

Entwicklung eines
Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Codes
zur numerischen Vorhersage des Primärzerfalls
an Brennstoffeinspritzdüsen

Zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften

der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Corina Höfler
aus Ötisheim

Tag der mündlichen Prüfung:
Hauptreferent:
Korreferent:

03. Mai 2013
Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer
Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken

Entwicklung eines
Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Codes
zur numerischen Vorhersage des Primärzerfalls
an Brennstoffeinspritzdüsen

von

Dipl.-Ing. Corina Höfler

Karlsruhe 2013

Vorwort der Herausgeber

Der schnelle technische Fortschritt im Turbomaschinenbau, der durch extreme technische Forderungen und starken internationalen Wettbewerb geprägt ist, verlangt einen effizienten Austausch und die Diskussion von Fachwissen und Erfahrung zwischen Universitäten und industriellen Partnern. Mit der vorliegenden Reihe haben wir versucht, ein Forum zu schaffen, das neben unseren Publikationen in Fachzeitschriften die aktuellen Forschungsergebnisse des Instituts für Thermische Strömungsmaschinen am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) einem möglichst großen Kreis von Fachkollegen aus der Wissenschaft und vor allem auch der Praxis zugänglich macht und den Wissenstransfer intensiviert und beschleunigt.

Flugtriebwerke, stationäre Gasturbinen, Turbolader und Verdichter sind im Verbund mit den zugehörigen Anlagen faszinierende Anwendungsbereiche. Es ist nur natürlich, dass die methodischen Lösungsansätze, die neuen Messtechniken, die Laboranlagen auch zur Lösung von Problemstellungen in anderen Gebieten - hier denke ich an Otto- und Dieselmotoren, elektrische Antriebe und zahlreiche weitere Anwendungen - genutzt werden. Die effiziente, umweltfreundliche und zuverlässige Umsetzung von Energie führt zu Fragen der ein- und mehrphasigen Strömung, der Verbrennung und der Schadstoffbildung, des Wärmeübergangs sowie des Verhaltens metallischer und keramischer Materialien und Verbundwerkstoffe. Sie stehen im Mittelpunkt ausgedehnter theoretischer und experimenteller Arbeiten, die im Rahmen nationaler und internationaler Forschungsprogramme in Kooperation mit Partnern aus Industrie, Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen durchgeführt werden.

Es sollte nicht unerwähnt bleiben, dass alle Arbeiten durch enge Kooperation innerhalb des Instituts geprägt sind. Nicht ohne Grund ist der Beitrag der Werkstätten, der Technik-, der Rechner- und Verwaltungsabteilungen besonders hervorzuheben. Diplomanden und Hilfsassistenten tragen mit ihren Ideen Wesentliches bei, und natürlich ist es der stets freundschaftlich fordernde wissenschaftliche Austausch zwischen den Forschergruppen des Instituts, der zur gleichbleibend hohen Qualität der Arbeiten entscheidend beiträgt. Dabei sind wir für die Unterstützung unserer Förderer außerordentlich dankbar.

Im vorliegenden Band der Schriftenreihe befasst sich die Autorin mit der numerischen Berechnung des Primärzerfalls bei der Zerstäubung von flüssigen Brennstoffen. Für die Beschreibung von Zweiphasenströmungen wird in jüngerer Zeit die sogenannte Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Methode als alternativer Ansatz zu gitterbasierten Verfahren untersucht. SPH ist ein Lagrange'sches partikelbasiertes Verfahren, das gänzlich ohne Rechengitter auskommt. Diesen ursprünglich aus der Astrophysik stammenden Ansatz greift Frau Höfler für die Berechnung der Zweiphasenströmung in luftgestützten Brennstoffdüsen auf. Der Zerfall des Flüssigkeitsfilms an der Zerstäuberkante stellt das einzige Glied in der Kette der numerischen Berechnung der Strömung und Verbrennung in Flugtriebwerksbrennkammern dar, das mit den heute verfügbaren CFD Verfahren noch nicht befriedigend aufgelöst werden kann, sondern mit Hilfe empirischer Korrelationen beschrieben werden muss. Eine der noch nicht vollständig gelösten Fragestellungen der SPH Methode betrifft die numerische Erfassung der Oberflächenspannung, sowohl für einphasige Strömungen mit freier Oberfläche als auch für die gekoppelte Berechnung von

Zweiphasenströmungen. Die exakte und numerisch effiziente Beschreibung der Oberflächenspannung stellt einen wesentlichen Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit dar. In einer Reihe von Validierungsfällen, für die analytische oder experimentelle Daten vorlagen, bzw. mit eigenen Vergleichsrechnungen hat die Autorin Schritt für Schritt weitere relevante Teilprozesse für die Primärzerstäubung separiert und die geeigneten Modellierungsansätze für das SPH Verfahren identifiziert und validiert. Mit ihrem Beitrag hat sie die wesentlichen Grundlagen zur vollständigen numerischen Berechnung der Gemischaufbereitung in Flugtriebwerksbrennkammern geschaffen.

Karlsruhe, im Mai 2013

Hans-Jörg Bauer

Vorwort des Autors

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) des Karlsruher Instituts für Technologie.

Mein Dank gilt an erster Stelle dem Institutsleiter Herr Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer für die Möglichkeit diese Arbeit durchzuführen und die Ergebnisse auf internationalen Konferenzen vorzustellen, sowie für die Übernahme des Hauptreferats. Ihm sowie seinem Vorgänger Herr Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Dr. h.c.mult. Sigmar Wittig danke ich für die hervorragenden Rahmenbedingungen am ITS. Ebenso möchte ich mich herzlich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieken für die Übernahme des Korreferats, das Interesse an dieser Arbeit und die Möglichkeit des Austauschs mit den Stuttgarter SPH'ern bedanken.

Ganz besonderer Dank gilt meinem Gruppenleiter Dr.-Ing. Rainer Koch für all die wertvollen, äußerst hilfreichen Diskussionen sowie für seine stetige Unterstützung bei allen neuen Ideen. Er hat das Fundament für diese Arbeit gelegt und mit seinen Ratschlägen einen wesentlichen Beitrag zur erfolgreichen Durchführung dieser Arbeit geleistet.

Bei allen Kollegen und Mitarbeitern des Instituts bedanke ich mich für die hervorragende Arbeitsatmosphäre und die kollegiale, unkomplizierte Zusammenarbeit. Herzlichen Dank an Herrn Michael Lahm für die wertvolle IT-Hilfe. Besonderer Dank für die Unterstützung bei den vielfältigen organisatorischen Aufgaben des Institutsalltags gilt Frau Petra Geyer, Frau Brigitte Humbert und Frau Viola Sauter. Vielen Dank auch an die Techniker und Mitarbeiter der Werkstätten ohne die meine experimentellen Tätigkeiten nicht so reibungslos abgelaufen wären.

Einen wertvollen Anteil zum Gelingen dieser Arbeit leisteten meine lieben Kollegen. Für die tolle Zusammenarbeit, das freundschaftliche Arbeitsumfeld und die Hilfsbereitschaft, sowie die aufmunternden Kaffeerunden möchte ich euch ganz herzlich danken. Danke auch für die hilfreichen Diskussionen und neugierigen Fragen. Besonderer Dank gilt meinem langjährigen Bürokollegen Lars Venema, sowie Benno Wurm für die Nervennahrung zwischendurch und Frau Dr. Elisabeth Eiche für die mittäglichen Spaziergänge, um den Kopf für neue Ideen freizubekommen. Darüberhinaus gilt mein Dank den Studenten, die mit ihrem Engagement im Rahmen von HiWi-Tätigkeiten sowie Studien- und Diplomarbeiten diese Arbeit bereichert haben.

Von ganzem Herzen danke ich meinen Eltern, die mir diesen Weg ermöglicht und mir bei jeder Entscheidung stets den Rücken gestärkt haben. In Worte lässt sich dieser Dank nicht fassen. Für die unermüdliche, geduldige Unterstützung und den Rückhalt danke ich meiner Familie und meinem Freund Marc Lück ganz herzlich.

Karlsruhe, im Mai 2013

Corina Höfler

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Symbole | iv |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Zerstäubung flüssiger Medien - Stand der Forschung | 5 |
| 2.1 Theoretische und experimentelle Grundlagen | 5 |
| 2.1.1 Zerstäuberinterne Effekte | 6 |
| 2.1.2 Primär- und Sekundärzerfall | 9 |
| 2.2 Numerische Beschreibung der Zweiphasenströmung | 13 |
| 2.2.1 Simulationsmethoden für Mehrphasenströmungen | 14 |
| 2.2.1.1 Gitterbasierte Euler'sche Simulationsverfahren | 14 |
| 2.2.1.2 Hybride Euler-Lagrange-Verfahren | 17 |
| 2.2.1.3 Partikelmethoden | 19 |
| 2.2.2 Wandfilm und Wellenbildung - numerische Betrachtung | 21 |
| 2.2.3 Primär- und Sekundärzerfall - numerische Betrachtung | 22 |
| 2.2.3.1 <i>Interface capturing</i> Verfahren | 22 |
| 2.2.3.2 Globale Modelle | 25 |
| 2.2.3.3 Zusammenfassung | 26 |
| 2.3 Smoothed Particle Hydrodynamics | 27 |
| 2.3.1 Inkompressibilität | 28 |
| 2.3.2 Dissipative Terme | 29 |
| 2.3.3 Mehrphasenströmungen | 30 |
| 2.3.4 Oberflächenspannung | 32 |
| 2.3.5 Vor- und Nachteile der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode | 35 |
| 2.4 Zielsetzung | 36 |
| 3 Strömungsmechanische Grundlagen | 39 |
| 3.1 Erhaltung der Masse | 39 |
| 3.2 Erhaltung des Impulses | 39 |
| 3.2.1 Reibungsterm | 40 |
| 3.3 Erhaltung der inneren Energie | 41 |
| 3.4 Zustandsgleichung | 42 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4 | Smoothed Particle Hydrodynamics | 43 |
| 4.1 | Ortsdiskretisierung | 43 |
| 4.2 | Räumliche Ableitungen | 44 |
| 4.3 | Glättungsfunktionen | 47 |
| 4.4 | Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen | 52 |
| 4.4.1 | Erhaltung der Masse | 52 |
| 4.4.2 | Erhaltung des Impulses | 53 |
| 4.4.3 | Erhaltung der inneren Energie | 57 |
| 4.5 | Zustandsgleichung | 59 |
| 4.6 | Oberflächenspannung | 60 |
| 4.6.1 | Continuum Surface Force Modell | 61 |
| 4.6.2 | Intermolekulare Kräfte | 63 |
| 4.7 | Numerische Korrekturen | 64 |
| 4.7.1 | Stützstellenbewegung - XSPH | 64 |
| 4.7.2 | Dichtereinitialisierung | 64 |
| 4.8 | Randmodellierung | 65 |
| 4.8.1 | Feste / bewegte Wände | 66 |
| 4.8.2 | Symmetrische Randbedingungen | 68 |
| 5 | Implementierung des SPH Verfahrens | 69 |
| 5.1 | Programmaufbau | 69 |
| 5.2 | Nachbarsuche | 70 |
| 5.2.1 | Direkte Suche | 71 |
| 5.2.2 | Baumsuche | 71 |
| 5.2.3 | Listensuche | 72 |
| 5.2.4 | Gegenüberstellung der Suchalgorithmen | 72 |
| 5.3 | Zeitdiskretisierung | 74 |
| 5.4 | Limitierung des Zeitschritts | 75 |
| 6 | Modellvalidierung | 77 |
| 6.1 | Einphasen-Testfälle ohne Oberflächeneffekte | 77 |
| 6.1.1 | Stoßrohr | 78 |
| 6.1.2 | Kavitätsströmung | 84 |
| 6.1.2.1 | Einfluss der Interpolationsfunktion | 85 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 6.1.2.2 | Konvergenzverhalten | 88 |
| 6.1.3 | Couette Strömung | 91 |
| 6.1.4 | Taylor-Green-Wirbel | 94 |
| 6.2 | Einphasen-Testfälle mit freier Oberfläche | 102 |
| 6.2.1 | Tropfenformation | 103 |
| 6.2.2 | Dammbruch - Zerfall einer Wassersäule | 110 |
| 6.2.3 | Generische Düsenströmung | 114 |
| 6.2.4 | Tropfen-Film-Interaktion | 124 |
| 6.3 | Zweiphasen-Testfälle | 128 |
| 6.3.1 | Tropfenformation | 128 |
| 6.3.2 | Tropfen in Scherströmung | 132 |
| 6.4 | Diskussion der Oberflächenspannungsmodelle | 136 |
| 6.4.1 | Einphasenströmungen mit freier Oberfläche | 136 |
| 6.4.2 | Mehrphasenströmungen | 137 |
| 6.5 | Zusammenfassende Beurteilung der Modellvalidierung | 139 |
| 7 | Zusammenfassung und Ausblick | 141 |
| | Literatur | 143 |
| | Anhang | 157 |
| A.1 | Glättungsfunktionen | 157 |
| A.2 | Stoßrohr | 162 |
| A.3 | Wärmeleitung | 164 |

Symbolverzeichnis

| Formelzeichen | Einheit | Bedeutung |
|----------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|
| <i>Lateinische Symbole</i> | | |
| a | $\frac{\text{Pa m}^6}{\text{mol}^2}$ | Kohäsionsdruck |
| a' | $\frac{\text{Pa m}^6}{\text{kg}^2}$ | Kohäsionsdruck |
| b | $\frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$ | Kovolumen |
| c | $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ | Schallgeschwindigkeit |
| c_D | – | Widerstandsbeiwert |
| c_v | – | Volumenanteil |
| c_v | $\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$ | Spezifische isochore Wärmekapazität |
| d_T | m | Tropfendurchmesser |
| e_{kin} | J | Kinetische Energie |
| f | – | Beliebige Funktion |
| h | m | Charakteristische Länge |
| h | m | Glättungslänge |
| k | $\frac{\text{W}}{\text{m K}}$ | Wärmeleitfähigkeit |
| k | $\frac{1}{m}$ | Wellenzahl |
| l_s | m | Strahleindringtiefe |
| m | kg | Masse |
| n | – | Modellparameter |
| p | $\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ | Druck |
| q | – | Dimensionsloser Abstand |
| r | m | Abstand |
| t | s | Zeit |
| u | $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ | Geschwindigkeitskomponente |
| u | $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$ | Spezifische innere Energie |
| v | $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ | Geschwindigkeitskomponente |
| w | $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ | Geschwindigkeitskomponente |
| x | m | Koordinate |
| Δx | m | Partikelabstand |
| y | m | Koordinate |
| z | m | Koordinate |
| A | m^2 | Fläche |
| B | $\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ | Referenzdruck |
| D | m | Strahldurchmesser |

| | | |
|----------------------------|-------------------|---|
| D | $\frac{m^2}{s^2}$ | Parameter Kraftpotential |
| F | N | Kraft |
| H | m | Charakteristische Länge |
| \mathbf{I} | – | Einheitsmatrix |
| M | $\frac{kg}{mol}$ | Molare Masse |
| N | – | Bool'sche Variable |
| N | – | Partikelanzahl |
| L | m | Charakteristische Länge |
| R | $\frac{J}{kg K}$ | Spezifische Gaskonstante |
| R | m | Radius |
| T | K | Temperatur |
| V | m^3 | Volumen |
| W | $\frac{1}{m^n}$ | Glättungsfunktion im n-dimensionalen Raum |
| \vec{a} | $\frac{m}{s^2}$ | Beschleunigungsvektor |
| \vec{g} | $\frac{m}{s^2}$ | Erdbeschleunigung |
| \vec{n} | m | Normalenvektor |
| \vec{r} | m | Ortsvektor |
| \vec{v} | $\frac{m}{s}$ | Geschwindigkeitsvektor |
| \vec{x} | m | Positionsvektor |
| <i>Griechische Symbole</i> | | |
| α | – | Modellparameter |
| α | $\frac{m^2}{s}$ | Temperaturleitfähigkeit |
| α | $^\circ$ | Winkel |
| β | – | Modellparameter |
| δ | – | Dirac-Funktion |
| ε | – | Modellparameter |
| ε | $\frac{1}{s}$ | Scherrate |
| ζ | – | Farbwert |
| κ | – | Isentropenexponent |
| κ | $\frac{1}{m}$ | Krümmung |
| λ | m | Mittlere freie Weglänge |
| λ | m | Wellenlänge |
| μ | $Pa s$ | Dynamische Viskosität |
| ν | $\frac{m^2}{s}$ | Kinematische Viskosität |
| ρ | $\frac{kg}{m^3}$ | Dichte |
| σ | $\frac{N}{m}$ | Oberflächenspannungskoeffizient |

| | | |
|----------|----------------------|--------------------|
| τ | $\frac{N}{m^2}$ | Spannungstensor |
| Γ | – | Grenzfläche |
| Π | $\frac{m^5}{s^2 kg}$ | Dissipationsterm |
| Φ | – | Beliebige Funktion |

Indizes

| | |
|---------------|--------------------------|
| <i>a</i> | Zentralpartikel |
| <i>b</i> | Benachbartes Partikel |
| <i>diff</i> | Differenz |
| <i>ext</i> | Extern |
| <i>i</i> | Integralinterpolation |
| <i>korr</i> | Korrigierter Wert |
| <i>krit</i> | Kritischer Wert |
| <i>max</i> | Maximum |
| <i>n</i> | Normal |
| <i>O</i> | Oberfläche |
| <i>R</i> | Rand |
| <i>rel</i> | Relativ |
| <i>rep</i> | Repulsiv |
| <i>s</i> | Summeninterpolation |
| $\frac{1}{2}$ | Wert zum Halbzeitschritt |

Kennzahlen

| | | |
|------------|------------------------------------|----------------|
| <i>Ca</i> | $\frac{\varepsilon \mu R}{\sigma}$ | Kapillar-Zahl |
| <i>CFL</i> | $\frac{u \Delta t}{\Delta x}$ | Courant-Zahl |
| <i>Kn</i> | $\frac{\lambda}{L}$ | Knudsen-Zahl |
| <i>M</i> | $\frac{u}{c}$ | Mach-Zahl |
| <i>Oh</i> | $\frac{\mu}{\sqrt{\rho L \sigma}}$ | Ohnesorge-Zahl |
| <i>Re</i> | $\frac{u L}{\nu}$ | Reynolds-Zahl |
| <i>We</i> | $\frac{\rho L v_{rel}^2}{\sigma}$ | Weber-Zahl |

Abkürzungen

| | |
|--------------|---|
| <i>ACARE</i> | Advisory Council for Aeronautics Research in Europe |
| <i>ADKE</i> | Adaptive Density Kernel Estimation |
| <i>CAEP</i> | Committee on Aviation Environmental Protection |
| <i>CF</i> | Cohesive Force |
| <i>CFD</i> | Computational Fluid Dynamics |

| | |
|----------------|--|
| <i>CPU</i> | Central Processing Unit |
| <i>CSF</i> | Continuum Surface Force |
| <i>DNS</i> | Direct Numerical Simulation |
| <i>DPD</i> | Dissipative Particle Dynamics |
| <i>DPM</i> | Discrete Phase Model |
| <i>ELSA</i> | Eulerian-Lagrangian Spray Atomization |
| <i>EPOS</i> | Elliptic Package On Shear flows |
| <i>FDM</i> | Finite Differenzen Methode |
| <i>FEM</i> | Finite Element Methode |
| <i>FVM</i> | Finite Volumen Methode |
| <i>GPU</i> | Graphics Processing Unit |
| <i>ICAO</i> | International Civil Aviation Organization |
| <i>ISPH</i> | Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics |
| <i>ITS</i> | Institut für Thermische Strömungsmaschinen |
| <i>LaDrop</i> | Lagrangian Droplet Tracking |
| <i>LBM</i> | Lattice-Boltzmann-Methode |
| <i>LDA</i> | Laser Doppler Anemometry |
| <i>LES</i> | Large Eddy Simulation |
| <i>LISA</i> | Linearized Instability Sheet Atomization |
| <i>LS</i> | Level Set |
| <i>MAC</i> | Marker and Cell |
| <i>MC</i> | Monte Carlo |
| <i>MD</i> | Molekulardynamik |
| <i>MPI</i> | Message Passing Interface |
| <i>PDA</i> | Phase Doppler Anemometry |
| <i>PIC</i> | Particle in Cell |
| <i>PIV</i> | Particle Image Velocimetry |
| <i>SPH</i> | Smoothed Particle Hydrodynamics |
| <i>SPHERIC</i> | Smoothed Particle Hydrodynamics European Research Interest Community |
| <i>SRA</i> | Strategic Research Agenda |
| <i>TAB</i> | Taylor Analogy Break-up |
| <i>VoF</i> | Volume of Fluid |
| <i>WCSPH</i> | Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics |
| <i>XSPH</i> | Korrektur im SPH Verfahren |

1 Einleitung

Die fortschreitende Globalisierung und die Erschließung neuer Märkte tragen dazu bei, dass das Flugverkehrsaufkommen, welches ein Stützpfeiler unserer mobilen Gesellschaft ist, vor allem im letzten Jahrzehnt einen rasanten Anstieg zu verzeichnen hatte. Begründet durch die stark anwachsenden Bevölkerungszahlen und die aktuellen wirtschaftlichen Entwicklungen wird dieses in den nächsten Jahren weiter stark zunehmen (ACARE (2010)). Nach jetzigem Stand der Technik werden somit die absoluten, durch den Luftverkehr verursachten Schadstoff- und Lärmemissionen ansteigen. Außerdem wird aufgrund des steigenden absoluten Rohstoffbedarfs für die Zukunft unweigerlich eine Ressourcenverknappung, vor allem des Rohöls, und somit eine Erhöhung der Kraftstoffpreise prognostiziert. Die in Angriff zu nehmenden Herausforderungen für Flugtriebwerke kommender Generationen sind daher die Steigerung des Wirkungsgrades, die Reduktion des absoluten Kraftstoffbedarfs und die Senkung der Schadstoff- und Lärmemissionen.

Heutzutage unterliegt die Luftfahrt bereits strengen Schadstoffemissionsvorschriften, welche zukünftig noch restriktiver werden. Vor dem Hintergrund der allseits diskutierten Klimaänderung und der daraufhin geforderten Verringerung der Treibhausgase, werden drastische Maßnahmen zum Schutz der Umwelt und der Verringerung flugverkehrbedingter Emissionen zu ergreifen sein.

Die internationale zivile Luftfahrtbehörde (ICAO) rief in diesem Zusammenhang 1983 das Komitee für Umweltschutz in der Luftfahrt (CAEP) ins Leben. Dessen Aufgabe ist die Erstellung zukünftiger Standards für Lärm- und Schadstoffemissionen die Luftfahrt betreffend. Im Rahmen des CAEP/8-Treffens 2010 (ICAO (2010)) wurden Vereinbarungen zur Regulierung der Treibhausgase, des Lärms und der lokalen Luftqualität getroffen. So soll bis zu CAEP/9 im Jahr 2013 ein Standard für zulässige CO_2 -Emissionen eingeführt werden. Des Weiteren wird ein neuer NO_x -Standard gelten, welcher eine Reduktion der NO_x -Emissionen um weitere 5 bzw. 15% für kleine bzw. große Triebwerke im Vergleich zu den bisher gültigen Bestimmungen aus CAEP/6 für alle nach dem 31. Dezember 2013 zertifizierten Triebwerke fordert. Außerdem wurde eine Einstellung der Produktion aller Triebwerke, welche den NO_x -Standard der CAEP/6-Norm nicht erfüllen, bis Ende 2012 empfohlen.

2001 wurde zur Erstellung und Ausführung einer strategischen Forschungsagenda (SRA) die Luftfahrt betreffend der Beirat für Luftfahrtforschung in Europa (ACARE) gegründet. Er definierte im Rahmen von ACARE (2010) bis 2020 folgende Ziele basierend auf den Emissionen des Jahres 2000:

- Reduktion der CO_2 -Emissionen um 50% pro Passagier-Kilometer
- Verminderung der NO_x -Emissionen um 80%
- Verringerung des wahrnehmbaren Fluglärms um 50%

Aufgrund der dargelegten Tatsachen besteht akuter Handlungsbedarf hinsichtlich der Entwicklung neuer, innovativer Design- und Auslegungskonzepte von Flugtriebwerken sowie der Optimierung

der Produktionsprozesse. Entscheidend sind die Forderungen nach Effizienzsteigerung und Erhöhung der spezifischen Leistung bei gleichzeitig geringerem absoluten Kraftstoffverbrauch sowie Reduktion der Schadstoff- und Lärmemissionen. Somit steht die Luftfahrtindustrie letztlich vor der Aufgabe diesen komplexen, ambivalenten Anforderungen unter Berücksichtigung der Wirtschaftlichkeit eines Triebwerks gerecht zu werden.

Wird vorausgesetzt, dass die maximal zulässige Turbineneintrittstemperatur, mit den derzeit verfügbaren Kühlkonzepten, nicht überschritten wird, ist es zur Erzielung eines guten thermischen Wirkungsgrades wünschenswert, eine möglichst hohe Brennkammeraustrittstemperatur zu erreichen. Außerdem gewährleisten höhere Druckverhältnisse eine Wirkungsgradsteigerung. Diese Forderungen stehen jedoch im Widerspruch zur erhöhten NO_x -Bildung in der Brennkammer bei hohen Betriebstemperaturen bzw. -drücken und dabei vor allem der Entstehung von thermischem NO_x . Daher bedarf es geeigneter Verbrennungskonzepte, um Triebwerke einer neuen Generation zu entwickeln.

Wird der gesamte Verbrennungsprozess betrachtet, so spielt die Kraftstoffaufbereitung eine entscheidende Rolle. Kerosin wird im flüssigen Zustand über die Kraftstoffzuleitung zur Zerstäuberdüse gefördert. Diese befindet sich am Brennkammereintritt. Luftgestützte Zerstäubersysteme, wie in Abb. 1.1 dargestellt, bringen den Kraftstoff als möglichst fein verteiltes Spray in die Brennkammer ein. Neben den luftgestützten Zerstäubern, den sog. Airblast-Zerstäubern, existiert eine Vielzahl an weiteren Konzepten zur Spraygenerierung (Lefebvre (1989)). Airblast-Zerstäuber werden jedoch überwiegend in Gasturbinenbrennkammern eingesetzt. Ihre bestechenden Vorteile sind die erzeugte Tropfengrößenverteilung, welche nahezu unabhängig vom Betriebspunkt ist, und ihr gutes Regelverhalten.

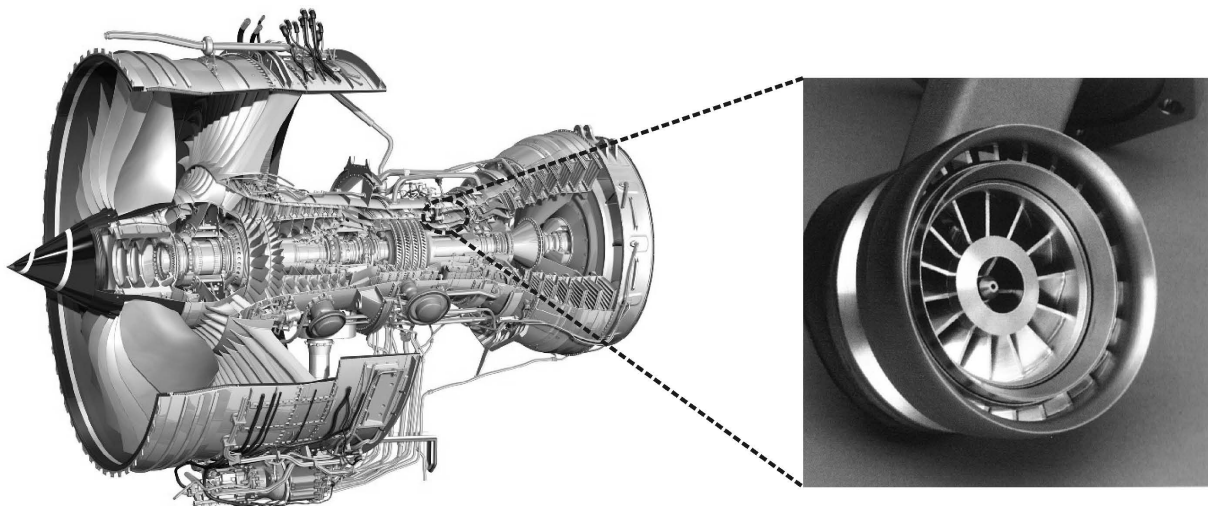


Abbildung 1.1: Flugtriebwerk Trent 1000 und luftgestützte Zerstäuberdüse (Rolls-Royce (2005)) von Rolls-Royce

Ziel ist eine schnell eintretende, stabile und schadstoffarme Verbrennung bei möglichst vollständigem Ausbrand. Deshalb muss eine rasche Verdunstung des Flüssigkraftstoffes vor der eigentlichen Verbrennung stattfinden. Folglich muss das beim Zerstäubungsvorgang am Düsen-

austritt entstehende Kraftstoffspray geringe Tropfengrößen aufweisen und in geeigneter Weise in der Primärzone der Brennkammer verteilt werden.

Bei der Entwicklung von Zerstäuberdüsen bleibt bisher einzig und allein die Konzeption und Fertigung eines Prototyps mit anschließender messtechnischer Erfassung der Tropfengrößen- und Tropfengeschwindigkeitsspektren zur Beurteilung der Zerstäubergüte. Erst nach Vermessung der relevanten Spraygrößen kann die nächste Iteration im Rahmen der Designoptimierung erfolgen. Aufgrund dieses iterativen Entwicklungsprozesses ist die Zerstäuberentwicklung derzeit mit einem sehr hohen Kosten- und Zeitaufwand verbunden. Des Weiteren besteht trotz aufwändiger und teurer Messtechnik nicht die Möglichkeit, das Spray unter allen Betriebszuständen, insbesondere Druckvariationen, welche in Brennkammern auftreten können, zu charakterisieren. Eine möglicherweise starke Abweichung der Sprayqualität während des Fluges unter bestimmten Last- und Umgebungsbedingungen kann daher in der Entwicklungsphase nicht erkannt und ausgeschlossen werden. Die Tropfengrößen und -geschwindigkeiten lassen sich nicht über den Druck skalieren. Aussagen über die Sprayqualität und -ausbreitung z.B. beim Wiederzünden eines Triebwerks in Reiseflughöhe bei stark verringertem Druck oder bei sehr hohen Drücken lassen sich nicht treffen. Deshalb sollten die Sprayeigenschaften zumindest für eine möglichst große Variation an Betriebspunkten untersucht werden, da keine verlässlichen Korrelationen existieren. Das Ergebnis ist unter anderem eine sehr große Messmatrix. Die hierfür notwendige Messtechnik, wie z. B. Laser-Doppler- oder Phasen-Doppler-Anemometrie (LDA/PDA), ist extrem teuer und kann die Tropfengrößen und -geschwindigkeiten nur punktweise erfassen. In der Praxis dienen die daraus erhaltenen Messergebnisse, neben der Beurteilung der Zerstäubergüte, als Anfangs- und Randbedingungen für die Berechnung der tropfenbeladenen Brennkammerströmung und der numerischen Simulation des Verbrennungsvorgangs.

Ausgangspunkt für die entstehende Tropfengrößen- und Tropfengeschwindigkeitsverteilung ist der Zerfall des Kraftstofffilms an der Zerstäuberkante. Dieser kann bisher nicht direkt auf Basis physikalischer Gesetzmäßigkeiten beschrieben werden. Es existieren lediglich empirische und statistische Modelle. Eine hinreichend exakte numerische Simulation des Primärzerfalls ist mittels gängiger gitterbasierter CFD-Verfahren wegen der dafür notwendigen enorm hohen Rechenleistung derzeit nicht umsetzbar. Die gitterbasierte Berechnung von Mehrphasenströmungen ist aktuell Gegenstand der Forschung. Sie ist neben einem extrem hohen Rechenaufwand mit Ungenauigkeiten, insbesondere an den Phasengrenzflächen, verbunden. Eine mögliche Alternative hierzu stellen die Lagrange'schen, gitterfreien Partikelmethode dar. Ein gewichtiger Vorteil dieses Ansatzes ist die inhärente Advektion der Phasengrenzflächen. Da die Generierung eines Rechengitters entfällt, können Strömungen in hochkomplexen Geometrien, wie der eines Airblast-Zerstäubers, mit vergleichsweise geringem Aufwand simuliert werden. Diese Alternative soll im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementiert und untersucht werden. Die Möglichkeit, den kompletten Flüssigkeitszerfall mittels numerischer Methoden zuverlässig und effektiv berechnen zu können, würde einen effizienten Entwicklungs- und Optimierungsprozess geeigneter Zerstäuberkonzepte ermöglichen. Somit würde die Auslegung und Produktion von Kraftstoffeinspritzdüsen erheblich beschleunigt.

Das Ziel der hier vorliegenden Arbeit ist die Grundlagenentwicklung und detaillierte Validierung eines Codes zur numerischen Simulation des Primärzerfalls basierend auf der gitterfreien

Lagrange'schen Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Methode. Dazu müssen die für den Primärzerfall relevanten strömungsmechanischen Phänomene in korrekter, effizienter Weise numerisch modelliert werden. Die Zuverlässigkeit und Aussagekraft der Simulationsergebnisse werden anhand geeigneter Testfälle validiert. Dieses Programm soll als Grundlage für die Erstellung eines zukünftigen virtuellen Zerstäuberprüfstandes dienen.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen: in Kapitel 2 wird der aktuelle Stand der Forschung hinsichtlich der theoretischen und experimentellen Untersuchung des Flüssigkeitszerfalls erläutert und ein Überblick über die bestehenden numerischen Methoden zur Simulation von Mehrphasenströmungen gegeben. Außerdem wird allgemein auf die derzeitigen Möglichkeiten und Grenzen der numerischen Modellierung der Kraftstoffaufbereitung und speziell auf den aktuellen Entwicklungsstand der SPH Methode eingegangen. Daraus werden die in dieser Arbeit verfolgte Zielsetzung und die Anforderungen an den zu entwickelnden Code abgeleitet. In Kapitel 3 werden in Kürze die zugrundeliegenden strömungsmechanischen Erhaltungsgleichungen behandelt. Die gitterfreie Lagrange-Methode SPH wird detailliert in Kapitel 4 diskutiert. Hierbei werden die angewendeten Approximationen durch Summeninterpolation mathematisch hergeleitet und darauf aufbauend die Ortsdiskretisierung des Verfahrens erklärt. Darüber hinaus beinhaltet dieses Kapitel die Modellierung der wichtigen zu berücksichtigenden strömungsmechanischen Effekte, wie z. B. die Oberflächenspannung, die Handhabung numerischer Korrekturen und die Darstellung von Randbedingungen. Die Codestruktur und die programmiertechnischen Aspekte werden in Kapitel 5 näher erläutert. Die Validierung des SPH Codes hinsichtlich für den Primärzerfall relevanter, exakt zu simulierender Effekte findet in Kapitel 6 statt. Anfangs soll anhand von einfachen Testfällen die Gültigkeit der implementierten Gleichungen für Einphasenströmungen aufgezeigt werden. Anschließend wird auf die Simulation von Strömungen mit freien Oberflächen unter Berücksichtigung der Oberflächenspannung eingegangen. Schließlich erfolgt die Validierung der Simulationen von Mehrphasenströmungen. Abschließend werden in Kapitel 7 die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick auf kommende Schritte hin zur Entwicklung eines virtuellen Zerstäuberprüfstandes gegeben.

2 Zerstäubung flüssiger Medien - Stand der Forschung

Gegenstand dieser Arbeit ist die Grundlagenentwicklung eines geeigneten Strömungslösers, der zukünftig die exakte numerische Vorhersage des Primärzerfalls eines Flüssigkeitsfilms an der Zerstäuber­kante in Ligamente und Primärtropfen ermöglichen soll. Dazu ist einerseits das Verständnis der physikalischen Prozesse in Airblast-Zerstäubern und andererseits das Wissen um die bestehenden Möglichkeiten und Grenzen der Computersimulation von Mehrphasenströmungen erforderlich. In den folgenden Unterkapiteln soll auf die physikalischen Grundlagen der Zerstäubung und den aktuellen Stand der Forschung näher eingegangen werden.

2.1 Theoretische und experimentelle Grundlagen

Die Kraftstoffaufbereitung zur Verbrennung flüssiger Kraftstoffe, wie sie in Flugtriebwerken stattfindet, ist bereits seit vielen Jahren Gegenstand der Forschung. Sie ist für die Tropfenverdunstung und die zeitlich darauf folgende Verbrennung von enormer Bedeutung. In letzter Zeit rückt dieses Thema aus den in Kapitel 1 erörterten Gründen wieder verstärkt in den Fokus der Wissenschaft. Die Entwicklung schadstoffarmer und effizienter Brennkammerkonzepte für Flugtriebwerke (Joos (2006)) ist unerlässlich. Ausschlaggebend hierfür ist stets auch die optimierte Auslegung der Kraftstoffeinspritzung. Die Kenntnis der Physik der Zweiphasenströmungen, insbesondere der Grenzflächenphänomene, hier von gasförmiger Luft und flüssigem Kerosin, ist unerlässlich. In den heutigen Triebwerken werden die sogenannten Airblast-Zerstäuber (Lefebvre (1980), Sattelmayer und Wittig (1989)), aus der Kategorie der luftgestützten Zerstäubersysteme, eingesetzt. Deren prinzipieller Aufbau ist in Abb. 2.1 zu sehen.

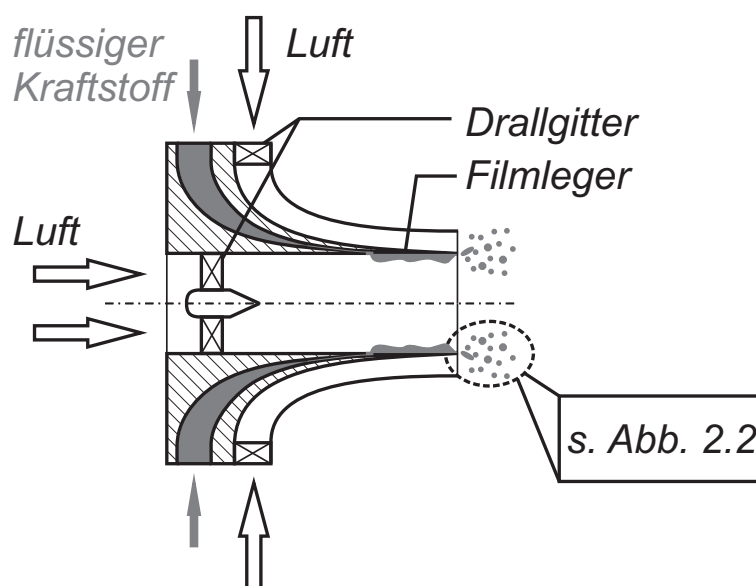


Abbildung 2.1: Zerfall des Kraftstofffilms in einer luftgestützten Zerstäuberdüse

Der Kraftstofffilm wird unter geringem Flüssigkeitsvordruck auf einen Filmleger aufgebracht. Die koaxial durch Drallgitter austretende, stark beschleunigte Luft interagiert mit dem flüssigen Film. An der Phasengrenze treten hohe Scherkräfte aufgrund der hohen Relativgeschwindigkeit zwischen Luft und Kraftstoff auf. Dies führt dazu, dass der Film zur Zerstäuberseite transportiert und eine Wellenbildung initiiert wird. Stromab wird der Film weiter beschleunigt, bis er schließlich an der Kante in Ligamente und große Einzeltröpfen zerfällt. Hier findet der sogenannte Primärzerfall des Flüssigkeitsfilms in Ligamente und meist nicht-sphärische Primärtropfen statt. Aufgrund der aerodynamischen Kräfte und entgegenwirkender Scher- und Oberflächenspannungskräfte setzt im weiteren Verlauf der Sekundärzerfall in kleinere Tropfen ein. Arbeiten hierzu wurden bereits von Schmehl (2003) und Bartz et al. (2010) durchgeführt. Der detaillierte Zerfallsprozess ist in einer Vielzahl an Lehrbüchern genauer erläutert und kann der Literatur (u. a. Lefebvre (1989), Bayvel und Orzechowski (1993), Ashgriz (2011)) entnommen werden. Die Prozesskette der Kraftstoffaufbereitung ist in Abb. 2.2 schematisch skizziert.

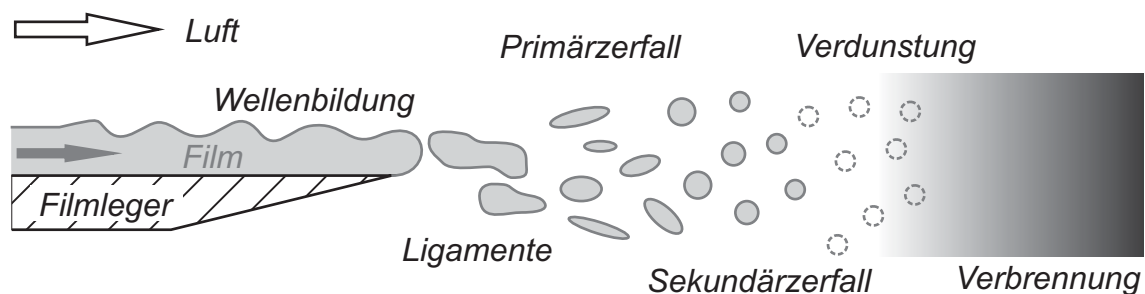


Abbildung 2.2: Kraftstofftransport über einen Filmleger mit anschließender Filmdesintegration, Verdunstung und Verbrennung

Die erzielten Fortschritte und Erkenntnisse aus den bisher durchgeführten theoretischen und experimentellen Forschungsarbeiten auf diesem Gebiet werden in den folgenden Kapiteln näher erläutert. Dabei werden die relevanten Teilprozesse der Zerstäubung, wie die Interaktion zwischen Flüssigkeitsfilm und Gasphase, die Verdunstung, der Primärzerfall und der Sekundärzerfall, genauer betrachtet. Eine getrennte Betrachtung der Teilprozesse ist aufgrund der Wechselwirkung untereinander nicht möglich, weshalb in den folgenden Kapiteln immer wieder Querverbindungen aufgezeigt werden.

