristischen Gitterabstand δ_x bestimmt.

Anschließend werden die Momente \tilde{P} und u_γ , wie in (5.9) beschrieben, auf jedem Punkt aktualisiert. Somit kann die neue Gleichgewichtsverteilung bestimmt werden, und der nächste Iterationsschritt beginnt mit der Konvektion.

An den Rändern müssen Werte für Verteilungsfunktionen derjenigen Richtungen vorgegeben werden, deren Skalarprodukte zwischen diskreter molekularer Geschwindigkeit und äußerem Normalenvektor der Randkante negativ sind. Bei dem hier betrachteten Finite-Volumen-Ansatz werden an den Rändern Halbzellen angesetzt, d. h. die Konturen werden durch mittels Kanten verbundener Knoten dargestellt. Wie in Abschnitt 5.7 er-

läutert kann deshalb die Gleichgewichtsrandbedingung mit guter Genauigkeit benutzt werden. Im Falle einer festen Wand werden die „einströmenden“ Verteilungsfunktionen durch die entsprechenden Gleichgewichtsverteilungen ersetzt. Diese wird mit den Geschwindigkeitskomponenten, hier zu Null gesetzt, und dem Druck, hier aus den nächsten Feldnachbarn extrapoliert, gebildet. Andere Randbedingungen wie Ein- bzw. Austritt oder Rutschgeschwindigkeiten an Wänden können analog formuliert werden.

Nach Gl. (5.37) aus Abschnitt 5.2 hängt die kinematische Viskosität ν des Fluids bei einem Upwind-Verfahren der Ordnung $O(\delta_x^n)$, $n < 2$ ab von der CFL-Zahl. Der entscheidende Term kann durch Einsatz eines Verfahrens von mindestens zweiter Ordnung eliminiert werden, sodass sich

$$\nu = \left(\frac{1}{\Omega} - 1 \right) c_s^2 \delta_t, \quad (\text{A.41})$$

mit der dimensionslosen Kollisionsfrequenz Ω für die kinematische Viskosität ergibt. Diese Formel ist in den folgenden Rechnungen eingesetzt worden.

Prinzipiell können die verschiedenen LBGK-Methoden aus Abschnitt 5 auf diese Betrachtungsweise übertragen werden. Bei der Methode zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen bei kleinen Machzahlen und variabler Dichte muss zusätzlich eine Konvektions-Diffusions-Gleichung der Temperatur berücksichtigt werden. Entsprechend der verschiedenen Methoden müssen die freien Parameter \tilde{P} , $f_\alpha^{\text{eq,corr}}$, $s_\alpha^{(1)}$ und $s_\alpha^{(1)}$ analog gewählt werden. Die folgenden Beispielrechnungen sind deswegen auf die Methode zur Lösung der Gleichungen für inkompressible Fluide beschränkt worden.

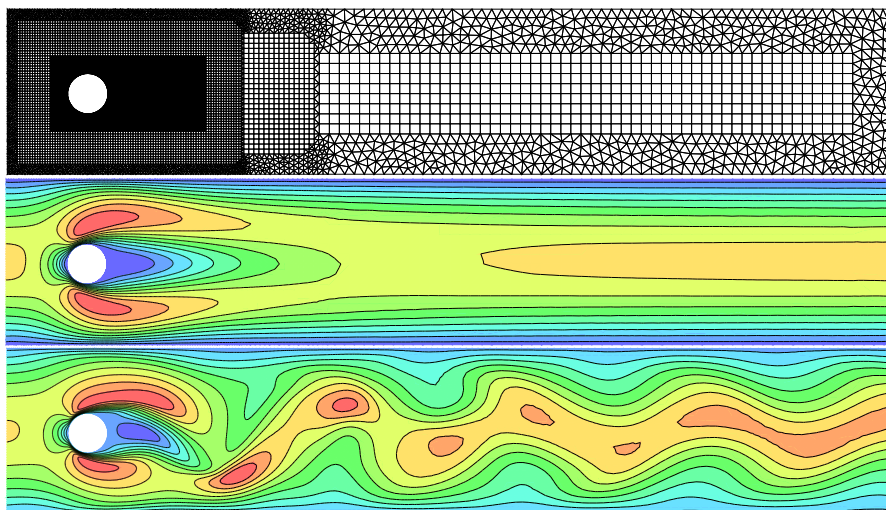


Abbildung A.4.: Hybrid-Gitter (oben), Isolinien der horizontalen Geschwindigkeit bei $Re = 20$ (mitte) und Momentaufnahme der Isolinien der horizontalen Geschwindigkeit bei $Re = 100$ (unten)

Als erstes wird der Testfall aus Abschnitt 8.2.1 betrachtet. Abb. A.4 zeigt das aus 13 751 Punkten bestehende hybride Gitter, das für die Berechnung der Strömung verwendet worden ist. Darunter sind die Isolinien der horizontalen Geschwindigkeitskomponente des stationären ($Re = 20$) und eine Momentaufnahme der Isolinien der horizontalen Geschwindigkeit des instationären ($Re = 100$) Falles dargestellt.

