

## Abstract

Fluid flow through granular materials is encountered in many industrial processes such as filtration, drying, combustion or heterogeneous catalysis. Efficient and reliable operation of such processes requires an in-depth understanding of the characteristic behaviors including knowledge of the main physical or chemical effects and phenomena. The greatest influence in this context is exerted by the transport processes that take place at the phase boundary. Research dedicated to this subject provided profound insights into heat, mass and momentum transfer processes over the past decades. Corresponding studies in the past have been mainly carried out experimentally and, due to the prevailing complexity, rarely theoretically or analytically. More recently, numerical methods have gained importance as they became more cost-effective and allowed for deeper analysis. These include the two-fluid model (TFM), the discrete element method coupled with computational fluid dynamics (DEM/CFD), and direct numerical simulation (DNS). In contrast to TFM and DEM/CFD, DNS spatially resolves the flow around solid particles, thus achieving a high level of detail. Such particle-resolved (PR) DNS is the preferred choice when highly accurate results are desired or small length scales are involved. However, studies employing PR-DNS were mainly limited to isothermal considerations in the past, leading to numerous conclusions on momentum exchange, while heat exchange was less well covered. In this regard, this thesis aims to contribute to the research of heat transfer processes in particle/fluid systems. The work is concerned on the one hand with the further development of heat transfer modeling and on the other hand with the acquisition of important data and expertise. Within the scope of the present thesis, the momentum and heat transfer in ensembles consisting of spherical or non-spherical particles are studied. The fluid dynamics solver employed was based on the lattice Boltzmann method (LBM), which, in contrast to conventional Navier–Stokes approaches, is founded on the kinetic theory of gases and depicts the statistical behavior of gas molecules. Further developments and extensions of existing algorithms and models and corresponding testing and verifications have been performed and can provide valuable input for future studies. Considering particle/fluid exchange phenomena, the interphase heat and momentum transfer in randomly arranged particle ensembles was examined. From the results obtained, several empirical proximity equations for packing averaged drag forces and Nusselt numbers, as well as a relation for local, meaning surface resolved, Nusselt numbers were derived. It was shown that the proposed correlations were more accurate than models previously reported in the literature. Such correlations are a fundamental part of less sophisticated simulation methods in which the fluid is not spatially resolved, and the particle/fluid forces and heat transfer coefficients can only be approximated. To critically examine non-resolved simulation approaches, a comparative study between PR-DNS and DEM/CFD using a randomly arranged configuration of static particles was performed. Inaccuracies found and quantified for DEM/CFD were particularly high for non-spherical particles. The established models for drag and lift forces as well as for Nusselt numbers are not recommended for non-spherical particles and should be revised in the future. For the lift forces, meaning forces acting perpendicular to the main flow direction, it was found that they are not related to Saffman forces, as is often assumed. In conclusion, practical recommendations are given in regard to DEM/CFD simulations as well as an outlook for upcoming research in the field of resolved and non-resolved simulations of particle/fluid systems.