2.1.1 Zerstäuberinterne Effekte

Erste experimentelle Untersuchungen zur Interaktion des Flüssigkeitsfilms und der Gasphasenströmung in Airblast-Zerstäubern führten bereits Sattelmayer (1985) und Aigner (1986) durch. Dabei stellte sich heraus, dass die Wechselwirkung beider Phasen miteinander einen maßgeblichen Einfluss auf die Tropfenbildung hat.

Sattelmayer und Wittig (1986) abstrahierten die komplexe Strömung in einem Airblast-Zerstäuber auf die Zweiphasenströmung in einem ebenen Spalt. Dabei wurde insbesondere der Einfluss der Spalthöhenvariation sowie der Strömungsparameter - Gasphasengeschwindigkeit, Filmbeladung,

Oberflächenspannung, Viskosität - auf den Filmzerfall und die Tropfenbildung untersucht. Aigner und Wittig (1988) charakterisierten die Einflussgrößen auf die Zerstäubung in zylindrischen, drallbehafteten Airblast-Zerstäubern und berücksichtigten zusätzlich den Einfluss des Dralls und der Dicke der Zerstäuberante auf die Zerstäubung.

Festzuhalten ist, dass die Oberflächenspannung und die Gasphasengeschwindigkeit maßgeblichen Einfluss auf das entstehende Tropfengrößenspektrum haben. Mit sinkender Oberflächenspannung und steigender mittlerer Geschwindigkeit der Gasphase nimmt die Tropfengröße ab. Die Oberflächenspannung ist eine temperaturabhängige Stoffgröße und kann durch Wärmeeintrag in den Film verringert werden. Die Gasphasengeschwindigkeit im Spalt wird wiederum indirekt über die Filmbeladung und die Viskosität der Flüssigkeit beeinflusst. Durch eine Erhöhung der Filmbeladung oder der Viskosität nehmen die Filmdicke sowie die Wellenbildung bzw. die Filmrauigkeit zu. Daraus resultiert eine Abnahme der für die Luftströmung zur Verfügung stehenden Spalthöhe sowie eine Schubspannungserhöhung an der Phasengrenzfläche und somit eine Verringerung der Gasphasengeschwindigkeit bei gleichem Vordruck. Dies hat zur Folge, dass sich die Tropfengrößenverteilung zu höheren Durchmessern hin verschiebt. Wird die Gasphasengeschwindigkeit durch Anpassung des Vordrucks konstant gehalten, so haben Filmbeladung und Viskosität bzw. die Wellenbildung keinen Einfluss auf die Tropfengrößen. Bei einer überkritischen Filmbeladung kommt es allerdings zum Abreißen einzelner Tropfen aus dem Film auf dem Filmleger noch bevor dieser die Zerstäuberante erreicht. Dieser Zerfallsmechanismus wird durch die Steigerung der Gasphasengeschwindigkeit, insbesondere bei geringen Oberflächenspannungen, zusätzlich angefacht (Aigner und Wittig, 1988). Hierdurch kommt es bereits im Zerstäuber zur Interaktion zwischen Tropfen und Wandfilm. Laut Aigner und Wittig (1985) bewirkt eine gegenläufige Drallbeaufschlagung der Gasphasenströmung eine Zunahme der an der Grenzfläche angreifenden Scherkräfte, wodurch die Tropfengrößenverteilung abnimmt. Daher kann der für eine definierte Sprayqualität benötigte Luftmassenstrom durch die Drallbeaufschlagung der Gasphase abgesenkt werden.

Der Filmzerfall an der Zerstäuberante ist ein periodischer Prozess (Sattelmayer und Wittig, 1986). Hierbei akkumuliert sich die Flüssigkeit an der Filmlegerante, an der die Desintegration in Ligamente und Primärtropfen stattfindet. Somit hat die Filmbeladung keinen Einfluss auf die Tropfengrößenverteilung. Die dominierenden Frequenzen der Tropfenentstehung hängen jedoch nicht von der Wellenfrequenz des Flüssigkeitsfilms auf dem Filmleger, sondern von der Gasphasengeschwindigkeit ab. Integral betrachtet ist die Frequenz der Tropfenbildung geringer als die Frequenz der Flüssigkeitswellen. Aigner und Wittig (1985) konstatierten, dass die Dicke der Zerstäuberante keinen Einfluss auf das Tropfenspektrum ausübt. Neueste Untersuchungen von Geppert et al. (2012) widerlegen dies jedoch.

Die Anwendung der optischen Messgeräte zur non-intrusiven Untersuchung welliger Flüssigkeitsfilme ist bei Sattelmayer et al. (1987) nachzulesen. Die von Aigner (1986) entwickelte Korrelation für mittlere Tropfendurchmesser wurde von Willmann (1999) für Drücke bis zu 8 bar bestätigt.

Die Interaktion zwischen laminarem Wandfilm und turbulenter Gasphase (s. Abb. 2.3) wie auch die Verdunstungsmodellierung eines welligen Films wurden von Wittig et al. (1991) und Himmelsbach et al. (1994) genauer untersucht. Die Ausbildung der Gas- und Flüssigkeitsströ-

mung ist abhängig von den Massenströmen und Temperaturen der beiden Phasen sowie von den lokalen Temperaturgradienten und der Konzentration der verdunsteten Flüssigkeit. Zu deren Berechnung müssen geeignete Vereinfachungen - z.B. die zeitliche Mittelung der Filmhöhe, der Geschwindigkeiten und der Welligkeit des Films sowie die Annahme eines idealen Gases - getroffen werden. Wie bereits festgestellt ist es notwendig, die Rauigkeit des Flüssigkeitsfilms, z. B. durch einen auf der Sandkornrauigkeit basierenden Ansatz, und die reduzierte Spalthöhe zu berücksichtigen. Durch Vergleiche mit experimentellen Daten zeigte sich die Zulässigkeit dieser Vereinfachungen und Ansätze. Dies führte zu einer Verbesserung der numerischen Modellierung der Phaseninteraktion unter Berücksichtigung der Wellenbildung und der Verdunstung.

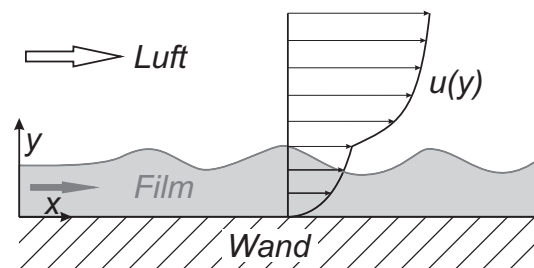


Abbildung 2.3: Vereinfachte Darstellung eines welligen schubspannungsgetriebenen Wandfilms nach Himmelsbach et al. (1994)

Die exakte experimentelle Bestimmung des Geschwindigkeitsprofils in einem schubspannungsgetriebenen Wandfilm in Abhängigkeit der Filmdicke ist für die Weiterentwicklung numerischer Modelle unerlässlich. Experimentelle Arbeiten hierzu wurden von Wittig et al. (1996), Samenfink et al. (1996), Elsässer et al. (1997), Elsässer et al. (1998) und Schober et al. (2003) durchgeführt. Der modifizierte Versuchsaufbau basiert auf einer Kombination aus Filmdickenmessung und Laser-Doppler-Anemometrie zur Bestimmung der Geschwindigkeiten in der Gasphase anstelle der zuvor eingesetzten Pitotsonden. Hiermit sind Messungen der mittleren Filmhöhe bis zu minimalen Werten von ca. $100 \mu\text{m}$ und der Strömungsgeschwindigkeiten im Film simultan möglich. Es zeigte sich, dass die Strömung im Inneren des Films hoch turbulent ist.

Mit der Kraftstoffaufbereitung und der Dynamik schubspannungsgetriebener Wandfilme befassten sich Elsässer (1998) und Schober (2009) im Detail. Ziel war die Entwicklung geeigneter Messverfahren, um eine hohe zeitliche und örtliche Auflösung der Strömungsgrößen in Wandfilmen zu erzielen. Roßkamp et al. (1998) stellten ein verbessertes Modell zur Berechnung des Wärmeübergangs zwischen Filmlegerwand und Wandfilm vor. Dieses berücksichtigt die Welligkeit und die filminterne Strömung aufgrund einer lokalen Nusselt-Zahl, gebildet mit der lokalen Filmdicke. So kann die Wandwärmeflussdichte und damit die Temperatur des Kraftstofffilms mit erhöhter Genauigkeit vorhergesagt werden. Die temperaturabhängigen Stoffeigenschaften, insbesondere die Oberflächenspannung, die Dichte und die Viskosität des Kraftstoffes, beeinflussen den Primärzerfall maßgeblich.

Neben den luftgestützten, filmlegenden Airblast-Zerstäubern existieren unter anderem auch Zerstäuberkonzepte bei denen der zu zerstäubende Flüssigkeitsfilm über eine Druckdüse mittels erhöhtem Vordruck auf den Filmleger aufgebracht wird. Hierbei sind die Druckzerstäubung

sowie die Tropfen-Wand-Interaktion relevante, zu berücksichtigende Effekte.

Experimentelle Studien zur Sprayausbreitung bei Druckzerstäubung wurden u. a. von Roisman et al. (2007) durchgeführt. Diese untersuchten die Eindringtiefe von Dieselstrahlen und die Struktur des vorderen Sprayrandes. Die Spraytiefe l_s nimmt in der ersten Stufe proportional mit der Zeit zu, nachfolgend nimmt die zeitliche Änderung der Eindringtiefe ab, wobei gilt $l_s \propto \sqrt{t}$. Der Übergang zwischen diesen Regimen hängt von der Gasdichte der Umgebungsluft ab.

Der experimentellen Untersuchung der Tropfen-Wand-Interaktion monodisperser Tropfen widmeten sich Mundo et al. (1995). Durch Variation des Tropfendurchmessers, der Geschwindigkeit, des Auftreffwinkels, der Viskosität und der Oberflächenspannung wurde ein empirisches Modell zur Vorhersage des Tropfenverhaltens nach dem Auftreffen auf die Wand aufgestellt. Im Fall von $Oh Re^{1,25} < 57,5$ kommt es zur Filmbildung. Nimmt die kinetische Energie zu, so zerfällt der Tropfen beim Aufprall in kleinere Sekundärtropfen unterschiedlicher Durchmesser und Geschwindigkeiten, welche sich anschließend von der Wand wegbewegen. Richter et al. (2005) stellten fest, dass Durchmesser sowie Geschwindigkeit der Sekundärtropfen von der Wandtemperatur und der Auftrefffrequenz abhängen.

Die durchgeführten experimentellen Untersuchungen zeigen, dass die physikalischen Eigenschaften der Fluide sowie die Strömungszustände im flüssigen Film und in der umgebenden Gasphase, insbesondere deren Wechselwirkung an der Grenzfläche, einen bedeutenden Einfluss auf den Primärzerfall ausüben. Abhängig vom Zerstäuberkonzept sind zusätzlich die Effekte der Druckzerstäubung und der Tropfen-Wand-Film-Interaktion zur Darstellung aller relevanten physikalischen Phänomene im Zerstäuber zu beachten. Daher müssen diese Effekte in der numerischen Simulation erfasst werden.

2.1.2 Primär- und Sekundärzerfall

Im vorhergehenden Kapitel wurde die Zweiphasenströmung innerhalb der Düse bis hin zur Zerstäuberkannte im Detail betrachtet. Nun soll der stromab der Zerstäuberkannte stattfindende Primär- und Sekundärzerfall des flüssigen Kraftstoffes diskutiert werden.

Mit dem laminaren Strahlzerfall beschäftigte sich Lord Rayleigh (Rayleigh (1878), Rayleigh (1879)) bereits vor mehr als einem Jahrhundert und kam zu dem Schluss, dass die Desintegration eines Flüssigkeitszylinders durch die Kapillarkraft und anfänglich auftretende geringe Instabilitäten verursacht wird. Seine auf diesen Annahmen beruhende mathematische lineare Stabilitätsanalyse lieferte das Ergebnis, dass die Wellenlänge λ , welche den Zerfall initiiert bzw. mit der Resonanzfrequenz der Instabilität korreliert, direkt proportional zum Strahldurchmesser D ist.

$$\lambda = 4,508 \cdot D \quad (2.1)$$

Somit lässt sich der Durchmesser der entstehenden Tropfen d_T , unter Vernachlässigung etwaiger Satellitentropfen, zu

$$d_T = 1,89 \cdot D \quad (2.2)$$

abschätzen. Jedoch ist zu beachten, dass diese theoretische Betrachtung unter realen praxisrelevanten Bedingungen nicht exakt zutrifft, da Reibungseinflüsse und Turbulenz vernachlässigt

wurden. Weber (1931) erweiterte die Theorie für viskose Flüssigkeiten durch einen Zusatzterm in der Berechnung der Wellenlänge, welche den Strahlzerfall am meisten begünstigt, und studierte den Einfluss des Luftwiderstands. Je höher die Relativgeschwindigkeit der Luft, desto geringer ist die angefachte Wellenlänge. Die Zerfallslänge ist bis zu einer gewissen Geschwindigkeit proportional zur Strahlgeschwindigkeit. Er definiert das Zertropfen aufgrund von rotationssymmetrischen Störungen einerseits, und das Zerwellen durch Einfluss der Luftkräfte andererseits als die bedeutenden Zerfallsmechanismen. Frühe experimentelle Untersuchungen der Tropfenbildung an einer Düse wurden bereits von Ohnesorge (1936) durchgeführt. Hierbei wurde der Einfluss der Trägheitskraft, der Gewichtskraft, der Kapillarkraft und der Viskosität auf die Zerstäubung in erster Näherung quantifiziert und die Zerfallsmechanismen in drei Bereiche, wie in Abb. 2.4 dargestellt, klassifiziert.

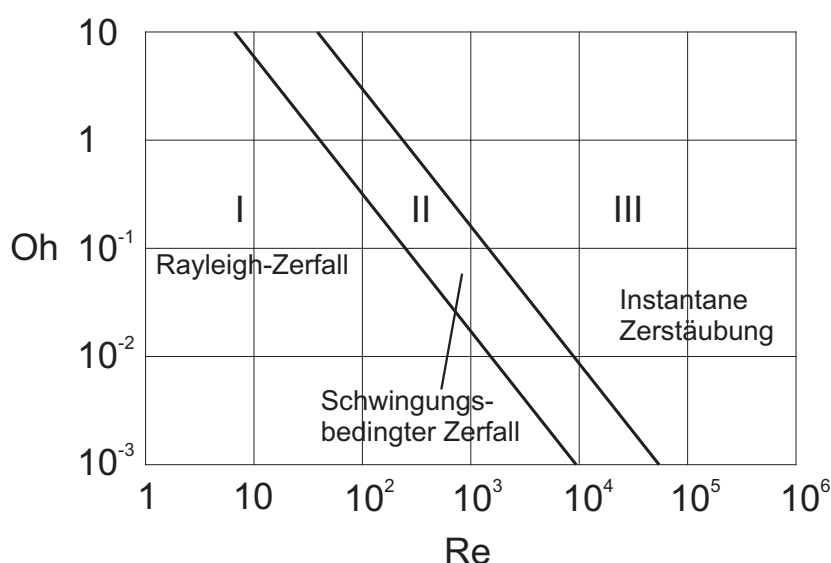


Abbildung 2.4: Klassifizierung der Zerfallsmechanismen nach Ohnesorge (1936)

Die Desintegration des Flüssigkeitsfilms an der FilmleGERKante in Ligamente (Primärzerfall) und der weitere Zerfall in Sekundärtropfen (Sekundärzerfall) hängt maßgeblich von den beiden dimensionslosen Kennzahlen Weber- und Ohnesorge-Zahl, ab.

$$We = \frac{\rho L v_{rel}^2}{\sigma} \quad (2.3)$$

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} = \frac{\mu}{\sqrt{\rho L \sigma}} \quad (2.4)$$

Die Weber-Zahl We repräsentiert das Verhältnis der Trägheitskraft zur stabilisierenden Oberflächenspannung. Der Viskositätseinfluss wird in der Ohnesorge-Zahl Oh berücksichtigt. Die Oberflächenspannung, definiert durch den Oberflächenspannungskoeffizient σ , stellt hierbei die entscheidende Kraft zur Tropfenbildung und Abscherung von Flüssigkeitsligamenten dar.

Bei geringen Reynolds- und Ohnesorge-Zahlen, dies entspricht dem Bereich I im Re - Oh -Diagramm, also insbesondere bei geringer Relativgeschwindigkeit und Fluiden sehr hoher Viskosität, findet der sogenannte Rayleigh-Zerfall statt. Dies hat die Entstehung relativ großer

Tropfen einheitlichen Durchmessers zur Folge. Bei höheren Reynolds-Zahlen im Bereich II tritt der schwingungsbedingte Strahlzerfall ein, welcher zu einem Spektrum von Tropfengrößen führt. Durch die nahezu sofortige Zerstäubung des Strahls am Düsenaustritt ist Bereich III charakterisiert, wie auch Reitz und Bracco (1982) feststellten. Diese beschäftigten sich mit der experimentellen Vermessung der Zerstäubung unter realitätsnahen Bedingungen. Einen Überblick über Literatur zur Tropfen- und Spraybildung geben Lin und Reitz (1998).

Mit der theoretischen Beschreibung der Bildung von Flüssigkeitstropfen, besonders der Tropfenabschnürung von einem Flüssigkeitsstrahl, setzte sich Eggers (1995) intensiv auseinander. Zu klären ist, ob bzw. inwiefern die Anfangsbedingung der Navier-Stokes-Gleichungen zur Beschreibung eines Einzeltropfens vom davor stattfindenden Zerfallsmechanismus abhängen. Eggers (1995) gelang die Konstruktion asymptotischer Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen für den Zustand nach dem Zerfall, welche den topologischen Übergang in zwei getrennte Oberflächen beschreiben und somit kontinuierlich aus der Lösung vor dem Zerfall hervorgehen. Ein Überblick über die theoretische Behandlung der Tropfenbildung ist in der Veröffentlichung von Eggers (2005) zu finden. Auf vorherige Arbeiten aufbauend lieferten Eggers und Villermaux (2008) eine fundamentale Beschreibung des Strahlzerfalls bis hin zur Spraybildung. Dabei spielen vor allem die Oberflächenspannung, die Viskosität bzw. die Nicht-Newton'sche Rheologie des flüssigen Mediums, die Dichtediskontinuität an der Phasengrenzfläche und der Strömungszustand - laminar oder turbulent - eine Rolle. Analytische Grundlage ist die lineare Stabilitätsanalyse des ursprünglichen Flüssigkeitszylinders. Während des Zerfallsprozesses treten jedoch starke Nichtlinearitäten auf, welche in dieser Beschreibung nicht erfasst wurden. Die Vorhersage der aus dem Strahlzerfall entstehenden Tropfengrößenverteilung basiert auf statistischen Methoden.

Müller et al. (2004) gelang es erstmals die instationären Vorgänge beim Zerfall eines ebenen Flüssigkeitsfilms mittels Hochgeschwindigkeitsvisualisierungen sichtbar zu machen. Daraus wurden die Abmessungen der entstehenden Ligamente ermittelt und auf Basis dieser experimentellen Daten ein Modell zur Beschreibung des Zerfallsprozesses unter stationären Strömungsbedingungen aufgestellt. Die ebene Filmlegerkante dient als Vorstufe zur Ermittlung der Zerfallsprozesse in Airblast-Zerstäubern. Es stellte sich heraus, dass der Zerfallsprozess Ähnlichkeiten zum Sekundärzerfall im Bag-Breakup-Regime (Schmehl et al. (2000)) aufweist. Von den gewonnenen Ligamentabmessungen kann auf einen äquivalenten Tropfendurchmesser geschlossen werden. Daraus wiederum können die für den Zerfallsprozess relevanten dimensionslosen Kennzahlen We und Oh gebildet werden. Weitere Messergebnisse unter instationären Bedingungen sind in Müller et al. (2006) aufgeführt. Die Messungen wurden an einem atmosphärischen Prüfstand durchgeführt. Der Einfluss erhöhter Drücke, wie sie in realen Brennkammern von Flugtriebwerken auftreten, konnte dabei nicht untersucht werden. Auch Fernandez et al. (2009) widmeten sich dem Zerfall eines Flüssigkeitsfilms. Unter erhöhtem Druck, jedoch noch weit unterhalb des Betriebsdrucks von Gasturbinenbrennkammern, wurden Messungen mittels LDA sowie Hochgeschwindigkeitsaufnahmen durchgeführt. Auch hier wird die Ausbildung von sogenannten Flüssigkeitstaschen analog zum Bag-Breakup beobachtet.

Auf vorherige Arbeiten aufbauend untersuchten Gepperth et al. (2010) den Einfluss der physikalischen Eigenschaften der Flüssigkeit, der Luftgeschwindigkeit und der Filmbeladung auf die Primärzerstäubung an einer ebenen Filmlegerkante. Hierzu wurden PDA-Messungen stromab

der Zerstäuberkante zur Ermittlung der charakteristischen mittleren Durchmesser durchgeführt. Jedoch liefert die PDA-Messung nur für sphärische Tropfen zuverlässige, belastbare Messergebnisse. Über den Zerfall des Films in Ligamente und Primärtropfen unmittelbar nach der Filmlegerkante, also den Primärzerfall an sich, werden durch diese Technik keine Informationen erhalten. Mittels Shadowgraphy-Technik (Müller et al. (2008)) und Highspeed-Visualisierung ließen sich hingegen die instationären Vorgänge der Wellenbildung und Desintegration des Flüssigkeitsfilms an der Abrisskante genauer untersuchen und die relevanten Tropfendurchmesser, die Zerfallsfrequenz und die mittlere Länge der Einschlüsse direkt im Bereich des Primärzerfalls detektieren. In Abb. 2.5 ist eine Folge von Momentaufnahmen an der Filmlegerkante gezeigt, welche den Filmzerfall veranschaulichen.

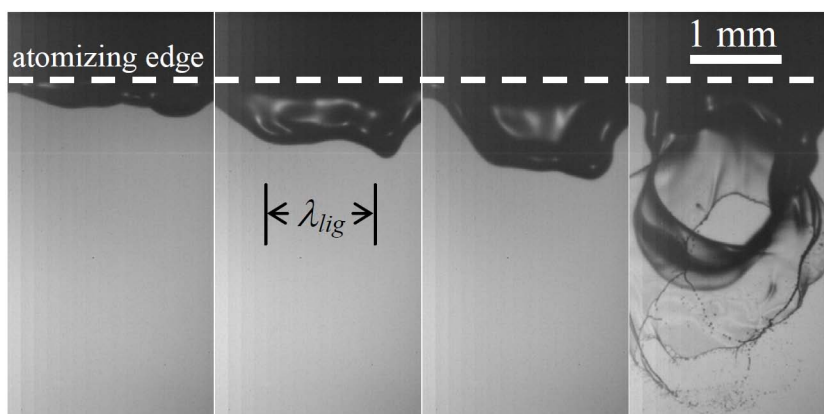


Abbildung 2.5: Zerfall des Flüssigkeitsfilms an der Filmlegerkante (Gepperth et al. (2010))

Die mittleren Durchmesser scheinen nur eine geringe Abhängigkeit von den physikalischen Eigenschaften der Flüssigkeit und der Filmbeladung aufzuweisen. Hingegen ist eine starke Abhängigkeit der gebildeten Tropfendurchmesser von der Gasphasengeschwindigkeit zu erkennen. Diese Schlussfolgerungen bestätigen die Kernaussagen von Sattelmayer (1985) und Aigner (1986). Aufbauend auf diesen Messungen und den theoretischen Vorarbeiten von Dombrowski und Johns (1963) wurde ein theoretisches Modell zur Vorhersage des Sauterdurchmessers des entstehenden Sprays, unabhängig von der a priori schwer zu bestimmenden Filmhöhe, vorgeschlagen.

Mit der Erweiterung eines Sekundärzerfallsmodells setzten sich Bartz et al. (2010) auseinander. Hierbei wird die zeitliche Änderung der auf den Tropfen wirkenden aerodynamischen Kräfte bezüglich dessen Formänderung berücksichtigt. Dabei wird der Widerstandskoeffizient des Tropfens aus einer linearen Interpolation des c_D -Wertes eines sphärischen und eines scheibenförmigen Tropfens berechnet. Das Einsetzen des Zerfalls ist von einer kritischen Deformation abhängig. Ein semi-empirisches Modell beschreibt den nachfolgenden Zerfallsprozess. Das Zerfallsregime wird anhand der Weber-Zahl zum Zeitpunkt der kritischen Deformation ermittelt. Die entstehenden Sekundärtropfen werden je nach Zerfallsregime mittels des Modells in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Messungen vorhergesagt wie in Abb. 2.6 zu sehen ist. Dabei sind die Isolinien der Axialgeschwindigkeit der Gasphase dargestellt. Die Zahlenwerte entsprechen der Geschwindigkeit in m/s .

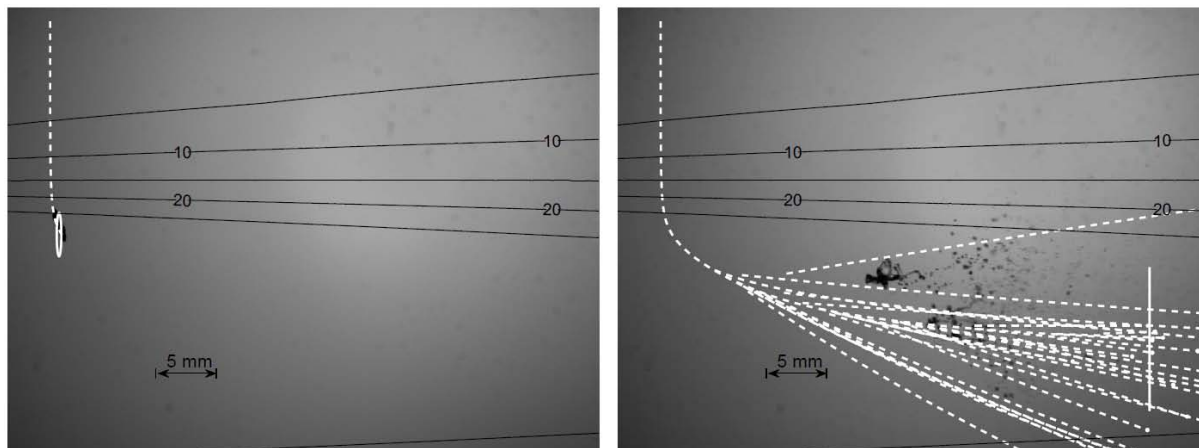


Abbildung 2.6: Vergleich des Sekundärzerfalls eines Tropfens im Experiment mit den berechneten Tropfentrajektorien nach dem Modell von Bartz et al. (2011)

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die wesentlichen Einflussparameter auf die Zerstäubung, und insbesondere auf den Primärzerfall, zum einen die Beschaffenheit der Filmlegeroberfläche sowie die Geometrie der Filmlegerkante und zum anderen die physikalischen Strömungsgrößen der Zweiphasenströmung, bestehend aus Luft und Kraftstoff, sind. Die charakteristischen dimensionslosen Kennzahlen zur Kategorisierung der strömungsmechanischen Effekte sind die Re -, We - und Oh -Zahl. Somit beeinflussen vor allem die Oberflächenspannung, die Viskosität, die Dichte und die Rheologie der Fluide maßgeblich den Flüssigkeitszerfall. Auch der Strömungszustand (laminar - turbulent) in beiden Medien, sowie die Form der entstehenden Primärtropfen spielen eine gewichtige Rolle bei der Sprayentstehung. Daher ist für die Erstellung numerischer Modelle zur Vorhersage der Zerstäubung die korrekte Beschreibung der Physik kompressibler, wie auch inkompressibler Medien, welche sowohl laminar wie auch turbulent sein können, unabdingbar. Des Weiteren muss die Interaktion beider Phasen untereinander und mit der Filmlegeroberfläche erfasst werden. Enorm wichtig wird dabei die exakte Darstellung und Berechnung der Grenzfläche. Die genaue Modellierung der Oberflächenspannung und viskoser Effekte ist zudem unerlässlich.

2.2 Numerische Beschreibung der Zweiphasenströmung

In diesem Unterkapitel soll zuerst auf die gängigen Verfahren zur numerischen Modellierung von Mehrphasenströmungen und deren Möglichkeiten und Schwachstellen eingegangen werden. Anschließend werden der aktuelle Stand der Forschung auf dem Gebiet der Simulation der Zerstäubung, anhand derzeit erzielbaren Ergebnissen, sowie die noch bestehenden Lücken aufgezeigt.

2.2.1 Simulationsmethoden für Mehrphasenströmungen

Die numerischen Verfahren zur Simulation physikalischer Phänomene lassen sich anhand von zwei Kriterien unterteilen. Die Unterscheidung kann einerseits anhand des Bezugssystems der Bilanzierungsgleichungen erfolgen. Hierbei können zum einen die der Berechnung zugrunde liegenden kontinuumsmechanischen Erhaltungsgleichungen für alle Diskretisierungspunkte in einem ortsfesten Koordinatensystem aufgestellt werden. Dies sind die sogenannten Euler-Verfahren. Zum anderen existiert die Möglichkeit, die Erhaltungsgleichungen für diskrete Stützstellen in einem mitbewegten Koordinatensystem zu formulieren. Dies ist bei Lagrange-Verfahren der Fall. Kombinierte Euler-Lagrange-Verfahren ermöglichen es, die Vorteile beider Methoden zu nutzen. Andererseits lassen sich die numerischen Simulationsverfahren hinsichtlich ihrer Diskretisierungsmethode einteilen. Dabei kann ganz allgemein zwischen den weitverbreiteten rein gitterbasierten Methoden und den in der Praxis minder vertretenen gitterfreien, und daher zwangsweise Lagrange'schen, Partikelmethode unterschieden werden.

Verfahren, denen die Euler'sche Betrachtungsweise eines ortsfesten Koordinatensystems zugrunde liegt, gelten als relativ robust auch bei starken Gitterverzerrungen. Ein großer Nachteil, besonders hinsichtlich Mehrphasenströmungen, ist jedoch die aufwendige und ungenaue Rekonstruktion mitbewegter Grenzflächen und die dort auftretende numerische Diffusion. Die Lagrange'schen Berechnungsmethoden, basierend auf einem mitbewegten Koordinatensystem, bieten Vorteile bei der Simulation von Strömungen mit Phasengrenzflächen. Diese Verfahren, wie z. B. die gitterfreie Smoothed Particle Hydrodynamics Methode, ermöglichen eine hohe Auflösung der Grenzfläche bei vergleichsweise geringem Aufwand und zugleich deren automatischen Transport während der Berechnung. Bei gitterbasierten Lagrange-Verfahren können durch starke Verformungen des Rechennetzes komplexe Gitterzellen entstehen, welche die Rechengenauigkeit stark beeinträchtigen.

2.2.1.1 Gitterbasierte Euler'sche Simulationsverfahren

Zu den gitterbasierten Euler-Verfahren zählen unter anderem die folgenden:

- Finite Elemente Methode (FEM)
- Finite Differenzen Methode (FDM)
- Finite Volumen Methode (FVM)

Detaillierte Erläuterungen zu den genannten Ansätzen sind in der Literatur (Klein (2010), LeVeque (2007), Oertel jr. und Laurien (2003), Versteeg und Malalasekera (1995), Anderson (1995)) zu finden. Deshalb wird an dieser Stelle nicht näher auf die mathematischen Hintergründe eingegangen.

Gängigstes Verfahren zur Simulation von Ein- und Mehrphasenströmungen ist die Finite Volumen Methode. Zur numerischen Berechnung von Strömungsphänomenen, bei denen mehrere Phasen bzw. Phasengrenzflächen auftreten, wurden zusätzliche Verfahren entwickelt. Diese dienen

hauptsächlich der korrekten Darstellung und Verfolgung bzw. Erfassung der Grenzflächen und werden daher in der Literatur den *interface tracking techniques* - direkte Markierung der Grenzfläche durch Marker - oder den *interface capturing techniques* - Darstellung der Grenzfläche als bewegliches Objekt im mehrdimensionalen Raum (Volume of Fluid, Level Set) - zugeordnet. So entstand das heute weitbekannte Volume of Fluid (VoF) Verfahren nach Hirt und Nichols (1981), welches von der in Kapitel 2.2.1.2 genannten MarkerAndCell-Methode abgeleitet ist, jedoch deutlich geringere Speicherkapazität benötigt. Zur Beschreibung des Simulationsgebietes wird eine zusätzliche Größe c_v , die den Volumenanteil eines der Fluide innerhalb einer Rechenzelle beschreibt, eingeführt.

- $c_v = 1$: Zelle enthält nur Fluid 1
- $c_v = 0$: Zelle enthält nur Fluid 2 (bzw. keine Flüssigkeit)
- $0 < c_v < 1$: Phasengrenzfläche verläuft durch diese Zelle

Für diese Größe wird die Transportgleichung

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} + u \frac{\partial c_v}{\partial x} + v \frac{\partial c_v}{\partial y} + w \frac{\partial c_v}{\partial z} = \frac{\partial c_v}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\nabla c_v) = 0 \quad (2.5)$$

im Rahmen der Zeitintegration gelöst.

Aufgrund der Verteilung des Volumenanteils, wie beispielhaft in Abb. 2.7 dargestellt, kann die Grenzfläche zwischen den Fluiden rekonstruiert werden. Die Massenerhaltung wird dabei exakt erfüllt.

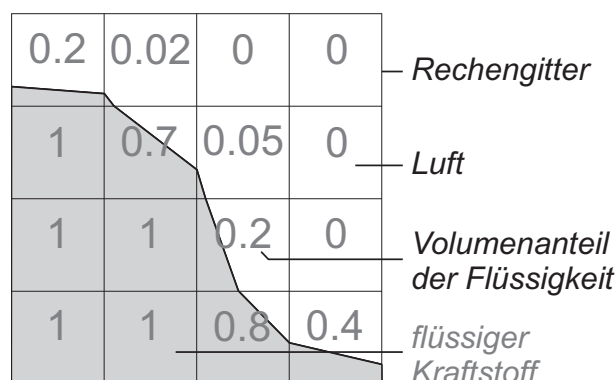


Abbildung 2.7: Verteilung des Volumenanteils c_v bei der Volume of Fluid Methode

Je größer die Auflösung des Gitters, desto größer sind die entstehenden Approximationsfehler. Besonders bei der Rekonstruktion dreidimensionaler Grenzflächen können große Fehler auftreten. Diese kommen bei der Berechnung der Oberflächenspannung auf Basis der Grenzflächenkrümmung nach Brackbill et al. (1992) enorm zum Tragen. Durch Ungenauigkeiten in der Oberflächenspannungsmodellierung kann wiederum der Primärzerfall nicht physikalisch korrekt dargestellt werden. Eine Verfeinerung der Auflösung führt zwar zu einer Minimierung der auftretenden Fehler, hingegen steigt der Rechenaufwand enorm an. Weitere Einschränkungen bestehen

bei der Ablösung von Ligamenten einer Phase. Hier ist es notwendig, den Volumenanteil in der Zelle dem korrekten Ligament zuzuteilen, was durch die c_v -Verteilung nicht eindeutig möglich ist. Bei hohen Dichteunterschieden der zu simulierenden Fluide ist dieses Verfahren anfällig für numerische Instabilitäten (Josserand und Zaleski (2003)).

Ein weiteres Verfahren zur Grenzflächenerfassung ist die seit den 1980er Jahren von Osher und Sethian (1988) entwickelte Level Set (LS) Methode. Dadurch können beliebige Topologieänderungen der Grenzfläche, z.B. auf Basis eines zugrunde liegenden Geschwindigkeitsfelds, in einem Euler'schen Gitter wiedergegeben werden. Hierbei wird die Phasengrenzfläche als Nullmenge einer Funktion $\phi(\vec{x}, t)$, mit dem Positionsvektor \vec{x} und der Zeit t , definiert (Osher und Fedkiw (2001)). Es gilt $\phi > 0$ im Fluidinneren, $\phi < 0$ ausserhalb und $\phi = 0$ auf der Grenzfläche $\Gamma(t)$ wie Abb. 2.8 verdeutlicht.

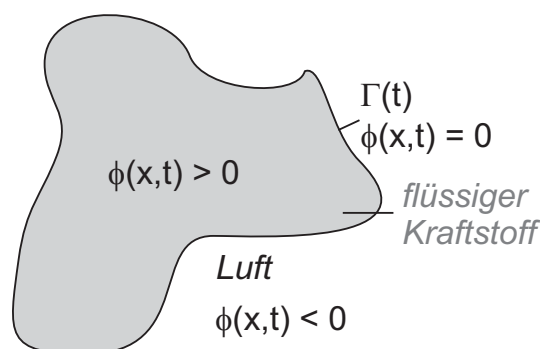


Abbildung 2.8: Definition der Grenzfläche bei der Level Set Methode

Somit können topologische Änderungen der Phasengrenze, wie z. B. durch das Verschmelzen und Auseinanderbrechen von Fluidelementen verursacht, in ihrem zeitlichen Verlauf erfasst werden. Die Kinematik der Grenzfläche wird durch das Lösen einer Grenzflächenadvektionsgleichung, analog zur partiellen Differentialgl. 2.5, wiedergegeben, wobei allein die normal zur Grenzfläche auftretende Geschwindigkeitskomponente v_n eine Rolle spielt.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v_n |\nabla \phi| = 0 \quad (2.6)$$

Die Grenzflächenbewegung wird somit zum zeitabhängigen Anfangswertproblem einer partiellen Differentialgleichung (Sethian (2001)). In Verbindung mit einer Projektionsmethode für die Dichteberechnung gelang Sussman et al. (1995) die numerische Simulation einer inkompressiblen Zweiphasenströmung mit erhöhter Genauigkeit bis zu einem Dichteverhältnis der beiden Medien von ca. 1000/1. Einschränkungen müssen bei der Simulation feinskaliger Phänomene aufgrund der zu hohen benötigten Rechenleistung hingenommen werden. Ein Überblick über die LS Methoden ist in der Arbeit von Sethian und Smereka (2003) zu finden. Ein gewichtiger Nachteil dieses Ansatzes ist, dass die Massenerhaltung vor allem in Regionen mit geringer Auflösung nicht strikt erfüllt wird.

Die *Fast Marching* Algorithmen (Sethian (1999)) sind eine Weiterentwicklung der LS Methode. Diese beinhalten gewisse Vereinfachungen, wenn sich die Bewegungsrichtung der Grenzfläche

nicht ändert, d. h. wenn die Grenzflächennormalengeschwindigkeit ihr Vorzeichen beibehält. Sie bieten somit den Vorteil deutlich reduzierter Rechenzeiten.

Neben der möglichst exakten Erfassung der Grenzfläche, muss zudem die Dichtediskontinuität an dieser korrekt dargestellt werden, um Mehrphasenströmungen mit ausreichender Genauigkeit modellieren zu können. Fedkiw et al. (1999) kombinierte daher den LS Ansatz mit der Ghost Fluid Methode. Hierbei werden in der Nähe der Phasengrenzfläche sogenannte *ghost cells* erzeugt. Dieses Vorgehen ermöglicht die exakte Beschreibung der Dichtediskontinuität an der Grenzfläche einer Zweiphasenströmung in Form einer Heaviside-Funktion, d. h. ohne Diffusion der Dichte bzw. Ausdehnung der Grenzfläche über mehrere Zellen. Die *ghost cells* dienen dazu beide Fluide im gesamten Rechengebiet zu beschreiben. Es werden zu jedem Zeitpunkt die Strömungsgrößen beider Fluide an jedem Diskretisierungspunkt im Raum bestimmt. Aufgrund des Vorzeichens der LS Funktion wird danach entschieden, welches der beiden Fluide am jeweiligen Ort vorliegt. Die Schwierigkeit hierbei ist die geeignete Festlegung der *ghost cells* und die Zuweisung der korrekten physikalischen Größen entsprechend der geforderten Randbedingungen an der Phasengrenzfläche. Eine Erweiterung zur Anwendung von *ghost cells* für die Simulation der Fluid-Struktur-Interaktion im Fall einer kompressiblen Strömung und dünner, offener Solidstrukturen schilderten Tam und Radovitzky (2004).

Eine Möglichkeit die Genauigkeit von Simulationen, insbesondere hinsichtlich der Berechnung der physikalischen Eigenschaften an der Phasengrenzfläche, zu steigern liegt in der adaptiven Gitterverfeinerung (Jeong und Yang (1998)). Dies hat jedoch eine unvermeidbare Zunahme der benötigten Rechenleistung und somit der Zeit und der Kosten zur Folge. Weiterhin müssen geeignete Kriterien zur Bestimmung der Bereiche, in denen die Gitterverfeinerung vorgenommen werden soll, und der Grad der Verfeinerung ermittelt werden. Zu beachten ist, dass die numerische Diffusion dabei gering gehalten werden muss.

Nachteile der reinen Euler-Verfahren in Bezug auf Mehrphasensimulationen sind vor allem die ungenaue und fehleranfällige Verfolgung bzw. Rekonstruktion der Phasengrenzflächen sowie das Auftreten von numerischer Diffusion für jegliche Diskontinuitäten im Strömungsfeld, wie z.B. der Dichteunterschied an der Phasengrenzfläche zwischen Luft und Kraftstoff. Außerdem muss stets sichergestellt werden, dass die Massenerhaltung nicht verletzt wird. Diese Nachteile können derzeit nicht mit vertretbarem Rechenaufwand vermieden werden.

2.2.1.2 Hybride Euler-Lagrange-Verfahren

Unter den hybriden Euler-Lagrange-Verfahren sind beispielhaft die folgenden beiden

- Particle In Cell (PIC)
- Marker And Cell (MAC)

gennant, da von diesen die meisten gängigen Hybrid-Verfahren abgeleitet sind.

Die PIC Methode nutzt die Vorteile der ortsfesten, auf Diskretisierungsgittern basierenden, Euler'schen Betrachtungsweise für die Luftströmung und der Lagrange'schen Betrachtungsweise

eines mitbewegten Beobachters für die disperse Phase. Die mit der Fluidgeschwindigkeit mitbewegten Partikel, welche die disperse Phase diskretisieren, werden von Zelle zu Zelle transportiert und sind somit einem Hintergrundgitter zugeordnet. Die im System vorhandene Masse ist diesen Massepunkten zugeteilt, welche jedoch nicht direkt miteinander interagieren. Der Informationsaustausch und die Berechnung der Impuls- und Energieströme erfolgt über das Hintergrundgitter (Harlow (1988)). Beispielhaft ist die Diskretisierung bei der PIC Methode in Abb. 2.9 skizziert.