CFL für 13 751 Knoten	lokales δ_t		globales δ_t	
	ℓ_a	ΔP	ℓ_a	ΔP
0.1	0.082699	0.1136	0.084728	0.1158
1.0	0.096969	0.1109	0.086647	0.1154
2.0	0.108911	0.1091	0.088738	0.1150
# Knoten bei CFL = 2				
3 442	—	—	0.092142	0.1183
8 247	—	—	0.086259	0.1133
13 751	—	—	0.088738	0.1150
25 437	—	—	0.086575	0.1157
40 951	—	—	0.085505	0.1163
Referenzwerte				
unterer Wert			0.0842	0.1172
oberer Wert			0.0852	0.1176

Tabelle A.1.: Ablöselänge ℓ_a und Druckdifferenz ΔP bei variierenden CFL-Zahlen und Gittergrößen für lokalen und globalen Zeitschritt, sowie die Bandweite der Referenzwerte aus [78] für den Fall $Re = 20$.

Tab. A.1 zeigt die Werte für die Ablöselänge ℓ_a und für die Druckdifferenz ΔP zwischen vorderem und hinterem Staupunkt nach Variation verschiedenen Parameter für den stationären Fall. Wird die CFL-Zahl zwischen 0.1 und 2.0 variiert, zeigt sich sowohl für den Fall mit lokalem Zeitschritt als auch für denjenigen mit globalem die gleiche Tendenz. Je größer die CFL-Zahl desto länger ist die Ablöselänge und desto kleiner ist die Druckdifferenz. Dieses Verhalten lässt auf eine geringere Viskosität bei höherer CFL-Zahl schließen, was auch durch Formel (5.37) erklärt werden kann, wenn die Ordnung des benutzten Verfahrens nicht hoch genug ist. Weiterhin zeigt sich, dass bei einem globalen Zeitschritt, der konstant für alle Punkte ist, diese Abhängigkeit deutlich weniger ausgeprägt ist als bei einem lokalen. Desweiteren wird der Einfluss der Gittergröße auf die Lösung bei einer konstanten CFL-Zahl $CFL = 2$ mit einem globalen Zeitschritt untersucht. Hierbei wird das Netz nicht über das gesamte Gebiet verfeinert, sondern nur in der Nähe des Zylinders. Für die LBGK-Methode zeigt sich auch hier eine eindeutige Tendenz. Die Ergebnisse der 3 442 und 8 247 Punkte Netze können vernachlässigt werden, da diese Gitter sehr grob sind. Je größer die Anzahl der Punkte ist, desto kleiner

wird die Ablöselänge und desto größer wird die Druckdifferenz. Beide Werte nähern sich den Referenzwerten an. Auch dieses Verhalten lässt sich mit Formel (5.37) erklären, denn $\delta_t \propto \delta_x$.

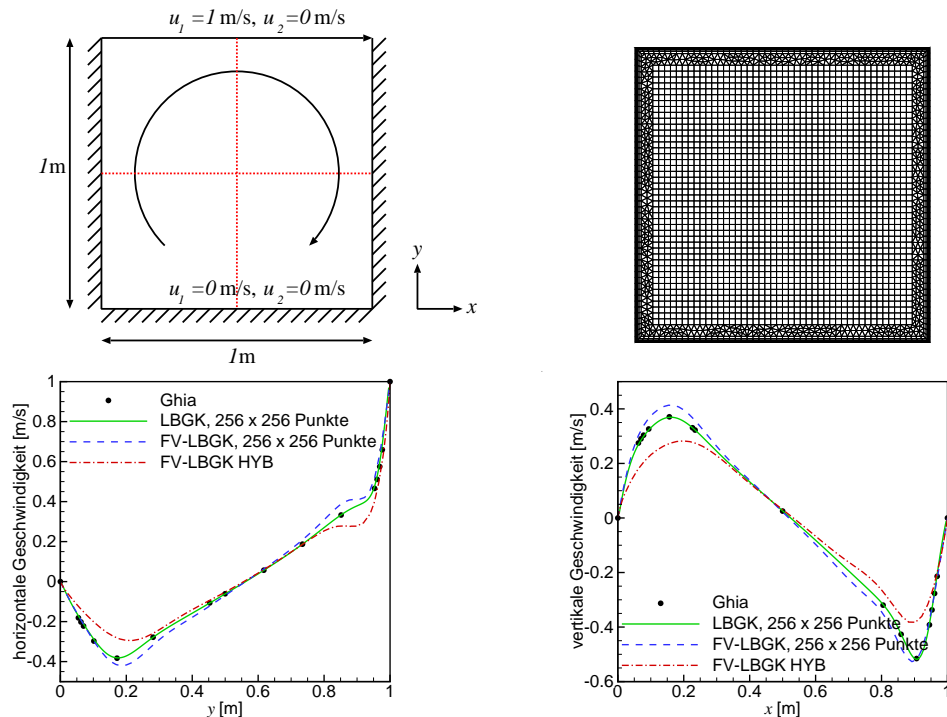


Abbildung A.5.: Geometrie und Randbedingungen (oben links), hybrides Gitter (oben rechts), horizontale Geschwindigkeit entlang der vertikalen Mittellinie (unten links) und vertikale Geschwindigkeit entlang der horizontalen Mittellinie (unten rechts)

Das zweite Beispiel zeigt eine an der oberen Seite angetriebene Strömung in einer Kavität. Abb. A.5 stellt neben der Geometrie mit Randbedingungen (oben links) und dem hybriden Gitter (oben rechts) die Ergebnisse verschiedener LBGK-Methoden für eine Strömung mit der Reynoldszahl 1 000 dar.