# Kurzfassung

Fluidströmung durch granulare Materie kommt in vielen industriellen Prozessen wie Filtration, Trocknung, Verbrennung oder heterogener Katalyse vor. Ein effizienter und zuverlässiger Betrieb solcher Prozesse erfordert ein tiefgreifendes Verständnis des charakteristischen Verhaltens einschließlich der Kenntnis der wichtigsten physikalischen oder chemischen Effekte und Phänomene. Den größten Einfluss haben dabei die Transportprozesse, die an der Phasengrenze stattfinden. Forschung, die sich mit dieser Thematik befasst, hat in den vergangenen Jahrzehnten profunde Erkenntnisse über die Prozesse der Wärme-, Stoff- und Impulsübertragung geliefert. Entsprechende Untersuchungen wurden in der Vergangenheit überwiegend experimentell und aufgrund der vorliegenden Komplexität selten theoretisch oder analytisch durchgeführt. In der jüngeren Vergangenheit haben numerische Methoden an Bedeutung gewonnen, da sie effizienter geworden sind und dadurch umfassendere Analysen ermöglichten. Dazu gehören das Two-Fluid-Modell (TFM), die Diskrete-Elemente-Methode gekoppelt mit der numerischen Strömungsmechanik (DEM/CFD) und die Direkte Numerische Simulation (DNS). Im Gegensatz zu TFM und DEM/CFD löst die DNS die Strömung um die Feststoffpartikel räumlich auf und ist dadurch in der Lage einen hohen Detaillierungsgrad zu erreichen. Solche partikel aufgelösten (engl. particle-resolved (PR)) DNS sind das Mittel der Wahl, wenn hochgenaue Ergebnisse erforderlich sind oder kleine Längenskalen betrachtet werden sollen. Studien, bei denen PR-DNS zum Einsatz kam, beschränkten sich in der Vergangenheit jedoch hauptsächlich auf isotherme Betrachtungen, was dazu führte, dass zahlreiche Erkenntnisse über den Impulsaustausch gewonnen wurden, während der Wärmeaustausch weniger ausführlich behandelt wurde. In diesem Zusammenhang zielt die vorliegende Dissertation darauf ab, einen Beitrag zur Erforschung von Wärmeübertragungsprozessen in Partikel/Fluidsystemen zu leisten. Dabei geht es zum einen um die Weiterentwicklung der Wärmeübergangsmodellierung und zum anderen um die Gewinnung wichtiger Daten und Erkenntnisse. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden der Impuls- und Wärmeübergang in Partikelkollektiven bestehend aus sphärischen und nicht sphärischen Teilchen untersucht. Die Strömungsberechnung basiert auf der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM), die im Gegensatz zu herkömmlichen Navier-Stokes-Ansätzen auf der kinetischen Gastheorie beruht und das statistische Verhalten von Gasmolekülen modelliert. Weiterentwicklungen und Erweiterungen existierender Algorithmen und Modelle sowie entsprechende Tests und Verifizierungen wurden durchgeführt und können wertvolle Grundlagen für zukünftige Studien liefern. Unter Berücksichtigung phasenübergreifender Transportprozesse wurden die Wärme- und Impulsübertragung in zufällig angeordneten Partikelgruppen untersucht. Aus den erhaltenen Ergebnissen wurden mehrere empirische Näherungsgleichungen für packungsgemittelte Widerstandskräfte und Nusselt-Zahlen sowie eine Gleichung für lokale, das heißt oberflächenaufgelöste, Nusselt-Zahlen hergeleitet. Es konnte nachgewiesen werden, dass die vorgeschlagenen Korrelationen genauer sind als die zuvor in der Literatur beschriebenen Modelle. Solche Korrelationen sind ein grundlegender Bestandteil weniger komplexer Simulationsmethoden, bei denen das Fluid nicht räumlich aufgelöst ist und die Partikel/Fluid-Kräfte und Wärmeübergangskoeffizienten nur angenähert werden können. Um nicht aufgelöste Simulationsansätze kritisch zu beleuchten, wurde im Rahmen dieser Dissertation eine Vergleichsstudie zwischen PR-DNS und DEM/CFD unter Verwendung einer zufällig angeordneten Konfiguration statischer Partikel durchgeführt. Ermittelte und quantifizierte Ungenauigkeiten der DEM/CFD waren besonders hoch für nicht kugelförmige Partikel. Die etablierten Modelle für Widerstands- und Auftriebskräfte sowie für Nusselt-Zahlen sind für nicht sphärische Partikel nicht empfehlenswert und sollten in Zukunft überarbeitet werden. Bei den Auftriebskräften, d. h. den Kräften, die senkrecht zur Hauptströmungsrichtung wirken, wurde festgestellt, dass sie nicht allein auf Saffman-Kräfte zurückzuführen sind, wie oft angenommen wird. Abschließend werden praktische Empfehlungen im Hinblick auf DEM/CFD-Simulationen sowie ein Ausblick für zukünftige Forschungen im Bereich der aufgelösten und nicht-aufgelösten Simulationen von Partikel/Fluid-Systemen gegeben.