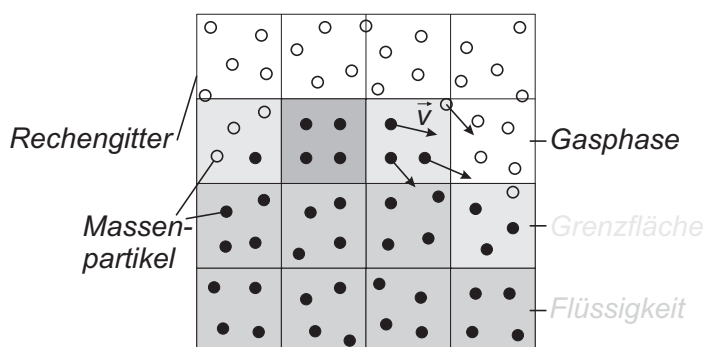


Abbildung 2.9: Dem PIC Verfahren zugrunde liegende Diskretisierung

Dem MAC Verfahren liegt ein Euler'sches Gitter zugrunde. Es wurde ursprünglich zur Modellierung von Strömungen mit freien Oberflächen entwickelt (Harlow und Welch (1965)). Hierbei definieren die Marker die Flüssigphase, wie in Abb. 2.10 schematisch dargestellt. Sie dienen ausschließlich der räumlichen Festlegung der Flüssigkeit und besitzen keine physikalischen Eigenschaften. Da sie sich mit der Geschwindigkeit der Flüssigphase im Rechengebiet mitbewegen, lässt sich anhand ihrer Position zu jedem Zeitschritt bestimmen in welchen Zellen die flüssige Phase vorliegt und wo sich die Grenzfläche befindet. Die Geschwindigkeit mit der die Marker bewegt werden wird über eine Interpolation der Geschwindigkeiten an den benachbarten Stützstellen des Rechengitters berechnet. Gitterzellen, die Marker enthalten und an eine leere Zelle angrenzen, werden als Oberflächenzellen identifiziert (McKee et al. (2008)). Nachteilig wirkt sich die Anhäufung der Marker an der Grenzfläche in Regionen starker Krümmung aus. Dies kann zu numerischen Instabilitäten führen. Des Weiteren besteht das topologische Problem, dass beim Zusammentreffen zweier Fluidflächen sichergestellt werden muss, dass die entsprechenden überflüssigen Markerpartikel sofort eliminiert werden. Analog dazu müssen beim Zerfall eines Ligaments Marker hinzugefügt werden können, um die geforderte Auflösung zu gewährleisten.

Ein gewichtiger Nachteil der Euler-Lagrange-Methoden liegt in dem enorm hohen Rechenaufwand. Zur Berechnung der Gasphase und der Flüssigphase in den beiden Bezugssystemen bedarf es prinzipiell zweier verschiedener Codes. Diese müssen in geeigneter Weise miteinander gekoppelt werden, um den Informationsaustausch zwischen den beiden Phasen und die Berücksichtigung von Grenzflächeneffekten zu gewährleisten. Die Interaktion von einzelnen Flüssigkeitselementen bzw. Tropfen untereinander kann nicht dargestellt werden. Grenzflächenkräfte können nicht direkt auf die Marker aufgeprägt werden. Durch die Notwendigkeit eines Rechengitters geht die Flexibilität und Anwendbarkeit für komplexe Geometrien verloren.

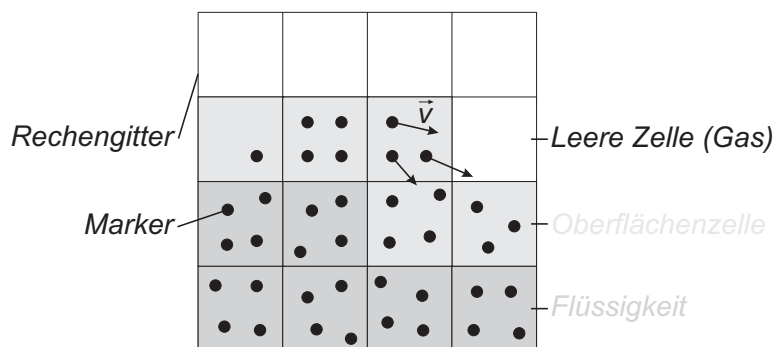


Abbildung 2.10: Dem MAC Verfahren zugrunde liegende Diskretisierung

2.2.1.3 Partikelmethoden

Nachfolgend sind einige charakteristische gitterfreie Partikelmethoden, sowie die gitterbasierte Lattice-Boltzmann-Methode, für die Anwendung in unterschiedlichen Größen- und Zeitskalenbereichen aufgeführt:

- Molekulardynamik (MD)
- Monte Carlo Verfahren (MC)
- Dissipative Partikelmethode (DPD)
- Lattice-Boltzmann-Methode (LBM)
- Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

Die Molekulardynamik und das Monte Carlo Verfahren können den mikroskopischen Methoden zugeordnet werden, wohingegen die Dissipative Partikelmethode sowie die Lattice-Boltzmann-Methode in den Bereich der mesoskopischen Darstellung fallen. Der Smoothed Particle Hydrodynamics Ansatz, welcher im Rahmen dieser Arbeit verfolgt wird, zählt zu den makroskopischen Simulationen.

Mikroskopische Partikelmethoden

Im Rahmen der Molekulardynamik werden Simulationen auf mikroskopischer Molekülebene durchgeführt. Dabei werden die intermolekularen kurz- und langreichweitigen Wechselwirkungen auf Basis von Potentialfunktionen sowie dem Newton'schen Gesetz und die Molekül- bzw. Atomzustände berücksichtigt. Die Berechnung dieser komplexen Mehrkörpersysteme erfordert einen hohen Rechenaufwand, vor allem beim Auftreten langreichweitiger Kraftfelder. Sie wird daher normalerweise nur über einen relativ kurzen Zeitraum, die Echtzeit der Simulation betreffend, durchgeführt. Ein weiterer Nachteil sind die kleinen Längenskalen auf die die Simulationen beschränkt sind. Das Verfahren der Molekulardynamik findet im Größenbereich von $nm - \mu m$ und in der zeitlichen Auflösung von ns Anwendung. Die erste Simulation einer realen Flüssigkeit führte Rahmann (1964) durch. Die praktikable Anwendung im Bereich technischer relevanter Größen- und Zeitskalen ist nicht möglich.

Die Monte Carlo Methode (Metropolis und Ulam (1949)) stammt aus dem Gebiet der statistischen Physik, wie von Binder et al. (1986) beschrieben, und ist ein stochastisches Simulationsverfahren. Hierbei wird auf Basis von Zufallszahlen die Wahrscheinlichkeit zur Gewichtung des Auftretens eines bestimmten Systemzustandes ermittelt, d. h. das Verfahren ist nicht deterministisch. Somit ergeben sich sprunghafte Zustandsänderungen. Ein Partikel bzw. ein Molekül wird durch eine Menge an dynamischen Variablen beschrieben. Den Partikeln werden Bewegungen aufgeprägt und daraufhin entschieden, ob der dadurch erreichte Zustand bei gegebener Temperatur energetisch betrachtet realisierbar ist. Bedingt durch die endliche Anzahl an Stützstellen tritt Rauschen im System auf. Das Verfahren ist damit ungeeignet zur Simulation technischer Systeme. Dynamische Prozesse können aufgrund des künstlichen Zeitschritts, im Gegensatz zur Molekulardynamik, welche auf einem realistischen, wenn auch sehr kleinen Zeitschritt beruht, nicht wiedergegeben werden. Bei der Simulation von Gleichgewichtsprozessen bietet die Monte Carlo Methode jedoch Vorteile. Aufgrund des stochastischen Ansatzes und der mikroskopischen Betrachtungsweise kommt dieses Verfahren nicht für die Berechnung technischer Strömungen in Frage.

Eine detaillierte Beschreibung der mathematischen und stochastischen Grundlagen der beiden Methoden kann Allen und Tildesley (1999) entnommen werden.

Mesoskopische Partikelmethoden

Im mesoskopischen Größenbereich ist das Verfahren der Molekulardynamik zu rechenintensiv für praxisrelevante Simulationen. Die makroskopischen Methoden hingegen, basierend auf der Kontinuumsannahme, berücksichtigen die Mikrostruktur nicht.

Die dissipative Partikelmethode, auch Dissipative Particle Dynamics (DPD) genannt, ist, wie die Monte Carlo Methode, stochastischer Natur. Dieser Ansatz kombiniert Eigenschaften der Molekulardynamik und des Lattice-Gas Automata Verfahrens (Hoogerbrugge und Koelman (1992)). Dabei wird das System durch einen stochastischen Term, welcher für die Wiedergabe des korrekten Drucks verantwortlich ist, angeregt und durch einen Dämpfungsterm, welcher die Viskosität nachahmt, gedämpft. Die Bewegung der Partikel ist, wie in der Molekulardynamik, durch die Newton'schen Gesetze vorgegeben. In der sogenannten Kollisionsphase werden die Impulsänderungen berechnet, woraufhin in der Bewegungsphase die Partikelpositionen aktualisiert werden. Aufgrund der Berechnung der Partikelinteraktionen, sind die zu simulierenden Zeit- und Längenskalen um Größenordnungen größer als bei der Molekulardynamik. Es ist zu beachten, dass hierbei die Partikel selbst nicht Atome bzw. Moleküle im eigentlichen Sinn repräsentieren, sondern einen mesoskopischen Volumenanteil des Kontinuums. Für die Berechnung technischer Systeme würde die Berücksichtigung der Mikrostruktur jedoch einen unvermeidbar hohen Rechenaufwand zur Folge haben.

Die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) ist im Gegensatz zu den anderen hier aufgeführten Verfahren eine gitterbasierte Partikelmethode. Wie bei der Monte Carlo Methode und der DPD bildet die statistische Physik die theoretische Basis. Die LBM ist eine Weiterentwicklung des Lattice Gas Cellular Automata Verfahrens (Li und Liu (2002)). Dabei wurden die Boole'schen Variablen durch reelle Variablen, deren Entwicklung durch die Boltzmann-Gleichung bestimmt wird, ersetzt, um das numerische Rauschen zu eliminieren. Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die statistische Verteilung der Teilchendichte eines Fluids im Phasenraum, bestehend aus phy-

sikalischen Raum und Geschwindigkeitsraum, zu einem bestimmten Zeitpunkt. Die zeitliche Änderung der Verteilungsfunktion wird durch einen Transportterm- und einen Kollisionsterm beschrieben. Im Rahmen der Lattice-Boltzmann-Methode wird dieser Phasenraum durch ein Gitter diskretisiert. Hierdurch ist die Anzahl der Geschwindigkeitsrichtungen im Phasenraum für jedes Teilchen an einem Knotenpunkt des Gitters limitiert. Aufgrund der diskreten Anzahl an Geschwindigkeitsrichtungen und Runden der Gleichgewichtsverteilung ist das Verfahren anfällig für numerische Instabilitäten (Chen und Doolen (1998)). Um Beeinträchtigungen der Genauigkeit bedingt durch Interpolationsschemata niedrigerer Ordnung zu vermeiden, sollten möglichst regelmäßige Rechengitter zum Einsatz kommen. Die Festlegung von Randbedingungen, z. B. der Haftbedingung an Wänden, gestaltet sich teilweise schwierig. Die numerische Genauigkeit ist abhängig von der Mach-Zahl (Chen und Doolen (1998)). Dies kann zu Ungenauigkeiten bei der Berechnung kompressibler Effekte sowie bei geringer Viskosität des Fluids führen. Die Methode eignet sich nicht zur Berechnung der Mehrphasenströmung in einem Airblast-Zerstäuber.

Makroskopische Partikelmethode

Der im Rahmen dieser Arbeit verfolgte SPH Ansatz zählt zu den makroskopischen Partikelmethode. Der Unterschied zur Molekulardynamik besteht darin, dass die Partikel hierbei keine Atome bzw. Moleküle repräsentieren, sondern zugleich Diskretisierungspunkte und Teilvolumina des gesamten Rechengebiets sind. Ihrem physikalischen Verhalten liegen, im Gegensatz zu den mikroskopischen und mesoskopischen Methoden, die Navier-Stokes Gleichungen für ein Kontinuum zugrunde. Das Verfahren ist somit deterministisch. Im Gegensatz zur Molekulardynamik kann so dasselbe Temperatur- und Druckfeld mittels verschiedener Partikelanordnungen dargestellt werden. Die Grenzflächeneffekte sowie die Interaktion von Fluidelementen können simuliert werden. Wechselwirkungen im kleinskaligen Bereich, z.B. mit Nanostrukturen, können durch Modellterme berücksichtigt werden. Durch die deutlich größeren zulässigen Zeit- und Längenskalen, für die effiziente Simulationen durchgeführt werden können, eignet sich diese Methode vor allem für die Simulation technisch relevanter Systeme.

2.2.2 Wandfilm und Wellenbildung - numerische Betrachtung

Auf Basis der in Kapitel 2.1 genannten Vorarbeiten wurde am Institut für Thermische Strömungsmaschinen ein numerischer Code zur Berechnung der komplexen Interaktion von Gasphase und Filmströmung auf einer ebenen Oberfläche entwickelt (Wittig et al. (2000)). Die Gasphase wurde hierbei mit dem internen Strömungslöser EPOS (**E**lliptic **P**ackage **O**n **S**hear flows) für dreidimensionale, turbulente Strömungen, basierend auf der Berechnung der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen mittels der Finite Volumen Methode, berechnet. Die Filmströmung wurde als inkompressible Grenzschichtströmung angenommen, welche unter Berücksichtigung der Verdunstung im zweidimensionalen Code durch die Grenzschichtgleichungen simuliert wird. Die Kopplung der Gasphase und des Wandfilms erfolgt über den Austausch von Masse, Impuls und Energie. Die Simulationsergebnisse stimmen sehr gut mit den messtechnisch ermittelten Werten der Filmdicke unter Umgebungsbedingungen überein. Koch et al. (2003) erweiterten das Modell für gekrümmte Oberflächen und führten die weitere Validierung des Moduls zur Berechnung des Wandfilms durch.

Ebner et al. (2009) beschrieben die Berechnung der Interaktion eines welligen, schubspannungsgetriebenen Wandfilms mit der Gasphase, aufbauend auf den Vorarbeiten von Himmelsbach et al. (1994) und Roßkamp et al. (1998). Die Gasphasenmodellierung erfolgte auf Basis eines konturangepassten Gitters mit dem Standard-k- ϵ Modell zur Turbulenzmodellierung. Der Film wurde, basierend auf einer Finiten Differenzen Methode, als turbulente Grenzschichtströmung berechnet. Effekte der Variation des Druckgradienten in Strömungsrichtung und der Filmbeladung wurden berücksichtigt. Die Welligkeit des Films wurde durch die Sandkornrauigkeit, wie in Himmelsbach et al. (1994) vorgeschlagen, wiedergegeben. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten weist eine sehr gute Übereinstimmung auf. Details zur Kopplung und Ausführungen über die Auswirkung des Druckgradienten auf den Impulsaustausch an der Phasengrenzfläche sind Ebner et al. (2004) zu entnehmen.

Im Kontext der turbulenten Zweiphasenströmung in Triebwerkslagerkammern untersuchten Hashmi et al. (2010) verschiedene CFD Methoden zur Simulation schubspannungsgetriebener Wandfilme. Dabei stellte sich heraus, dass die implementierten VoF Verfahren ungeeignet zur Berechnung von Strömungen, in denen starke Interaktionen zwischen der schweren, langsamen Flüssigphase und der schnellen, treibenden Gasphase auftreten, sind. Der Grund dafür ist die Lösung einer gemeinsamen Impulsgleichung für beide Phasen und die Mittelung der Materialeigenschaften in Grenzflächennähe. Der fehlerhaft berechnete Impulsaustausch führt zu einer falschen Vorhersage des Geschwindigkeitsprofils. Die Gitterverfeinerung bietet hierzu keine Lösung. Eine enorme Verbesserung in der Vorhersage der Profile der turbulenten Größen über die Kanalhöhe hinweg wird durch die Modifikation der Turbulenzgrößen an der Phasengrenzfläche erzielt. Bisher ist jedoch noch kein allgemeingültiger Ansatz zur Simulation von Scherströmungen gefunden, da die Modellierung des zusätzlichen Quellterms der Dissipation unklar ist.

2.2.3 Primär- und Sekundärzerfall - numerische Betrachtung

Die Simulation des Flüssigkeitszerfalls stellt extrem hohe Anforderungen an die Rechenleistung, da nicht vernachlässigbare Phänomene über eine große Bandbreite an Zeit- und Längenskalen auftreten und erfasst werden müssen (Herrmann (2003)). Aufgrund der derzeit verfügbaren Rechenleistung ist die Direkte Numerische Simulation (DNS) des kompletten Strahlzerfalls nicht möglich. Für den Primärzerfall existieren lediglich empirische und statistische Modelle, jedoch keine explizite physikalische Gesetzmäßigkeit, die als Berechnungsgrundlage dienen könnte. Die numerische Vorhersage des Strahlzerfalls auf Basis von Modellannahmen wurde erst in den letzten Jahren durch die Steigerung der verfügbaren Rechenleistung möglich. Bestehende Verfahren zur Erfassung der Phasengrenzfläche weisen die in den vorherigen Kapiteln erläuterten, nicht vernachlässigbaren Defizite auf.

2.2.3.1 *Interface capturing* Verfahren

Den bisher durchgeführten Arbeiten liegt meist ein gitterbasiertes, Euler'sches Finite Volumen Verfahren zugrunde. Bei der Berechnung des Grenzflächenverhaltens kommen die zuvor ge-

nannten Techniken zum Einsatz. Herrmann (2003) erstellte ein Large Surface Structure Modell ähnlich einer LES für die Simulation des turbulenten Primärzerfalls. Hierbei wurden die Fluide als reibungsfrei und inkompressibel angenommen. Grenzflächenphänomene mit einer charakteristischen Länge L größer als die Gitterzelle Δx wurden direkt aufgelöst, kleinskaligere Effekte ($\frac{L}{\Delta x} < 1$) wurden modelliert. Die Grenzflächendynamik wurde mittels der Kombination einer Level Set und Vortex Sheet Methode erfasst. Durch das Continuum Surface Force Modell von Brackbill et al. (1992) wurde die Oberflächenspannung aufgeprägt.

Um die geschilderten Nachteile der einzelnen Verfahren zur Grenzflächenbehandlung zu umgehen, koppelten Ménard et al. (2007) die Volume of Fluid, die Level Set und die Ghost Fluid Methode miteinander. Die Kombination der ersten beiden dient der Verfolgung der Grenzfläche (Level Set) unter Einhaltung der Massenerhaltung (VoF). Die Ghost Fluid Methode ermöglicht die Darstellung der Diskontinuitäten in Dichte, Druck und Viskosität über die Phasengrenze hinweg. Vereinfachend wurde angenommen, dass $We < 10$ gilt und somit kein Sekundärzerfall der gebildeten Tropfen auftritt. Über das Minimum der resultierenden Tropfengröße wurde die Gittergröße und somit die Gesamtauflösung festgelegt. Für die dreidimensionale Simulation des Primärzerfalls eines Rundstrahls wurden ca. 14,5 Mio. Gitterzellen ohne adaptive Gitterverfeinerung benötigt. Das Ziel der Arbeit von Marek et al. (2008) war die Erweiterung dieser Vorgehensweise für CFD-Löser höherer Ordnung.

Da die DNS sehr rechenaufwändig ist, kann sie nur stark eingeschränkt auf einen sehr kleinen Bereich angewendet werden. Lebas et al. (2009) führten einen Vergleich der DNS des Primärzerfalls eines dichten Dieselsprays (s. Abb. 2.11), basierend auf der gekoppelten Level Set / VoF / Ghostfluid Methode nach Ménard et al. (2007) und mittels MPI parallelisiert, mit ihrem Euler-Lagrange-Modell für Sprayzerstäubung (ELSA) durch. Dieses behandelt die Zweiphasenströmung als eine Phase bestehend aus zwei Fluiden mit stark unterschiedlicher Dichte. Nachteilig bei diesem Vorgehen ist die Mittelung der Größen in den Zellen der Phasengrenzfläche. Zur Modellierung der Turbulenz wurde das Standard- k - ϵ Modell verwendet. Die DNS erforderte eine Rechenzeit von 10.000 CPUh auf 14 Prozessoren.



Abbildung 2.11: Visualisierung des mittels DNS berechneten Primärzerfalls von Lebas et al. (2009)

Die Ergebnisse der Simulationen mittels des ELSA Modells stimmten, nach Anpassung einiger Simulationsparameter, gut mit der DNS und experimentellen Messungen überein. Durch die zusätzliche Implementierung eines Verdunstungsmodells konnte der Einfluss der Gastemperaturänderung auf den Strahlzerfall erfasst werden.

Auch Cousin et al. (2010) nutzten den hybriden Ansatz der Kopplung von Level Set, Volume of Fluid und Ghost Fluid Methode zur exakten Darstellung der Phasengrenze bei Vermeidung des Masseverlusts und Erfassung der Diskontinuitäten in Dichte und Viskosität über die Grenzfläche hinweg. Es wurde die Interaktion eines Wirbels mit der Flüssig-Gas-Grenzfläche untersucht. Hierbei bewegt sich ein anfänglich in der Flüssigphase lokalisiertes Wirbelpaar in Richtung der Grenzfläche und ruft dort Störungen hervor. Eine Parameterstudie zeigte unter welchen Ausgangsbedingungen die Tropfenbildung stattfindet. Je geringer die Weber-Zahl, desto höher ist die zur Tropfenabscherung nötige Reynolds-Zahl. Unterhalb einer bestimmten Weber-Zahl findet unabhängig von der Reynolds-Zahl keine Tropfenbildung statt. Aus diesen Erkenntnissen können Rückschlüsse auf die Bedingungen für eine effiziente Primärzerstäubung gezogen werden.

Ein weiterer Ansatz zur numerischen Vorhersage des Strahlzerfalls ist die Kombination der Level Set Methode mit der Ghost Fluid Methode, wie in Desjardins et al. (2008) beschrieben. Die Verletzung der Massenerhaltung wurde durch Reinitialisierung der Level Set Funktion minimiert. Damit konnte der turbulente Zerfall eines Dieselstrahls bei $Re = 3000$ (Desjardins et al. (2008)) und eines ebenen Strahls bei verschiedenen Re - und We -Zahlen (Desjardins (2009)) modelliert werden. Das Dichteverhältnis der Fluide entspricht in etwa den Bedingungen bei der realen Dieseleinspritzung, hingegen ist die Reynolds-Zahl geringfügig und die Weber-Zahl um ein Vielfaches reduziert. Der CFD-Löser basiert auf den inkompressiblen Erhaltungsgleichungen, wodurch keine Kompressibilitätseffekte wie z. B. Druckwellen, simuliert werden konnten. Die Massenerhaltung wurde trotz Reduzierung der Fehler nicht strikt erfüllt.

Unter Verwendung der Level Set Methode zur Grenzflächenbeschreibung auf einem verfeinerten Gitter simulierte Herrmann (2009b) den turbulenten Strahlzerfall ($We = 330$, $Re = 14000$) in einer Querströmung. Die kleinsten sphärischen Tropfen werden dabei in die Lagrange'sche Darstellung überführt (Herrmann (2010)). Im Folgenden wurde die Zwei-Wege-Kopplung, d.h. der gegenseitige Masse-, Impuls- und Energieaustausch zwischen Gas- und Flüssigphase, angewendet. Der Sekundärzerfall wurde auf Basis eines stochastischen Modells modelliert (Herrmann (2009a)). Das Dichteverhältnis war im Vergleich zu den Experimenten verringert, wodurch eine Diskrepanz zwischen den im Experiment ermittelten Tropfengeschwindigkeiten und den Geschwindigkeiten der kleinen Tropfen in der Simulation auftritt.

Fuster et al. (2009) wendeten die VoF Methode auf ein *octree*-Gitter an. Zur Simulation des Flüssigkeitszerfalls wurde eine zeit- und ortsabhängige adaptive Gitterverfeinerung durchgeführt. Die lokale Netzauflösung hing von der Wirbelstärke, dem Gradienten des Flüssigkeitsanteils und der Krümmung der Grenzfläche ab. Aufgrund des ersten Kriteriums wird eine höhere Auflösung in Regionen hoher Wirbelstärke erzielt. Das zweite Kriterium ermöglicht die Gitterverfeinerung in der unmittelbaren Umgebung normal zur Grenzfläche, wohingegen das dritte Kriterium die variable Auflösung entlang der Phasengrenzfläche erlaubt. Die Dichte- und Viskositätsverhältnisse der beiden Fluide sind vergleichbar mit den bei der Zerstäubung in einer Hochdruckkammer vorherrschenden Bedingungen. Zur Initiierung der Instabilitäten, welche zum Zerfall führen, wurden anfänglich minimale Störungen an der Phasengrenzfläche aufgeprägt. Dieses Vorgehen hat lange Rechenzeiten zur Folge. Die Reynolds-Zahl der Simulationen ist nach oben begrenzt, da sonst sehr kleine Strukturen auftreten, welche nicht mehr mit ausreichender Genauigkeit erfasst werden können.

Auf Basis der Volume of Fluid Methode, jedoch ohne Berücksichtigung der Phaseninteraktion, untersuchten Gomaa et al. (2010) den Einfluss verschiedener Strömungsparameter (Düsengeometrie, Turbulenzgrad, integrales turbulentes Längenmaß, Umgebungsdruck) auf die Entstehung von Instabilitäten beim runden Strahlzerfall. Das Rechengbiet musste dabei mit 78,6 Millionen Gitterzellen diskretisiert werden, um die Kolmogorov-Länge stets aufzulösen.

Einen ausführlichen Überblick über die numerische Modellierung des Primärzerfalls im akademischen Bereich geben Gorokhovski und Herrmann (2008).

2.2.3.2 Globale Modelle

Die Direkte Numerische Simulation ist keine praktikable Maßnahme zur Vorhersage des Flüssigkeitszerfalls im Rahmen der industriellen CFD-Anwendung. Grund dafür ist die wirtschaftlich nicht vertretbare erforderliche Rechenleistung bzw. Rechenzeit und die dadurch entstehenden Kosten. Zur Zeit auf dem Markt befindliche kommerzielle CFD-Löser sind nicht oder nur in äußerst begrenztem Maß in der Lage den Tropfenzerfall mit ausreichender Genauigkeit vorherzusagen. In diesen Programmen werden empirische und stochastische Modelle für die Simulation des Primär- und Sekundärzerfalls herangezogen. Jedoch ist deren Genauigkeit und Zuverlässigkeit bzw. die Aussagekraft der resultierenden Ergebnisse fragwürdig. Es besteht die Möglichkeit direkt stochastische oder aus Messungen extrahierte Tropfenstartbedingungen vorzugeben, um die Simulation des Primärzerfalls komplett zu umgehen. Hierzu ist, wie in Kapitel 1 bereits erwähnt, die teure und zeitaufwändige Vermessung der Spraycharakteristik der Düse notwendig.

Das Softwarepaket FLUENT bietet die Möglichkeit das Volume of Fluid Verfahren zur Verfolgung von Phasengrenzflächen für Mehrphasenströmungen anzuwenden. Des Weiteren stellt die Lagrange'sche Discrete Phase Model (DPM) Umgebung Modelle für die Primärzerstäubung und den Sekundärzerfall zur Verfügung. Hierbei unterliegt die kontinuierliche Phase der Euler'schen Betrachtung. Die disperse Phase wird mittels eines Lagrange'schen Verfahrens verfolgt. Diese Modelle basieren allesamt auf der Annahme, dass die dispergierte Phase nur ein sehr geringes Volumen gegenüber der Kontinuumsphase einnimmt, welche insbesondere für den Primärzerfall keineswegs gerechtfertigt ist.

Die derzeit in FLUENT integrierten Primärzerfallsmodelle

- Plain-Orifice
- Pressure-Swirl
- Air-Blast / Air-Assist
- Flat-Fan
- Effervescent

sind abhängig von der Art der Zerstäuberdüse, deren Geometrie und dem durchgesetzten Massenstrom. Die anfänglichen Verteilungen der Tropfengrößen, -geschwindigkeiten und -positionen

werden in Abhängigkeit des gewählten Modells festgelegt. Die Tropfengrößenverteilung wird durch eine 2-Parameter Rosin-Rammler-Verteilung definiert. Es erfolgt die stochastische Zuweisung der Tropfentrajektorien für die einzelnen Tropfen. Die Düseninnenströmung kann mittels empirischer Modelle in die Berechnung einbezogen werden. Ein Nachteil, den alle genannten Modelle besitzen, ist die stochastische zeitliche und örtliche Verteilung der Trajektorien. Die direkte Simulation des Primärzerfalls ist nicht möglich. Die Variation an Düsengeometrien ist stark eingeschränkt. Zur Grenzflächenverfolgung kann die Volume of Fluid oder die Level Set Methode angewendet werden, jedoch sind deren inherente Schwächen (s. Kapitel 2.2.1.1) zu beachten. Für die Modellierung des Sekundärzerfalls stehen die stochastischen Zerfallsmodelle des *Taylor Analogy Breakup (TAB)* und *Wave Breakup* zur Verfügung. Darauf wird an dieser Stelle nicht näher eingegangen, sondern auf FLUENT (2009) verwiesen.

Zur Modellierung des Flüssigkeitszerfalls und des Sprays greift auch CFX auf den hybriden Euler-Lagrange Ansatz zurück. Die Primärzerfallsmodelle dienen zur Vorhersage der Tropfendurchmesser und -geschwindigkeiten. Die folgenden Modelle sind in CFX implementiert:

- Blob
- Enhanced Blob
- Linearized Instability Sheet Atomization (LISA)
- Turbulence Induced Atomization

Im Fall der Blob Methode wird allen Tropfen der Durchmesser der Düse zugewiesen. Die Tropfengeschwindigkeit wird gemäß der Massenerhaltung über den Massenstrom, die Düsenaustrittsfläche und die Flüssigkeitsdichte bestimmt. Eine Erweiterung hiervon ist das Enhanced Blob Modell, bei dem über die Charakteristik der Düseninnenströmung das eventuelle Auftreten von Kavitation berücksichtigt wird. Davon ausgehend wird der entstehende Tropfendurchmesser und dessen Geschwindigkeit angepasst. Dazu müssen aber mehrere Parameter, wie z. B. der Kontraktionskoeffizient in der Düse und der Dampfdruck der Flüssigkeit, vorgegeben bzw. a priori abgeschätzt werden. Mittels des LISA Modells lassen sich die entstehenden Tropfen eines Druck-Drall-Zerstäubers modellieren. Das letzte Modell liefert, neben der Tropfengröße und -geschwindigkeit, Aussagen über den Spraywinkel und berücksichtigt den durch die Turbulenz in der Flüssigphase induzierten Zerfall. Die Zerfallsmodelle basieren allesamt auf gemittelten Größen am Düsenaustritt und der Düsengeometrie. Der Primärzerfall wird nicht direkt aufgelöst. Weitere Details dazu und zu den Sekundärzerfallsmodellen sind in CFX (2009) nachzulesen.

2.2.3.3 Zusammenfassung

Die Herausforderung bei der numerischen Vorhersage des Primärzerfalls liegt in der exakten Beschreibung des Grenzflächenverhaltens. Außerdem treten Diskontinuitäten in Dichte und Viskosität über die Phasengrenze hinweg auf. Die numerische Diffusion an der Grenzfläche sollte vermieden werden. Ein wichtiger Effekt für die korrekte Simulation des Flüssigkeitszerfalls ist die Oberflächenspannung. Hierbei ist die numerische Modellierung einer Flächenkraft schwierig.

Fehler in der Rekonstruktion der Grenzfläche führen sofort zu großen Fehlern in der Berechnung der Oberflächenspannung nach Brackbill et al. (1992).

Zusammenfassend kann die Aussage getroffen werden, dass der Primärzerfall zwar im akademischen Bereich mit enorm hohem Rechenaufwand in gewissem Maße näherungsweise vorhergesagt werden kann, jedoch weisen die bisherigen Verfahren zur Verfolgung der Grenzfläche gewichtige Nachteile auf. Diese können durch Kombination mehrerer Ansätze oder durch die adaptive Gitterverfeinerung zwar minimiert, aber keineswegs vollständig eliminiert werden. Für die industrielle Praxis sind diese Verfahren keine Alternativen, da sie zu rechenintensiv sind und somit einen unvermeidbaren Zeit- und Kostenfaktor darstellen. Die gängigen Modelle in kommerziellen CFD-Codes lösen den Primärzerfall nicht auf, sondern liefern in Abhängigkeit von gemittelten Größen am Düsenaustritt und der Düsengeometrie stochastische Tropfengrößen- und -geschwindigkeitsverteilungen. Die Genauigkeit und Aussagekraft der aus den Modellen ermittelten Größen sind daher fragwürdig.

2.3 Smoothed Particle Hydrodynamics

Eine Alternative zu den gitterbasierten Methoden stellt die gitterfreie Partikelmethode Smoothed Particle Hydrodynamics dar. Diese wurde Ende der Siebziger Jahre in der Astrophysik zeitgleich von Gingold und Monaghan (1977) und Lucy (1977) entwickelt. Sie sollte die Berechnung kosmologischer und astrophysikalischer Phänomene, wie z.B. Galaxieentstehungen, Sternenkollisionen oder Supernovae, bei vertretbarem Rechenaufwand ermöglichen. Die Herausforderung bei solchen Simulationen ist vor allem die enorm hohe benötigte Rechenleistung bei Anwendung bekannter Gittermethoden, da die Ausdehnung des Simulationsgebietes a priori für die Gittererstellung bekannt sein und dieses lückenlos diskretisiert werden muss. Die relevanten Längenskalen der zu simulierenden Effekte und die Ausdehnung der Materie bei solchen Vorgängen erstrecken sich oft über mehrere Größenordnungen hinweg, wodurch die Anzahl der Gitterzellen extrem ansteigt. Die SPH Methode hingegen beruht auf der Lagrange'schen Betrachtungsweise der kontinuumsmechanischen Erhaltungsgleichungen. Die Stützstellen werden im Simulationsgebiet mitbewegt. Die Berechnung der Fluideigenschaften an jeder Stützstelle erfolgt durch eine mittels einer sogenannten Glättungsfunktion gewichtete Interpolation über benachbarte Stützstellen. Da sich die Stützstellen mit dem Geschwindigkeitsfeld des Fluids bewegen, müssen weder leere Räume diskretisiert werden noch die finale Gebietsausdehnung a priori bekannt sein. Ein weiterer bedeutender Vorteil ist der automatische Transport der Grenzflächen. Es sind keine zusätzlichen Algorithmen zur Grenzflächenverfolgung oder -erfassung notwendig. Außerdem werden die partiellen Differentiale der Erhaltungsgleichungen nicht durch Differenzen approximiert, sondern durch direkte Differentiation der Glättungsfunktion in gewöhnliche Differentialgleichungen überführt. Das genaue Verfahren wird in Kapitel 4 eingehend erläutert.

Nach anfangs ausschließlicher Anwendung im Rahmen der Astrophysik, wird die SPH Methode inzwischen auch vereinzelt in den technischen Bereichen angewendet und weiterentwickelt. Sie befindet sich jedoch hinsichtlich einiger technisch wichtiger Aspekte, wie z. B. der Implementierung von Randbedingungen, Verdunstungsmodellierung, Darstellung der Oberflächenspannung,

Simulation von Mehrphasenströmungen und Behandlung von Mehrkomponentenstoffen, noch im Entwicklungsstadium. In den folgenden Unterkapiteln soll näher auf den aktuellen Stand der Forschung in Bezug auf die SPH Methode hinsichtlich für den Primärzerfall relevanten Bereichen - z. B. Inkompressibilität der flüssigen Phase, korrekte Berechnung der dissipativen Terme, Darstellung von Mehrphasensystemen und Berücksichtigung der Oberflächenspannungseffekte - eingegangen werden. Die Eignung der implementierten Modellansätze hinsichtlich der numerischen Vorhersage des Primärzerfalls wird in Kapitel 6 anhand der Modellvalidierung diskutiert. Zuletzt sind die bekannten Vor- und Nachteile der SPH Methode aufgeführt. Die Berücksichtigung der Strahlungsdiffusion und der Wärmeleitung werden von Brookshaw (1994) und Cleary und Monaghan (1999) diskutiert. Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wird die Wärmeübertragung durch Strahlung vernachlässigt. Der Wärmetransport aufgrund von Konduktion spielt zwar eine untergeordnete Rolle, Modellansätze dafür wurden jedoch in den Strömungslöser implementiert, um zukünftig die Integration von Verdunstungsmodellen zu ermöglichen.

2.3.1 Inkompressibilität

Die Simulation der Wechselwirkung von Flüssig- und Gasphase erfordert je nach Fluid und Strömungsgeschwindigkeit die Möglichkeit sowohl kompressible, wie auch inkompressible Rechnungen durchführen zu können.

Im Rahmen der SPH Methode werden grundsätzlich die kompressiblen Erhaltungsgleichungen gelöst. Der Druck ist explizit über eine Zustandsgleichung mit der Dichte gekoppelt. Die Amplitude der Druckänderungen in Abhängigkeit der Dichteschwankungen kann durch Wahl einer geeigneten Zustandsgleichung angepasst werden. Somit lassen sich Fluidströmungen inkompressibler Medien, wie z. B. Wasser oder Kerosin, über den sogenannten Weakly Compressible SPH (WCSPH) Ansatz als schwach kompressible Medien durch Limitierung der Dichteschwankungen simulieren. Eine solche Zustandsgleichung ist beispielsweise die von Cole (1948) eingeführte Tait-Gleichung für Wasser, auf die näher in Kapitel 4.5 eingegangen wird. Die starke Abhängigkeit des Drucks von Dichteänderungen im Medium ruft bei geringen lokalen Abweichungen der Dichte hohe Druckgradienten und somit starke lokale Beschleunigungen hervor. Dadurch wird der Zeitschritt bei der Zeitintegration stark herabgesetzt. Infolgedessen bleibt die Dichteänderung innerhalb eines Zeitschritts wiederum gering bzw. auftretende Druckoszillationen werden durch angepasste Dichteverteilungen sofort ausgeglichen. Dies bedeutet, dass bei der Modellierung inkompressibler Medien eine steife Druck-Dichte-Korrelation angesetzt wird und die Dichteschwankungen durch das Setzen der numerischen Informationsausbreitungsgeschwindigkeit limitiert werden. Diese Modellannahme für inkompressible Medien wird in der vorliegenden Arbeit weiterverfolgt, da auf dieser Basis sowohl inkompressible wie auch kompressible Medien mit hoher Genauigkeit simuliert werden können. Interpolationsfehler in der Dichte aufgrund einer ungeordneten Stützstellenverteilung können durch das sogenannte *remeshing*, d.h. periodisches Reinitialisieren der Partikelverteilung auf ein Hintergrundgitter während der Simulation (Chaniotis et al. (2002)), weiter minimiert werden. Hierbei geht die Flexibilität der ursprünglich gitterfreien SPH Methode verloren. Zudem steigt die benötigte Rechenleistung an. Daher wird

dieser Ansatz nicht weiterverfolgt.

Zur Modellierung strikt inkompressibler Strömungen mittels SPH (ISPH) ohne zusätzliches Lösen einer Poisson-Gleichung schlagen Ellero et al. (2007) eine kinematische Beschränkung der Stützstellenbewegung vor. Dadurch soll gewährleistet werden, dass jeder Stützstelle ein konstantes Volumen zugewiesen wird. Hierbei wird jedoch nur die Forderung nach einem divergenzfreien Geschwindigkeitsfeld erfüllt, Dichteschwankungen im Fluid werden nicht unterbunden. Laut Hu und Adams (2007) kann dieses Verfahren zur lokalen Anhäufung von Stützstellen (Partikelclustern) führen, weshalb in deren Arbeit, basierend auf der Projektionsmethode, durch Regulierung des Zeitschritts ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld erzielt und gleichzeitig Dichteänderungen im Strömungsgebiet vermieden werden. Jedoch nimmt die Komplexität der Programmierung und somit der Rechenaufwand zu. Weitere Vor- und Nachteile der genannten Ansätze sind in Xu et al. (2009) aufgeführt. Zudem wurde eine Methode vorgeschlagen, bei der die Partikel geringfügig entlang ihrer Stromlinien verschoben werden und die physikalischen Größen an den korrigierten Stützstellenpositionen anhand einer Taylorreihenentwicklung ermittelt werden. Nachteilig erweist sich auch hierbei der Anstieg des Rechenaufwands.

2.3.2 Dissipative Terme

Die Wellenbildung an der Flüssigkeitsfilmoberfläche, initiiert durch die Relativgeschwindigkeit zwischen Gas- und Flüssigphase, geht dem an der Zerstäuberkante stattfindenden Primärzerfall voraus. Um den gesamten Prozess in einem Airblast-Zerstäuber zu simulieren ist es notwendig, die auftretenden Schubspannungen, besonders an den Phasengrenzflächen, exakt erfassen zu können. Die korrekte Modellierung der Reibungsterme in der Impuls- und Energieerhaltungsgleichung ist dafür unerlässlich.

Die Berechnung der diffusiven Terme gestaltet sich bei der SPH Methode aufgrund der auftretenden zweiten Ableitungen umfangreicher. Bei der direkten Verwendung der zweiten Ableitung der Glättungsfunktion zur Approximation dieser Terme können vor allem bei ungeordneten Stützstellenverteilungen und geringer Auflösung große Fehler auftreten und das Verfahren wird instabil. Daher wurden anfänglich nur SPH Simulationen, denen die reibungsfreien Euler-Gleichungen zugrunde lagen, durchgeführt. In den neunziger Jahren erfolgte die Einführung des sogenannten künstlichen Viskositätsmodells durch Monaghan und Gingold (1983), welches in Kapitel 4.4.2 näher erläutert wird. Dieses setzt sich aus einer Volumenviskosität und einer von Neumann-Richtmyer Viskosität zur Darstellung von Stoßfronten zusammen. Hierzu müssen die Skalierungsparameter für beide Viskositätsanteile kalibriert werden. Es existiert keine direkte Korrelation mit der physikalischen Viskosität. Um die Viskositätsparameter an jeder Stützstelle zeitlich veränderlich zu halten, wurde eine Erweiterung in Morris und Monaghan (1997) vorgeschlagen. Dies führt dazu, dass die Viskosität in den Bereichen, wo sie keine entscheidende Rolle spielt, reduziert wird, und daher eine geringere Auflösung für die Simulation zulässig ist. Flebbe et al. (1994) berücksichtigten die Viskositätsterme bei astrophysikalischen Phänomenen, wie z.B. der Simulation einer Akkretionsscheibe, mit Hilfe geschachtelter Ableitungen der Glättungsfunktion. Es sind deutliche Abweichungen der Simulationsergebnisse von den analytischen Lösungen zu erkennen.