Folgende Varianten des LBGK-Verfahrens sind benutzt worden:

- LBGK-Methode aus Abschnitt 5.3 auf einem 256×256 Punkte Netz mit konstantem Gitterabstand δ_x
- Finite-Volumen-(FV)-LBGK-Methode auf dem gleichen äquidistanten Netz
- Finite-Volumen-(FV)-LBGK-Methode auf einem hybriden Netz mit 45 142 Punkten bei dem die Zellen am Rand gestreckt sind (Grenzschichtnetz).

Auf der unteren linken Grafik ist die horizontale Geschwindigkeitskomponente über der vertikalen Mittellinie bei $x = 0,5 \text{ m}$ aufgetragen. Die Lösung des LBGK-Verfahrens

stimmt sehr gut mit den Werten aus [33] überein. Die FV-LBGK-Methode liefert bei konstantem Gitterabstand eine Lösung mit geringfügig reduzierter Viskosität, erkennbar an der betragsmäßig größeren Geschwindigkeitskomponente. Auf dem hybriden Gitter zeigt die Lösung des gleichen Verfahrens jedoch starke viskose Effekte (Geschwindigkeitskomponente ist betragsmäßig deutlich kleiner). In diesem Fall ist das Verfahren aufgrund der gestreckten Geometrie der Randelemente nicht mehr von zweiter Ordnung genau. Es treten Abbruchfehler der Größenordnung $O(\delta_x^2)$ auf, die die Viskosität verstärken. Analoge Verläufe zeigen sich für die vertikale Geschwindigkeitskomponente entlang der horizontalen Mittellinie bei $y = 0.5$ m, die in der Abbildung unten rechts dargestellt sind.

A.5. Parallelisierung der LBGK-Methode

Dreidimensionale Simulationen erfordern eine hohe räumliche Auflösung, um im gesamten Integrationsgebiet ausreichende Genauigkeit gewährleisten zu können. Spielt zusätzlich der zeitliche Verlauf eine Rolle verstärken sich die Ansprüche an Einsparung der Rechenzeit weiter. Eine Möglichkeit zur Verbesserung besteht darin, einen Parallelrechner mit mehreren Prozessoren einzusetzen.

Die LBGK-Methode eignet sich aufgrund des einfachen Algorithmus, der expliziten Formulierung und ihres granularen Aufbaus besonders gut für die Parallelisierung. Der zuletzt aufgeführte Punkt wird in Abschnitt 7.2 ausführlich dargestellt. In den einzelnen Schritten des Algorithmus werden die Berechnungen auf jedem Knoten mit den lokalen Daten ausgeführt. Lediglich im Konvektionsschritt wird auf Daten der Nachbarknoten zugegriffen. Deswegen müssen in jedem Zeitschritt nur die Werte der Verteilungsfunktionen eines jeden Randpunktes der Teilgebiete vor und nach dem Konvektionsschritt ausgetauscht werden. Beim Einsatz der Gitterverfeinerung müssen die unterschiedliche Knotendichte und Zeitschritte der verschiedenen Verfeinerungsstufen bei der Gebietszerlegung bzw. Rechnung berücksichtigt werden.

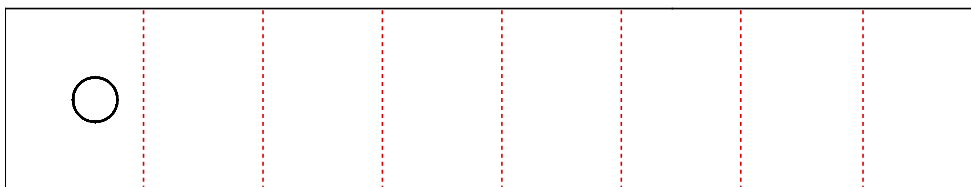


Abbildung A.6.: Gebietszerlegung für 8 Prozessoren

Anhand des Testproblems der stationären zweidimensionalen Zylinderumströmung eines inkompressiblen Fluids in einem Kanal aus Abschnitt 8.2.1 sind Untersuchungen des Parallelisierungsgrades der LBGK-Methode durchgeführt worden. Zwei Fälle sind betrachtet worden: eine feine Auflösung mit 581 130 Punkten und eine grobe mit 37 088 Punkten, um den Einfluss des Datenaustausches bei vielen Teilgebieten darstellen zu können. Abb. A.6 zeigt die Zerlegung des Integrationsbereiches in acht Teilgebiete. Der Programmcode ist mittels der MPI-Bibliothek [2] für einen Linux Rechencluster mit „distributed memory“-Architektur parallelisiert worden.