Takeda et al. (1994) legten den Fokus ihrer Untersuchungen auf technisch relevante Strömungen, wie die reibungsbehaftete Kanal- und Rohrströmungen und berechneten diese durch die direkte Anwendung zweiter Ableitungen der Glättungsfunktionen. Die SPH Ergebnisse stimmen sehr gut mit der Analytik überein, so lange eine einigermaßen regelmäßige Stützstellenanordnung vorliegt. Tritt jedoch eine stärkere Umverteilung der Stützstellen ein, wie im Nachlauf des Strömungshindernisses im Falle einer Zylinderumströmung, so entstehen durch die Approximationsfehler Abweichungen zur FDM Simulation. Außerdem ist dieser Ansatz nur unter der Annahme einer konstanten Scherviskosität gültig, die Volumenviskosität wird nicht berücksichtigt (Watkins et al. (1996)).

In der Arbeit von Kum et al. (1995) wurden die diffusiven Terme aufgrund von Reibung sowie die Wärmeleitung durch Approximation des Spannungstensors und der Divergenz der Temperaturgradienten modelliert.

Watkins et al. (1996) diskutierte eine Beschreibung der viskosen Terme im Rahmen der SPH Methode, wobei zuerst die Approximation des Gradienten der Viskosität und anschließend die Summeninterpolation der kompletten viskosen Terme durchgeführt wird.

Ein Viskositätsmodell, bei dem keine geschachtelten Summationen erforderlich sind, wird von Morris et al. (1997) beschrieben. Die Standardapproximation für Gradienten gemäß dem SPH Algorithmus wird mit einer Finite Differenzen Approximation der ersten Ableitung kombiniert. Die Impulserhaltung wird nach dieser Formulierung exakt erfüllt, die Drehimpulserhaltung hingegen nur näherungsweise. Treten höhere Reynolds-Zahlen in den Simulationen auf, können Abweichungen von den analytischen Lösungen festgestellt werden.

Die Simulation der Viskoelastizität von Fluiden auf Basis der drei Effekte: Elastizität, Plastizität und Viskosität behandelten Clavet et al. (2005). Die ersten beiden Effekte werden durch ein Feder-Masse-Modell dargestellt. Die Viskositätsmodellierung basiert auf der Einführung von radialen Kräften, die zwischen Interaktionspaaren auftreten, wodurch das Geschwindigkeitsfeld geglättet wird. Der Nachteil dieses Modells ist der nicht vorhandene direkte Zusammenhang mit der physikalischen Viskosität. Des Weiteren müssen die darin auftretenden Parameter vorab kalibriert werden.

Für eine detailliertere Diskussion der Genauigkeit der SPH Simulationen unter Berücksichtigung der viskosen Diffusion und deren Abhängigkeit von Partikelabstand, Glättungslänge und Stützstellenverteilung sei an dieser Stelle auf Graham und Hughes (2008) verwiesen.

2.3.3 Mehrphasenströmungen

Das Kraftstoff-Luft-Gemisch und die Interaktion zwischen den beiden Phasen müssen für eine korrekte numerische Vorhersage des Primärzerfalls durch die Simulationsmethode exakt beschrieben und erfasst werden können.

Die in der Literatur zu findenden Modelle für Mehrphasenströmungen können grundlegend in zwei Bereiche unterteilt werden. Spielt der Einfluss einer der beiden Phasen nur eine untergeordnete Rolle, so kann die Darstellung dieser vernachlässigt werden. Es wird somit ein Fluid mit

sogenannten freien Oberflächen simuliert. Des Weiteren besteht die Möglichkeit die Eigenschaften beider oder mehrerer Phasen und deren Interaktion explizit darzustellen. Die Unterschiede der beiden Simulationsmöglichkeiten seien in Abb. 2.12 anhand der Diskretisierung eines von Luft umgebenen Brennstofftropfens verdeutlicht.

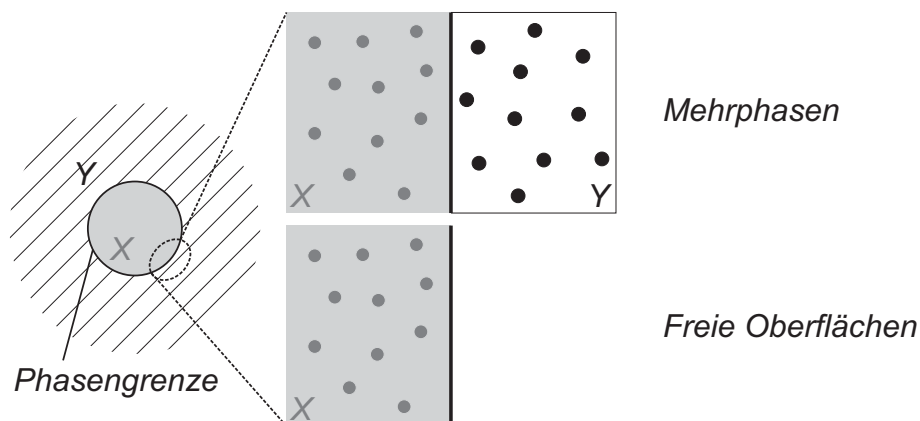


Abbildung 2.12: Diskretisierung eines von Luft umgebenen Kraftstofftropfens für die Mehrphasensimulation (oben) und die Simulation mit freier Oberfläche (unten)

Zu den bekanntesten Problemen, die mittels freier Oberflächen in ausreichend guter Näherung dargestellt werden können, zählt die Simulation eines Dammbbruchs, bei der eine Wassersäule unter dem Einfluss der Schwerkraft in sich zusammenfällt. Dabei kann die korrekte zeitliche Bewegung der freien Oberfläche und das Voranschreiten der Wasserfront in horizontaler Richtung zur Validierung dienen. Dieser Fall wurde unter anderem von Monaghan (1994) und Veen und Gourlay (2008) numerisch untersucht. Wasser wird mit Hilfe der Tait-Zustandsgleichung als schwach kompressibles Medium dargestellt. Diese bietet außerdem den Vorteil, dass mit Relativdrücken gerechnet werden kann und somit kein unphysikalischer Druckgradient hin zur freien Oberfläche induziert wird. Um bei dieser Art von Simulationen eine geordnete Stützstellenverteilung beizubehalten wird in der Literatur oft die XSPH-Korrektur (s. Kapitel 4.7.1) angewendet. Das Auftreffen viskoelastischer Tropfen, modelliert durch freie Oberflächen, untersuchten Fang et al. (2006). Die Genauigkeit der Summenapproximationen kann für solche Simulationen bei denen häufig Interpolationsfehler an den freien Oberflächen auftreten durch Korrekturen erhöht werden (Fang et al. (2008)). Colagrossi (2003) simulierte mittels des SPH Verfahrens sowohl Phänomene bei denen freie Oberflächen auftreten, wie auch Mehrphasenströmungen. Eine umfassende Beschreibung der aktuellen SPH Entwicklung und bereits bestehender Modelle hinsichtlich der Simulation von Systemen mit freien Oberflächen wird von Gomez-Gesteira et al. (2010) gegeben. Im Rahmen von *SPHERIC*, der SPH European Research Interest Community, wird für solche Anwendungen der open-source Code *SPHysics* (Gesteira et al. (2010)) entwickelt. Die erste serielle Version wurde im August 2007 veröffentlicht. Inzwischen gibt es neben vielen Erweiterungen des Codes und der Modelle eine serielle, eine parallele sowie eine hybride GPU-CPU-Version. Dieser Code wird in Zusammenarbeit der Johns Hopkins University (USA), der Universidade de Vigo (Spanien), der University of Manchester (UK) und der Università di Roma Sapienza (Italien) entwickelt. Im Fokus von *SPHysics* soll auch in Zukunft die Simu-

lation von Phänomenen mit freien Oberflächen stehen, wie z. B. die numerische Vorhersage von Dammbbruch-Szenarien oder Wellen-Struktur-Interaktion (Crespo (2008)). Ansätze und Modelle zur Darstellung von Mehrphasenströmungen sind in *SPHysics* nicht enthalten und auch in absehbarer Zeit nicht vorgesehen. Aus diesen Gründen ist die Verwendung von *SPHysics* keine Option zur Simulation des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen.

Eine der ersten Arbeiten (Monaghan und Kocharyan (1995)), welche sich mit der Simulation von Mehrphasenströmungen mittels des SPH Ansatzes beschäftigte, behandelte die Modellierung einer staubbeladenen Gasphase zur Analyse pyroklastischer Ströme in der Astrophysik. Die beiden sich durchdringenden Phasen interagieren in diesem Fall über Druck- und Widerstandsterme, wobei die Eigenspannungen der Staubpartikel vernachlässigt wurden. Verdunstung und Kondensation wurden nicht berücksichtigt. Die Kontinuitäts- und Impulserhaltungsgleichung wurden jeweils für die Gasphase und die feste Staubphase gelöst und deren jeweilige Dichten anteilmäßig berücksichtigt. Die Grenzflächeninteraktion, wie bei einer Gas-Flüssigkeitsströmung, wurde vernachlässigt. Jedoch ist die SPH Methode grundsätzlich mit Modifikationen auch auf Flüssig-Flüssig- oder Flüssig-Gas-Systeme anwendbar. Hierbei ist es von entscheidender Bedeutung die Grenzflächenphänomene korrekt zu beschreiben. Durch geeignete Umformulierung der Approximationen der Erhaltungsgleichungen, um die Diskontinuitäten in der Dichte an der Grenzfläche darstellen zu können, ist die Simulation von Mehrphasenströmungen, bei denen nur geringe Relativgeschwindigkeiten zwischen den beiden Phasen auftreten, möglich (Colagrossi und Landrini (2003), Colagrossi (2003)). In einer vielversprechenden Arbeit simulierte Ott (1999) die zweidimensionale, isotherme Einspritzung eines Dieselstrahls in ruhende Luft. Grenzflächeneffekte und Wärmeübertragung wurden dabei vorerst vernachlässigt. Durch Korrektur der Partikelmassen im Einflussbereich der Grenzfläche erreichten Valizadeh et al. (2008) die stabile Simulation einer Mehrphasenströmung mit hohen Dichteverhältnissen ($\frac{\rho_l}{\rho_g}$), wobei Oberflächenspannungseffekte vernachlässigt wurden.

2.3.4 Oberflächenspannung

Die Oberflächenspannung, als einer der wichtigsten Einflussfaktoren bei der Betrachtung des Primärzerfalls, muss in den Simulationen berücksichtigt werden. Erste Ansätze hierzu im Rahmen der SPH Methode sind von den gitterbasierten Verfahren abgeleitet. Dort führten Brackbill et al. (1992) im Kontext der VoF Methode das Continuum Surface Force (CSF) Modell ein, auf welches in Kapitel 4.6.1 näher eingegangen wird. Die in der Natur als Flächenkraft auftretende Oberflächenspannung bewirkt eine Verringerung der Grenzfläche zwischen zwei Phasen. Das System strebt somit ein Minimum der Oberflächenenergie an. Da sich jedoch die Umsetzung der Simulation einer Flächenkraft bei gitterbasierten Finite Volumen Methoden (FVM) als schwierig erweist, bzw. diese dann als Randbedingung auf ein Flächenelement gesetzt werden muss, wird die Flächenkraft in eine auf ein beschränktes Gebiet wirkende Volumenkraft überführt. Analog dazu erfolgt das Vorgehen bei der SPH Methode, wie von Morris (2000) ausführlich erklärt wird. Dieses Modell ist in der Literatur weit verbreitet, wobei Erweiterungen oder Umformulierungen vorgenommen wurden, um die Stabilität und Genauigkeit zu erhöhen. So simulierten Liu und Liu (2005) die Flüssigkeitsströmung in Mikrokanälen unter Berücksichtigung der kohäsiven

Effekte an der Wand. Hu und Adams (2006) erweiterten den CSF Ansatz zur Simulation makroskopischer Effekt in Mehrphasenströmungen, wie am Beispiel der Dreiphasen-Wechselwirkung und der Tropfendeformation in einer Scherströmung anschaulich gezeigt wird. Hierbei werden die benachbarten Stützstellen nicht direkt zur Berechnung der Dichte, sondern zur Berechnung eines spezifischen Volumens herangezogen. Dies hat zur Folge, dass Dichtediskontinuitäten an Grenzflächen aufgelöst werden können. Nachteilig ist das Auftreten von Partikelanhäufungen und dadurch bedingte Rechenungenauigkeiten. Auch bei der von Zhang et al. (2007) beschriebenen Finite Volumen Partikelmethode wird die Oberflächenspannung auf Basis des CSF Modells berechnet. Durch Umformung der CSF Formulierung und der Korrektur der Gradientenapproximation modellierten Adami et al. (2010) Mehrphasenströmungen mit erhöhter Genauigkeit.

Im Gegensatz zu dem zuvor genannten makroskopischen Verfahren auf Basis des CSF Modells, bei dem die Oberflächenspannung aufgrund der Krümmung der Grenzfläche berechnet wird, existieren weitere Ansätze zu deren Modellierung. Diese beruhen auf einer mikroskopischen Betrachtung. Physikalisch gesehen rührt die Oberflächenspannung von der gegenseitigen Anziehung einzelner Moleküle her. Daher wird bei diesen Ansätzen versucht, die Anziehungskraft zwischen Molekülen auf die Partikel bzw. Stützstellen im Rahmen der SPH Methode zu übertragen.

Erstmals simulierten Nugent und Posch (2000) ein van der Waals Fluid, wobei die Oberflächenspannung aufgrund des Kohäsionsdrucks in der van der Waals Zustandsgleichung dargestellt wird. Durch Miteinbeziehung dieses zusätzlichen Kohäsionsterms, welcher den absoluten Druck vermindert, ergeben sich in der Impulserhaltungsgleichung anziehende Kräfte zwischen Partikeln. Diese gleichen sich im Fluidinnern bei Gleichverteilung der Stützstellen aus. An freien Oberflächen hingegen resultiert eine ins Fluidinnere gerichtete Kraft, welche sich aus dem kohäsiven van der Waals Parameter und der Gewichtung der benachbarten Partikelmassen ergibt. Dieser Ansatz scheint vielversprechend für Realgassimulationen bei denen nur ein Reinstoff vorliegt. In Abhängigkeit der Temperatur tritt die Kondensation eines Tropfens aus der Gasphase auf. Wird jedoch dieselbe Glättungslänge für alle Interpolationen angenommen, so können Instabilitäten auftreten. Daher wird die anziehende Kraft aufgrund des Kohäsionsterms über einen Interpolationsbereich mit doppeltem Einflussradius ermittelt, was zugleich eine deutliche Erhöhung des Rechenaufwands bedeutet. Die auftretenden Instabilitäten rühren von unphysikalischen Partikelanhäufungen her, welche, wie von Monaghan (2000) berichtet, typischerweise unter Zugspannung auftreten können. Sie führen unter anderem zur Ausbildung konzentrischer Ringe in der Stützstellenverteilung im stationären Tropfen und somit zu nichtdiskretisierten Gebieten, wodurch Approximationsfehler hervorgerufen werden. Diese Instabilität kann durch Einführung einer kurzreichweitigen, abstoßenden Kraft, in Abhängigkeit des Drucks, der Dichte und des Partikelabstandes, behoben werden. Meleán et al. (2004) modifizierten daher zur Simulation viskoser van der Waals Tropfen die viskosen Terme in der Impuls- und Energieerhaltungsgleichung mittels eines künstlichen Spannungstensors. Hierbei wurde eine geordnete Partikelverteilung im Vergleich zu Nugent und Posch (2000) erzielt, wodurch die Simulationen weniger anfällig für Instabilitäten waren. Es war wiederum unvermeidbar den Interpolationsradius der anziehenden Kräfte auf das Doppelte zu erhöhen. Ein weiterer Nachteil ist, dass die stationäre Dichte und Temperatur im Tropfen von einer Modellkonstante abhängig sind. Auf Basis dieser Arbeit stu-

dierten Meleán und Sigalotti (2005) und Meleán et al. (2006) die zweidimensionale frontale und exzentrische Tropfenkollision bei verschiedenen Reynolds- und Weber-Zahlen ($23 \leq Re \leq 68$, $1 \leq We \leq 10$). Hierbei wurde nur ein einphasiger Tropfen eines Reinstoffes, ohne umgebende Gasphase, mit freier Oberfläche berücksichtigt. Die Druckverteilung im resultierenden Tropfen wurde nicht betrachtet. Die Erweiterung dieses Modells um die sogenannte *adaptive density kernel estimation (ADKE)* von Sigalotti et al. (2006) und Sigalotti und López (2008) führte zu einer Erhöhung der Genauigkeit und der Stabilität der Simulationen, da nun die Breite der Glättungsfunktion lokal variiert werden konnte und somit nur die minimal notwendige Glättung an Grenzflächen vorgenommen wurde. López und Sigalotti (2006) studierten auf dieser Grundlage die Tropfenoszillation bei geringer Auslenkung aus der Gleichgewichtslage.

Auch Tartakovsky und Meakin (2005) bedienten sich der van der Waals Zustandsgleichung für die Druck-Dichteleration. Zusätzlich wurde eine Interpartikel-Kraft zur Simulation der Oberflächenspannung und der Fluid-Solid-Wechselwirkung aufgeprägt. Diese ist auf kurze Distanz repulsiv, im Fernfeldbereich hingegen wirkt sie anziehend. Da die Kraft zwischen paarweise interagierenden Stützstellen auftritt, wird der Impuls im System stets erhalten. Das Benetzungsverhalten von Fluiden und festen Wänden wird zwar qualitativ richtig dargestellt, es bedarf jedoch der Kalibrierung der in der Kräftebilanz auftretenden Parameter, welche in keinem direkten Zusammenhang zur Physik stehen. Somit lässt sich die Oberflächenspannung zwar aus den Ergebnissen ermitteln, nicht jedoch a priori festlegen, wie dies für belastbare und aussagekräftige, physikalische Simulationen wünschenswert wäre. Es ist daher nur eine generische Beschreibung des Strömungsverhaltens möglich. Es können keine Rückschlüsse auf das quantitative Verhalten gezogen werden. Eine Kalibrierung der Funktion und deren Parameter für jede Fluid-Fluid-Paarung wäre notwendig, um das Fluidverhalten genauer zu beschreiben.

Eine Modifikation der van der Waals Zustandsgleichung ermöglicht die Beschreibung eines Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems (Tartakovsky et al. (2009)). Durch geeignete Wahl des Koeffizienten in der van der Waals Gleichung des jeweiligen Fluids wird erreicht, dass Partikel desselben Fluids stärkere Anziehungskräfte untereinander erfahren als Partikel unterschiedlicher Fluide. Die Interaktionsstärke wird über einen Parameter definiert, welcher modellabhängig kalibriert werden muss, um die Oberflächenspannungseffekte in technischen Systemen quantitativ wiedergeben zu können. Ein weiterer Nachteil dieser Formulierung ist die Anfälligkeit des SPH Modells für Instabilitäten aufgrund von anziehenden Kräften zwischen Partikeln (*tensile instability*). Dies kann zur lokalen Anhäufung der Diskretisierungsstellen und somit zum Genauigkeitsverlust oder Abbruch der Simulationen führen. Dem kann mit der Einführung eines künstlichen Kräftepotentials, welches auf kurze Entfernungen abstoßend und bei größeren Partikelabständen anziehend wirkt, entgegengewirkt werden. Auch hier besteht der Nachteil einer nicht physikalischen Kraft, deren Parameter a priori festgelegt und im Nachhinein einer Kalibrierung unterzogen werden müssen, um quantitativ belastbare Ergebnisse zu erzielen. In den von Tartakovsky et al. (2009) durchgeführten Studien sind keine Dichteunterschiede der Fluide berücksichtigt.

Die van der Waals Zustandsgleichung eignet sich zur Simulation von van der Waals Fluiden unter Berücksichtigung des Phasenübergangs und der Oberflächenspannungseffekte. Hinsichtlich der Zielanwendung zur numerischen Vorhersage des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen

ist es nicht vorteilhaft weder den inkompressiblen, flüssigen Kraftstoff noch die kompressible, gasförmige Luft als van der Waals Fluid anzunehmen. Dies gilt insbesondere, wenn zukünftig die Verdunstung berücksichtigt werden soll.

Ein weiterer mikroskopischer Ansatz, welcher von Becker und Teschner (2007), Wróblewski et al. (2008) und Zhang et al. (2008) in unterschiedlicher Formulierung verfolgt wurde, ist die Darstellung der Oberflächenspannungseffekte ausschließlich auf Basis interagierender Partikelkräfte. Diese waren rein anziehender Natur. Bei nahezu geordneter Partikelverteilung gleichen sich diese Kräfte im Fluidinneren aus, an den Grenzflächen resultiert eine nach innen gerichtete Kraft analog zur Oberflächenspannung. Zhang et al. (2008) simulierten so die Tropfenausbreitung beim Auftreffen auf solide Oberflächen und deren daraufhin eintretende Erstarrung. Die Oberflächenspannungseffekte wurden durch eine zusätzliche Kraft, welche einem Lennard-Jones-Potential entspricht, modelliert. Somit wurde sowohl die kurzreichweitige Abstoßung, wie auch die langreichweitige Anziehung zwischen Partikeln berücksichtigt. Alle Arbeiten behandeln jedoch nicht die Simulation von Mehrphasensystemen, sondern von Einphasenströmungen mit freien Rändern oder Fluid-Wand-Interaktion.

Die Interaktion zweier Phasen und die dort auftretenden Grenzflächeneffekte modellierten Zhou et al. (2008) durch die Annahme von abstoßenden Kräften zwischen Partikeln verschiedener Phasen. Das Benetzungsverhalten an Wänden wurde wiederum über einen Lennard-Jones-Potential-Ansatz formuliert. Nachteilig dabei ist die Festlegung der zu kalibrierenden Modellparameter.

2.3.5 Vor- und Nachteile der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode

In den Anfangsjahren wurde die SPH Methode ausschließlich für Simulationen in der Astrophysik eingesetzt (Gingold und Monaghan (1977), Lucy (1977), Flebbe et al. (1994), Speith (1998), Price (2004)) und hinsichtlich darin enthaltener Problemstellungen erweitert. Erst in den letzten Jahren hält sie Einzug in den technischen Disziplinen (Cleary et al. (2006), Marongiu et al. (2010)). Die Methode befindet sich noch im Entwicklungsstadium und ihre Anwendungsmöglichkeiten, vor allem in den technischen Bereichen, sind bei weitem noch nicht erschöpft und ausgereizt. Es bedarf unter anderem der Auseinandersetzung mit der Frage nach der geeigneten Modellierung von Randbedingungen und der Notwendigkeit von Korrekturen, um die Konsistenz der Partikelapproximationen zu erfüllen. Es besteht keine eindeutige Verknüpfung der Diskretisierungspunkte bzw. -volumina untereinander, wie dies bei Rechengittern der Fall ist. Daher sind effiziente Algorithmen erforderlich, um die Rechenzeiten gering zu halten.

Einer der überzeugenden Vorteile, insbesondere bei der Simulation des Primärzerfalls und von Mehrphasenströmungen im Allgemeinen, ist der automatische Mittransport der Phasengrenzflächen aufgrund der Lagrange'schen Formulierung der Erhaltungsgleichungen an mitbewegten Stützstellen. Hierdurch entfällt die Notwendigkeit aufwändiger und fehleranfälliger Grenzflächenverfolgungsalgorithmen, wie z.B. der Volume of Fluid oder der Level Set Methode. Die Grenzflächenrekonstruktion mittels der Volume of Fluid Methode gestaltet sich vor allem bei dreidimensionalen Simulationen als schwierig, fehleranfällig und daher ungenau. Dies führt zu Ungenauigkeiten in der Berechnung der lokalen Krümmung und somit zu teilweise hohen

Abweichungen in der Berechnung der Oberflächenspannungskräfte. Hierdurch kann keine exakte Simulation des Primärzerfalls erfolgen. Die Level Set Methode verletzt die Massenerhaltung. Ein weiterer Nachteil der gitterbasierten Berechnungsverfahren ist die numerische Diffusion von Diskontinuitäten, wie z. B. der Dichte und Viskosität an der Luft-Kraftstoff-Phasengrenzfläche. Mittels der SPH Methode kann die numerische Diffusion an den Phasengrenzflächen verhindert und so die Dichte- und Viskositätsdiskontinuität dargestellt werden. Die Erhaltungsgleichungen werden durch geeignete Formulierung der Approximationen nicht verletzt. Zudem entfällt die zeitintensive Gittergenerierung. Vor allem bei hochkomplexen Geometrien, wie im Fall eines Airblast-Zerstäubers, können aufgrund eines verzerrten Gitters Ungenauigkeiten in den nachfolgenden Berechnungen auftreten. Da bei der SPH Methode nur das Fluid - nicht die leeren Räume - diskretisiert werden muss, kann dies simulationsabhängig zu einer deutlichen Verringerung der Rechenzeiten führen.

2.4 Zielsetzung

Die exakte numerische Vorhersage des Primärzerfalls ist mit derzeitigen gitterbasierten Simulationen aufgrund der bereits genannten Nachteile der bestehenden Verfahren und der nicht vertretbaren bzw. verfügbaren Rechenkapazität nur eingeschränkt möglich. In Zukunft wird es aber unausweichlich numerischer Werkzeuge zur korrekten Vorhersage des Primärzerfalls bedürfen. Nur so können effizientere, umweltverträglichere und leistungsstärkere Triebwerke einer neuen Generation konzipiert werden.

Eine vielversprechende Alternative zu den gitterbasierten Verfahren ist die Lagrange'sche Smoothed Particle Hydrodynamics Methode. Bisherige auf diesem Ansatz beruhenden Arbeiten, wie im vorherigen Kapitel aufgeführt, liefern noch keine zufriedenstellenden Optionen zur Simulation der während des Primärzerfalls relevanten Effekte. Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit sollen am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) die Grundlagen eines CFD-Codes auf Basis der SPH Methode mit dem Ziel der numerischen Vorhersage des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen entwickelt werden. Dazu bedarf es der Identifizierung der im Kontext des Primärzerfalls relevanten strömungsmechanischen Effekte und daraufhin der Implementierung geeigneter Modelle zu deren exakter Wiedergabe. Anschließend erfolgt die Codevalidierung anhand von ausgesuchten Testfällen. Die Anforderungen an den Code richten sich im Rahmen dieser Arbeit nicht in erster Linie an die Optimierung der Laufzeit, sondern die korrekte numerische Vorhersage der physikalischen Phänomene, welche hinsichtlich der technisch relevanten Simulation eines luftgestützten Zerstäubers eine entscheidende Rolle spielen. Im Fokus steht die bis heute nicht mögliche exakte Simulation des Primärzerfalls. Auf längere Sicht soll so, auf Basis der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode, ein leistungsstarker Code geschaffen werden, der es ermöglicht einen virtuellen Zerstäuberprüfstand zu betreiben. Dadurch könnte der Auslegungs- und Optimierungsprozess von Zerstäubersystemen um ein vielfaches beschleunigt werden und deren Effizienz und Zuverlässigkeit deutlich gesteigert werden. Bestehende SPH Codes verfolgen nicht diese Zielsetzung und sind daher nicht darauf ausgelegt die entsprechenden Strömungsphänomene korrekt zu beschreiben.

Am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) steht bis dato eine Vielfalt an numerischen Codes für spezielle Anforderungen zu Verfügung. Hervorzuheben ist die Entwicklung eines Lagrange'schen Tropfenverfolgungsverfahrens (*LaDrop*). Sowohl die Interaktion von Flüssig- und Gasphase wie auch die Modellierung des Sekundärzerfalls durch geeignete Modelle ist möglich. Des Weiteren wird die Brennstoffverdunstung berücksichtigt. Tropfenstartbedingungen müssen anhand einer Größen- und Geschwindigkeitsverteilung im Raum vorgegeben werden. Der stromauf stattfindende Primärzerfall des Flüssigkeitsfilms ist somit nicht Gegenstand der Berechnungen. Zur numerischen Vorhersage des kompletten Zerstäubungsvorganges in einem Airblast-Zerstäuber, von der Düseninnenströmung über den Primär- bis zum Sekundärzerfall bei simultaner Kopplung zwischen Luft- und Brennstoffphase, ist daher noch ein geeignetes numerisches Verfahren zur Berechnung des Primärzerfalls notwendig. Die Grundlage zur Schließung dieser Lücke soll im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit geschaffen werden. Die Kopplung der genannten Berechnungswerkzeuge, wie beispielhaft in Abb. 2.13 skizziert, würde letztendlich die Generierung des virtuellen Zerstäuberprüfstands ermöglichen.

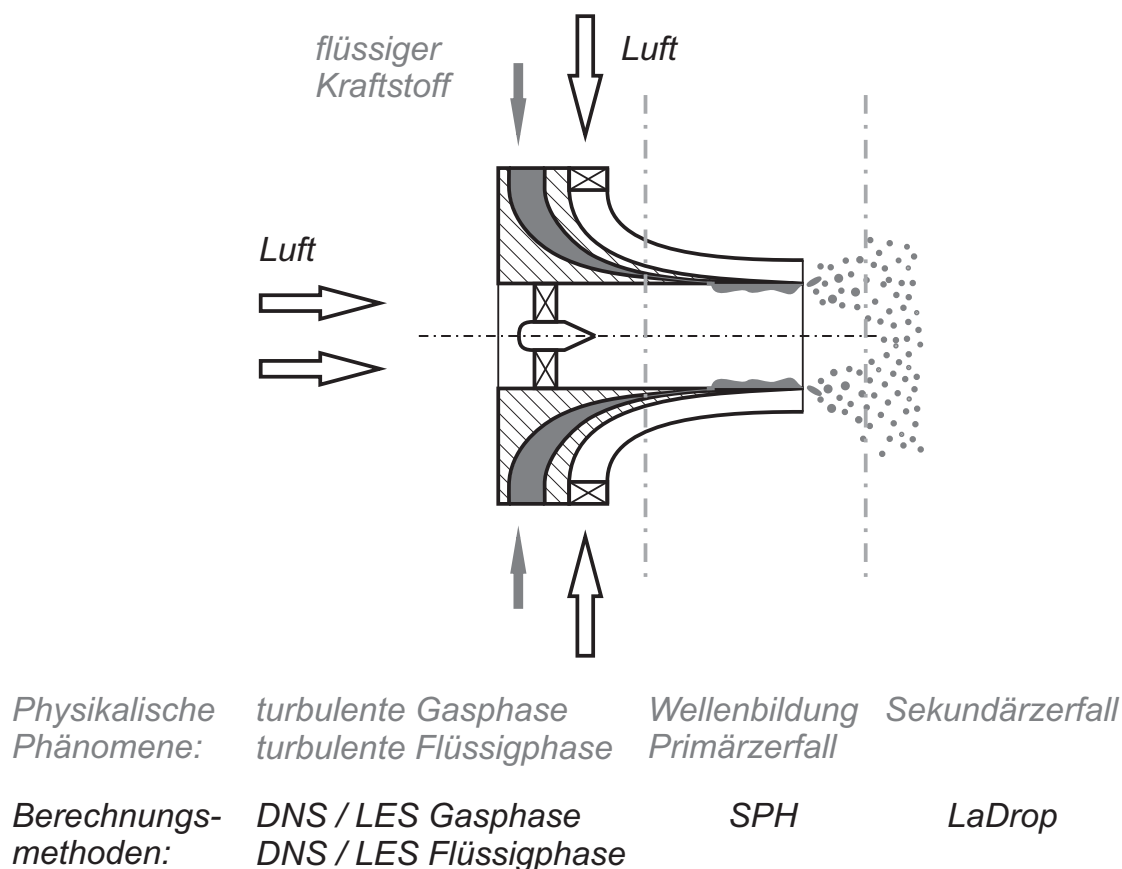


Abbildung 2.13: Einsatz der verschiedenen Berechnungsmethoden bei der numerischen Simulation eines Einspritzvorgangs mittels eines Airblast-Zerstäubers

Eine Möglichkeit zur effizienten Simulation des Primärzerfalls wäre das sogenannte *embedded SPH*. Im Bereich des Primärzerfalls (s. Abb. 2.13) könnte die freie Gasphasenströmung mittels einer Large Eddy Simulation modelliert werden, in unmittelbarer Umgebung der Ligamente und Primärtropfen wäre die SPH Methode einzusetzen. Voraussetzung hierfür ist die Gestaltung

einer entsprechenden Schnittstelle zwischen der SPH Methode und der gitterbasierten Large Eddy Simulation.

3 Strömungsmechanische Grundlagen

Ist die Annahme eines Kontinuums für ein Fluid gerechtfertigt, kann dessen zeitabhängiger Strömungszustand mit Hilfe der Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Ein beliebiges Fluid wird als Kontinuum betrachtet, wenn die charakteristische Länge des betrachteten Phänomens groß im Verhältnis zur mittleren freien Weglänge der Fluidmoleküle ist. Ein Maßstab hierfür ist die Knudsen-Zahl Kn , welche das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge der Moleküle λ zur charakteristischen Länge L beschreibt. Für $Kn = \frac{\lambda}{L} \ll 1$ ist die Kontinuumsbetrachtung gerechtfertigt (Brennen (2005)).

Die Navier-Stokes-Gleichungen und die Beschreibung der zeitlichen Dichte- und Energieänderung eines Fluids können aus den Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie eines Systems hergeleitet werden. Es ergeben sich somit fünf nichtlineare partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Zur Schließung des Gleichungssystems mit den sechs Unbekannten Dichte, Geschwindigkeitskomponenten, Energie und Druck wird eine Zustandsgleichung benötigt.

Dem im Rahmen dieser Arbeit implementierten SPH Formalismus liegt die Lagrang'sche Betrachtungsweise der Erhaltungsgleichungen der fluiddynamischen Größen Masse, Impuls und innere Energie zugrunde. Hierzu werden im Folgenden die Massenerhaltung, die Navier-Stokes-Gleichungen und die Energierhaltung nach dem totalen Differential der jeweiligen Strömungsgröße Φ aufgelöst, und somit sowohl die lokale zeitliche Änderung als auch die Advektion der Strömungsgröße im System berücksichtigt.

$$\underbrace{\frac{D\Phi}{Dt}}_{\text{totales Differential}} = \underbrace{\frac{\partial\Phi}{\partial t}}_{\text{lokale zeitliche Änderung}} + \underbrace{\vec{v} \nabla\Phi}_{\text{Advektion}} \quad (3.1)$$

3.1 Erhaltung der Masse

Allgemein gilt nach der Kontinuitätsgleichung folgender Zusammenhang für die lokale zeitliche Änderung der Dichte (Anderson (1995)).

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{v}) = 0 \quad (3.2)$$

Dies führt, unter Berücksichtigung der substantiellen Ableitung, zur Beschreibung der Änderung der Dichte nach der Zeit gemäß Gl. 3.3.

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla\vec{v}. \quad (3.3)$$

3.2 Erhaltung des Impulses

Die Änderung des Impulses beruht auf Druckänderungen, Reibungsvorgängen und der Einwirkung äußerer Kräfte, wie z. B. der Schwerkraft. Quellen und Senken sind bei dieser Darstellung

vernachlässigt. Unter Berücksichtigung von Gl. 3.2 für die Kontinuität lautet die substantielle Änderung der Geschwindigkeit, welche sich aus der Impulserhaltung ergibt:

$$\frac{D\vec{v}}{Dt} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\rho} + \vec{f}_{ext} \quad (3.4)$$

3.2.1 Reibungsterm

An dieser Stelle soll kurz auf den in der Impulserhaltung (Gl. 3.4) auftretenden Reibungsterm eingegangen werden. Als Ausgangspunkt hierzu dient die Definition des Spannungstensors mit Normal- und Schubspannungen nach Gl. 3.5.

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Bei der Betrachtung von technischen Systemen mit Hinblick auf die Primärzerstäubung am Austritt von luftgestützten Brennstoffeinspritzdüsen in Flugtriebwerken liegen die Newton'schen Fluide Luft und Kerosin vor. Für diese gilt nach Versteeg und Malalasekera (1995) ein proportionaler Zusammenhang zwischen der viskosen Spannung und der Deformationsrate, wodurch sich für den Reibungstensor die folgende Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsfeld ergibt.

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} u & \frac{\partial}{\partial x} v & \frac{\partial}{\partial x} w \\ \frac{\partial}{\partial y} u & \frac{\partial}{\partial y} v & \frac{\partial}{\partial y} w \\ \frac{\partial}{\partial z} u & \frac{\partial}{\partial z} v & \frac{\partial}{\partial z} w \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} u & \frac{\partial}{\partial y} u & \frac{\partial}{\partial z} u \\ \frac{\partial}{\partial x} v & \frac{\partial}{\partial y} v & \frac{\partial}{\partial z} v \\ \frac{\partial}{\partial x} w & \frac{\partial}{\partial y} w & \frac{\partial}{\partial z} w \end{bmatrix} + \lambda' \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v + \frac{\partial}{\partial z} w \right] & 0 & 0 \\ 0 & \left[\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v + \frac{\partial}{\partial z} w \right] & 0 \\ 0 & 0 & \left[\frac{\partial}{\partial x} u + \frac{\partial}{\partial y} v + \frac{\partial}{\partial z} w \right] \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Hierbei wird $\lambda' = -\frac{2}{3}\mu$ gesetzt (Schlichting und Gersten (2006)). Die einzelnen Komponenten τ_{ij} des Schubspannungstensors können folgendermaßen dargestellt werden

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial}{\partial x^i} v^j + \frac{\partial}{\partial x^j} v^i - \delta_{ij} \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right] \quad (3.7)$$

wobei die Indizes i, j den jeweiligen Einträgen in x -, y - und z -Koordinatenrichtung im Ortsvektor \vec{x} bzw. im Geschwindigkeitsvektor \vec{v} entsprechen.

Der Reibungsterm $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ in den Navier-Stokes-Gleichungen enthält partielle Differentiale zweiter Ordnung. Diese bedürfen einer besonderen Berücksichtigung bei der Umformung der Erhal-

tungsgleichungen in den Smoothed Particle Hydrodynamics Formalismus, welcher in Kapitel 4 näher erläutert wird.

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zx} \\ \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zy} \\ \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xz} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yz} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

3.3 Erhaltung der inneren Energie

Die Gesamtenergie eines Systems setzt sich aus der kinetischen und der inneren Energie zusammen. Unter Vernachlässigung von Quellen und Senken der inneren Energie u lässt sich deren Änderung in Lagrange'scher Form folgendermaßen formulieren:

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{p}{\rho} \cdot \nabla \vec{v} + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho} + \frac{1}{\rho} \cdot \Phi \quad (3.9)$$

Druckänderungen, Wärmeleitung im Fluid und Dissipation aufgrund von Reibungseffekten bestimmen die Änderungsrate der inneren Energie. Auch hierbei treten im Wärmeleitungsterm, basierend auf dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz, Differentiale zweiter Ordnung auf. Die Dissipationsfunktion Φ (s. Gl. 3.10) beschreibt die Umwandlung von mechanischer Energie in innere Energie aufgrund der Scherbewegung des Fluids (Batchelor (2000)) und liefert daher stets positive Beiträge zur Änderung der inneren Energie.

$$\begin{aligned} \Phi = & \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] \right. \\ & + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left. \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right\} \\ & - \frac{2}{3} \mu (\nabla \vec{v})^2 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Gemäß Liu und Liu (2007) kann der Dissipationsterm umformuliert werden. Somit lässt sich die substantielle Änderung der inneren Energie folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned} \frac{Du}{Dt} = & -\frac{p}{\rho} \cdot \nabla \vec{v} + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho} + \frac{1}{2\mu\rho} \left(\begin{aligned} & \tau_{xx} \cdot \tau_{xx} + 2 \cdot \tau_{xy} \cdot \tau_{xy} + 2 \cdot \tau_{xz} \cdot \tau_{xz} \\ & + \tau_{yy} \cdot \tau_{yy} + 2 \cdot \tau_{yz} \cdot \tau_{yz} \\ & + \tau_{zz} \cdot \tau_{zz} \end{aligned} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Hierbei gilt die Annahme eines Newton'schen Fluids mit der linearen Charakteristik $\boldsymbol{\tau} = \mu \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$ zwischen Schubspannung und Scherrate.

3.4 Zustandsgleichung

Zur Schließung des Gleichungssystems von sechs Unbekannten muss die thermische Zustandsgleichung gelöst werden. Diese stellt den thermodynamischen Zusammenhang zwischen den Größen Druck und Dichte dar. Eine kalorische Zustandsgleichung kann zusätzlich herangezogen werden, um die Relation zwischen innerer Energie und Temperatur zu beschreiben.

Für ideale Gase gilt der folgende Zusammenhang zwischen Druck p und Dichte ρ in Abhängigkeit der inneren Energie u :

$$p = (\kappa - 1) \cdot \rho \cdot u \quad (3.12)$$

Die Schallgeschwindigkeit c im Medium ist über die kalorische Zustandsgleichung

$$c = \sqrt{\kappa \cdot (\kappa - 1) \cdot u} \quad (3.13)$$

gegeben, da sie eine Funktion der Temperatur ist.

Im Hinblick auf die Numerik bedingt eine hohe Schallgeschwindigkeit c im Fluid einen kleinen Zeitschritt für instationäre Simulationen aufgrund der Stabilitätsbedingung durch die Courant-Zahl $CFL < 1$ (Anderson (1995)). Oft wird daher anstelle der physikalischen Schallgeschwindigkeit eine geringere, fiktive numerische Schallgeschwindigkeit angenommen. Diese erhöht die zulässige Zeitschrittweite, darf aber auf die relevanten zu simulierenden strömungsmechanischen Effekte keine Auswirkung haben. Andererseits darf zur Einhaltung der Inkompressibilitätsbedingung bzw. Limitierung der Dichteänderungen im Fluid unterhalb eines bestimmten Schwellwertes die numerische Schallgeschwindigkeit einen minimalen Grenzwert nicht unterschreiten (Morris et al. (1997)).

Die Annahme der Inkompressibilität für Fluide ist gerechtfertigt, wenn die Dichteänderungen im Medium unterhalb des Grenzwertes von z. B. $\frac{\Delta \rho}{\rho_0} < 1\%$ liegen. Die Dichteänderungen wiederum sind proportional zum Quadrat der Mach-Zahl M , wie aus der thermodynamischen Definition der Schallgeschwindigkeit nach Kabelac (1998) ersichtlich ist.

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (3.14)$$

Wird im Umkehrschluss die Geschwindigkeit akustischer Signale so gewählt, dass die Mach-Zahl $M \leq 0,1$ ist, kann dadurch eine geringe Dichteveriation $\leq 1\%$ gewährleistet und die Annahme der Inkompressibilität gerechtfertigt werden.

Die folgenden Zusammenhänge sollen dies verdeutlichen.

$$M^2 = \frac{v^2}{c^2} \propto \frac{\Delta \rho}{\rho} \leq 1\% = 0,01 \quad (3.15)$$

$$M = \frac{v}{c} \leq 0,1 \quad (3.16)$$

$$v \leq 0,1 \cdot c \quad (3.17)$$

$$c \geq 10 \cdot v \quad (3.18)$$

Liegt die Schallgeschwindigkeit über dem Grenzwert der zehnfachen Maximalgeschwindigkeit v , werden die Dichteänderungen theoretisch unter 1% limitiert.

4 Smoothed Particle Hydrodynamics

In diesem Kapitel wird auf die mathematischen Grundlagen der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode eingegangen. Darauf aufbauend erfolgt die Herleitung der diskretisierten fluiddynamischen Grundgleichungen, welche im Rahmen dieser Arbeit in den Code integriert wurden.

Die Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Methode ist ein gitterfreies Verfahren zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen in der Strömungsmechanik. Sie basiert auf der Lagrange'schen Formulierung der Erhaltungsgleichungen für die zu simulierenden Fluide. Neben den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie können auch weitere Transportgleichungen für Stoffgrößen, wie z. B. die Konzentration, mittels SPH beschrieben werden. Die Berechnung aller Größen erfolgt zeitabhängig.

4.1 Ortsdiskretisierung

Grundvoraussetzung für die Anwendung der SPH Methode, wie auch für jedes andere numerische Verfahren, ist die Überführung der räumlich kontinuierlichen Strömungsgrößen in eine räumlich diskrete Form. Hierzu wird das Fluid an einzelnen, beliebig im Raum verteilten Stützstellen diskretisiert. Im Vergleich zu gitterbasierten Methoden muss jedoch nur das Fluid, nicht das komplette Simulationsgebiet durch Stützstellen dargestellt werden. Dies kann fallabhängig eine enorme Einsparung an Rechenleistung für die nachfolgende Simulation bedeuten. Den diskreten Stützstellen oder auch sogenannten Partikeln werden neben den Größen Dichte ρ , Geschwindigkeit \vec{v} und innere Energie u , auch eine Masse m als Anteil an der Gesamtmasse des Fluids abhängig vom Volumen V , welches das Partikel repräsentiert, zugewiesen. Üblicherweise bleibt die Masse eines Partikels über die Zeit konstant, die Massen verschiedener Partikel können sich jedoch unterscheiden.

Jede beliebige Funktion im Raum $f(\vec{r})$ kann durch eine Faltung mit der Dirac-Funktion δ exakt wiedergegeben werden.

$$f(\vec{r}) = \int f(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \quad (4.1)$$

Zur Berechnung der Terme der Erhaltungsgleichungen, und den sich daraus ergebenden Änderungen der Strömungsgrößen, an einer Stützstelle wird eine Interpolation über benachbarte Stützstellen durchgeführt. Hierbei wird deren Einfluss abhängig von der Entfernung zur zentralen Stützstelle mittels einer Glättungsfunktion gewichtet.

Bei der Herleitung hat dies zur Folge, dass die Dirac-Funktion in Gl. 4.1 durch eine kompakte Glättungsfunktion W angenähert wird, um die integrale Interpolation der Funktion $f_i(\vec{r})$ über benachbarte Partikel zu ermöglichen.

$$f_i(\vec{r}) \cong \int f(\vec{r}') W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' \quad (4.2)$$

Die sogenannte Glättungslänge h beschreibt die Breite und somit indirekt den maximalen Einflussradius der Glättungsfunktion. Diese muss zur Erfüllung der mathematischen Exaktheit von Gleichung 4.2 folgenden Bedingungen genügen:

- Normierung: $\int W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' = 1$
- Kompaktheit: $W(\vec{r} - \vec{r}', h) = 0$ für $|\vec{r} - \vec{r}'| \geq q_{max}h$
- Grenzwertbetrachtung: $\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{r} - \vec{r}', h) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

Das Produkt $q_{max} \cdot h$ stellt den maximalen Einflussradius dar, wobei die Konstante q_{max} von der gewählten Glättungsfunktion abhängig ist. Diese Bedingungen sind keine hinreichenden Bedingungen für ein physikalisches Verhalten der Fluide bei der Berechnung strömungsmechanischer Phänomene (s. Kapitel 4.3).

Im nächsten Schritt wird die integral interpolierte räumliche Feldfunktion $f_i(\vec{r})$ zur numerischen Berechnung in eine diskrete Summeninterpolation $f_s(\vec{r})$ überführt. Hierbei ist im Folgenden der zu berechnende Funktionswert am Zentralpartikel mit dem Index a gekennzeichnet. Die Größen der benachbarten Stützstellen sind mit dem Index b versehen, wie in Abb. 4.1 verdeutlicht.

$$\begin{aligned} f_s(\vec{r}_a) &\cong \sum_b f(\vec{r}_b) W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h) V_b \\ &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f(\vec{r}_b) W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Das mit der Stützstelle assoziierte Volumen V_b ist durch die Partikelmasse m_b und die Partikeldichte ρ_b definiert.

Im Folgenden gilt = anstelle von \cong . Weiterhin ist in der Literatur (z.B. Monaghan (1988), Ott (1999), Randles und Libersky (1996)) die Schreibweise

$$\langle f \rangle_a = f_s(\vec{r}_a) \quad (4.4)$$

für eine approximierete Größe verbreitet, welche auch hier verwendet wird.

4.2 Räumliche Ableitungen

In den in Kapitel 3 dargestellten kontinuumsmechanischen Grundgleichungen zur Berechnung der Änderungsraten der Strömungsgrößen treten deren räumliche Gradienten auf.

Gradienten einer beliebigen räumlichen Funktion f können analog zu Gl. 4.3 in diskreter Form dargestellt werden. Hierbei ist die Ortsabhängigkeit des Gradienten unter bestimmten Voraussetzungen vollständig im Gradienten der Glättungsfunktion enthalten. Die Herleitung erfolgt wiederum aus der Darstellung des Gradienten als Approximation durch das Interpolationsintegral (analog zu Gl. 4.2) unter Berücksichtigung der Kettenregel der Differentiation.

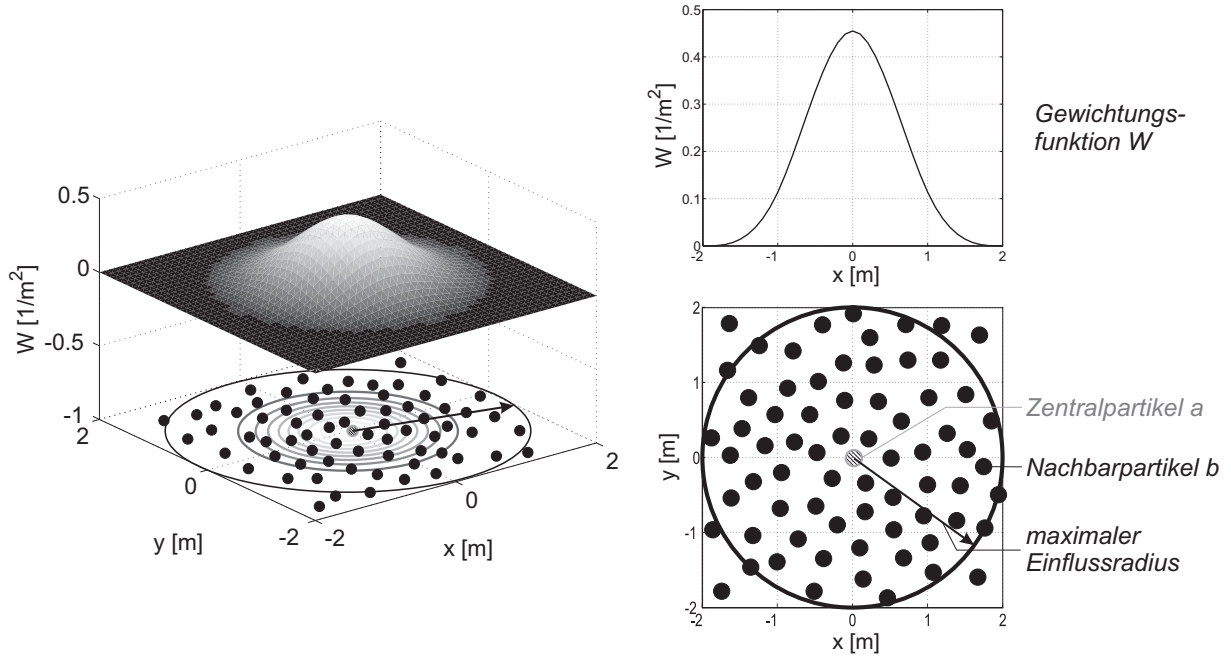


Abbildung 4.1: Zweidimensionale Interpolation für ein beliebiges Zentralpartikel (grau) mittels der Glättungsfunktion W

$$\begin{aligned}\nabla f_i(\vec{r}_a) &= \int (\nabla f(\vec{r}_b)) W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h) d\vec{r}_b \\ &= \int \nabla (f(\vec{r}_b) W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h)) d\vec{r}_b - \int f(\vec{r}_b) (\nabla W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h)) d\vec{r}_b\end{aligned}\quad (4.5)$$

Durch Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes auf den ersten Term der rechten Seite wird das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral transformiert.

$$\nabla f_i(\vec{r}_a) = \underbrace{\oint f(\vec{r}_b) W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h) \vec{n} dA}_{= 0 \text{ für Einflussgebiet} \in \text{Simulationsgebiet}} - \int f(\vec{r}_b) (\nabla W(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h)) d\vec{r}_b\quad (4.6)$$

Befindet sich das Interpolationsgebiet um den Zentralpartikel a vollständig innerhalb des diskretisierten Simulationsgebiets, so wird das Oberflächenintegral zu Null. Diese Vereinfachung ist somit für die Gradientenberechnung an allen Stützstellen, welche nicht nahe an freien Oberflächen liegen, gültig. Für Stützstellen in der Nähe von Rändern muss das Oberflächenintegral ausgewertet oder es müssen andere Methoden zur Randmodellierung (s. Kapitel 4.8) berücksichtigt werden.

Die Summenapproximation des Gradienten einer Funktion f am Partikel a wird somit durch eine mit dem Gradienten der Glättungsfunktion gewichtete Interpolation über die Funktionswerte f_b an den benachbarten Stützstellen b berechnet.

$$\begin{aligned}\langle \nabla f \rangle_a &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f(\vec{r}_b) \nabla W_a(\vec{r}_a - \vec{r}_b, h) \\ &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f_b \nabla W_{ab}\end{aligned}\quad (4.7)$$

Hierbei erscheint der Gradient der Glättungsfunktion bezogen auf das Zentralpartikel a .

Gleichung 4.7 erfüllt jedoch nicht die Symmetrieeigenschaft. Um das Dritte Newton'sche Axiom *actio = reactio* nicht zu verletzen und die Genauigkeit der Summeninterpolation auch bei ungeordneten Partikelverteilungen zu erhöhen (Monaghan (1992)), wird sich folgender Identitäten, welche durch die Ketten- und Quotientenregel gegeben sind, bedient.

$$\rho \nabla f = \nabla(\rho f) - f \nabla \rho \quad (4.8)$$

$$\frac{\nabla f}{\rho} = \nabla \left(\frac{f}{\rho} \right) + \frac{f}{\rho^2} \nabla \rho \quad (4.9)$$

Neben weiteren Möglichkeiten der Umformung, soll an dieser Stelle noch die Darstellung des Gradienten einer Funktion in Zusammenhang mit der Einheitsmatrix \mathbf{I} nach Chaniotis et al. (2002) erwähnt werden. Diese Formen werden in der vorliegenden Arbeit angewendet.

$$\mathbf{I} \nabla f = \nabla(\mathbf{I} f) - f \nabla \mathbf{I} \quad (4.10)$$

$$\frac{\nabla f}{\mathbf{I}} = \nabla \left(\frac{f}{\mathbf{I}} \right) + \frac{f}{\mathbf{I}^2} \nabla \mathbf{I} \quad (4.11)$$

Werden jeweils die Terme der rechten Seite der Identitäten (Gl. 4.8 - 4.11) in die nicht symmetrische Darstellung nach Gl. 4.7 eingesetzt, so werden die folgenden Summeninterpolationen erhalten. Hierbei gilt $\mathbf{I} = 1$.

$$\begin{aligned} \langle \rho \nabla f \rangle_a &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \rho_b f_b \nabla W_{ab} - f_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \rho_b \nabla W_{ab} \\ &= \sum_b m_b (f_b - f_a) \nabla W_{ab} \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\nabla f}{\rho} \right\rangle_a &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \frac{f_b}{\rho_b} \nabla W_{ab} + \frac{f_a}{\rho_a} \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \rho_b \nabla W_{ab} \\ &= \sum_b m_b \left(\frac{f_b}{\rho_b^2} + \frac{f_a}{\rho_a^2} \right) \nabla W_{ab} \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle_a &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f_b \nabla W_{ab} - f_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \nabla W_{ab} \\ &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (f_b - f_a) \nabla W_{ab} \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle_a &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f_b \nabla W_{ab} + f_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \nabla W_{ab} \\ &= \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (f_b + f_a) \nabla W_{ab} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Somit setzen sich die Summanden der rechten Seite aus paarweise auftretenden Wechselwirkungen zusammen. Die Gln. 4.13 und 4.15 angewendet auf den Druckterm in der Impulserhaltung

erfüllen die Symmetriebedingung. Dies kann anhand von Gl. 4.13 am Beispiel der Kraft, welche zwei Partikel a und b aufeinander ausüben, anschaulich gezeigt werden. Hierbei soll die Reibung in erster Näherung vernachlässigt werden und die Euler-Gleichung zur Berechnung des Impulses ausreichen.

Kraft von Partikel b auf Partikel a :

$$F_{ab} = m_a \cdot \vec{a}_a = m_a \cdot \frac{d\vec{v}}{dt}_a = m_a \cdot \left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_a = -m_a \cdot m_b \left(\frac{p_b}{\rho_b^2} + \frac{p_a}{\rho_a^2} \right) \nabla W_{ab} \quad (4.16)$$

Kraft von Partikel a auf Partikel b :

$$F_{ba} = m_b \cdot \vec{a}_b = m_b \cdot \frac{d\vec{v}}{dt}_b = m_b \cdot \left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_b = -m_b \cdot m_a \left(\frac{p_a}{\rho_a^2} + \frac{p_b}{\rho_b^2} \right) \nabla W_{ba} \quad (4.17)$$

Unter Berücksichtigung der Symmetrie der Glättungsfunktion gilt $\nabla W_{ab} = -\nabla W_{ba}$. Somit ist nach den Gl. 4.16 und 4.17 das Dritte Newton'sche Axiom $F_{ab} = -F_{ba}$ erfüllt. Diese Betrachtung kann analog für Gl. 4.15 durchgeführt werden. Es können beliebige weitere symmetrische Formen aufgestellt werden (Monaghan (1992)). Diese finden im Rahmen dieser Arbeit jedoch keine Anwendung und werden daher nicht weiter vertieft.

Unter Annahme der Inkompressibilität ($\rho = const$) bei Einphasenströmungen sind die Gln. 4.12 und 4.14 identisch. Diese liefern bei konstantem Druck zwar richtigerweise keine auftretenden Kräfte, wie in Monaghan (1992) erwähnt, jedoch erfüllen sie die Reziprozität im Falle des Auftretens von Druckunterschieden ($F_{ab} = -F_{ba}$) nicht und garantieren somit keine Impulserhaltung (Colagrossi (2003)). Aus diesem Grund werden die Formulierungen nach den Gln. 4.12 und 4.14 nicht für die Berechnung der Druckterme in den Navier-Stokes-Gleichungen herangezogen.

4.3 Glättungsfunktionen

Wie in Kapitel 4.1 bereits dargelegt, ist die grundlegende Interpolationseigenschaft der SPH Methode durch Gewichtung der Einflussgrößen der benachbarten Stützstellen auf die Glättungsfunktion W zurückzuführen. Neben den bereits genannten Bedingungen der Normierung, der Kompaktheit und des Grenzwertverhaltens für $h \rightarrow 0$ kommen weitere Anforderungen an die Glättungsfunktion hinzu, um die mathematische und physikalische Konsistenz der Interpolation zu gewährleisten (Liu et al. (2003)).

1. Normierung: $\int W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' = 1$
2. Kompaktheit: $W(\vec{r} - \vec{r}', h) = 0$ für $|\vec{r} - \vec{r}'| \geq q_{max}h$
3. Grenzwertbetrachtung: $\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{r} - \vec{r}', h) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$
4. Positivität: $W(\vec{r} - \vec{r}', h) \geq 0$ für $|\vec{r} - \vec{r}'| \leq q_{max}h$

5. Symmetrie: $W(\vec{r} - \vec{r}', h) = W(\vec{r}' - \vec{r}, h)$
6. Monotonie (streng fallend): $W_1(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1, h) > W_2(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2, h)$ für $|\vec{r}_1 - \vec{r}'_1| < |\vec{r}_2 - \vec{r}'_2|$
7. Stetigkeit: $\lim_{\vec{x} \rightarrow \vec{x}_0} [W(\vec{x}, h)] = W(\vec{x}_0, h)$ für $\vec{x} = (\vec{r} - \vec{r}')$

Die Glättungsfunktionen werden über den dimensionslosen Abstand

$$q = \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{h} = \frac{r}{h} \quad (4.18)$$

definiert. Beispielhaft sind in Abb. 4.2 die von Monaghan (1985) eingeführte kubische Glättungsfunktion und ihr Gradient im eindimensionalen Raum, definiert durch Gl. 4.19 und 4.20, dargestellt.

$0 \leq q \leq 1$:

$$\begin{aligned} W(q, h) &= \alpha \left[\frac{2}{3} - q^2 + \frac{1}{2}q^3 \right] \\ \nabla W(q, h) &= \alpha \left[-2q + \frac{3}{2}q^2 \right] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|h} \end{aligned}$$

$1 < q \leq 2$:

$$\begin{aligned} W(q, h) &= \alpha \frac{1}{6} [2 - q]^3 \\ \nabla W(q, h) &= -\frac{1}{2} \alpha [2 - q]^2 \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|h} \end{aligned}$$

$2 < q$:

$$\begin{aligned} W(q, h) &= 0 \\ \nabla W(q, h) &= 0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\alpha_{1D} = \frac{1}{h} \quad \alpha_{2D} = \frac{15}{7\pi h^2} \quad \alpha_{3D} = \frac{3}{2\pi h^3} \quad (4.20)$$

Der Vorfaktor α dient zur Normierung der Glättungsfunktion und variiert daher für den ein-, zwei- und dreidimensionalen Fall.

Weitere implementierte Glättungsfunktionen sind im Anhang A.1 zu finden. Deren maximale Einflussradien reichen vom 1-fachen der Glättungslänge im Falle der Lucy Glättungsfunktion (Lucy (1977)) bis hin zum 3-fachen von h für die Gauß (Gingold und Monaghan (1977)) und Quintische (Morris et al. (1997)) Glättungsfunktion. Jeder Funktion ist ein maximaler dimensionsloser Einflussradius $q_{max} = \frac{r_{max}}{h}$, wie Tabelle 4.1 zu entnehmen ist, zugeordnet.

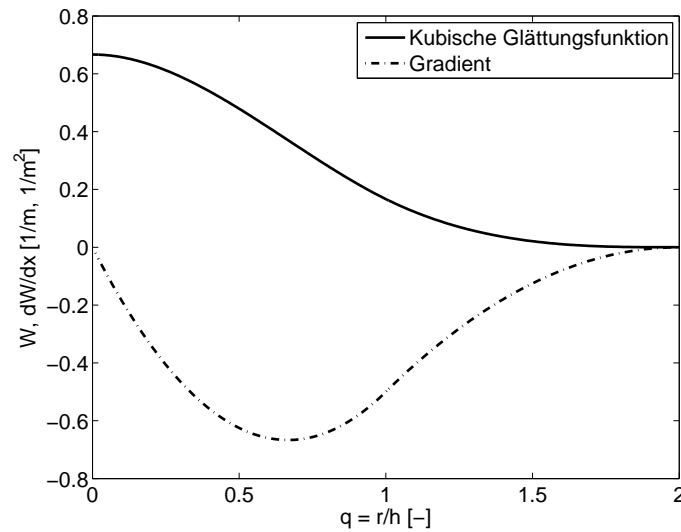
Abbildung 4.2: Eindimensionale kubische Glättungsfunktion ($h = 1m$)

Tabelle 4.1: Maximale dimensionslose Einflussradien der Glättungsfunktionen

| Glättungsfunktion | q_{max} |
|-------------------|-----------|
| Kubisch | 2 |
| Gauss | 3 |
| Quintisch | 3 |
| Quartisch | 2,5 |
| Lucy | 1 |
| Wendland | 2 |

Somit ergeben sich bei konstanter Glättungslänge h unterschiedliche maximale Einflussradien für die einzelnen Glättungsfunktionen, wodurch sich die minimal mögliche Auflösung der in der Simulation auftretenden Effekte ändert. Wird hingegen bei konstantem Partikelabstand Δx der maximale Einflussradius r_{max} für alle Glättungsfunktionen konstant gehalten - mittels variierender Glättungslänge h -, so bleibt die Auflösung unabhängig von der Wahl der Glättungsfunktion dieselbe, jedoch ändert sich die Approximationsgenauigkeit aufgrund der zugrundeliegenden Spline-Definitionen. Dies ist in den Abbn. 4.3 und 4.4 für den ein- und zweidimensionalen Fall verdeutlicht. Hierbei ist der relative Fehler der Summenapproximation eines Funktionswertes nach Gl. 4.3 an einem Partikel, mit einer ausreichenden Anzahl Nachbarstützstellen um Randeffekte zu vermeiden, über das Verhältnis von maximalem Einflussradius r_{max} zu Partikelabstand Δx aufgetragen. Der relative Fehler sei folgendermaßen definiert:

$$\text{Relativer Fehler} = \frac{f_{s.approx} - f}{f} \quad (4.21)$$

Es zeigt sich, dass die Approximation einen umso geringeren relativen Fehler aufweist, je größer der Einflussradius im Verhältnis zum Partikelabstand ist, was gleichzeitig eine erhöhte Stützstel-

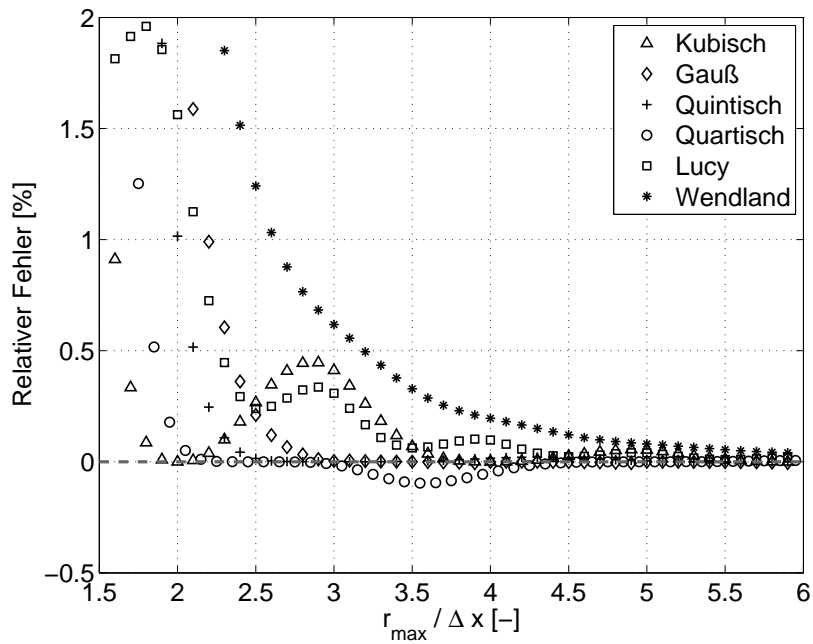


Abbildung 4.3: Relativer Fehler der Summenapproximation einer konstanten Funktion für verschiedene Glättungsfunktionen in Abhängigkeit der Glättungslänge h (1D)

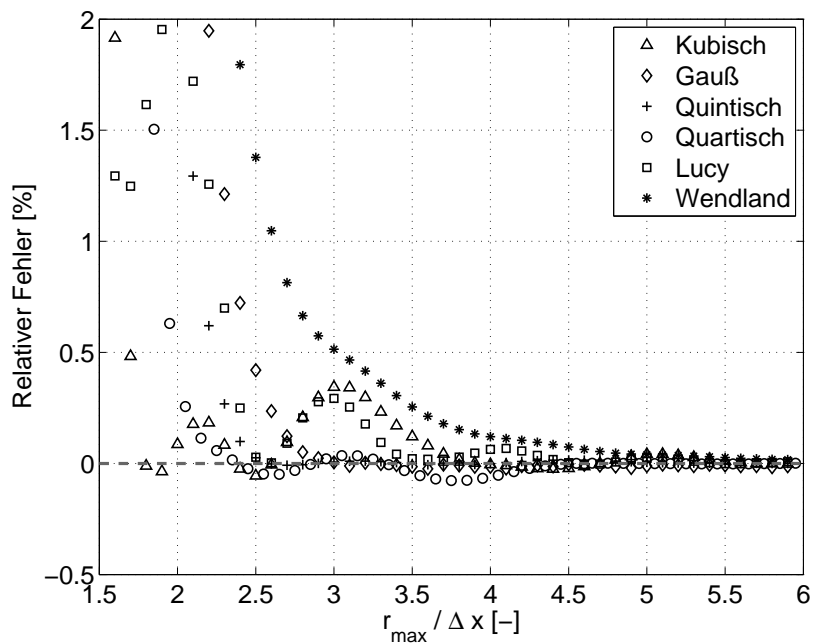


Abbildung 4.4: Relativer Fehler der Summenapproximation einer konstanten Funktion für verschiedene Glättungsfunktionen in Abhängigkeit der Glättungslänge h (2D)

lenanzahl und somit auch einen höheren Rechenaufwand zur Folge hat. Zum einen kann ein größerer Einflussradius bei festgelegter Glättungsfunktion durch eine Erhöhung der Glättungs-

länge erzielt werden. Zum anderen kann der Einflussradius bei konstanter Glättungslänge durch die Wahl einer Glättungsfunktion mit größerem q_{max} (s. Tab. 4.1) erweitert werden. Es ist zu beachten, dass die kleinstmögliche Auflösung mit Zunahme der Glättungslänge und somit des maximalen Einflussradiuses größer wird.

Die Gauß und die Quintische Glättungsfunktion weisen die geringsten Schwankungen in Abhängigkeit des maximalen Einflussradiuses r_{max} auf. Der relative Approximationsfehler liegt ab einem Verhältnis von ca. $\frac{r_{max}}{\Delta x} > 2,5$ unter 0,25%. Die Wendland Funktion fünfter Ordnung (Wendland (1995)) weist keine Schwankungen in Abhängigkeit von $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ auf. Der Approximationsfehler ist monoton fallend bei Zunahme des Einflussradius. Erst für $\frac{r_{max}}{\Delta x} > 4$ wird eine relative Abweichung von 0,25% unterschritten. Bei den übrigen Glättungsfunktionen wird der relative Fehler schon ab einem geringeren Verhältnis $\frac{r_{max}}{\Delta x}$, d.h. bei weniger Nachbarn, klein. Im weiteren Verlauf, welcher z. B. auch eine Änderung der Partikelverteilung bzw. eine Variation in Δx repräsentieren kann, treten Schwankungen auf.

Allgemein gilt, je höher die Ordnung der Glättungsfunktion, desto höher ist die Genauigkeit der Interpolationsapproximation (Crespo (2008)). Es lässt sich daraus schließen, dass die Gauß und Quintische Glättungsfunktion im eindimensionalen Fall ab einer Anzahl von vier Nachbarstützstellen ($\hat{=} \frac{r_{max}}{\Delta x} = 2,5$) die stabilsten und genauesten Varianten zur Ermittlung der Summenapproximationen bei vertretbarem Rechenaufwand bieten. Analog sind dies im zwei- und dreidimensionalen Fall 20 bzw. 80 benachbarte Stützstellen. Der zweidimensionale Fall ist in Abb. 4.5 veranschaulicht.

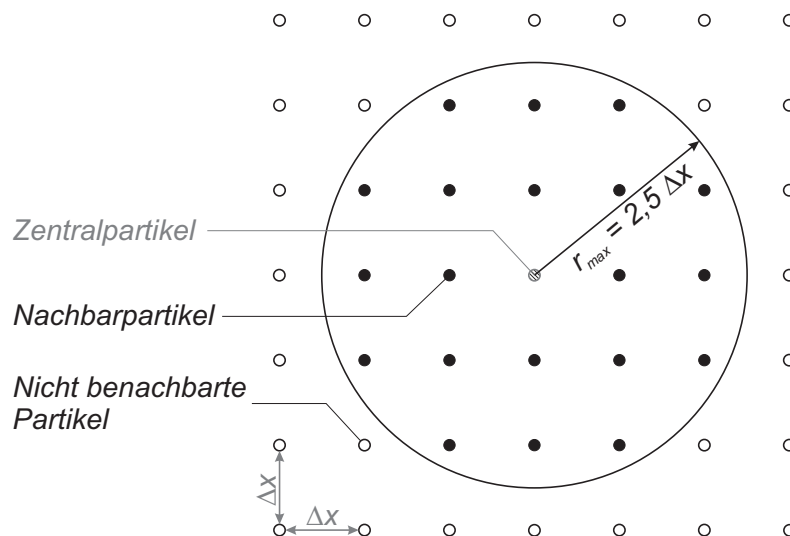


Abbildung 4.5: Benachbarte Stützstellen im zweidimensionalen Fall für einen maximalen Einflussradius von $r_{max} = 2,5 \cdot \Delta x$

Ein ähnliches Einschwingverhalten des relativen Fehlers als Funktion von $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ weisen auch die Approximationen im dreidimensionalen Fall auf (Braun (2010)).

Der Einfluss der Wahl der Glättungsfunktion sowie der Anzahl der benachbarten Stützstellen auf das Simulationsergebnis wird in Kapitel 6.1.2 anhand des Testfalls der Kavitätsströmung im Detail erörtert. Die Genauigkeit der Simulationen bei einer stochastischen Stützstellenverteilung

wird für den Testfall der Couette Strömung und des Taylor-Green-Wirbels (s. Kapitel 6.1.3 und 6.1.4) diskutiert.

4.4 Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen

Im Rahmen der SPH Methode werden die in Kapitel 3 aufgeführten Erhaltungsgleichungen nach den zuvor genannten Schemata in eine diskrete Form zur weiteren numerischen Berechnung überführt. Wie bei der Herleitung der SPH Approximationen bereits aufgeführt, bestehen für die Diskretisierung der einzelnen Terme jeweils mehrere Möglichkeiten.

4.4.1 Erhaltung der Masse

Grundsätzlich lassen sich zwei Ansätze zur Darstellung der Massenerhaltung, wie von Monaghan (1992) und Liu und Liu (2007) diskutiert, formulieren. Bei Ersterem wird die Dichte ρ direkt anstelle von f in Gl. 4.3 eingesetzt. Die Dichte am Partikel a berechnet sich aus der Verteilung der benachbarten Massepunkte im Raum.

$$\langle \rho \rangle_a = \sum_b m_b W_{ab} \quad (4.22)$$

Die Gesamtmasse m im System bleibt bei diesem Ansatz exakt erhalten, wenn weder Quellen noch Senken im Strömungsgebiet vorhanden sind und jedem Partikel eine über die Zeit konstante Masse zugewiesen ist. Die Dichte im Rechengebiet muss nicht a priori definiert werden, jedoch muss vor der Berechnung aller weiteren Terme der Erhaltungsgleichungen die Dichteinterpolation erfolgen. Nachteilig gestaltet sich in diesem Fall die Simulation freier Oberflächen, da an diesen aufgrund der verringerten Partikelanzahl die Dichte in Normalenrichtung zur Oberfläche hin kontinuierlich abnimmt. Das nicht diskretisierte Gebiet stellt sozusagen ein Vakuum dar. Analog dazu werden Dichtediskontinuitäten, wie sie zwischen verschiedenen Fluiden in Mehrphasenströmungen auftreten, über einen gewissen Bereich verschmiert. Des Weiteren kann es durch ungeordnete Partikelverteilungen zu Dichteschwankungen im Fluid kommen.

Durch Normierung von Gl. 4.22, bzw. die Anwendung des sogenannten Shepard-Filters, wie von Gesteira et al. (2010) beschrieben, kann die Dichte in den Randbereichen und bei ungeordneter Partikelverteilung unter bestimmten Voraussetzungen genauer wiedergegeben werden.

Die Normierungsbedingung aus Kapitel 4.1 lässt sich in diskreter Form folgendermaßen darstellen:

$$\sum_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab} = 1 \quad (4.23)$$

Die Dichte wird nun als normierte Massenverteilung berechnet und somit die Dichteabnahme hin zu freien Oberflächen vermieden.

$$\langle \rho \rangle_a = \frac{\sum_b m_b W_{ab}}{\sum_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}} \quad (4.24)$$

Die alternative Darstellung der Kontinuitätsgleichung führt über die direkte Berechnung der Dichteänderungsrate nach Gl. 3.2. Hierbei wird die rechte Seite dieser Gleichung nach der symmetrisierten Form der Gradientenapproximation (Gl. 4.12) ermittelt.

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{D\rho}{Dt} \right\rangle_a &= \langle -\rho \nabla \vec{v} \rangle_a \\
 &= -\sum_b m_b (\vec{v}_b - \vec{v}_a) \nabla W_{ab} \\
 &= \sum_b m_b (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab}
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Die Dichte muss vor Beginn der Rechnung im gesamten Fluid initialisiert werden. Im weiteren Verlauf der Simulation kann die Berechnung der Änderungsrate der Dichte simultan zur Berechnung der Änderungsraten von Geschwindigkeit aus der Impulserhaltung und innerer Energie aus der Energierhaltung erfolgen. Eine Dichteabnahme hin zur freien Oberflächen bzw. eine Verschmierung der Dichtediskontinuität über die Grenzfläche hinweg im Fall eines Mehrphasensystems wird mit der Formulierung nach Gl. 4.25 vermieden. Ein Nachteil ist, dass die Masse nicht exakt erhalten wird (Morris (1996)).

Analog hierzu kann die Herleitung über die symmetrisierte Form nach Gl. 4.14 erfolgen. Diese erweist sich laut Colagrossi und Landrini (2003) bei der Berechnung von Mehrphasenströmungen mit hohen Dichtegradienten als vorteilhaft bzw. numerisch stabiler.

Die aufgeführten Modellansätze wurden je nach Testfall entsprechend eingesetzt. Details dazu werden in Kapitel 6 näher erläutert.

4.4.2 Erhaltung des Impulses

Um die Änderungsraten der Geschwindigkeitskomponenten numerisch berechnen zu können, werden die Terme der rechten Seite der Impulserhaltung nach Gl. 3.4 auf Basis der symmetrischen Summationsinterpolationen diskretisiert.

$$\left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_a = \left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_a + \left\langle \frac{\nabla \cdot \tau}{\rho} \right\rangle_a + \left\langle \vec{f}_{ext} \right\rangle_a \tag{4.26}$$

Druckterm

Der Druckgradient verursacht eine Beschleunigung oder Verzögerung des Fluids und trägt zur Impulsänderung im Medium bei. Er lässt sich mittels der zuvor aufgezeigten Ansätze auf unterschiedliche Weise diskretisieren. Die hier genannten Möglichkeiten sind allesamt im Code implementiert und können in Abhängigkeit der zu simulierenden Phänomene ausgewählt werden.

1. Symmetrische Diskretisierung nach Gl. 4.13:

$$\left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_a = -\sum_b m_b \left(\frac{p_b}{\rho_b^2} + \frac{p_a}{\rho_a^2} \right) \nabla W_{ab} \quad (4.27)$$

Diese Form des Druckgradienten erweist sich als stabil für Einphasenströmungen oder Mehrphasenströmungen mit geringen Dichteunterschieden der Fluide.

2. Symmetrische Diskretisierung nach Gl. 4.14:

$$\left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_a = -\frac{1}{\rho_a} \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (p_b - p_a) \nabla W_{ab} \quad (4.28)$$

Die Berechnung des Druckgradienten aufgrund der Differenzenbildung ist unabhängig vom Umgebungsdruck (Morris (1996)). Bei konstantem Druck im Fluid treten keine Kräfte auf, wodurch diese Formulierung sehr gute Stabilitätseigenschaften vor allem hinsichtlich der Stützstellenanordnung aufweist. Es können Berechnungen mit freien Oberflächen auf Basis von Absolutdrücken durchgeführt werden. Jedoch bleibt bei Anwendung dieser Gleichung der Gesamtimpuls nicht exakt erhalten (s. Kapitel 4.2).

3. Symmetrische Diskretisierung nach Gl. 4.15:

$$\left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_a = -\frac{1}{\rho_a} \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (p_b + p_a) \nabla W_{ab} \quad (4.29)$$

Dieser Ansatz eignet sich zur Berechnung von Mehrphasenströmungen mit Fluiden stark unterschiedlicher Dichte (Colagrossi und Landrini (2003)). Die Formulierung ist nach Bonet und Lok (1999) konsistent mit der Berechnung der Dichteänderungsrate nach der Kontinuitätsgleichung 4.25. Die Reziprozität wird erfüllt.

Dissipationsterm

Die Dissipation, welche die Geschwindigkeitsänderung der Partikel bedingt, ist im Gradienten des Schubspannungstensors τ verankert. Für den Schubspannungstensor gilt die Annahme eines Newton'schen Mediums, d.h. es besteht ein linearer Zusammenhang zwischen Schubspannung und Scherrate bzw. Geschwindigkeitsgradient senkrecht zur Strömungsrichtung. Somit ergeben sich Ableitungen zweiter Ordnung. Deren Berechnung mittels des SPH Verfahrens bei expliziter Verwendung von Ableitungen zweiter Ordnung der Glättungsfunktion kann zu Instabilitäten und Ungenauigkeiten, besonders bei ungeordneter Partikelverteilung, führen (Brookshaw (1985)) und ist daher nicht geeignet. An dieser Stelle ist es möglich, entweder zweimal eine Differentiation erster Ordnung durchzuführen oder ein entsprechendes Viskositätsmodell zu verwenden.

Die explizite Berechnung des Dissipationsterms erfordert zwei Interpolationsschritte. Die symmetrische Diskretisierung nach Gl. 4.12 der Komponenten τ_{ij} des Schubspannungstensors

(Gl. 3.7) führt zu folgender Summeninterpolation für das Zentralpartikel a :

$$\begin{aligned} \langle \tau_{ij} \rangle_a &= \frac{\mu_a}{\rho_a} \left[\sum m_b (v_b^j - v_a^j) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x^i} \right. \\ &+ \sum m_b (v_b^i - v_a^i) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x^j} \\ &\left. - \delta_{ij} \frac{2}{3} \sum m_b (\vec{v}_b - \vec{v}_a) \nabla W_{ab} \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

Bei Diskretisierung nach Gl. 4.14 wird anstatt der Dichte des Zentralpartikels ρ_a die Dichte der benachbarten Stützstellen ρ_b in die Summationen einbezogen.

$$\begin{aligned} \langle \tau_{ij} \rangle_a &= \mu_a \left[\sum \frac{m_b}{\rho_b} (v_b^j - v_a^j) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x^i} \right. \\ &+ \sum \frac{m_b}{\rho_b} (v_b^i - v_a^i) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x^j} \\ &\left. - \delta_{ij} \frac{2}{3} \sum \frac{m_b}{\rho_b} (\vec{v}_b - \vec{v}_a) \nabla W_{ab} \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

Im Falle von inkompressiblen Einphasenströmungen sind die resultierenden diskreten Summationen identisch. Die Symmetrie des Schubspannungstensors kann ausgenutzt werden, um den Rechenaufwand zu reduzieren.

Im zweiten Schritt werden die Komponenten des Quotienten aus Divergenz des Schubspannungstensors und Dichte, wie er als Term in der Impulserhaltungsgleichung 3.4 auftritt, berechnet.

$$\left\langle \frac{\nabla \cdot \tau}{\rho} \right\rangle_a = \left\langle \frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zx} \\ \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zy} \\ \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xz} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yz} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zz} \end{bmatrix} \right\rangle_a = \left\langle \begin{pmatrix} \frac{T_x}{\rho} \\ \frac{T_y}{\rho} \\ \frac{T_z}{\rho} \end{pmatrix} \right\rangle_a \quad (4.32)$$

Nach Gl. 4.13 ergeben sich die Komponenten aus Gl. 4.32 mit $j = x, y, z$ wie folgt:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{T_j}{\rho} \right\rangle_a &= \sum_b m_b \left(\frac{\tau_{xj,a}}{\rho_a^2} + \frac{\tau_{xj,b}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \\ &+ \sum_b m_b \left(\frac{\tau_{yj,a}}{\rho_a^2} + \frac{\tau_{yj,b}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y} \\ &+ \sum_b m_b \left(\frac{\tau_{zj,a}}{\rho_a^2} + \frac{\tau_{zj,b}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z} \\ &= \sum_b m_b \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\tau_{ij,a}}{\rho_a^2} + \frac{\tau_{ij,b}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x^i} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Des Weiteren kann die Diskretisierung der Komponenten des Reibungsterms auch nach Gl. 4.15, analog zur Berechnung des Druckterms (Gl. 4.29), erfolgen.