In Abb. A.7 ist der Verlauf der Rechenzeit in Sekunden für jeweils einen Zeitschritt über der Anzahl an Prozessoren aufgetragen. Letztere ist dabei zwischen eins und 24 variiert worden. Für den kleineren Fall mit 37 088 Punkten zeigt sich, dass insbesondere bei wenigen Prozessoren eine deutliche Reduktion der Rechenzeit auftritt. Das Minimum ist zwischen 16 und 20 Prozessoren erreicht. Wird die Anzahl der Prozessoren weiter erhöht, spielt zunehmend der Datenaustausch zwischen den Prozessoren eine Rolle, da die Länge der Ränder zwischen den Teilgebieten anwächst. Dagegen fällt die Rechenzeit

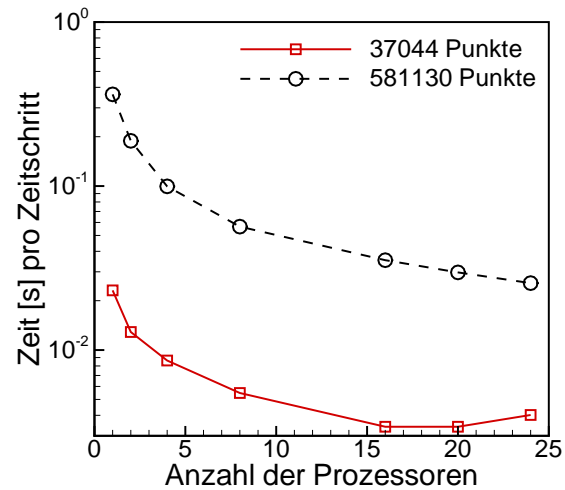


Abbildung A.7.: Rechenzeit als Funktion der Prozessoranzahl für eine LBGK-Lösung

pro Zeitschritt monoton bei dem größeren Problem. Ab einer bestimmten Anzahl an Prozessoren, die in diesem Fall über 24 liegt, ist jedoch auch hier ein Ansteigen dieser Rechenzeit zu erwarten.

A.6. Monte-Carlo-Direktsimulationsmethode (DSMC)

Strömungen bei kleinen Knudsenzahlen, $\text{Kn} = \frac{\lambda}{L} < 0.01$ mit der mittleren freien Weglänge λ des Fluids und einer charakteristischen Strömungslänge L , können als Kontinuum betrachtet und mittels der allgemeinen Erhaltungsgleichungen beschrieben werden. Nähert sich die charakteristische Strömungslänge jedoch der mittleren freien Weglänge an, so sind diese Gleichungen nicht mehr länger gültig und es muss auf die allgemeinere Boltzmann-Gleichung zurückgegriffen werden. Für Simulationen in diesem Transitionsbereich zwischen Kontinuums- und freier Molekülströmung eignet sich die Monte-Carlo-Direktsimulationsmethode (DSMC) nach [5], die die Fluidphase mittels einer stochastischen Lösung der Boltzmann-Gleichung beschreibt. Sie soll hier kurz beschrieben werden.

Die DSMC-Methode liefert eine Näherungslösung der Boltzmann-Gleichung durch Simulation des Verhaltens „numerischer“ Testmoleküle. Jedes dieser Testmoleküle besitzt eine Position und eine Geschwindigkeit und simuliert ein Ensemble an realen Molekülen. Die prinzipielle Vorgehensweise ist in [5] ausführlich beschrieben und besteht aus einem Transportschritt der Testmoleküle und einem Kollisionsschritt. Im Transportschritt wird jedes Testmolekül entsprechend seiner Geschwindigkeit und dem Zeitschritt Δt transportiert. Für den anschließenden Kollisionsschritt muss der Ortsraum in Zellen, deren Abmessungen kleiner als die mittlere freie Weglänge sind, diskretisiert werden. In jeder Zelle wird eine bestimmte Anzahl von Kollisionspaaren zufällig ausgewählt und deren neue Geschwindigkeiten unter Berücksichtigung der elastischen Stoßbedingungen bestimmt. Wird nach einer ausreichenden Anzahl von Zeitschritten eine stationäre Lösung erreicht, werden die makroskopischen Größen, wie z. B. Dichte oder Geschwindigkeit, aus den entsprechenden Momenten berechnet:

$$[\rho(t, x_\beta)] = \frac{1}{V_z} \sum_i m_i \quad \text{und} \quad [v_\alpha(t, x_\beta)] = \frac{1}{V_z} \sum_i m_i v_{i\alpha} / [\rho(t, x_\beta)], \quad (\text{A.42})$$

wobei die Summe über alle Testmoleküle i in der Zelle um den Ort x_β verläuft, V_z das Zellvolumen ist und m_i die Masse bzw. $v_{i\alpha}$ die Geschwindigkeit des Testmoleküles bezeichnet. $[\rho(t, x_\beta)]$ und $[v_\alpha(t, x_\beta)]$ stellen über ein Zeitintervall gemittelte Größen dar.

Bei der DSMC-Methode treten keinerlei Stabilitätsprobleme auf, sie ist explizit und besonders effizient im Transitionsbereich, also für Knudsenzahlen $O(0.01) < \text{Kn} < O(10)$. Da der Rechenaufwand direkt proportional zur Gesamtanzahl der Testmoleküle N_g ist, ist eine möglichst geringe Anzahl wünschenswert. Andererseits ist die statistische Genauigkeit des Verfahrens umgekehrt proportional der Wurzel aus dieser Gesamtanzahl N_g , für geeignete Mittelwerte müssen genügend Testmoleküle vorhanden sein. In der Praxis hat sich eine Anzahl an Testmolekülen von zehn bis 20 pro Zelle als optimal erwiesen. Insbesondere für den Bereich nahe dem Kontinuum treten jedoch sehr hohe

Rechenzeiten auf. Ursache hierfür ist die kleine mittlere freie Weglänge, die auf geringe geometrische Zellabmessungen und damit eine große Gesamtanzahl an Testmolekülen führt. Bei der Betrachtung von Strömungen mit niedriger Machzahl wird das Verhältnis zwischen Strömungs- und wahrscheinlichster molekularer Geschwindigkeit groß. Letztere tritt in den Randbedingungen von festen Wänden auf und liegt in Größenordnung der Schallgeschwindigkeit. Aufgrund dieses ungünstigen Verhältnisses tritt ein starkes Rauschen bei der Mittelung der Größen auf. Diese Problematik soll im folgenden anhand eines einfachen Beispiels verdeutlicht werden.

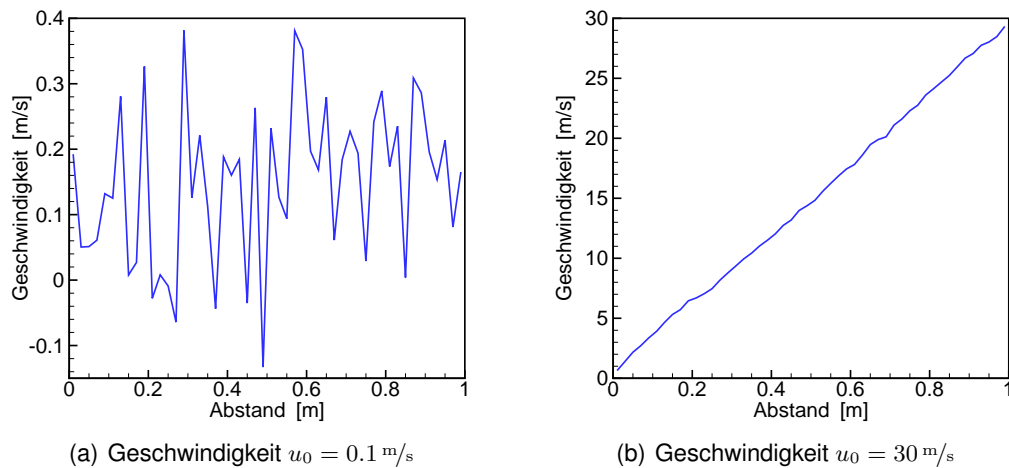


Abbildung A.8.: DSMC-Simulationen einer 1D Couette-Strömung mit $T = 300 \text{ K}$ und verschiedenen Geschwindigkeiten u_0 .

Betrachtet wird die eindimensionale Gasströmung zwischen zwei ebenen Platten (Couette-Strömung). Die untere Platte ist in Ruhe, während sich die in einem Abstand von $L = 1 \text{ m}$ entfernte obere mit der konstanten Geschwindigkeit u_0 bewegt. Als Gas wird Luft bei 300 K und 1 bar angenommen. Damit ergibt sich eine Knudsenzahl $K_n = \frac{\lambda}{L} \ll 0.01$, so dass die Strömung im Kontinuumsbereich liegt. Unter diesen Bedingungen hat die wahrscheinlichste molekulare Geschwindigkeit der Gasmoleküle den Wert $c_m = \sqrt{2RT} = 415 \text{ m/s}$, wobei die spezifische Gaskonstante von Luft bei $R = 287 \text{ J/kgK}$ liegt. Abb. A.8 zeigt die Ergebnisse der DSMC-Simulationen, die jeweils über $400\,000$ Rechenschritte gemittelt worden sind. Das Resultat bei einer Geschwindigkeit von $u_0 = 0.1 \text{ m/s}$ ist auf Abb. A.8 (a) dargestellt. Die Lösung wird vom statistischen Rauschen vollkommen überlagert. Wird die Geschwindigkeit auf $u_0 = 30 \text{ m/s}$ erhöht, so ergibt sich unter ansonsten gleichen Simulationsbedingungen das zu erwartende lineare Strömungsprofil, vgl. Abb. A.8 (b). Um das auch bei diesem Fall auftretende statistische Rauschen zu eliminieren, muss über die sehr große Anzahl an Rechenschritten gemittelt werden. Es zeigt sich also, dass die DSMC-Methode für den in dieser Arbeit betrachteten Bereich der Strömungen bei kleinen Machzahlen numerisch zu aufwendig

ist. Bei Strömungen mit stärkerem Kompressibilitätseinfluss oder Knudsenzahlen im Transitionsbereich ist die Methode jedoch erwägenswert.