Neben der expliziten Diskretisierung in zwei Schritten, kann durch die Verwendung von Modelltermen die Rechenzeit deutlich verringert werden, da die Berechnung verschachtelter Summationen entfällt.

Das von von Neumann und Richtmyer (1950) eingeführte künstliche Viskositätsmodell zur numerischen Simulation von Verdichtungsstößen mittels gitterbasierter Verfahren wurde durch Monaghan und Gingold (1983) für die SPH Methode übernommen und weiterentwickelt (Monaghan (1992)). Das Auftreten eines Verdichtungsstoßes in einem Medium entspricht in der Realität physikalisch nicht einer scharfen Diskontinuität, sondern einer Transition über wenige mittlere freie Weglängen des Mediums (Liu und Liu (2007)). Normalerweise beträgt die Auflösung numerischer Methoden bzw. der Abstand der Diskretisierungspunkte im Rechengebiet mehr als nur wenige mittlere freie Weglängen aufgrund des ansonsten unvermeidbar hohen Rechenaufwandes. Daher wird in der Numerik eine Stoßfront mathematisch als eine Fläche dargestellt, an welcher die physikalischen Größen, wie Dichte, Temperatur und Druck sich sprunghaft ändern (von Neumann und Richtmyer (1950)). Zur schrittweisen numerischen Lösung des Systems der partiellen Differentialgleichungen, welche die Strömung beschreiben, werden an dieser Stelle Randbedingungen benötigt. Diese wiederum sind vom Strömungszustand abhängig und somit vorab nicht bekannt. Bei Berücksichtigung dissipativer Effekte durch Viskosität und Wärmeleitung wird die mathematische Fläche, an welcher der Stoß und somit die diskontinuierliche Änderung der physikalischen Parameter auftritt, auf einen schmalen Stoßbereich mit finiter Dicke über mehrere Interpolationspunkte ausgedehnt. Über diesen Bereich hinweg ändern sich nun Dichte, Temperatur und Druck kontinuierlich. In Abb. 4.6 ist dieser Sachverhalt veranschaulicht.

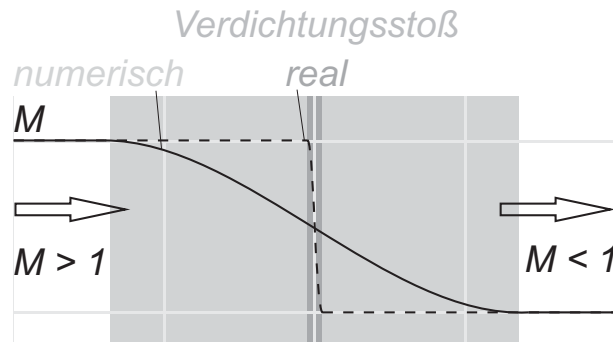


Abbildung 4.6: Verdichtungsstoß in der Realität und in der numerischen Darstellung

Diese zusätzliche Dissipation und Wärmeleitung über die Stoßfront ist nach Monaghan (1994) durch folgenden Term - aus Konsistenzgründen (Monaghan (1985)) sowohl in der Impuls- wie auch in der Energieerhaltungsgleichung - gegeben:

$$\Pi_{ab} = \begin{cases} \frac{-\alpha \bar{c}_{ab} \mu_{ab} + \beta \mu_{ab}^2}{\bar{\rho}_{ab}} & , \vec{v}_{ab} \cdot \vec{r}_{ab} < 0 \\ 0 & , \vec{v}_{ab} \cdot \vec{r}_{ab} > 0 \end{cases} \quad (4.34)$$

mit

$$\mu_{ab} = \frac{h \vec{v}_{ab} \cdot \vec{r}_{ab}}{\vec{r}_{ab}^2 + \eta^2} \quad (4.35)$$

Die Parameter α und β sind an die jeweilige Simulation anzupassende Konstanten. \bar{c}_{ab} und $\bar{\rho}_{ab}$ ergeben sich als mittlerer Wert der Schallgeschwindigkeiten bzw. der Dichten der beiden betrach-

teten Partikel a und b . $\vec{v}_{ab} = \vec{v}_a - \vec{v}_b$ und $\vec{r}_{ab} = \vec{r}_a - \vec{r}_b$ stellen die vektoriellen Geschwindigkeits- bzw. Ortsdifferenzen der Partikel dar.

Aus Gl. 4.34 folgt, dass der dissipative Charakter dieses Modells nur greift, wenn sich Partikel aufeinander zu bewegen, d.h. wenn eine Kompression des Mediums erfolgt. Der erste Term in Gl. 4.34, welcher proportional zur Geschwindigkeitsdifferenz \vec{v}_{ab} ist und mit α skaliert wird, erzeugt eine Scher- und Volumenviskosität. Der zweite Term hingegen, skaliert über den Parameter β , ist proportional zum Quadrat der Geschwindigkeitsdifferenz und repräsentiert die zuvor erwähnte Neumann-Richtmyer-Viskosität zur numerischen Modellierung von Stoßvorgängen. Laut Monaghan (1992) erfüllt dieses Modell die lineare Impulserhaltung und die Drehimpulserhaltung. Der Term $\eta^2 = 0,01 h^2$ im Nenner von Gl. 4.35 dient zur Vermeidung von Singularitäten (Morris und Monaghan (1997)).

Die Impulsgleichung, unter Vernachlässigung externer Kräfte und Berücksichtigung des Druckterms nach Gl. 4.27, kann unter Einbeziehung des künstlichen Viskositätsmodells folgendermaßen zusammengefasst werden:

$$\left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_a = - \sum_b m_b \left(\frac{p_b}{\rho_b^2} + \frac{p_a}{\rho_a^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla W_{ab} \quad (4.36)$$

Zur Berechnung laminarer Strömungen bzw. Strömungen bei niedrigen Reynolds-Zahlen steht ein weiteres Modell zur Verfügung. Das laminare Viskositätsmodell von Morris et al. (1997) basiert auf folgender Darstellung des Reibungsterms

$$\left\langle \frac{\nabla \tau}{\rho} \right\rangle_a = \left\langle \frac{(\nabla \cdot \mu \nabla) \vec{v}}{\rho} \right\rangle_a = \sum_b \frac{m_b (\mu_a + \mu_b) \vec{r}_{ab} \nabla W_{ab}}{\rho_a \rho_b (\vec{r}_{ab}^2 + \eta^2)} \vec{v}_{ab} \quad (4.37)$$

wobei $\eta^2 = 0,01 h^2$ gilt. Es kann durch eine Taylorreihenentwicklung um Punkt a verifiziert werden. Hierbei wird der lineare Impuls exakt erhalten, die Drehimpulserhaltung hingegen wird nur näherungsweise erfüllt.

4.4.3 Erhaltung der inneren Energie

Die zeitliche Änderung der inneren Energie ist in erster Linie vom Druckterm, dem Dissipations- und dem Wärmeleitungsterm abhängig. Deren Überführung in die diskrete Darstellung soll in Kürze aufgezeigt werden. Änderungen der inneren Energie aufgrund von Strahlung werden vernachlässigt.

Druckterm

Nach Umformung und Diskretisierung entsprechend der Kontinuitätsgleichung 4.25 resultiert

$$\begin{aligned} \left\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \vec{v} \right\rangle_a &= \left\langle \frac{p}{\rho^2} (-\rho \nabla \vec{v}) \right\rangle_a \\ &= \frac{p_a}{\rho_a^2} \sum_b m_b (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab} \end{aligned} \quad (4.38)$$

für den Druckterm.

Eine weitere Möglichkeit der Diskretisierung ist die Anwendung der Kettenregel und anschließende Diskretisierung der Terme der rechten Seite mittels der nicht symmetrischen SPH Grundgleichung 4.7 zur Gradientenberechnung.

$$\begin{aligned}
\left\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \vec{v} \right\rangle_a &= \left\langle \vec{v} \nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) \right\rangle_a - \left\langle \nabla \left(\frac{p}{\rho} \vec{v} \right) \right\rangle_a \\
&= \vec{v}_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \frac{p_b}{\rho_b} \nabla W_{ab} - \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \frac{p_b}{\rho_b} \vec{v}_b \nabla W_{ab} \\
&= \sum_b m_b \frac{p_b}{\rho_b^2} (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab}
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Wie bei Monaghan (1992) dargestellt, ergibt sich durch Mittelung der beiden Gleichungen 4.38 und 4.39 die häufig verwendete Form des Druckterms der Energiegleichung für SPH Berechnungen.

$$\left\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \vec{v} \right\rangle_a = \frac{1}{2} \sum_b m_b \left(\frac{p_b}{\rho_b^2} + \frac{p_a}{\rho_a^2} \right) (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab} \tag{4.40}$$

Die Diskretisierung kann ebenso analog zu Gl. 4.29 erfolgen.

$$\left\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \vec{v} \right\rangle_a = \frac{1}{2} \sum_b m_b \frac{p_a + p_b}{\rho_a \rho_b} (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab} \tag{4.41}$$

Dissipationsterm

In Abhängigkeit des Modells für die Berechnung des Dissipationsterms in der Impulsgleichung wird auch der dissipative Term der Energiegleichung entsprechend diskretisiert. Zur Auswahl stehen die direkte Berechnung der Dissipationsfunktion nach Gl. 3.11, die Anwendung des künstlichen (Gl. 4.34) oder des laminaren (Gl. 4.37) Viskositätsmodells.

- Direkte Berechnung:

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_{a,diss} = \frac{1}{2 \mu_a \rho_a} (\tau_{xx}^2 + 2 \tau_{xy}^2 + 2 \tau_{xz}^2 + \tau_{yy}^2 + 2 \tau_{yz}^2 + \tau_{zz}^2)$$

Der dissipative Term kann direkt aus den Quadraten der zuvor berechneten Schubspannungen τ nach Gl. 4.30 oder Gl. 4.31 an jedem Partikel bestimmt werden.

- Künstliches Viskositätsmodell nach Monaghan (1994):

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_{a,diss} = \frac{1}{2} \sum_b m_b \Pi_{ab} (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab} \tag{4.42}$$

- Laminare Viskositätsmodell Morris et al. (1997):

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_{a,diss} = \frac{1}{2} \sum_b \frac{m_b (\mu_a + \mu_b) \vec{r}_{ab} \vec{v}_{ab}}{\rho_a \rho_b (\vec{r}_{ab}^2 + \eta^2)} (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab} \tag{4.43}$$

Wärmeleitungsterm

Die Wärmeleitung wird gemäß dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz berechnet. Aufgrund der Nachteile der Approximation mittels der zweiten Ableitung der Glättungsfunktion (Monaghan (2005)), ist es vorteilhafter den Wärmeleitungsterm über die diskrete Summeninterpolation durch die wiederholte Bildung der ersten Ortsableitung oder über einen Modellterm (Morris (1996)) zu diskretisieren.

Im ersten Fall wird zuerst der Temperaturgradient nach Gl. 4.12 approximiert.

$$\langle k \nabla T \rangle_a = \frac{k_a}{\rho_a} \sum_b m_b (T_b - T_a) \nabla W_{ab} = q_a \quad (4.44)$$

Anschließend erfolgt die Berechnung der Divergenz dieses Terms, unter Anwendung der Diskretisierungsgleichung 4.13, an jeder Stützstelle.

$$\left\langle \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho} \right\rangle_a = \left\langle \frac{\nabla q}{\rho} \right\rangle_a = \sum_b m_b \left(\frac{q_b}{\rho_b^2} + \frac{q_a}{\rho_a^2} \right) \nabla W_{ab} \quad (4.45)$$

Der alternative Modellansatz nach Morris (1996) beinhaltet direkt die innere Energie.

$$\left\langle \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho} \right\rangle_a = \sum_b m_b \frac{(k_a + k_b) \left(\frac{u_a}{c_{v,a}} - \frac{u_b}{c_{v,b}} \right) \vec{r}_{ab}}{\rho_a \rho_b (\vec{r}_{ab}^2 + \eta^2)} \nabla W_{ab} \quad (4.46)$$

Die Validierung der beiden Ansätze zur Berechnung der Wärmeleitung wird im Anhang A.3 diskutiert.

4.5 Zustandsgleichung

Die Zustandsgleichung dient zur Schließung des Gleichungssystems mit den sechs Unbekannten Dichte ρ , drei Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} , innerer Energie u und Druck p . Der entwickelte Code basiert auf der direkten Kopplung zwischen Dichte und Druck und folgt damit dem Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics (WCSPH) Ansatz. Hierbei wird die Inkompressibilität durch Limitierung der auftretenden Dichteschwankungen (s. Kapitel 3.4) gewährleistet.

Für die Modellierung idealer Gase steht die ideale Gasgleichung zur Verfügung.

$$\begin{aligned} p &= (\kappa - 1) \rho u \\ c &= \sqrt{\kappa (\kappa - 1) u} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Eine in der Literatur häufig verwendete Zustandsgleichung für die Beschreibung der thermodynamischen Zusammenhänge in inkompressiblen Medien, wie z. B. Wasser oder Kerosin, stellt die Tait-Gleichung nach Cole (1948) dar. Sie beschreibt die Isentropenbeziehung für Wasser über einen großen Druckbereich hinweg. Hierbei wird berücksichtigt, dass die Dichte von Wasser

nur um ca. 0,5% bei einer Druckerhöhung von 1 auf 100 *atm* (Batchelor (2000)) bei konstanter Temperatur zunimmt.

$$\begin{aligned}\Delta p &= B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\kappa - 1 \right] \\ B &= \frac{c^2 \rho_0}{\kappa}\end{aligned}\quad (4.48)$$

Zu beachten ist, dass Δp in Gl. 4.48 den Relativdruck zur Umgebung darstellt. Die Parameter B und ρ_0 dienen als Referenzwerte für Druck und Dichte. Geringe Dichteveränderungen bewirken starke Druckunterschiede im Fluid. Diese haben hohe Beschleunigungen zur Folge, welche wiederum eine hohe Rückstellkraft erzeugen. Demnach weist das Dichtefeld nur geringe Schwankungen auf.

Eine weitere von Morris et al. (1997) vorgeschlagene Druck-Dichte-Relation

$$p = c^2 \rho \quad (4.49)$$

kann für Simulationen, bei denen keine freien Oberflächen auftreten, angewendet werden. Im Vergleich zu Zustandsgleichung 4.48 wird hierbei ein absoluter Druck berechnet. Die Dichteänderungen wirken sich weniger stark auf Druckänderungen aus. Um Simulationen mit freien Oberflächen, auf Basis von Relativdrücken berechnen zu können, kann Gl. 4.49 folgendermaßen umformuliert werden:

$$\Delta p = c^2 (\rho - \rho_0) \quad (4.50)$$

Die geeignete Zustandsgleichung muss je nach Simulationsanforderungen und -bedingungen gewählt werden. Detailliertere Erläuterungen zu den jeweiligen Testfällen sind in Kapitel 6 gegeben.

4.6 Oberflächenspannung

Eine nicht vernachlässigbare Rolle bei der exakten Modellierung von Zerstäubungsvorgängen spielt die Oberflächenspannung. Sie wirkt den aufgrund der Relativgeschwindigkeit zwischen flüssigem Kraftstoff und Luft auftretenden Scherkräften und aerodynamischen Kräften entgegen. Grundsätzlich lassen sich zwei Methoden zur Berücksichtigung von Oberflächenspannungseffekten unterscheiden, wie bereits in Kapitel 2.3.4 diskutiert. Die zusätzlich an den Grenzflächen auftretenden Kräfte können auf Basis des von Brackbill et al. (1992) eingeführten Continuum Surface Force (CSF) Modells simuliert werden. Hierzu wird die CSF Methode wie von Morris (2000) vorgeschlagen in den SPH Formalismus überführt. Dieser Ansatz basiert auf der makroskopischen Betrachtung, dass ein System stets den Zustand minimaler Energie anstrebt und versucht die Grenzfläche durch Minimierung der Krümmung zu reduzieren.

Eine weitere Möglichkeit zur Modellierung der Oberflächenspannung beruht auf der mikroskopischen Betrachtung der molekularen Vorgänge. Die Modellierung intermolekularer Kräfte erfolgt

entweder auf Basis der van der Waals Kräfte in Anlehnung an Nugent und Posch (2000) und in anderer Form von Colagrossi und Landrini (2003) erwähnt, oder durch explizite Vorgabe einer zusätzlichen Kraft, welche zwischen benachbarten Stützstellen wirkt (Tartakovsky und Meakin (2005), Becker und Teschner (2007), Zhou et al. (2008)).

Diese Ansätze wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementiert. Im Folgenden soll allerdings nur auf die ersten beiden eingegangen werden, da diese näher untersucht wurden.

4.6.1 Continuum Surface Force Modell

Im Rahmen des Modells nach Brackbill et al. (1992) und Morris (2000) wird die Oberflächenspannung auf Basis der Krümmung κ der Phasengrenzfläche berechnet. Die grundlegende Annahme für die Entwicklung des Berechnungsansatzes ist die Umformulierung der Flächenkraft \vec{f}_O in eine Volumenkraft \vec{F}_O , welche nur innerhalb eines begrenzten Volumens in der Nähe der Grenzfläche auftritt. Dies ist gleichbedeutend mit der Annahme, dass die Grenzfläche über einen gewissen Bereich der Breite δ_O ausgedehnt wird, wie in Abb. 4.7 veranschaulicht.

$$\vec{F}_O = \vec{f}_O \delta_O \quad (4.51)$$

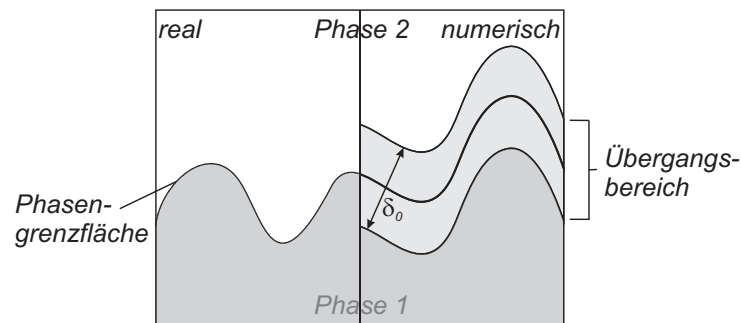


Abbildung 4.7: Darstellung der Phasengrenzfläche zur Berechnung der dort wirkenden Kräfte in der Realität (links) und in der Numerik (rechts)

Die Flächenkraft \vec{f}_O , unter Vernachlässigung der Tangentialkomponente, kann als Funktion der Krümmung κ , des Einheitsnormalenvektors \hat{n} und des Oberflächenspannungskoeffizienten σ wiedergegeben werden. Die Dirac-Funktion δ_O entspricht der Länge des Normalenvektors $|\vec{n}|$.

$$\begin{aligned} \vec{f}_O &= \sigma \kappa \hat{n} \\ \kappa &= -\nabla \cdot \hat{n} \\ \delta_O &= |\vec{n}| \end{aligned} \quad (4.52)$$

Somit ergibt sich die zusätzliche Impulsänderung aufgrund der Oberflächenspannung zu

$$\frac{D\vec{v}}{Dt}_o = \frac{\vec{F}_O}{\rho} = -\frac{\sigma}{\rho} (\nabla \cdot \hat{n}) \vec{n} \quad (4.53)$$

Der folgende Ansatz für die Formulierung der Oberflächenspannungskräfte im Rahmen der SPH Methode wurde von Morris (2000) übernommen. Hierbei werden die Partikel anhand eines sogenannten Farbwertes ζ_1 bzw. ζ_2 der entsprechenden Phase zugewiesen. Über diesen können nach Gl. 4.54

$$\vec{n} = \frac{\nabla \zeta}{|\zeta_2 - \zeta_1|} \quad (4.54)$$

die Normalenvektoren \vec{n} an den Grenzflächen sowie die Divergenz des Einheitsnormalenvektors $\nabla \cdot \hat{\vec{n}}$ berechnet werden. Hieraus lässt sich nach Gl. 4.53 die auf ein Partikel wirkende spezifische Oberflächenspannung bestimmen.

Für die zugrundeliegenden Berechnungen im Rahmen der SPH Methode wird zuerst der approximierte Farbwert ζ_g für jedes Partikel nach Gl. 4.3 ermittelt.

$$\langle \zeta_g \rangle_a = \sum_b \zeta_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab} \quad (4.55)$$

Somit ergibt sich der Normalenvektor bzw. der Gradient des geglätteten Farbwertes ζ_g an der Stützstelle a zu

$$\langle \vec{n} \rangle_a = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\zeta_{g,b} - \zeta_{g,a})}{|\zeta_b - \zeta_a|} \nabla W_{ab} \quad (4.56)$$

Zur Berechnung der Oberflächenspannung wird die Divergenz des Einheitsnormalenvektors an der Grenzfläche benötigt, wie aus Gl. 4.53 ersichtlich ist. Hierzu schlug Morris (2000) ein Korrekturverfahren zur Fehlerminimierung bzw. eine Restriktion der zur weiteren Berechnung beitragenden Normalenvektoren basierend auf deren Länge vor. Liegt die Länge des Normalenvektors an einer Stützstelle oberhalb einer vorab definierten Grenze ε , so wird zu diesem der entsprechende Einheitsnormalenvektor gebildet. Andernfalls wird der Einheitsnormalenvektor in den weiteren Summenapproximationen nicht berücksichtigt.

$$\langle N \rangle_a = \begin{cases} 1 & , \text{für } |\vec{n}_a| > \varepsilon \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (4.57)$$

$$\langle \hat{\vec{n}} \rangle_a = \begin{cases} \frac{\vec{n}_a}{|\vec{n}_a|} & , \text{für } N_a = 1 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (4.58)$$

Die Divergenz des Einheitsnormalenvektors ergibt sich schließlich analog zu Gl. 4.56 mit entsprechender Normierung aufgrund der Vernachlässigung *ungeeigneter* Stützstellen.

$$\langle \nabla \cdot \hat{\vec{n}} \rangle_a = \frac{\sum_b \min(N_a, N_b) \frac{m_b}{\rho_b} (\hat{\vec{n}}_b - \hat{\vec{n}}_a) \nabla W_{ab}}{\sum_b \min(N_a, N_b) \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}} \quad (4.59)$$

Somit wirkt auf ein Partikel a nahe der Grenzfläche die zusätzliche spezifische Kraft aufgrund der Oberflächenspannung:

$$\left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_{a,O} = -\frac{\sigma}{\rho_a} (\nabla \cdot \hat{\vec{n}})_a \vec{n}_a \quad (4.60)$$

4.6.2 Intermolekulare Kräfte

Ausgehend von der Modellierung eines van der Waals Fluids nach Nugent und Posch (2000) (s. Kapitel 2.3.4), kann die Oberflächenspannung durch die kohäsiven Kräfte zwischen den Molekülen eines Fluids aufgrund der van der Waals-Wechselwirkungen dargestellt werden. In der van der Waals Gleichung für reale Gase wird im Vergleich zur idealen Gasgleichung das Eigenvolumen der Moleküle über den Parameter b und die Anziehung zwischen den Molekülen, aufgrund kurzzeitig induzierter Dipole, durch den Parameter a berücksichtigt (Poling et al. (2004)).

$$p = \frac{RT}{\frac{1}{\rho} - \frac{b}{M}} - \frac{a}{M^2} \rho^2 \quad (4.61)$$

Bei der numerischen Simulation inkompressibler Medien wird nun die Tait-Zustandsgleichung 4.48 um den kohäsiven Term erweitert (Colagrossi und Landrini (2003)), wobei $a' = \frac{a}{M^2}$ gilt.

$$\Delta p = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\kappa - 1 \right] - a' \rho^2 \quad (4.62)$$

Durch Aufprägung des sogenannten Kohäsionsdrucks ergibt sich für geringe Dichteschwankungen $\rho \approx \rho_0$ ein negativer Relativdruck. Dies hat eine nach innen gerichtete Kraft an der freien Oberfläche eines Fluids zur Folge, wodurch diese gemäß dem Prinzip der Energieminimierung verringert wird. Einsetzen von Gl. 4.62 in die Summenapproximation des Druckterms der Impulserhaltungsgleichung 4.27 führt zu folgendem zusätzlichen Beschleunigungsterm aufgrund der Oberflächenspannung:

$$\left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_{a,O} = \left\langle -\frac{\nabla p}{\rho} \right\rangle_{a,O} = \sum_b m_b (a'_a + a'_b) \nabla W_{ab} \quad (4.63)$$

Anschaulich ist die an den freien Oberflächen resultierende Kraft für den eindimensionalen Fall in Abb. 4.8 dargestellt.

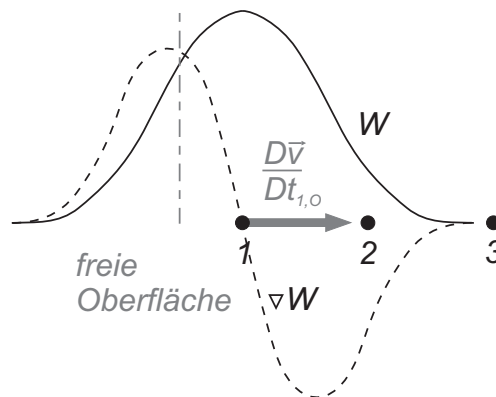


Abbildung 4.8: Nach innen gerichtete Oberflächenkraft $\frac{D\vec{v}}{Dt}_{1,0}$ an Partikel 1 für eine freie Oberfläche

Des Weiteren ergibt sich in der Energieerhaltungsgleichung die durch den Kohäsionsterm zusätzlich erzeugte Änderung der inneren Energie zu

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_{a,O} = \left\langle -\frac{p}{\rho} \nabla \vec{v} \right\rangle_{a,O} = -\frac{1}{2} \sum_b m_b (a'_a + a'_b) (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \nabla W_{ab}. \quad (4.64)$$

4.7 Numerische Korrekturen

Um strömungsmechanische Phänomene physikalisch exakt zu berechnen und stabile Simulationen zu ermöglichen, stehen numerische Korrekturverfahren zur Verfügung. Fehler können z.B. durch das Auftreten von Rändern oder durch eine unregelmäßige Verteilung der Stützstellen verursacht werden (Colagrossi (2003)).

4.7.1 Stützstellenbewegung - XSPH

Die Position einer Stützstelle wird direkt aus der Differentialgleichung der Partikelbewegung $\frac{D\vec{r}}{Dt} = \vec{v}$ hergeleitet. Es kann andererseits durchaus sinnvoll sein, die Stützstellen mit einer von der physikalischen Geschwindigkeit abweichenden, sogenannten korrigierten Geschwindigkeit gemäß Monaghan (1994), zu bewegen, um Interpolationsfehler zu minimieren bzw. eine einheitlichere Verteilung der Diskretisierungspunkte zu gewährleisten. Diese zeitliche Änderung der Stützstellenposition aufgrund der korrigierten Geschwindigkeit geht aus der XSPH-Korrektur hervor.

$$\left\langle \frac{D\vec{r}}{Dt} \right\rangle_a = \vec{v}_{a,korr} = \vec{v}_a + \varepsilon \sum_b \frac{m_b}{\bar{\rho}_{ab}} (\vec{v}_b - \vec{v}_a) W_{ab} \quad (4.65)$$

Hierbei stellt $\bar{\rho}_{ab} = \frac{\rho_a + \rho_b}{2}$ die mittlere Dichte dar, die Konstante ε liegt im Bereich $0 \leq \varepsilon \leq 1$. Sowohl die Impuls- wie auch die Drehimpulserhaltung sind hierbei erfüllt (Monaghan (1989)).

Die Diskretisierungspunkte repräsentieren ein Massenelement und somit jeweils ein Teilvolumen des gesamten Fluidsystems. Die Massenverteilung hängt direkt mit dem Dichtefeld zusammen, wie aus Gl. 4.22 hervorgeht. Daher muss aus Konsistenzgründen die korrigierte Geschwindigkeit $\vec{v}_{a,korr}$ in die Berechnung der zeitlichen Dichteänderung nach Gl. 4.25 einbezogen werden. Alle weiteren Terme der strömungsmechanischen Grundgleichungen beinhalten weiterhin die physikalische Geschwindigkeit \vec{v} .

4.7.2 Dichtereinitialisierung

Die Dichteverteilung im Simulationsgebiet ergibt sich nach Gl. 4.22 direkt aus der Stützstellenverteilung. An freien Oberflächen oder bei ungeordneter Partikelverteilung treten jedoch Ungenauigkeiten auf. An Erstgenannten ist die integrale Normierungsbedingung $\int W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' = 1$ aufgrund des Partikeldefizits und dem damit bedingten Abschneiden der Glättungsfunktion bzw. ihres Gradienten nicht mehr erfüllt. Dies ist durch die schraffierte Fläche in Abb. 4.9 verdeutlicht.

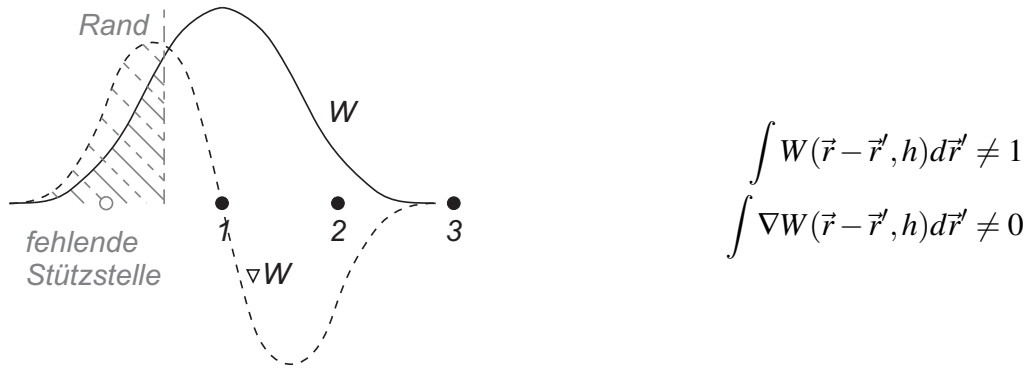


Abbildung 4.9: Abschneiden der Glättungsfunktion aufgrund des Partikeldefizits am Rand

Zudem ist bei einer ungeordneten Partikelverteilung zwar die integrale Form der Normierungsbedingung erfüllt, die diskrete Form $\sum \frac{m}{\rho} W(\vec{r} - \vec{r}', h) = 1$ hingegen unter Umständen nicht (Liu und Liu (2010)). Hierdurch ergeben sich Ungenauigkeiten in der Dichteapproximation, welche zu starken nicht-physikalischen Druckoszillationen in den Simulationen führen können. Um dies zu vermeiden, wird die Dichteapproximation zu jedem n -ten Zeitschritt entsprechend normiert.

$$\langle \rho \rangle_a = \frac{\sum_b m_b W_{ab}}{\sum_b \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}} \quad (4.66)$$

Dieses Verfahren ist in der Literatur (Bonet und Lok (1999), Chen et al. (1999)) auch als Shepard-Filter, nach Shepard (1968), bekannt.

4.8 Randmodellierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mehrere Varianten der Randmodellierung umgesetzt.

- Periodische Randbedingungen
- Feste / bewegte Wände
- Symmetrische Randbedingungen

Außerdem wäre es in Zukunft wünschenswert, Ein- und Auslassrandbedingungen zu realisieren. Die Darstellung von Rändern dient zum einen zur Aufprägung von Randbedingungen, wie z.B. der Haftbedingung an festen Wänden. Zum anderen werden dadurch ein Abschneiden der Glättungsfunktion aufgrund eines Partikeldefizits am Rand (s. Kapitel 4.7.2) und dadurch entstehende Interpolationsungenauigkeiten verhindert.

Im Folgenden wird zwischen den periodischen und den weiteren aufgeführten Randbedingungen unterschieden. Erstere basieren nicht auf dem Prinzip, dass eine Randbedingung durch zusätzlich eingeführte diskrete Stützstellen realisiert wird. Auf deren Implementierung wird in Kapitel 5.2 im Detail eingegangen. Bei allen weiteren Randbedingungen werden die Ränder genauso wie

das Fluid anhand von Stützstellen, den sogenannten Partikeln, diskretisiert. Den Randpartikeln werden die den Randbedingungen entsprechenden physikalischen Eigenschaften zugewiesen. Auch sie repräsentieren jeweils ein bestimmtes Volumen innerhalb des Simulationsgebietes.

4.8.1 Feste / bewegte Wände

Die einfachste Aufprägung von Randbedingungen wird durch Diskretisierung der Ränder bzw. Wände mittels Randpartikeln mit entsprechenden physikalischen Eigenschaften vorgenommen. Deren Anordnung erfolgt gemäß einer äquidistanten Verteilung, wie von Takeda et al. (1994) erwähnt, in einer oder mehreren versetzt angeordneten Reihen. Ihre Lage wird zu Beginn einer Simulation festgelegt. Dies ist beispielhaft in Abb. 4.10 dargestellt.

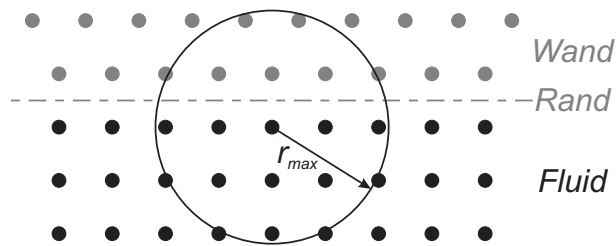


Abbildung 4.10: Modellierung einer Wand als Randbedingung

Die physikalischen Eigenschaften sind fallabhängig zeitlich veränderlich. Standardmäßig werden Dichte und somit auch Druck der Randpartikel in jedem Zeitschritt aktualisiert. Hierdurch erfolgt bei gegenseitiger Annäherung von Fluid- und Randpartikel, d.h. bei Bewegung eines Fluidpartikels hin zum Rand, eine Dichtezunahme an beiden Stützstellen. Daraus resultiert ein der Relativbewegung entgegenwirkender Druckgradient. Druckspitzen werden laut Morris et al. (1997) genauer erfasst. Die Randpartikel gehen in die Summenapproximationen für die Strömungsgrößen an den Stützstellen des Fluids mit ein, um dadurch die Randbedingung aufzuprägen. Ihre eigene Beschleunigung, und somit auch die Geschwindigkeit und Position der den Rand repräsentierenden Stützstellen, bleibt jedoch unverändert. Weitere Möglichkeiten zur Modellierung von Wänden bzw. starren Strömungshindernissen sind u. a. von Morris et al. (1997) und von Monaghan und Kajtar (2009) diskutiert worden.

Um das Durchdringen der Wände zu vermeiden, werden die folgenden beiden Methoden angewendet.

- **Reflektierende Randbedingungen**

Bei einfachen Geometrien kann eine rein geometrisch bedingte Reflexion der Fluidpartikel am Rand erfolgen, sobald diese bestimmte vorab definierte Gebietsgrenzen überschreiten.

Würde ein Partikel a nach Aktualisierung seiner Position die Ränder in $i = x$ -, y - oder z -Koordinatenrichtung $x_{R\pm}^i$ überschreiten, d. h. $x_a^i < x_{R-}^i$ oder $x_a^i > x_{R+}^i$, greift die Bedingung:

$$x_{a,neu}^i = 2x_{R\pm}^i - x_a^i \quad (4.67)$$

Dieser Zusammenhang ist anschaulich in der folgenden Abb. 4.11 dargestellt.

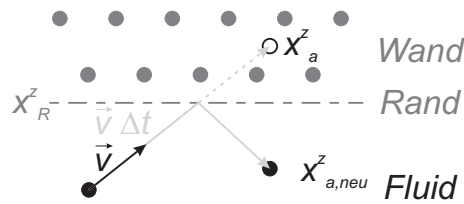


Abbildung 4.11: Auswirkung der reflektierenden Randbedingung auf die Aktualisierung der Position eines Fluidpartikels

Vorteilhaft erweist sich hierbei die einfache Implementierung und Handhabung der Randbedingungen. Für komplexe Geometrien sind die reflektierenden Randbedingungen jedoch ungeeignet.

- **Repulsive Randbedingungen** (Monaghan (1994))

Hierbei üben die Randpartikel eine abstoßende Kraft auf die Fluidpartikel aus, sobald sich diese innerhalb eines Minimalabstandes r_0 zur Wand befinden. Die Kraft weist dabei einen Verlauf gemäß eines Lennard-Jones-Potentials auf.

$$\left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_{a,rep} = \sum_b D \left[\left(\frac{r_0}{r_{ab}} \right)^{n_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ab}} \right)^{n_2} \right] \frac{\vec{r}_{ab}}{r_{ab}^2} \quad \frac{r_0}{r_{ab}} \geq 1 \quad (4.68)$$

Die Distanz zwischen Rand- und Fluidpartikel ist über r_{ab} gegeben, wobei \vec{r}_a der Position des Fluidpartikels und \vec{r}_b der Position des Randpartikels entspricht. Durch den Faktor D kann die Stärke der abstoßenden Kraft variiert werden. Dieser sollte in der Größenordnung der auftretenden Maximalgeschwindigkeit im Quadrat liegen. Die Exponenten n_1 und n_2 bedingen den Kurvenverlauf bzw. die Steigung der Potentialfunktion, wobei für die abstoßende Wirkung der Wand stets $n_1 > n_2$ erfüllt sein muss. Die auf die Fluidpartikel wirkende repulsive Kraft sowie die Potentialfunktion sind in Abb. 4.12 skizziert.

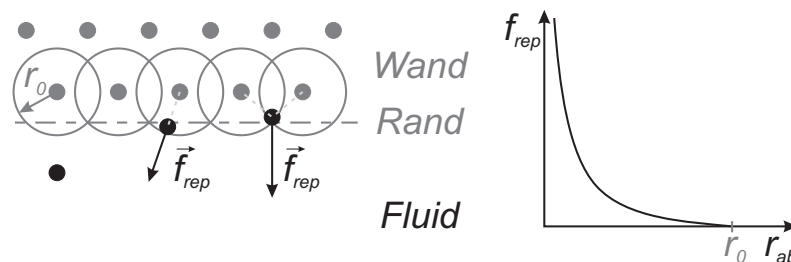


Abbildung 4.12: Auswirkung der repulsiven Randbedingung auf die Fluidpartikel

Vorteilhaft ist hierbei die Skalierung der repulsiven Kraft mit dem Abstand des Fluidpartikels zur Wand sowie die Anwendbarkeit der Randbedingung auf beliebig komplexe Geometrien. Das wellenförmige Profil des repulsiven Kraftfeldes in Wandnähe, wie in Abb. 4.12 zu erkennen ist, kann jedoch dazu führen, dass Fluidpartikel in einem Wellental eingeschlossen werden.

4.8.2 Symmetrische Randbedingungen

Symmetrische Randbedingungen werden durch das Spiegeln der Positionen der Fluidpartikel innerhalb eines limitierten Randabstandes, welcher dem maximalen Einflussradius entspricht, ermöglicht (s. Abb. 4.13).

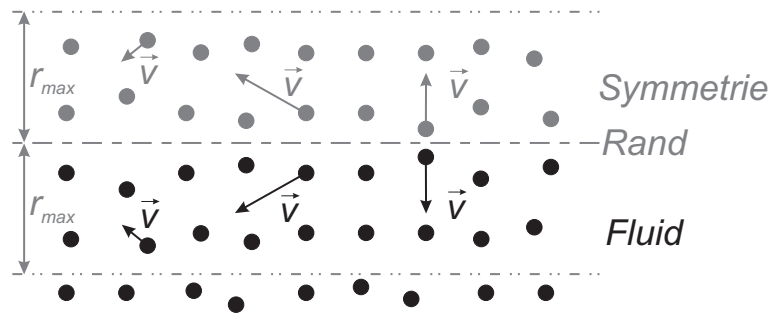


Abbildung 4.13: Modellierung einer Symmetrierandbedingung

Dabei werden die Eigenschaften des Fluidpartikels, bis auf die Geschwindigkeitskomponente normal zur Symmetrielinie, für das Randpartikel übernommen. Diese ändert ihr Vorzeichen.

5 Implementierung des SPH Verfahrens

Dieses Kapitel soll im Wesentlichen den Aufbau des entwickelten Simulationsprogrammes auf Basis der gitterfreien SPH Methode erläutern. Die Codestruktur, welche die programmiertechnische Umsetzung der Stützstellen und Interaktionspaare beinhaltet, sowie die dazu notwendige Nachbarsuche werden vorgestellt. Des Weiteren muss, neben der in Kapitel 4 eingeführten Ortsdiskretisierung, die zeitliche Entwicklung der Strömungsgrößen anhand einer Zeitdiskretisierung durchgeführt werden.

5.1 Programmaufbau

Im Hauptprogramm werden die folgenden Schritte, wie in Abb. 5.1 vereinfacht dargestellt, abgearbeitet.

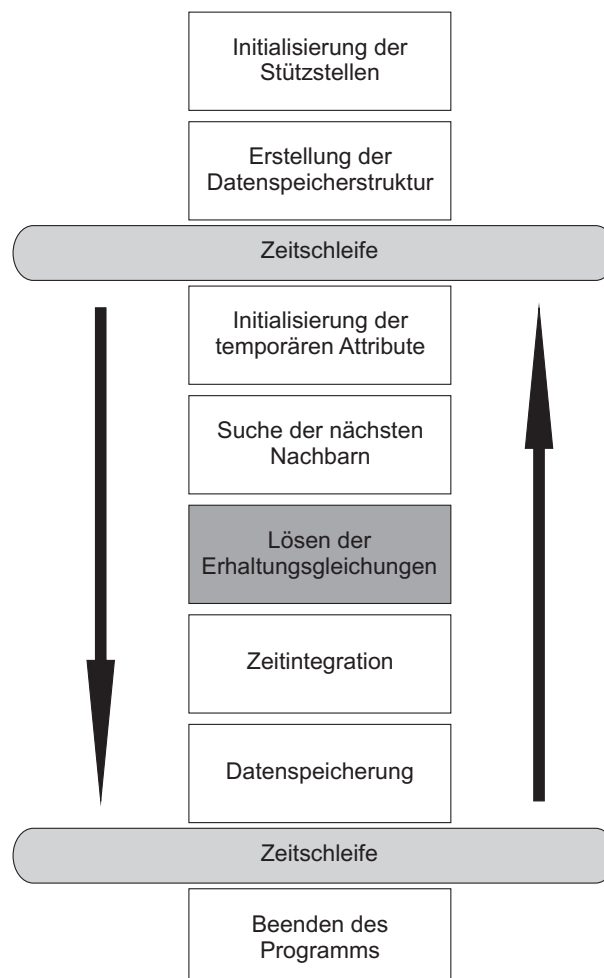


Abbildung 5.1: Struktur des Hauptprogramms

Die Berechnung der zeitabhängigen Strömungsgrößen findet in der äußersten Schleife, der Zeitschleife, statt. Die hierzu notwendigen Terme zur Lösung der Kontinuitätsgleichung, der

Navier-Stokes-Gleichungen und der Energiegleichung, sowie der Zustandsgleichung und aller weiteren Korrekturen, welche zur Änderung des Strömungszustandes beitragen, werden innerhalb des grau hinterlegten Moduls berechnet.