Literaturverzeichnis

- [1] <http://www.vug.uni-duisburg.de/MOUSE/>. – Online-Ressource
- [2] <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>. – Online-Ressource
- [3] BARTON, I. E.: Computation of particle tracks over a backward-facing step. In: *Journal of Aerosol Science* 26 (1995), Nr. 6, S. 887–901
- [4] BHATNAGAR, P. ; GROSS, E.P. ; KROOK, M.K.: A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. In: *Physical Review* 94 (1954), S. 511–525
- [5] BIRD, G.A.: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow*. Oxford University Press, 1998
- [6] BROWN, R.C.: *Air Filtration, an Integrated Approach to the Theory and Applications of Fibrous Filters*. Pergamon Press, 1993
- [7] CHANDRASEKHAR, S.: Stochastic problems in physics and astronomy. In: *Review of Modern Physics* 15 (1943), S. 1–89
- [8] CHANG, Y.I. ; WHANG, J.J.: Particle deposition behavior simulated by the stochastic method. In: *Journal of Petrol Science Engineering* 22 (1999), S. 189–203
- [9] CHEN, H. ; CHEN, D. ; MATTHAEUS, W.: Recovery of the Navier-Stokes equations through a lattice gas Boltzmann equation method. In: *Physical Review A* 45 (1992), S. R5339–R5342
- [10] COFFEY, W.T. ; KALMYKOV, Yu.P. ; WALDRON, J.T.: *The Langevin Equation*. Second Edition. World Scientific Printers, 2004
- [11] CROWE, C.T. ; SOMMERFELD, M. ; TSUJI, Y.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, 1998
- [12] CULLITY, B.D.: *Introduction to Magnetic Materials*. Addison Wesley Publishing, 1972
- [13] CZARNECKI, J.: Van der Waals attraction energy between sphere and half-space. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 72 (1979), S. 361–362

- [14] DAVIS, M.H.: Electrostatic field and force on a dielectric sphere near a conducting plane. In: *American Journal of Physics* 37 (1969), S. 26–29
- [15] DUPUIS, A. ; CHOPARD, B.: Lattice gas modeling of scour formation under submarine pipeline. In: *Journal of Computational Physics* 16 (2002), S. 523–532
- [16] EINSTEIN, A.: *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Publications, 1956
- [17] ELIMELECH, M. ; GREGORY, J. ; JIA, X. ; WILLIAMS, R.: *Particle Deposition & Aggregation - Measurement, Modelling and Simulation*. Butterworth-Heinemann Ltd, 1995
- [18] ERMAK, D.I. ; BUCKHOLZ, H.: Numerical integration of the Langevin equation: Monte Carlo simulation. In: *Journal of Computational Physics* 35 (1980), S. 169–182
- [19] FAN, C. ; WAMSLEY, B. ; GENTRY, J.W.: The effect of Stokes and Reynolds numbers on the collection efficiency of grid filters. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 65 (1978), Nr. 1, S. 162–173
- [20] FAN, L.S. ; CHAO, Z.: *Principles of Gas-Solid Flows*. Cambridge University Press, 1998
- [21] FERZINGER, J. H. ; PERIC, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 2002
- [22] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Lattice-Boltzmann simulations of gas-particle flow in filters. In: *Computers & Fluids* 7 (1997), S. 697–712
- [23] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Boundary fitting and local grid refinement for lattice-BGK models. In: *International Journal of Modern Physics C* 9 (1998), S. 1271–1279
- [24] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Grid refinement for Lattice-BGK models. In: *Journal of Computational Physics* 147 (1998), S. 219–228
- [25] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Numerical simulation of gas-particle flow in filters by lattice Bhatnagar-Gross-Krook model. In: SPURNY, K.R. (Hrsg.): *Advances in Aerosol Filtration*. Lewis Publishers, 1998, S. 173–192
- [26] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Acceleration of Lattice-BGK schemes with grid refinement. In: *Journal of Computational Physics* 165 (2000), S. 407–427
- [27] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: A novel lattice BGK approach for low Mach number combustion. In: *Journal of Computational Physics* 158 (2000), S. 138–160

- [28] FILIPPOVA, O. ; SUCCI, S. ; MAZZOCCO, F. ; ARRIGHETTI, C. ; BELLA, G. ; HÄNEL, D.: Multiscale lattice Boltzmann schemes with turbulence Modeling. In: *Journal of Computational Physics* 170 (2001), S. 812–829
- [29] FISSAN, H. ; KENNEDY, M.K. ; KRINKE, T.J. ; KRUIS, F.E.: Nanoparticles from the gas phase as building blocks for electrical devices. In: *Journal of Nanoparticle Research* 5 (2003), Nr. 3, S. 299–310
- [30] FRIEDLANDER, S.K.: *Smoke, Dust and Haze - Fundamentals of Aerosol Dynamics*. Second Edition. Oxford University Press, 2000
- [31] FRISCH, U. ; HASSLACHER, B. ; POMMEAU, Y.: Lattice-gas automata for Navier-Stokes equation. In: *Physical Review Letters* 56 (1986), S. 1505–1508
- [32] GERBER, R. ; BIRSS, R.R.: *High Gradient Magnetic Separation*. John Wiley and Sons, 1983
- [33] GHIA, U. ; GHIA, K.N. ; SHIN, C.T.: High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multi-grid method. In: *Journal of Computational Physics* 48 (1982), S. 387–411
- [34] GOEL, N.S. ; SPENCER, P.R.: Toner particle-photoreceptor adhesion. In: *Adhesion Science Technology* 9 (1975), S. 763–82
- [35] GREGORY, J.: Approximate expressions for retarded van der Waals interaction. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 83 (1981), S. 138–145
- [36] GUPTA, D. ; PETERS, M.H.: A Brownian dynamics simulation of aerosol deposition onto spherical collectors. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 104 (1985), S. 375–389
- [37] HÄNEL, D.: *Molekulare Gasdynamik*. Springer-Verlag, 2004
- [38] HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U.: Simulation of particle transport and structure formation by deposition. In: HOOGENDOORN, S.P. (Hrsg.) ; LUDING, S. (Hrsg.) ; BOVY, P.H.L. (Hrsg.) ; SCHRECKENBERG, M. (Hrsg.) ; WOLF, D.E. (Hrsg.): *Traffic and Granular Flow '03*, Springer-Verlag, 2005, S. 503–512
- [39] HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U. ; KAISER, R.: Lattice-Boltzmann simulations in chemical engineering. In: GROTH, C. (Hrsg.) ; ZINGG, D.W. (Hrsg.): *Computational Fluid Dynamics 2004*, Springer-Verlag, 2006, S. 587–592
- [40] HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U. ; KAISER, R. ; WLOKAS, I.: Generalized lattice-BGK concept for thermal and chemically reacting flows at low Mach numbers. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51 (2006), S. 351–369

- [41] HE, X. ; LUO, L.S.: Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. In: *Journal of Statistical Physics* 88 (1996), S. 927–944
- [42] HE, X. ; LUO, L.S.: A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. In: *Physical Review E* 55 (1997), S. R6333–R6336
- [43] HE, X. ; LUO, L.S.: Theory of the lattice Boltzmann equation: From Boltzmann equation to lattice Boltzmann equation. In: *Physical Review E* 56 (1997), S. 6811–6817
- [44] HE, X. ; ZOU, Q. ; LUO, L.S. ; DEMBO, M.: Analytic solutions and analysis on non-slip boundary condition for the lattice Boltzmann BGK model. In: *Journal of Statistical Physics* 87 (1997), S. 115–136
- [45] HENKE, H.: *Elektromagnetische Felder: Theorie und Anwendungen*. Springer Verlag, 2004
- [46] HIGUERA, F. ; SUCCI, Benzi R.: Lattice gas dynamics with enhanced collisions. In: *Europhysics Letters* 9 (1989), S. 345–349
- [47] HINDS, W.C.: *Aerosol Technology – Properties, Behavior and Measurement of Airborne Particles*. John Wiley and Sons, 1982
- [48] HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Bd. 1: Fundamentals of Numerical Discretization. John Wiley and Sons, 1988
- [49] HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Bd. 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. John Wiley and Sons, 1990
- [50] ISRAELACHVILI, J.: *Intermolecular & Surface Forces*. Academic Press, 1997
- [51] JONES, T.B.: *Electromechanics of Particles*. Cambridge University Press, 1995
- [52] KAUFFELDT, T.: . 2004. – nicht veröffentlicht
- [53] KEE, R.J. ; DIXON-LEWIS, G. ; WARNATZ, J. ; COLTRIN, M.E. ; MILLER, J.A.: A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties / Sandia National Laboratories. Albuquerque, NM, 1986 (SAND86-8246). – Forschungsbericht
- [54] KEE, R.J. ; MILLER, J.A.: A Structured Approach to the Computational Modeling of Chemical Kinetics and Molecular Transport in Flowing Systems / Sandia National Laboratories. Albuquerque, NM, 1986 (SAND86-8841). – Forschungsbericht

- [55] KIRSH, V.A.: Calculation of the van der Waals force between a spherical particle and an infinite cylinder. In: *Advances in Colloid and Interface Science* 104 (2003), S. 311–324
- [56] KIRSH, V.A.: The effect of van der Waals forces on the deposition of highly dispersed aerosol particles on ultrafine fibers. In: *Colloid Journal* 66 (2004), S. 497–503
- [57] KLOEDEN, P.E. ; PLATEN, E. ; SCHURZ, H.: *Numerical Solution of SDE Through Computer Experiments*. Springer Verlag, 1994
- [58] KRAFCZYK, M. ; LEHMANN, P. ; FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U.: Lattice-Boltzmann simulations of complex multi-phase flows. In: SÄNDIG, A.M. (Hrsg.) ; SCHIELEN, W. (Hrsg.) ; WENDLAND, W.L. (Hrsg.): *Multifield Problems*, Springer-Verlag, 2000, S. 50–57
- [59] KRINKE, T.J.: *Nanopartikel aus der Gasphase: Depositionsmechanismen und strukturierte Anordnung auf glatten Substratoberflächen*, Gerhard-Mercator Universität Duisburg, Diss., 2001
- [60] LAIN, S. ; SOMMERFELD, M. ; KUSSIN, J.: Experimental studies and modelling of four-way coupling in particle-laden horizontal channel flow. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 23 (2002), S. 647–656
- [61] LANDAU, L.D. ; LIFSCHITZ, E.M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*. Bd. 6: Hydrodynamik. Akademie Verlag, 1991
- [62] LANTERMANN, U. ; HÄNEL, D.: Particle-Monte-Carlo and Lattice Boltzmann methods for simulations of gas-particle flows. In: *Computers & Fluids* (2006). – in Druck
- [63] LANTERMANN, U. ; HÄNEL, D. ; KAISER, R.: Finite volume-based Lattice-Boltzmann method for general grids. In: HERBIN, R. (Hrsg.) ; KRÖNER, D. (Hrsg.): *Finite Volumes for Complex Applications III – Problems and Perspectives*, Hermes Ltd, 2002, S. 373–380
- [64] LEE, T. ; C.L., Lin: A characteristic Galerkin method for discrete Boltzmann equation. In: *Journal of Computational Physics* 171 (2001), S. 336–356
- [65] LOYALKA, S.K.: Motion of a sphere in a gas: Numerical solution of the linearized Boltzmann equation. In: *Physics of Fluids A* 4 (1992), Nr. 5, S. 1049–1056
- [66] MASSELOT, A. ; CHOPARD, B.: A lattice Boltzmann model for particle transport and deposition. In: *Europhysics Letters* 42 (1998), S. 259–264
- [67] MCNAMARA, G. ; ZANETTI, G.: Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. In: *Physical Review Letters* 61 (1988), S. 2332–2335