Dem Simulationsprogramm liegt die abstrahierte Datenstruktur von Stützstellen, den sogenannten Partikeln, und Wechselwirkungspaaren, bestehend aus entweder zwei Fluidpartikeln oder einem Fluid- und einem Randpartikel, zugrunde. Bei der Beschreibung der Stützstellen wird dabei in Fluidpartikel und Randpartikel unterschieden. Beide Partikelarten besitzen die gleichen Attribute wie die physikalischen Strömungsgrößen, weitere temporäre Berechnungsgrößen und Hilfsvariablen oder Bool'sche Variablen. Der Typ eines Wechselwirkungspaares beinhaltet Attribute, welche die beiden interagierenden Partikel betreffen, wie z. B. deren Abstand, den daraus resultierenden Wert der Glättungsfunktion und deren Gradienten oder die Nachbarschaftsbeziehung zwischen den Stützstellen. Die Wechselwirkungspaare werden mit Hilfe eines geeigneten Suchalgorithmus ermittelt, auf welchen in Kapitel 5.2 detaillierter eingegangen wird.

Vor Start der Rechnung, muss die Definition folgender Parameter in einer Steuerdatei vorgenommen werden.

- Restartbedingungen
- Vorgaben zur Datenspeicherung
- Interpolationsschema: Glättungsfunktion und Glättungslänge
- Randbedingungen: reflektierend oder repulsiv, symmetrisch
- Nachbarsuchalgorithmus
- Auswahl der Summeninterpolationsvorschrift für das Lösen der Erhaltungsgleichungen
- Modellkonstanten
- Berücksichtigung von Oberflächenspannung, Schwerkraft
- Zeitintegration
- Dimensionalität der Simulation

Die Diskretisierung und Initialisierung des Strömungsgebietes erfolgt direkt im Code durch Positionierung der Partikel und Zuweisung der entsprechenden Strömungsgrößen. Die Berechnungen können wahlweise in *single* oder *double precision* durchgeführt werden.

5.2 Nachbarsuche

Die Bestimmung der Wechselwirkungspaare nimmt einen Großteil der Rechenleistung und somit der Berechnungszeit in Anspruch. Daher muss deren Aufwand mittels geeigneter Suchalgorithmen auf ein Minimum reduziert werden. Die drei im Folgenden aufgeführten Suchalgorithmen sind im aktuellen Code enthalten.

5.2.1 Direkte Suche

Das einfachste Vorgehen zur Bestimmung der nächsten Nachbarstützstellen entspricht dem direkten Vergleich des Abstandes aller Stützstellen N untereinander mit dem maximalen Einflussradius. Der Aufwand liegt dabei in der Ordnung von $O(N^2)$. Durch die Annahme symmetrischer Wechselwirkungen, d.h. wenn Partikel 2 einen Einfluss auf Partikel 1 ausübt, so trägt Partikel 1 auch zu den Approximationen an Partikel 2 bei, kann der Aufwand auf $O(\sum_{i=1}^N N - i) = O(\frac{N(N-1)}{2})$ reduziert werden.

5.2.2 Baumsuche

Die Suche der nächsten Nachbarn eines Partikels innerhalb eines bestimmten Einflussradius auf Basis des Baumsuchalgorithmus (Hernquist und Katz (1989)) bietet vor allem bei weit auseinanderliegenden Stützstellen große Vorteile. Der Suchaufwand liegt in der Größenordnung $O(N \log N)$. Hierzu wird im dreidimensionalen Raum das Strömungsgebiet nach dem in Abb. 5.2 dargestellten Schema so lange zerlegt, bis sich in jedem Unterwürfel nur noch eine Stützstelle befindet. Die daraus resultierende Struktur entspricht einem Baum mit mehreren Ebenen. Dessen Hauptmerkmale sind die Wurzel, welche dem Würfel entspricht, der das gesamte Strömungsgebiet umfasst, die Knoten, welche jeweils ein Volumen eines Unterwürfels repräsentieren, und die Blätter, welche den Unterwürfeln entsprechen, die nur noch eine Stützstelle enthalten.

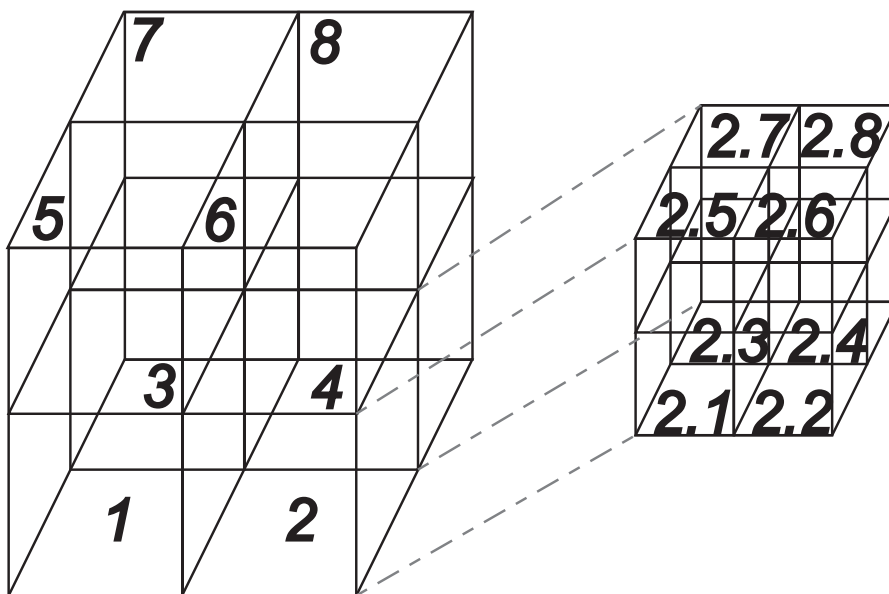


Abbildung 5.2: Baumsuchalgorithmus: Zerlegung des Simulationsgebiets in Würfel

Die in den Summationen zu berücksichtigenden Nachbarn jeder Stützstelle lassen sich nun durch Abarbeiten des Baumes in umgekehrter Richtung ermitteln. Hierbei müssen nur die Würfel, welche innerhalb des Einflussradiuses des Zentralpartikels liegen, berücksichtigt werden.

5.2.3 Listensuche

Der von Hockney und Eastwood (1992) verwendete Algorithmus der Listensuche ermöglicht ein schnelles und effizientes Identifizieren benachbarter Partikel mit einem Suchaufwand in der Größenordnung von $O(N)$. Das Simulationsgebiet wird in identische Würfel mit einer Kantenlänge, die dem maximalen Einflussradius $r_{max} = q_{max} \cdot h$ entspricht, unterteilt. Beispielhaft ist dies in Abb. 5.3 skizziert. Für jede Stützstelle muss so nur noch der Würfel, in dem sie sich selbst befindet (*durchgezogene Linie*), und die angrenzenden Nachbarwürfel mit höherem Index (*gestrichelte Linie*) auf potentielle Nachbarpartikel hin untersucht werden.

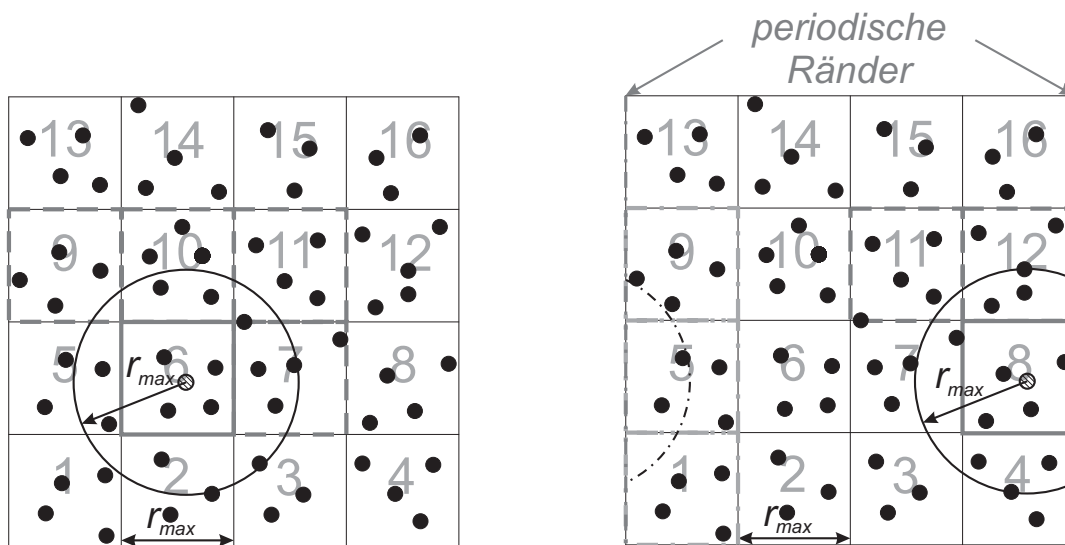


Abbildung 5.3: Listensuchalgorithmus (2D): Zerlegung des Simulationsgebiets in Quadrate
 Abbildung 5.4: Listensuchalgorithmus (2D): Berücksichtigung periodischer Randbedingungen

Auf Basis dieses Algorithmus sind auch die periodischen Randbedingungen im Code umgesetzt. So werden bei Berücksichtigung periodischer Ränder, diese zuerst markiert. Im Rahmen des Listensuchalgorithmus werden anschließend für alle Würfel, welche in der Nähe eines markierten periodischen Randes liegen, die periodisch benachbarten Würfel, nach einer Koordinatentransformation ihrer darin liegenden Partikel, auf interagierende Stützstellen hin durchsucht. Dies ist schematisch in Abb. 5.4 wiedergegeben. Die Würfel, welche aufgrund der periodischen Randbedingungen Nachbarpartikel des Zentralpartikels (*schraffiert*) in Würfel 8 enthalten können, sind mit einer Strichpunktlinie umrahmt (*Würfel 1, 5, 9*).

5.2.4 Gegenüberstellung der Suchalgorithmen

Je nach Problemstellung, bietet jeder der Suchalgorithmen gewisse Vorteile, wie von Höfler et al. (2010) diskutiert. Die direkte Suche der benachbarten Partikel ist einfach zu implementieren und daher ohne besondere Fehleranfälligkeit oder hohe Ansprüche an den Speicherplatz zu

bewerkstelligen. Jedoch steigt die Rechenzeit hierfür mit zunehmender Anzahl an Diskretisierungspunkten sehr stark an. Dies ist in Abb. 5.5 zu erkennen. Grundlage für diese Auswertung ist eine Strömungsfeldberechnung auf Basis einer geordneten zweidimensionalen Verteilung von 40×40 bzw. 80×80 Fluidpartikeln und einer Reihe Randpartikel, welche die Fluidpartikel umschließt. Es wird die CPU-Zeit für die Berechnung von 100 Zeitschritten, ohne das Ausschreiben von Daten, verglichen.

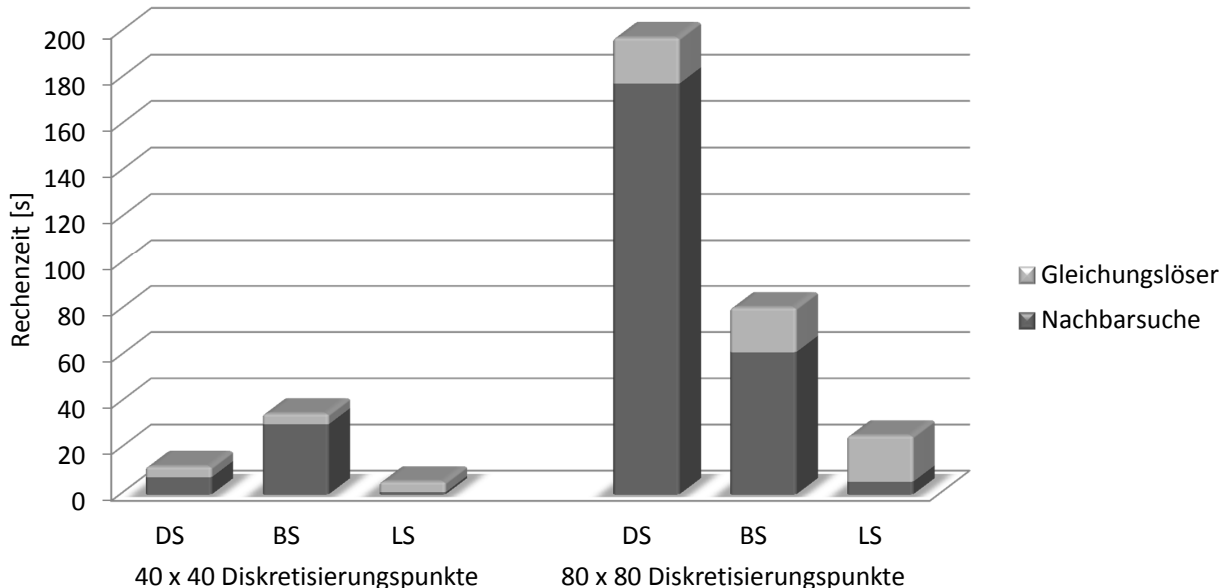


Abbildung 5.5: Vergleich der Rechenzeit bei verschiedenen Diskretisierungen und Suchalgorithmen

Wie zu erwarten, ist die Rechenzeit zur Lösung des Gleichungssystems nur abhängig von der Anzahl der Diskretisierungspunkte. Bei Verdopplung der Stützstellenanzahl in jeder Raumrichtung, erhöht sich diese auf ca. das 4-fache, da die Zahl der Interpartikel-Wechselwirkungen nahezu proportional zur Partikelanzahl zunimmt.

Die für die Nachbarsuche benötigte Rechenzeit skaliert zum einen mit der Anzahl der Stützstellen und ist zum anderen von der Art des Suchalgorithmus abhängig. Im Fall der 40×40 Diskretisierung arbeitet der Listensuchalgorithmus mit einem Anteil von 16,5% an der Gesamtrechenzeit am effektivsten. Die direkte Suche nimmt 61,6% der gesamten Rechenzeit in Anspruch. Das schlechte Abschneiden der Baumsuche ist auf die Programmstruktur dieses Algorithmus zurückzuführen. Deren Aufwendigkeit, vor allem hinsichtlich des Speicherbedarfs, fällt insbesondere bei geringen Partikelzahlen stark ins Gewicht.

Für eine höhere Anzahl an Stützstellen gewinnt die Baumsuche gegenüber der direkten Suche an Effektivität. Der Suchaufwand bei der direkten Suche nimmt nahezu proportional mit dem Quadrat der Stützstellenanzahl zu. Aufgrund der zusätzlich zu berücksichtigenden Interaktionen der Fluidpartikel mit den Randpartikeln steigt der Suchaufwand auf über das 16-fache und somit 90% der Gesamtrechenzeit an. Dahingegen nimmt der Aufwand im Fall der Baumsuche nur logarithmisch zu und liegt für die 80×80 Konfiguration bei 76,1% der Rechenzeit, jedoch wird für die Nachbarsuche nur ungefähr ein Drittel der Zeit im Vergleich zur direkten Suche

benötigt. Die Listensuche erweist sich wiederum als effektivste Suche mit 5,5 s Suchzeit bei einer Gesamtrechenzeit von 25,4 s.

Es ist zu beachten, dass es sich bei dem vorliegenden Testfall um ein geschlossenes, diskretisiertes Gebiet ohne Lücken handelt. Für Simulationen, bei denen große Lücken zwischen den diskretisierten Gebieten zu erwarten sind, ergibt sich ein anderes Bild. Die Baumsuche ist in diesem Fall effektiver als die Listensuche aufgrund der in Kapitel 5.2.2 geschilderten Struktur. Dabei wird das Rechengebiet in Würfel verschiedener Größe unterteilt. Somit werden nicht diskretisierte, für die weitere Suche irrelevante Gebiete relativ früh vom Suchprozess ausgeschlossen. Der geeignete Suchalgorithmus sollte daher mit Hinsicht auf den zu simulierenden Testfall ausgewählt werden.

5.3 Zeitdiskretisierung

Aufgrund des verminderten Speicherbedarfs bieten sich für die SPH Methode hauptsächlich explizite Zeitschrittverfahren an. Die implizite Zeitintegration ist bei großen Partikelanzahlen zu aufwendig (Speith (1998)). Zur Erhöhung der Genauigkeit und der Stabilität empfiehlt sich ein explizites Mehrschrittverfahren. Aufgrund dieser Anforderungen wird die Zeitdiskretisierung durch ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren zweiter Ordnung umgesetzt.

Hierbei erfolgt die explizite Berechnung der Strömungsgrößen zum Halbzeitschritt $(\)_{\frac{1}{2}}$ durch den Prädiktor-Schritt:

$$\begin{aligned}
 \rho_{\frac{1}{2}} &= \rho_0 + \left(\frac{D\rho}{Dt} \right)_0 \frac{\Delta t}{2} \\
 \vec{v}_{\frac{1}{2}} &= \vec{v}_0 + \left(\frac{D\vec{v}}{Dt} \right)_0 \frac{\Delta t}{2} \\
 \vec{r}_{\frac{1}{2}} &= \vec{r}_0 + \vec{v}_{\text{korrr},0} \frac{\Delta t}{2} \\
 u_{\frac{1}{2}} &= u_0 + \left(\frac{Du}{Dt} \right)_0 \frac{\Delta t}{2}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Daraufhin werden die Größen der linken Seite verwendet, um die zeitlichen Änderungen der Dichte ρ , der Geschwindigkeit \vec{v} und der inneren Energie u auf Basis der diskretisierten Erhaltungsgleichungen zum Halbzeitschritt $(\frac{D}{Dt})_{\frac{1}{2}}$ zu berechnen. Unter Berücksichtigung dieser Änderungen werden die absoluten Strömungsgrößen zum Halbzeitschritt durch den Korrektor-

Schritt erneut berechnet bzw. korrigiert.

$$\begin{aligned}
 \rho_{\frac{1}{2}} &= \rho_0 + \left(\frac{D\rho}{Dt} \right)_{\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{2} \\
 \vec{v}_{\frac{1}{2}} &= \vec{v}_0 + \left(\frac{D\vec{v}}{Dt} \right)_{\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{2} \\
 \vec{r}_{\frac{1}{2}} &= \vec{r}_0 + \vec{v}_{korrr,\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{2} \\
 u_{\frac{1}{2}} &= u_0 + \left(\frac{Du}{Dt} \right)_{\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{2}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Um letztlich die physikalischen Fluideigenschaften nach dem vollen Zeitschritt $()_1$ zu erhalten wird eine Aktualisierung durchgeführt.

$$\begin{aligned}
 \rho_1 &= 2 \rho_{\frac{1}{2}} - \rho_0 \\
 \vec{v}_1 &= 2 \vec{v}_{\frac{1}{2}} - \vec{v}_0 \\
 \vec{r}_1 &= 2 \vec{r}_{\frac{1}{2}} - \vec{r}_0 \\
 u_1 &= u_{\frac{1}{2}} - u_0
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Bei diesem Verfahren ist zu beachten, dass nach dem Prädiktor-Schritt keine erneute Suche der nächsten Nachbarn ausgeführt wird. Es wird in erster Näherung davon ausgegangen, dass die Partikelpositionen sich nur marginal ändern. Ansonsten würde das Verfahren einem expliziten Euler-Verfahren erster Ordnung mit halber Zeitschrittweite, verglichen mit der des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens zweiter Ordnung, entsprechen.

5.4 Limitierung des Zeitschritts

Um die Stabilität und Genauigkeit der Zeitdiskretisierung zu gewährleisten, muss der Zeitschritt der Integration beschränkt werden. Die Bestimmung der maximal zulässigen Zeitschrittweite wird anhand mehrerer Kriterien vorgenommen. Das erste beruht auf der Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung (Courant et al. (1928)).

$$\Delta t_c \leq \frac{h}{c} \tag{5.4}$$

Eine weitere Einschränkung ist durch die maximale Partikelbeschleunigung bzw. die auf einen Massepunkt wirkende Kraft, wie in Monaghan (1992) beschrieben, gegeben.

$$\Delta t_f \leq \min_a \left(\sqrt{\frac{h}{|\vec{a}_a|}} \right) \tag{5.5}$$

Um die dissipativen Effekte zu berücksichtigen, muss, je nach Viskositätsmodell, eine der folgenden Ungleichungen erfüllt sein.

$$\begin{aligned}
 \Delta t_v &\leq \frac{h^2}{\nu} && \text{(explizit oder laminar)} \\
 \Delta t_v &\leq \min_a \left(\frac{h}{c_a + 0,6 (\alpha c_a + \beta \max_b \mu_{ab})} \right) && \text{(künstlich, Monaghan (1992))}
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Sollen weitere physikalische Effekte, wie z.B. die Oberflächenspannung durch das in Kapitel 4.6.1 erläuterte CSF Modell, simuliert werden, so ergeben sich daraus zusätzliche Restriktionen bezüglich der Zeitschrittweite (Morris (2000)).

$$\Delta t_O \leq \sqrt{\frac{(\rho_{min} + \rho_{max}) h^3}{4 \pi \sigma}} \quad (5.7)$$

Der letztlich verwendete minimale Zeitschritt wird über die folgende Abschätzung, wie von Morris et al. (1997) vorgeschlagen, aus den zuvor ermittelten Kriterien definiert.

$$\Delta t = \min (0,25\Delta t_c, 0,25\Delta t_f, 0,125\Delta t_v, 0,25\Delta t_O) \quad (5.8)$$

6 Modellvalidierung

In diesem Kapitel werden ausgewählte Testfälle diskutiert, welche jeweils zur Validierung und Verifikation des SPH Codes hinsichtlich einzelner physikalischer Phänomene dienen, welche bei der numerischen Vorhersage des Primärzerfalls von Bedeutung sind. Die Ergebnisse der SPH Simulationen werden mit analytischen Lösungen oder Resultaten, welche durch andere Methoden erzielt wurden, verglichen. Zuerst wird die numerische Modellierung von Einphasenströmungen untersucht. Diese können in kompressible und inkompressible Simulationen unterteilt werden. Hierbei sollen zunächst die Phänomene in Einphasenströmungen, bei denen keine Oberflächeneffekte auftreten, betrachtet werden. Darauf aufbauend werden inkompressible Einphasenströmungen mit freien Oberflächen untersucht. Bei diesen Testfällen sind rein physikalisch zwar mehrere Phasen beteiligt, jedoch werden aufgrund ihrer geringen Wechselwirkung alle bis auf eine bei der Berechnung vernachlässigt. Abschließend erfolgt die Simulation von Mehrphasenströmungen.

Die Testfälle dienen der Validierung des implementierten SPH Verfahrens. Der Fokus wird hierbei auf die in Kapitel 2 identifizierten Effekte, welche beim Primärzerfall bzw. dessen numerischer Vorhersage eine entscheidende Rolle spielen, gelegt.

6.1 Einphasen-Testfälle ohne Oberflächeneffekte

Die betrachteten Testfälle bauen in ihrer Komplexität aufeinander auf. Grenzflächeneffekte werden vorerst nicht betrachtet.

- Stoßrohr
- Kavitätsströmung
- Couette Strömung
- Taylor-Green-Wirbel

Zuerst werden kompressible Strömungen und die numerische Simulation von Diskontinuitäten anhand des eindimensionalen, instationären Verdichtungsstoßes in einem Stoßrohr untersucht. Anschließend wird die zweidimensionale, inkompressible Ausbildung eines laminaren Wirbels in einer Kavität, welche von festen Wänden umschlossen ist, genauer betrachtet und somit die Simulation der schubspannungsinduzierten Fluidbewegung validiert. Der Einfluss der Interpolationsfunktion sowie das Konvergenzverhalten der SPH Methode werden dabei detailliert beleuchtet. Ausgehend von diesem Testfall werden zwei der festen Wände durch eine periodische Randbedingung ersetzt. Es erfolgt die Validierung der periodischen Randbedingungen und der zeitabhängigen Ausbildung der Couette-Strömung im Reynolds-Zahlbereich $Re = 1 - 100$. Werden alle festen Wände durch periodische Ränder ersetzt, so lässt sich anhand der numerischen Vorhersage des Abklingverhaltens eines Taylor-Green-Wirbels die Modellierung der dissipativen

Terme beurteilen. Da bei der Kraftstoffaufbereitung auch die Aufheizung des Brennstoffes und die damit verbundene Veränderung der Stoffeigenschaften einen entscheidenden Einfluss ausübt, wird die Modellierung des Wärmeleitungsterms anhand der eindimensionalen, instationären Wärmeleitung in einem Festkörper simuliert. Die Ergebnisse dieses Testfalls sind im Anhang A.3 zu finden, da in dieser Arbeit die korrekte Modellierung der Fluidströmung im Vordergrund steht.

6.1.1 Stoßrohr

In Airblast-Zerstäubern in Flugtriebwerken treten typischerweise Strömungsgeschwindigkeiten der Luft von $60 - 100 \frac{m}{s}$ auf. Dies entspricht unter Berücksichtigung der vorangehenden Kompression im Verdichter und dem damit verbundenen Temperaturanstieg in heutigen Strahltriebwerken einer Mach-Zahl von $M \approx 0,16$. Die kompressiblen Effekte können hierfür vernachlässigt werden. Jedoch existieren spezielle Zerstäuberkonzepte, bei denen mit Hilfe eines Verdichtungsstoßes an der Düsenmündung die Flüssigkeit zerstäubt wird. Daher soll das entwickelte Programm in der Lage sein, kompressible Phänomene wie z. B. das Auftreten eines Verdichtungsstoßes exakt zu beschreiben. Zur Validierung der SPH Methode hinsichtlich der numerischen Berechnung kompressibler Phänomene wird ein senkrechter instationärer Verdichtungsstoß im Stoßrohr eindimensional simuliert. Eine Prinzipskizze des Versuchsaufbaus und der Stoßausbreitung im Stoßrohr über die Zeit ist in Abb. 6.1 zu sehen.

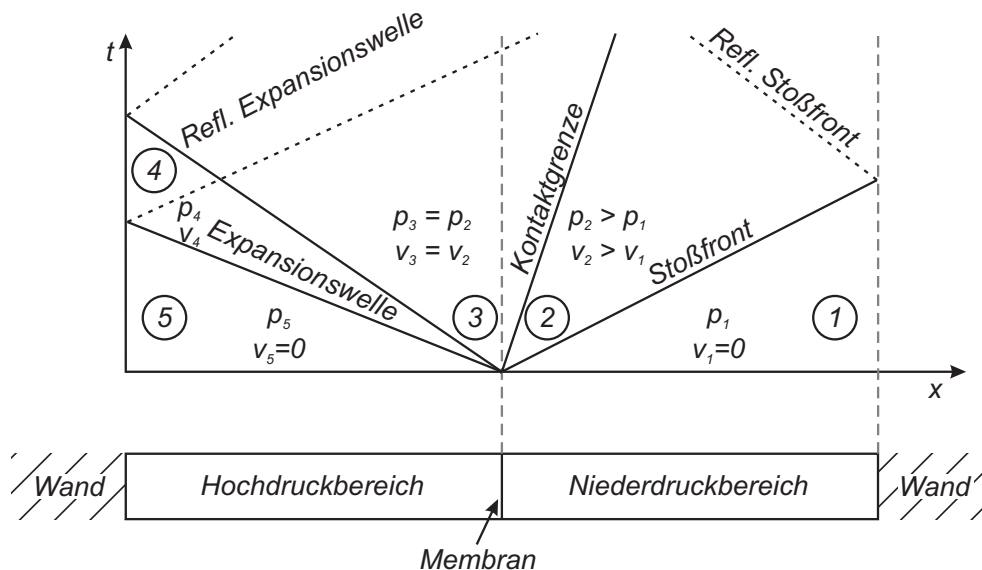


Abbildung 6.1: Prinzipieller Aufbau eines Stoßrohres

Das Stoßrohr besitzt die Länge $L = 1,2 m$, wobei die Membran an der Stelle $x = 0$ den Hoch- vom Niederdruckbereich trennt. Die beiden Medien - das Treibgas im Hochdruckteil und das Laufgas im Niederdruckteil - befinden sich zu Beginn im Ruhezustand. Der Zeitpunkt $t = 0 s$ markiert das Bersten der Membran. Im Weg-Zeit-Diagramm (Abb. 6.1) ist die anschließende Ausbreitung der Medien, des Verdichtungsstoßes und der Expansionswelle über die Zeit dargestellt. Der

instationäre Verdichtungsstoß bewegt sich mit der Geschwindigkeit $v_s > c_1$ in Abhängigkeit der Stoß-Mach-Zahl M_s in den Niederdruckbereich. c_1 repräsentiert die Schallgeschwindigkeit im ruhenden Gas im Niederdruckbereich. Das Laufgas wird über den Stoß hinweg auf die Geschwindigkeit v_2 beschleunigt und dabei von p_1 auf den Druck p_2 verdichtet. Das Treibgas dehnt sich in den Niederdruckbereich aus, wodurch sich die Kontaktgrenze mit v_g ebenfalls in positive x -Richtung verschiebt. Druck und Geschwindigkeit bleiben über die Kontaktgrenze hinweg konstant, $p_3 = p_2$ und $v_3 = v_2$. Die Front der Expansionswelle bewegt sich mit der Schallgeschwindigkeit c_5 in Bereich 5 in negative x -Richtung. Das Ende der Expansionswelle breitet sich mit der Geschwindigkeit v_3 , abhängig von der Schallgeschwindigkeit c_3 , entweder in negative ($v_3 - c_3 < 0$) oder in positive ($v_3 - c_3 > 0$) x -Richtung aus. Die Strömungsgeschwindigkeit in Bereich 4 über die Expansionswelle hinweg ist orts- und zeitabhängig. Die Gaszustände in den Bereichen 1 - 5 können über die Stoßgleichungen (Oertel jr. und Boehle (2004)) und die Expansionsgleichungen (Oertel (1966)) berechnet werden.

Für die numerische Simulation dieses Phänomens werden die feststehenden Wände links und rechts, sowie die Fluide im Hoch- und Niederdruckbereich durch eine eindimensionale Partikelreihe diskretisiert. Den Randpartikeln werden die Eigenschaften des jeweils angrenzenden Fluids zugewiesen. Zur Diskretisierung der Fluide unterschiedlicher Dichte bestehen zwei grundlegende Möglichkeiten. Werden alle Diskretisierungspunkte mit gleichem Abstand voneinander gesetzt und somit eine einheitliche Diskretisierung gewährleistet, müssen sich die den Partikeln zugewiesenen Massen im Hoch- und Niederdruckbereich unterscheiden. Andererseits kann allen Stützstellen die identische Masse zugewiesen werden, hieraus ergibt sich, dass die Partikelabstände im Niederdruckbereich ein Vielfaches der Interpartikelabstände im Hochdruckbereich sein müssen. Für die folgenden Simulationen wurde erstere Variante gewählt, da somit die Anzahl an Stützstellen für die Interpolation im gesamten Gebiet gleich ist. Das Fluid ist durch $N = 2 \times 320$ Partikel diskretisiert.

Für den Standard-Testfall mit Stickstoff als Fluid gelten die in Tabelle 6.1 aufgeführten Eigenschaften für den Hoch- und Niederdruckbereich:

Tabelle 6.1: Physikalische Größen für den Hoch- und Niederdruckbereich im Stoßrohr

| Parameter | Hochdruckbereich | Niederdruckbereich |
|--------------------------------------|------------------|--------------------|
| $p \left[\frac{N}{m^2} \right]$ | 1 | 0,1795 |
| $u \left[\frac{J}{kg} \right]$ | 2,5 | 1,795 |
| $\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ | 1 | 0,25 |
| $N [-]$ | 320 | 320 |

Unter diesen Bedingungen ergibt sich eine Stoß-Mach-Zahl von $M_s = \frac{v_s}{c_1} = 1,481$.

Stickstoff wird als ideales Gas betrachtet und mit der idealen Gasgleichung 3.12 und 3.13 mit $\kappa = 1,4$ beschrieben. Die Dichteberechnung erfolgt über den Summationsansatz (Gl. 4.22). Die dissipativen Terme werden aufgrund des Auftretens hoher Mach-Zahlen durch die künstliche Viskosität (Gl. 4.34), mit den Parametern $\alpha = 0,8$ und $\beta = 1,0$, modelliert. Zur Interpolation hat sich die quintische Glättungsfunktion mit $h = 1,6 \cdot \Delta x$ als vorteilhaft herausgestellt. Den Wänden werden reflektierende Eigenschaften aufgeprägt. Die in den Abbn. 6.2 - 6.5 aufgetragenen charakteristischen Verläufe der Strömungsgrößen Dichte, Druck, Geschwindigkeit und innere Energie als Funktion der dimensionslosen Rohrlänge $x^+ = \frac{x}{L}$ gelten für den Zeitpunkt $t = 0,2 s$. Es treten noch keine Reflektionen des Verdichtungsstoßes oder der Expansionswelle an den Wänden auf.

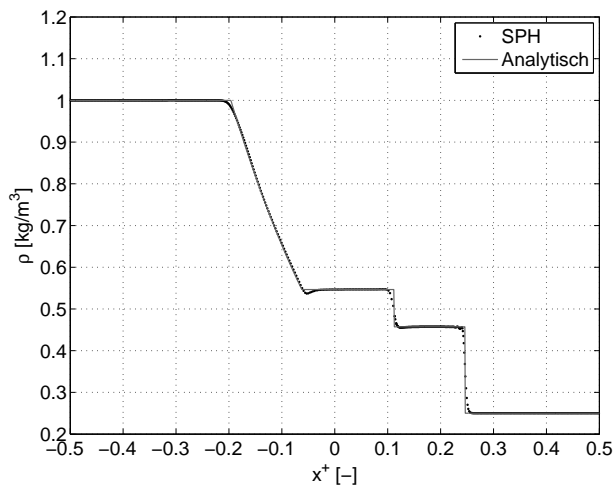


Abbildung 6.2: Dichteverlauf zum Zeitpunkt $t = 0,2 s$

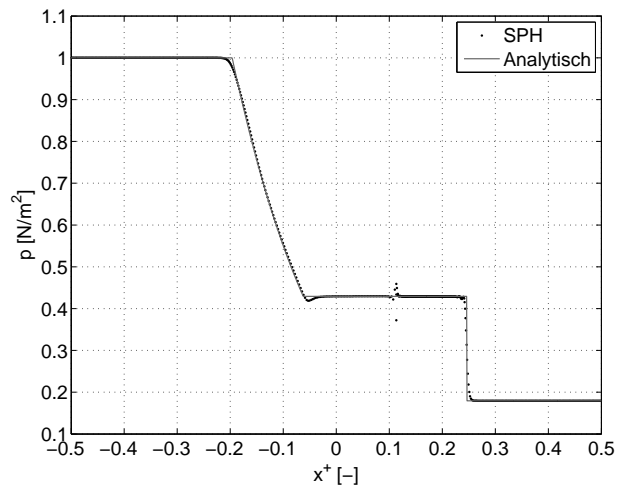


Abbildung 6.3: Druckverlauf zum Zeitpunkt $t = 0,2 s$

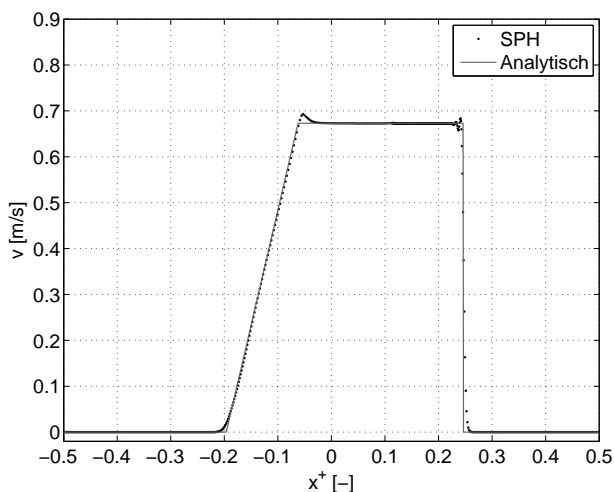


Abbildung 6.4: Geschwindigkeitsverlauf zum Zeitpunkt $t = 0,2 s$

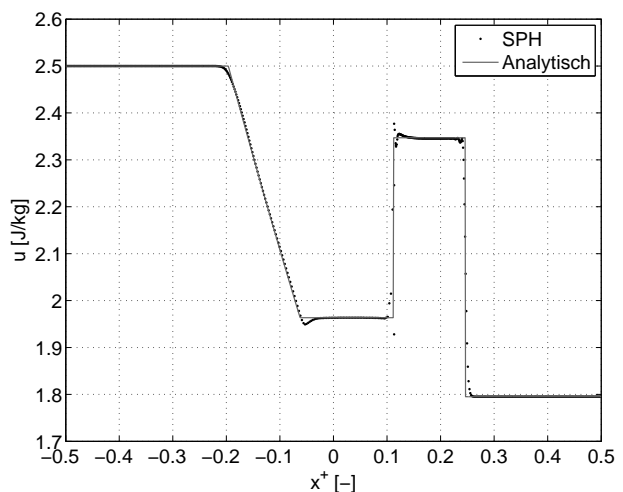


Abbildung 6.5: Verlauf der inneren Energie zum Zeitpunkt $t = 0,2 s$

Aus der theoretischen Herleitung ergibt sich für $t = 0,2 s$ die Lage des Verdichtungsstoßes an

der Stelle $x_s^+ = 0,247$ ($x_s = 0,296$ m), die Kontaktgrenze liegt bei $x_g^+ = 0,112$ ($x_g = 0,134$ m), das Ende und die Front der Expansionswelle treten bei $x_e^+ = -0,063$ und $x_f^+ = -0,197$ ($x_e = -0,075$ m und $x_f = -0,236$ m) auf. Diese Grenzen werden durch die SPH Simulation sehr gut erfasst. Der Dichteverlauf über die Stoßrohrlänge hinweg wird mit sehr guter Genauigkeit wiedergegeben. Dabei befindet sich sowohl die Dichteabnahme über die Expansionswelle hinweg als auch der Dichtesprung an der Mediengrenze und über den Verdichtungsstoß in exzellenter Übereinstimmung mit der Theorie. Der Verdichtungsstoß wird in seiner Ausdehnung minimal verschmiert. Zwischen der Stoßbreite und der angewendeten Glättungslänge besteht ein linearer Zusammenhang (Weiland (2011)). Durch Verringerung der Glättungslänge bzw. Erhöhung der Diskretisierung kann die Stoßbreite minimiert werden. An der Kontaktgrenze wird die Dichte aufgrund des Summationsansatzes über den maximalen Einflussradius der Interpolation hinweg verschmiert. Dies kann durch entsprechende Erhöhung der Diskretisierung und Wahl der Glättungslänge minimiert werden. Die Berechnung der Dichteänderungsrate nach Gl. 4.25 führt hingegen zu starken Diskrepanzen der Strömungsgrößen an der Kontaktgrenze, aufgrund der darin enthaltenen Geschwindigkeitsdifferenzen. Sie sollte daher für diesen Fall nicht verwendet werden. Eine Erhöhung der Diskretisierung bedeutet gleichzeitig eine Zunahme der Rechenzeit. Die dadurch erzielte Genauigkeitsverbesserung rechtfertigt in diesem Fall nicht die Rechenzeitzunahme. Die Druckverläufe werden von der SPH Simulation in den Bereichen 1 - 5 sehr gut erfasst. An der Kontaktgrenze treten Abweichungen von $< \pm 14\%$ auf. Der Geschwindigkeitsverlauf im Stoßrohr weist ein minimales Überschwingen der Geschwindigkeit von $+3\%$ am Ende der Expansionswelle auf. Bei linksseitiger Annäherung an die Stoßfront sind Geschwindigkeitsabweichungen von maximal $\pm 4\%$ festzustellen. Die Diskontinuität der inneren Energie über den Verdichtungsstoß hinweg wird ausgezeichnet wiedergegeben. Geringe Abweichungen $< 3\%$ sind an der Kontaktgrenze zwischen Treib- und Laufgas erkennbar.

Generell werden die Strömungszustände im Stoßrohr durch die SPH Methode mit nur minimalen Abweichungen von der analytischen Lösung sehr gut abgebildet. Die konstanten Werte der Strömungsgrößen in den Bereichen 1 - 3 und 5 stimmen exakt mit der Theorie überein. Die kontinuierliche Zustandsänderung des Gases über die Expansionswelle hinweg wird akkurat, ohne das Auftreten von Schwingungen, berechnet. Es tritt lediglich eine minimale Schwingung im Bereich 3 am Ende der Expansionswelle auf, welche Abweichungen der Strömungsgrößen von $\leq 3\%$ von der analytischen Lösung verursacht. Die Unstetigkeit beim Übergang von Bereich 4 in den Ruhezustand des Treibgases (5) wird aufgrund der Interpolation über benachbarte Stützstellen hinweg nicht exakt erfasst. An der Kontaktgrenze treten sowohl im Treib- wie auch im Laufgas maximale Abweichungen ($< 3\%$) der inneren Energie auf, welche sich durch die Zustandsgleichung direkt in Druckschwankungen auswirken.