- [68] MEI, R. ; LUO, L.S. ; SHYY, W.: An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. In: *Journal of Computational Physics* 155 (1999), S. 307–330
- [69] OH, Y.W. ; JEON, K.J. ; JUNG, A.I. ; JUNG, Y.W.: A simulation study on the collection of submicron particles in a unipolar charged fiber. In: *Aerosol Science & Technology* 36 (2002), S. 573–582
- [70] PAILLÈRE, H. ; VIOZAT, C. ; KUMBARO, A. ; TOUMI, I.: Comparison of low Mach number models for natural convection problems. In: *Heat and Mass Transfer* 36 (2000), S. 567–573
- [71] PAYATAKES, A.C.: *A New Model for Granular Porous Media: Application to Filtration through Packed Beds*, Syracuse University, N.Y., Diss., 1973
- [72] PENG, G. ; XI, H. ; DUNCAN, C. ; CHOU, S.H.: Finite volume scheme for the lattice Boltzmann method on unstructured meshes. In: *Physical Review E* 59 (1999), S. 4675–4682
- [73] PRZEKOP, R. ; MOSKAL, A. ; GRADOŃ, L.: Lattice-Boltzmann approach for description of the structure of deposited particulate matter in fibrous filters. In: *Journal of Aerosol Science* 34 (2003), S. 133–147
- [74] QIAN, Y.H. ; D'HUMIÈRES, D. ; LALLEMAND, P.: Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. In: *Europhysics Letters* 17 (1992), S. 479–484
- [75] REIST, P.C.: *Aerosol Science and Technology*. R.R. Donnelley & Sons, 1993
- [76] RUBINOW, S.I. ; KELLER, J.B.: The transverse force on spinning sphere moving in a viscous fluid. In: *Journal of Fluid Mechanics* 11 (1961), S. 447–459
- [77] SAFFMAN, P.G.: The lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *Journal of Fluid Mechanics* 22 (1965), S. 385–400
- [78] SCHÄFER, M. ; TUREK, S.: Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. In: *Notes in Numerical Fluid Mechanics* 52 (1996), S. 547–566
- [79] SCHWARZ, H.R.: *Numerische Mathematik*. B.G. Teubner, 1993
- [80] SOMMERFELD, M.: *Theoretical and Experimental Modelling of Particulate Flows*. Rhode Saint Genese, Belgium : VKI Lecture Series 2000-06, April 2000
- [81] STECHKINA, I.B. ; KIRSCH, A.A. ; FUCHS, N.A.: Studies on fibrous aerosol filter—IV: Calculation of aerosol deposition in model filters in the range of maximum penetration. In: *The Annals of Occupational Hygiene* 12 (1969), S. 1–8

- [82] SUCCI, S.: Lattice Boltzmann equation: failure or success? In: *Physica A* 240 (1997), S. 221–228
- [83] TIEN, C.: *Filtration of Aerosols and Hydrosols*. Butterworth Publishers, 1989
- [84] VIERTL, R.: *Einführung in die Stochastik*. Springer Verlag, 2003
- [85] VINCENTI, W.G. ; KRUGER, C.H.: *Introduction to Physical Gas Dynamics*. John Wiley and Sons, 1967
- [86] WALTER, W.: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, 1993
- [87] WIEDENSOHLER, A.: *Die bipolare Diffusionsaufladung von Partikeln in chemisch trägen Reinstgasen*, Universität Duisburg, Diss., 1989
- [88] WOLFF, I.: *Maxwellsche Theorie: Grundlagen und Anwendungen*. Springer Verlag, 1997
- [89] WU, Z. ; WALTERS, J.K. ; THOMAS, D.W.P.: The deposition of particles from an air flow on a single cylindrical fiber in a uniform electric field. In: *Aerosol Science & Technology* 30 (1999), S. 62–70
- [90] YU, D. ; MEI, R. ; LUO, L.S. ; SHYY, W.: Viscous flow computations with the method of Lattice Boltzmann equation. In: *Progress in Aerospace Science* 39 (2003), S. 329–367
- [91] ZANK, G.P. ; MATTHAEUS, W.H.: The equations of nearly incompressible fluids. I. Hydrodynamics, turbulence and waves. In: *The Physics of Fluids A* 3 (1991), S. 69–82
- [92] ZARUTSKAYA, T. ; SHAPIRO, M.: Capture of nanoparticles by magnetic filters. In: *Journal of Aerosol Science* 31 (2000), S. 907–921