Weiterhin soll geklärt werden, ob die SPH Berechnung auch für höhere Druckverhältnisse $\frac{p_5}{p_1}$ sowie für realitätsnahe physikalische Anfangszustände verlässliche Ergebnisse liefert. Für die erste Betrachtung wurden ausgehend vom Standardtestfall die Strömungsgrößen im Niederdruckteil des Stoßrohres so angepasst, dass sich ein Druckverhältnis von $\frac{p_5}{p_1} = 50$ ergibt. Daraus resultiert eine Stoß-Mach-Zahl von $M_s = 2,383$. Um die physikalischen Effekte in diesem Fall korrekt zu erfassen, wird die Glättungslänge auf $h = 4,8 \cdot \Delta x$ erhöht. Für geringere Glättungslängen von $h = 1,6 \cdot \Delta x$ und $h = 2,7 \cdot \Delta x$ treten vor allem in den Bereichen 2 und 3 starke Abweichungen von

den theoretischen Werten aufgrund der hohen Druckgradienten auf. Für die zweite Betrachtung, d.h. die realitätsnahe Simulation, werden ausgehend vom Standardtestfall für den Gaszustand im Niederdruckteil Normalbedingungen ($T_1 = 273,15 \text{ K}$, $p_1 = 101325 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$) angenommen. Aufgrund der um mehrere Größenordnungen höheren Anfangsdrücke, treten um ein Vielfaches höhere Schallgeschwindigkeiten auf, wodurch eine schnellere zeitliche Ausbreitung von Verdichtungsstoß, Kontaktgrenze und Expansionswelle erreicht wird. Daher wird die Länge des Stoßrohres bei gleichbleibender Stützstellenanzahl verzehnfacht ($h = 1,6 \cdot \Delta x$). Die Ergebnisse der SPH Simulation sind in Abb. 6.7 zum Zeitpunkt $t = 0,01 \text{ s}$ dargestellt. Die Stoß-Mach-Zahl beträgt wie im Standardtestfall $M_s = 1,481$, da diese neben den Freiheitsgraden des Moleküls ausschließlich vom Druckverhältnis $\frac{p_5}{p_1}$ abhängt.

In den Abb. 6.6 und 6.7 seien exemplarisch nur die charakteristischen Dichteverläufe entlang des Stoßrohres zum Zeitpunkt $t = 0,2 \text{ s}$ bzw. $t = 0,01 \text{ s}$ für beide Simulationen aufgezeigt. Die Verläufe des Druckes, der Geschwindigkeit und der inneren Energie sind im Anhang (A.2) zu finden.

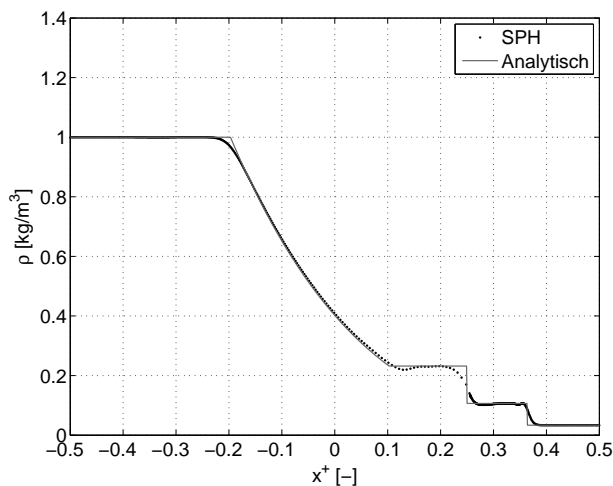


Abbildung 6.6: Dichteverlauf zum Zeitpunkt $t = 0,2 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 50$

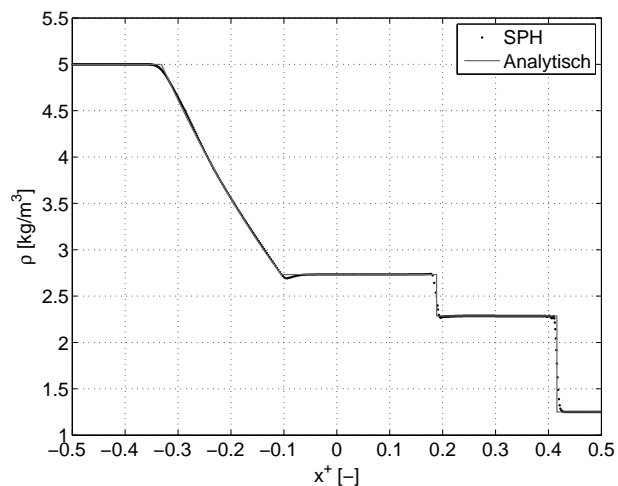


Abbildung 6.7: Dichteverlauf zum Zeitpunkt $t = 0,01 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 5,57$ unter der Annahme von Normalbedingungen für Gaszustand 1

Durch Erhöhung der Glättungslänge auf das Dreifache für die Simulation des Druckverhältnisses von $\frac{p_5}{p_1} = 50$ im Vergleich zum Standardtestfall wird der Verdichtungsstoß über einen breiteren Bereich ausgedehnt. Die Gaszustände innerhalb der Bereiche 1 - 5 werden in sehr guter Übereinstimmung mit der Theorie wiedergegeben. Bei der Simulation unter realen Anfangsbedingungen entspricht das Verhältnis der Glättungslänge zur Rohrlänge dem Standardtestfall, somit wird die Verschmierung der Stoßfront gering gehalten. Die SPH Simulation liefert in allen Bereichen eine hervorragende Übereinstimmung zwischen der Numerik und der Analytik.

Es stellt sich heraus, dass die Glättungslänge unabhängig von den absoluten Drücken im Hoch- und Niederdruckbereich festgelegt werden kann. Jedoch beeinflusst das Druckverhältnis bzw. die Stoß-Mach-Zahl, und somit das Auftreten der Druckgradienten, die Wahl der Glättungslänge.

Neben Stickstoff wurden weitere Gase, wie z.B. Wasserstoff oder Neon, als Treib- und Laufgas untersucht (Weiland (2011)). Bei H_2 ändern sich im Vergleich zu N_2 die Werte der spezifischen Gaskonstanten, der kinematischen Viskosität und der Wärmeleitfähigkeit. Das Gleiche gilt für einatomige Gase, wie z. B. Ne , wobei sich hier zudem das Verhältnis der spezifischen Wärmen κ und somit die analytische Lösung und die Anfangsbedingungen im Hoch- und Niederdruckbereich ändern. Auch deren Verhalten im Stoßrohr wird von der SPH Simulation ohne Beeinträchtigung der Genauigkeit erfasst. Des Weiteren können die Strömungscharakteristika im Stoßrohr bei Verwendung unterschiedlicher Gase (N_2/H_2) unter realen Bedingungen numerisch sehr genau vorhergesagt werden. Der Vergleich mit einer Finiten Volumen Rechnung mittels der Software ANSYS CFX zeigt die bestechenden Vorteile der SPH Simulation auf. Dies ist aus dem Dichteverlauf im Stoßrohr nach $t = 0,01$ s der Simulation unter realitätsnahen Bedingungen in Abb. 6.8 ersichtlich.

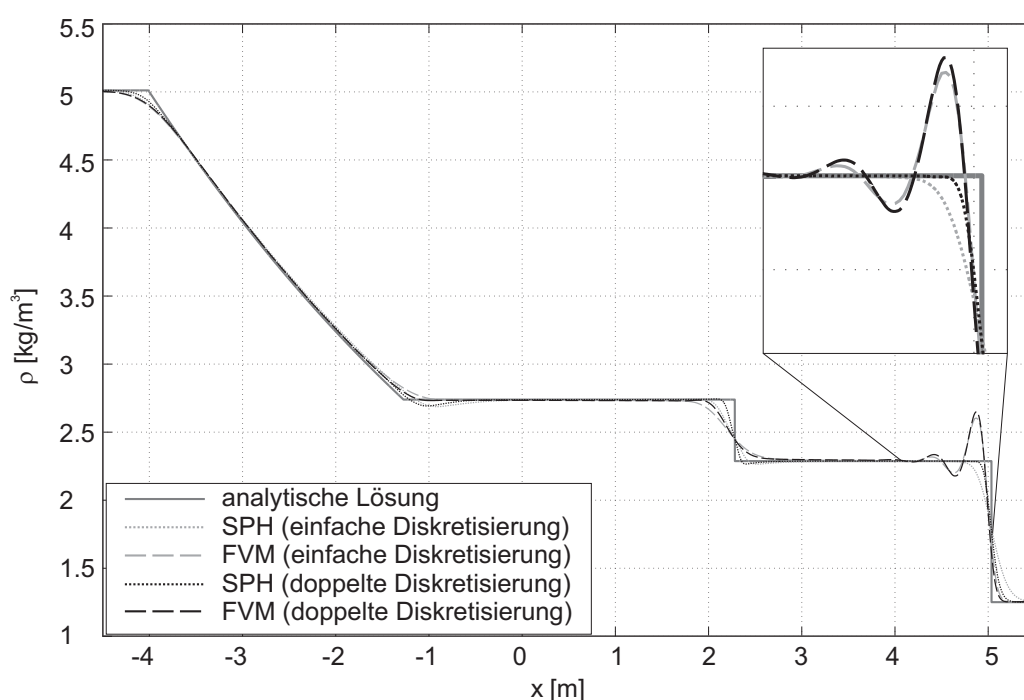


Abbildung 6.8: Vergleich der FVM und SPH Methode unter realitätsnahen Bedingungen (Weiland (2011))

Bei gleicher Anzahl an Diskretisierungspunkten, derselben Zeitschrittweite und der identischen Anzahl Zeitschritte für beide Simulationen liefert die SPH Methode genauere Ergebnisse und insbesondere eine geringere Verschmierung der Dichtediskontinuität an der Kontaktgrenze. An der Stoßfront treten im Vergleich zur FVM Rechnung keine Schwingungen auf. Die Rechenzeiten für die FVM Simulation liegen um ein 20-faches höher als bei der SPH Berechnung.

Zusammenfassend zeigt sich, dass der entwickelte SPH Code in der Lage ist, kompressible Effekte, die bei speziellen Zerstäubertypen auftreten können, exakt zu erfassen und die physikalischen Phänomene, selbst beim Auftreten von Diskontinuitäten, korrekt vorherzusagen. Hervorragende Ergebnisse konnten im Vergleich zu gitterbasierten FVM Strömungslösern erzielt werden.

6.1.2 Kavitätsströmung

Der flüssige Kraftstoff soll als inkompressibles Medium modelliert werden. Daher ist es unumgänglich, den Code anhand von Testfällen für inkompressible Strömungen zu validieren. In Airblast-Zerstäubern wird der flüssige Kraftstoff normalerweise über Bohrungen, bei speziellen Ausführungen auch über einen Druckzerstäuber, auf den Filmleger aufgebracht. Die hohe Relativgeschwindigkeit zwischen verdrahlter Luft und Kraftstoff führt zu einer starken Interaktion der beiden Phasen. Es kommt zur Schubspannungsinduzierten Wellenbildung an der Flüssigkeitsoberfläche. Der Flüssigkeitsfilm wird zur Filmlegerkante transportiert. Außerdem hat die Wand-Flüssigkeits-Interaktion Auswirkungen auf die Wellenbildung und muss korrekt erfasst werden.

Mit diesem Testfall wird die schubspannungsinduzierte Fluidbewegung in einer geschlossenen Kavität untersucht. Das Fluid ist am Boden und an den Seiten von starren, feststehenden Wänden umgeben. Der Deckel bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit u_0 in x -Richtung. Das Fluid befindet sich anfänglich in Ruhe und wird durch die Bewegung des Deckels aufgrund der Schubspannung beschleunigt. Für geringe Reynolds-Zahlen bildet sich im stationären Zustand ein laminarer Wirbel im Inneren der Kavität aus. Der schematische Aufbau dieses Testfalles ist in Abb. 6.9 wiedergegeben.

Die zweidimensionale Kavität besitzt quadratische Abmessungen der Länge $H \times H$. Dem Fluid bzw. den diskretisierten Fluidpartikeln werden die physikalischen Eigenschaften von Wasser unter Umgebungsbedingungen zugeordnet. Die Wände werden durch versetzt angeordnete Reihen an Randpartikeln mit demselben Interpartikelabstand wie zwischen den Fluidpartikeln modelliert. Die Geschwindigkeit der bewegten Wand in x -Richtung ergibt sich aus der Vorgabe der Reynolds-Zahl $Re = 1$. Die Randpartikel, welche die Wände repräsentieren, üben repulsive Kräfte, welche in Kapitel 4.8 beschrieben sind, auf die Fluidpartikel aus.

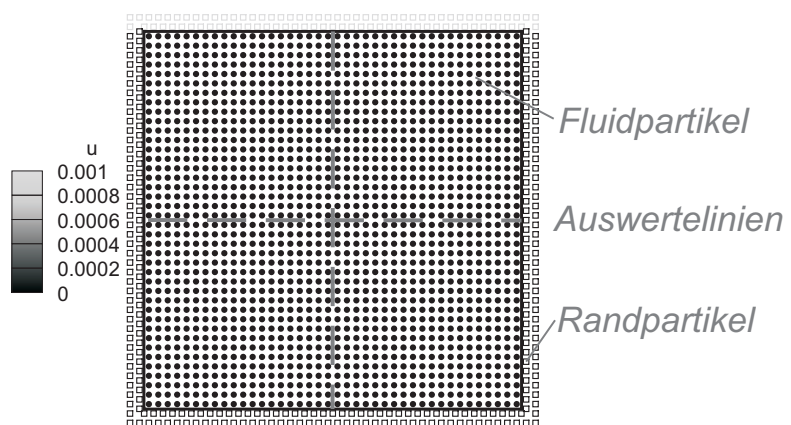
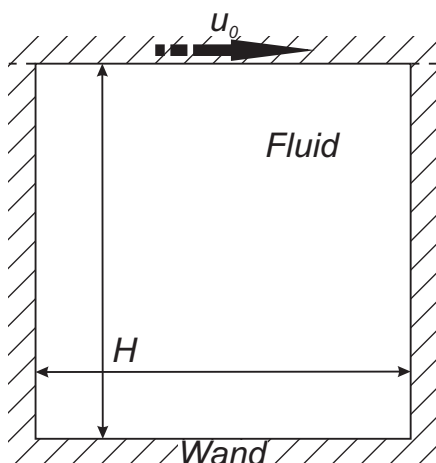


Abbildung 6.9: Skizze der zweidimensionalen Kavität

Abbildung 6.10: Diskretisierung der Kavität und Auswertelinien für die Geschwindigkeitsprofile

Anhand dieses Beispiels soll neben der Validierung des Partikelverfahrens für laminare Strö-

mungen auch die Konvergenz der SPH Methode verifiziert werden. Einerseits wird der Einfluss der Interpolationsfunktion auf das Ergebnis untersucht. Andererseits wird die Konvergenz der Methode für verschiedene Diskretisierungsgrade diskutiert. Zur Auswertung dienen in erster Linie das Profil der horizontalen Geschwindigkeitskomponente entlang der vertikalen Mittelachse der Kavität, sowie das Geschwindigkeitsprofil der Vertikalkomponente entlang der horizontalen Mittelachse. Diese Auswertelinien sind in Abb. 6.10 zusätzlich zu der initialen Diskretisierung des Strömungsgebiets dargestellt. Die Randpartikel werden durch Quadrate repräsentiert, die das Fluid diskretisierenden Partikel sind durch ausgefüllte Kreise gekennzeichnet. Die Grauwertverteilung gibt die Anfangsbedingungen des Geschwindigkeitsfeldes wieder. Die mittels der SPH Methode berechneten Geschwindigkeiten werden den aus einer FVM Simulation erhaltenen Ergebnissen, welche mit der Software OpenFOAM berechnet wurden, gegenübergestellt. Die im Folgenden abgebildeten Profile geben den Strömungszustand nach der Zeit $t^+ = t \frac{u_0}{H} = 2$ nach Simulationsstart ausgehend von einem ruhenden Fluidsystem wieder.

6.1.2.1 Einfluss der Interpolationsfunktion

Im Rahmen der im Folgenden diskutierten Simulationsreihen wurde die Glättungsfunktion und somit das Interpolationsverfahren, zum einen bei konstanter Glättungslänge h und zum anderen bei konstantem maximalem Einflussradius r_{max} , variiert. Allen Konfigurationen liegt dieselbe Diskretisierung von 40×40 Fluidpartikeln für das Fluid im Inneren der Kavität, und somit derselbe Partikelabstand $\Delta x = \frac{H}{40}$, zu Grunde. Die Wände werden durch jeweils zwei versetzt angeordnete Reihen von Randpartikeln dargestellt. Durch das Aufprägen der Translationsgeschwindigkeit auf die Stützstellen, welche den horizontal bewegten Deckel repräsentieren, entstehen Schubspannungen zwischen der Wand und dem anfänglich ruhenden Fluid. Dadurch wird die Fluidbewegung und schliesslich die Ausbildung des laminaren Wirbels verursacht.

$\frac{h}{\Delta x} = \text{konst}$

Bleibt die Glättungslänge h unabhängig von der angewendeten Interpolationsfunktion konstant, so variiert der maximale Einflussradius r_{max} je nach Glättungsfunktion. Dieser lässt sich aus den maximalen dimensionslosen Einflussradien der Glättungsfunktionen q_{max} nach Tabelle 4.1 herleiten. Die ermittelten Geschwindigkeitsprofile für eine Glättungslänge von $h = 0,96 \cdot \Delta x$ sind in den Abbn. 6.11 und 6.12 wiedergegeben.

Diese Ergebnisse sollten in Verbindung mit den Erläuterungen zu Abb. 4.4, in der der relative Approximationsfehler als Funktion des Verhältnisses $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ für jede Glättungsfunktion aufgetragen ist, und Tabelle 4.1 interpretiert werden. Nach obiger Voraussetzung von $h = 0,96 \cdot \Delta x$ folgt ein Verhältnis von $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 0,96 \cdot q_{max}$. Es ist zu erkennen, dass mittels der kubischen, der Gauss, der quintischen und der quartischen Glättungsfunktion sehr gute Übereinstimmungen der Ergebnisse von SPH und FVM Simulation erzielt werden können. Im Fall der kubischen Glättungsfunktion ergibt sich $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 1,92$, was zu einem nahezu vernachlässigbaren Approximationsfehler nach Abb. 4.4 führt. Ändern sich jedoch die Partikelabstände und somit Δx geringfügig, treten Schwankungen im relativen Approximationsfehler auf. Dies verursacht die Abweichungen der SPH Ergebnisse bei Verwendung der kubischen Interpolationsfunktion in den vertikalen Geschwindigkeitskomponenten entlang der horizontalen Mittelachse.

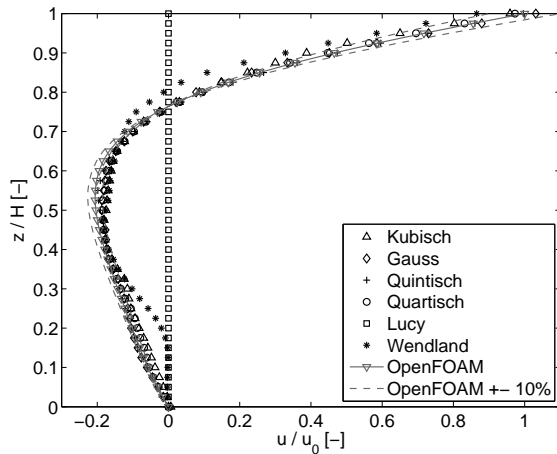


Abbildung 6.11: Geschwindigkeitsprofil der Horizontalkomponente entlang der vertikalen Mittelachse für $h = 0,96 \cdot \Delta x$

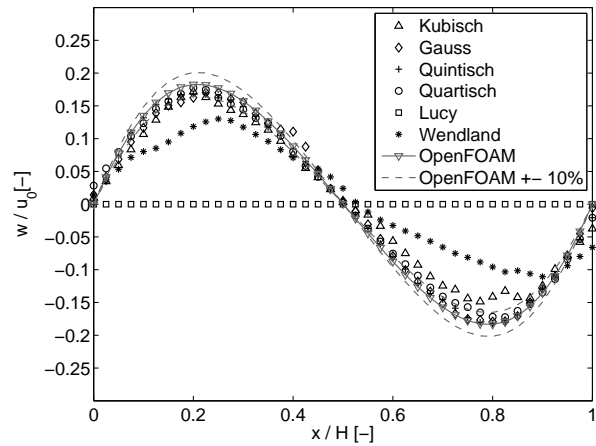


Abbildung 6.12: Geschwindigkeitsprofil der Vertikalkomponente entlang der horizontalen Mittelachse für $h = 0,96 \cdot \Delta x$

Im Fall der Gauss und der quintischen Glättungsfunktion mit $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 2,88$ treten nur sehr geringe, nahezu vernachlässigbare Approximationsfehler ($< 0,1\%$ s. Abb. 4.4) auf, welche bei geringfügigen Änderung von Δx keinen Schwankungen unterliegen. Daher lassen sich mit diesen beiden Interpolationsfunktionen die Geschwindigkeitsprofile äußerst genau wiedergeben. Die Haftbedingungen an den festen Wänden und an der bewegten Wand werden sehr gut erfasst. Die Minima, Maxima und Nulldurchgänge der Geschwindigkeitskomponenten können mit sehr guter Genauigkeit vorhergesagt werden. Auch die quartische Glättungsfunktion mit $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 2,4$ weist einen vernachlässigbaren relativen Fehler und nur minimale Schwankungen über Δx in den Summenapproximationen auf.

Ganz anders hingegen verhalten sich die Lucy und Wendland Funktionen mit $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 0,96$ bzw. $1,92$. In diesen Fällen treten starke Abweichungen der SPH Ergebnisse gegenüber der FVM Simulation auf. Ursache sind die großen relativen Approximationsfehler ($> 2\%$). Den Extremfall spiegelt die Interpolation mittels der Lucy Funktion wieder. Der maximale Einflussradius r_{max} ist hierbei geringer als der Partikelabstand Δx . Dies führt dazu, dass keine Interpolationen im eigentlichen Sinn durchgeführt werden, da ein Partikel keine Nachbarpartikel sieht. Somit kann die Geschwindigkeit des Deckels nicht auf das Fluid Einfluss nehmen, da keine Schubspannungen auftreten.

Die ausgeführte Erklärung trifft selbstverständlich nur zu, wenn die Partikelabstände Δx im Laufe der Simulation nahezu konstant bleiben. Andernfalls treten starke Schwankungen in $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ auf, was zu großen Variationen in der Genauigkeit der Approximationen entsprechend Abb. 4.4 führt. Dies ist vor allem für geringe Verhältnisse von $\frac{r_{max}}{\Delta x}$, insbesondere bei der kubischen und der Lucy Glättungsfunktion, der Fall.

$$\frac{r_{max}}{\Delta x} = \text{konst}$$

Wird hingegen der maximale Einflussradius für die Interpolationen als konstant vorausgesetzt,

so muss die Glättungslänge für die jeweilige Glättungsfunktion entsprechend angepasst werden. Dies führt dazu, dass jede Summeninterpolation der physikalischen Größen an einer Stützstelle, unabhängig von der verwendeten Interpolationsfunktion, auf derselben Anzahl von benachbarten Stützstellen basiert. Anschaulich bedeutet dies, dass die Anzahl der benachbarten Stützstellen eines Partikels nicht mehr von der Glättungsfunktion beeinflusst wird. Bei einer geordneten Verteilung von 40×40 Stützstellen in der Kavität mit den Abmaßen $H \times H$ entspricht ein maximaler Einflussradius von $r_{max} = 2,88 \cdot \Delta x$ 24 benachbarten Interpolationspunkten für jedes Partikel.

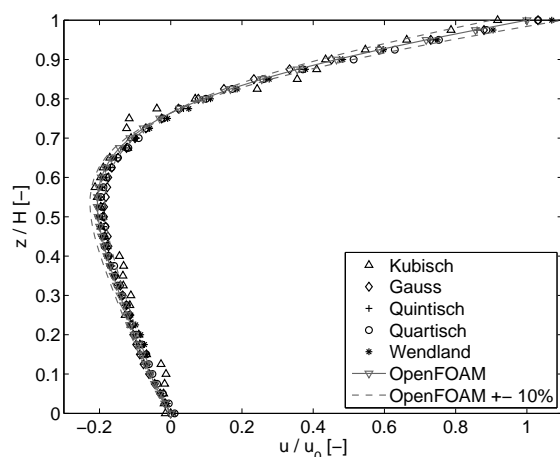


Abbildung 6.13: Geschwindigkeitsprofil der Horizontalkomponente entlang der vertikalen Mittelachse für $r_{max} = 2,88 \cdot \Delta x$

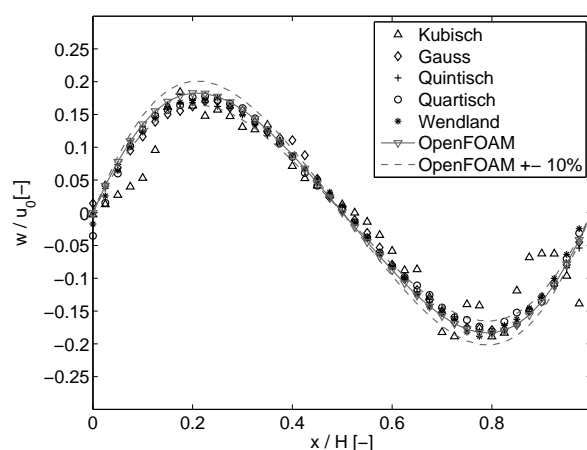


Abbildung 6.14: Geschwindigkeitsprofil der Vertikalkomponente entlang der horizontalen Mittelachse für $r_{max} = 2,88 \cdot \Delta x$

Bis auf die Simulation mit der kubischen Glättungsfunktion werden sehr gute Übereinstimmungen zwischen SPH und FVM erzielt, wie in den Abbn. 6.13 und 6.14 zu sehen ist. Das Verhältnis $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ liegt in diesem Fall für alle Interpolationsfunktionen bei 2,88. Nach Abb. 4.4 treten hierbei relative Fehler in der Summenapproximation von unter 1% auf. Abweichungen der Ergebnisse für die kubische Glättungsfunktion sind auf die Schwankungen im relativen Fehler in Abhängigkeit von Δx in diesem Bereich zurückzuführen. Bei Verwendung der Lucy Glättungsfunktion bricht die Simulation frühzeitig ab, da ein Fluidpartikel die Wand durchdringt. Somit wurden diese Ergebnisse nicht zur Auswertung herangezogen.

Sollen die verschiedenen Glättungsfunktionen zur Simulation eines physikalischen Sachverhalts hinsichtlich ihrer Eignung und Genauigkeit der damit berechneten Interpolationen beurteilt werden, so ist ein konstanter maximaler Einflussradius r_{max} für die Vergleiche festzulegen. Somit ist gewährleistet, dass bei allen Simulationen dieselben physikalischen Phänomene aufgelöst werden. Um eine hohe Genauigkeit bei vertretbarem Rechenaufwand zu erzielen ist $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ entsprechend Abb. 4.4 so zu wählen, dass möglichst geringe Schwankungen im relativen Fehler bei einer minimalen Anzahl an Nachbarstützstellen auftreten.

Zusammenfassend kann die Aussage getroffen werden, dass alle Interpolationsfunktionen ober-

halb eines maximalen Einflussradius bzw. bei einer entsprechend ausreichenden Anzahl an benachbarten Stützstellen zur Interpolation sehr gute Ergebnisse für die SPH Simulation liefern. Die kubische Glättungsfunktion kann schon ab einem relativ geringen Einflussradius, d.h. wenigen Nachbarstützstellen und somit bei geringerem Rechenaufwand, sehr gute Ergebnisse liefern. Zu beachten ist, dass hierbei Ungenauigkeiten aufgrund der Schwankungen des relativen Fehlers in Abhängigkeit der Partikelabstände Δx auftreten können. In diesem Fall sollte eine Interpolationsfunktion gewählt werden, welche keinen oder nur sehr geringen Schwankungen des relativen Fehlers in Abhängigkeit des Partikelabstandes unterliegt, wie z. B. die quintische Glättungsfunktion. Variieren die Partikelabstände Δx im Verlauf der Simulation stark, muss der maximale Einflussradius groß genug sein, um stets eine ausreichende Anzahl an benachbarten Stützstellen für die Interpolationen zu erhalten. Für die Zukunft ist vorgesehen, ein Verfahren zur adaptiven Diskretisierungsverfeinerung einzuführen.

6.1.2.2 Konvergenzverhalten

Gegenstand dieser Studie ist die Untersuchung des Konvergenzverhaltens, ähnlich einer Gitterunabhängigkeitsstudie bei gitterbasierten Verfahren. Dazu wird bei gleichbleibenden Kavitätsabmessungen die Diskretisierung, d. h. die Stützstellenanzahl, variiert. Als Referenzfall dient die Modellierung der Kavitätsströmung mit 40×40 Fluidpartikeln und Darstellung der Wände durch zwei versetzt angeordnete Reihen an Randpartikeln, bei einer dimensionslosen Glättungslänge von $\frac{h}{\Delta x} = 0,96$. Als Interpolationsfunktion wird aufgrund der vorhergegangenen Untersuchungen die quintische Glättungsfunktion gewählt, so dass $\frac{r_{max}}{\Delta x} = 0,96 \cdot q_{max} = 2,88$ für den Referenzfall gilt und die Approximationsfehler vernachlässigbar sind.

h = konst

Bei konstanter Glättungslänge h und damit konstantem maximalem Einflussradius r_{max} wird die Anzahl der Stützstellen, welche das Fluid in der Kavität repräsentieren, variiert. Da sich hierdurch der Abstand zwischen den Fluidpartikeln Δx ändert, schwankt auch die den Summeninterpolationen zugrundeliegende Anzahl an benachbarten Stützstellen.

In den Abbn. 6.15 und 6.16 werden die Ergebnisse der Diskretisierungsstudie anhand der horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitsprofile entlang der vertikalen bzw. horizontalen Mittelachse miteinander verglichen. Wie erwartet, wird bei einer zu geringen Auflösung von 20×20 Partikeln und somit großem Partikelabstand eine sehr geringe Wechselwirkung der Stützstellen untereinander stattfinden. Unter der Annahme einer geordneten Partikelverteilung basieren die Interpolationen in diesem Fall auf nur acht Nachbarstützstellen, welche auf das Zentralpartikel aufgrund ihres weiten Abstandes nur einen geringen Einfluss haben. In Tabelle 6.2 ist die jeweilige Anzahl der Nachbarstützstellen, die zur Interpolation herangezogen werden, in Abhängigkeit der angewendeten Diskretisierung aufgelistet.

Bei einer Diskretisierung von 30×30 Partikeln treten hohe relative Approximationsfehler auf, wodurch die Genauigkeit der SPH Simulation stark beeinträchtigt wird. Die Haftbedingung an der linken und rechten feststehenden Wand und der bewegten Wand kann nicht erfasst werden. Lediglich die Haftbedingung an der Bodenplatte wird exakt wiedergegeben, da die Fluidgeschwindigkeit im bodennahen Bereich stets nahezu Null ist und keine Partikelbewegung

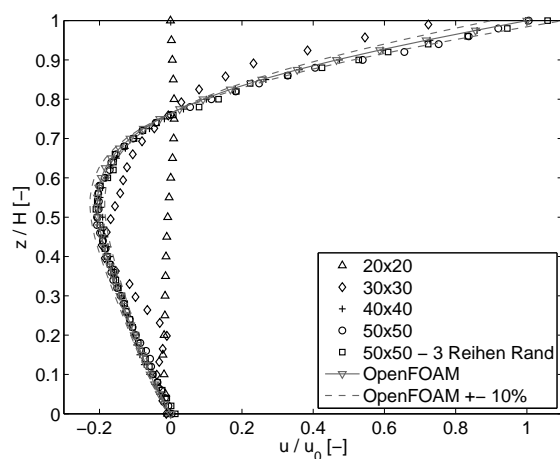


Abbildung 6.15: Konvergenzverhalten bei konstanter Glättungslänge $h = 2,4 \cdot 10^{-5} m$

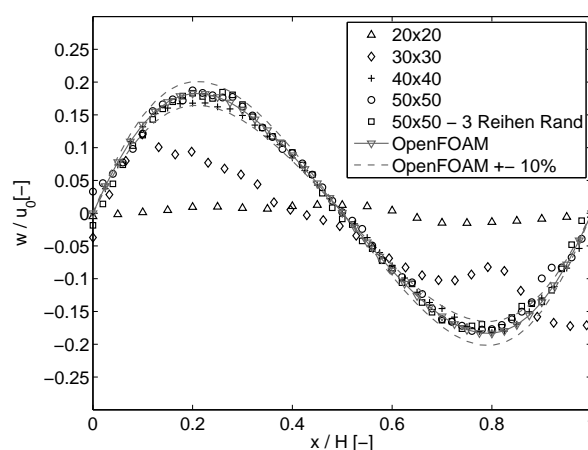


Abbildung 6.16: Konvergenzverhalten bei konstanter Glättungslänge $h = 2,4 \cdot 10^{-5} m$

Tabelle 6.2: Anzahl der Interpolationsstützstellen in Abhängigkeit der Diskretisierung bei konstantem h ($q_{max} = 3$)

| Diskretisierung | $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ | Benachbarte Stützstellen |
|-----------------|----------------------------|--------------------------|
| 20 x 20 | 1,44 | 8 |
| 30 x 30 | 2,16 | 12 |
| 40 x 40 | 2,88 | 24 |
| 50 x 50 | 3,60 | 36 |

auftritt. Der Initialisierungszustand entspricht somit dem Zustand nach $t^+ = 2$ und erfüllt die Haftbedingung a priori. Für eine Anordnung von 40 x 40 und 50 x 50 Partikeln in der Kavität wird eine gute Übereinstimmung mit der FVM Simulation erzielt, sowohl was die Haftbedingung an den Wänden betrifft als auch die Erfassung der Geschwindigkeitsmaxima, -minima und Nulldurchgänge. Die Diskretisierung des Randes übt kaum einen Einfluss auf die Ergebnisse aus. Dies ist wie zuvor im Zusammenhang mit dem relativen Approximationsfehler als Funktion von $\frac{r_{max}}{\Delta x}$ zu sehen.

Im Fall einer Diskretisierung mittels 50 x 50 Partikeln mit zwei Reihen an Randpartikeln durchdringen die Fluidpartikel während der Simulation die Wand in der rechten oberen Ecke, in welcher der Maximaldruck vorliegt. Dies kann vermieden werden, indem drei Reihen Randpartikel gesetzt werden, was jedoch einen erhöhten Rechenaufwand zur Folge hat. Die Genauigkeit der Ergebnisse verbessert sich im Vergleich zur Simulation mit 40 x 40 Partikeln nicht.

$$\frac{h}{\Delta x} = \text{konst}$$

Durch die Vorgabe einer konstanten dimensionslosen Glättungslänge von $\frac{h}{\Delta x} = 0,96$ variiert der Einflussradius mit der Diskretisierung. Hierdurch wird das Auflösungsvermögen kleinster Strukturen beeinflusst. Jedoch wird dadurch gewährleistet, dass die Anzahl der benachbarten Stützstellen, welche für die Approximationen herangezogen werden, konstant (= 24 vgl. Tab. 6.2) bleibt.

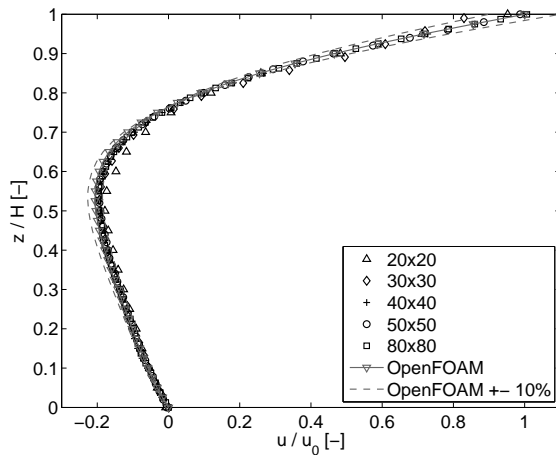


Abbildung 6.17: Konvergenzverhalten bei konstanter dimensionsloser Glättungslänge $h = 0,96 \cdot \Delta x$

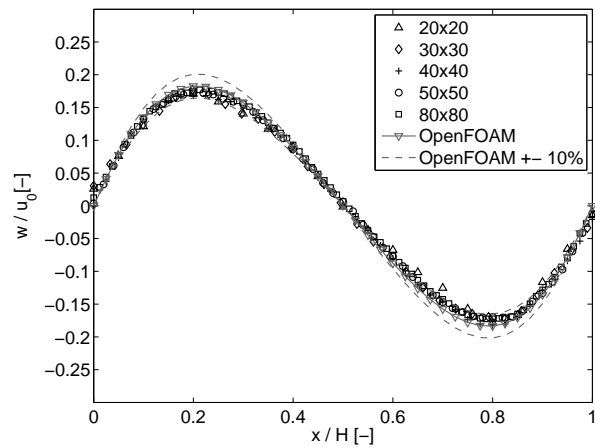


Abbildung 6.18: Konvergenzverhalten bei konstanter dimensionsloser Glättungslänge $h = 0,96 \cdot \Delta x$

Wie aus den Abbn. 6.17 und 6.18 ersichtlich ist, liefern hierbei alle Simulationen mit einer Diskretisierung des Fluids von 20 x 20 bis hin zu 50 x 50 eine sehr gute Übereinstimmung mit den FVM Ergebnissen. Bei einer Anordnung von 50 x 50 Partikeln im Fluidgebiet und zwei Reihen an Randpartikeln tritt in diesem Fall kein Durchdringen der Wände auf.

Bei einer weiteren Verfeinerung der Diskretisierung auf 80 x 80 Fluidpartikel und bis zu drei Reihen Randpartikel zur Modellierung der Wände, tritt wiederum das Durchdringen der festen Wände auf. Die Strömungsgeschwindigkeiten in der Kavität werden zwar ausreichend genau wiedergegeben, jedoch tritt dadurch ein nicht physikalischer Masseverlust in der Kavität auf. Abhilfe könnten mehrere Reihen an Randpartikeln zur Repräsentation der Wände oder eine Erhöhung der Masse der Randpartikel schaffen.

Somit ergibt sich für diesen Testfall die Schlussfolgerung, dass eine Gebietsauflösung mittels 40 x 40 Fluidpartikel bei einer Glättungslänge von $\frac{h}{\Delta x} = 0,96$ ausreichend zur korrekten Erfassung der auftretenden Strömungsphänomene bei geringst möglichem Rechenaufwand ist. Die Angaben stellen einen Orientierungswert dar und sind für jeden Anwendungsfall von der Wahl der Glättungsfunktion, der gewünschten Auflösung der physikalischen Prozesse und den Randbedingungen abhängig. In Abb. 6.19 sind die Stromlinien und die Verteilung der entdimensionierten Absolutgeschwindigkeit ($v^+ = \frac{v_{abs}}{u_0}$) in der Kavität zum Zeitpunkt $t^+ = 2$ wiedergegeben. Der laminare Wirbel ist deutlich zu erkennen.

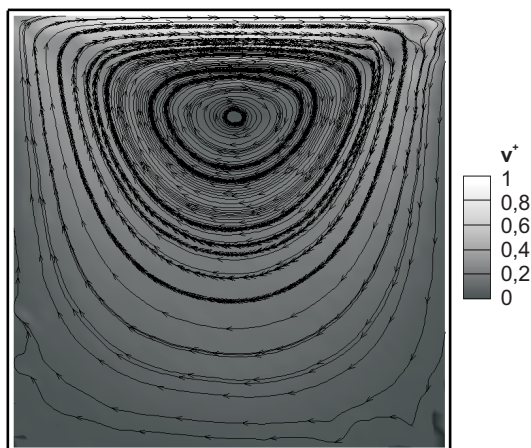


Abbildung 6.19: Geschwindigkeitsfeld und Stromlinien in der Kavität für $t^+ = 2$

Damit bleibt festzuhalten, dass die numerische Vorhersage des schubspannungsinduzierten Strömungsverhaltens inkompressibler Fluide mit dem entwickelten Strömungslöser auf Basis der SPH Methode mit hoher Genauigkeit gelingt. Die Fluid-Wand-Interaktion sowie die Haftbedingung an festen Wänden wird korrekt abgebildet. Somit kann die dem Primärzerfall vorausgehende Wellenbildung und die Flüssigkeitsströmung an der Filmlegerkante prinzipiell erfasst werden.

6.1.3 Couette Strömung

Die ebene Couette Strömung dient zur Validierung der implementierten periodischen Randbedingung und der Untersuchung der zeitabhängigen Ausbildung schubspannungsgetriebener Strömungen (Höfler et al., 2012). Sie tritt im Rahmen der Zielanwendung - der Simulation des Primärzerfalls in einem Airblast-Zerstäuber und im weiteren Sinn des Aufbaus eines virtuellen Zerstäuberprüfstandes - näherungsweise auf dem Filmleger auf. Der Vergleich mit analytischen zeitabhängigen Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen für einen Reynolds-Zahlbereich von $Re = 1 - 100$ ermöglicht die Validierung des Verfahrens direkt anhand der zugrunde liegenden Physik der Kontinuumsmechanik. Periodische Ränder sind für die effiziente numerische Simulation ein unerlässlicher Code-Baustein.

Zur Berechnung der zweidimensionalen Couette Strömung wurde das Simulationsgebiet der Kavitätsströmung (Kapitel 6.1.2) geringfügig modifiziert. Dessen Aufbau und die Beaufschlagung des Fluids sind in Abb. 6.20 dargestellt. Die Abmessungen und die Diskretisierung des Fluids mit 40×40 Fluidpartikeln entsprechen dem vorherigen Referenzfall. Die festen Wände links und rechts wurden durch korrespondierende periodische Randbedingungen (Strichpunktlinien), wie in Kapitel 5.2.3 beschrieben, ersetzt. Zur Interpolation wird die quintische Glättungsfunktion mit $h = 0,96 \cdot \Delta x$ verwendet. Die Variation der Reynolds-Zahl im Bereich von $Re = 1 - 100$ erfolgt über die Variation der Horizontalgeschwindigkeit der oberen Wand, welche über die Simulationsdauer konstant ist. Das Fluid befindet sich anfänglich in Ruhe und das System somit im Nicht-Gleichgewicht. Die Wände üben eine repulsive Kraft auf das Fluid aus.

Die Dichte wird nach dem Summationsansatz (Gl. 4.22) bestimmt. Da das Rechengebiet

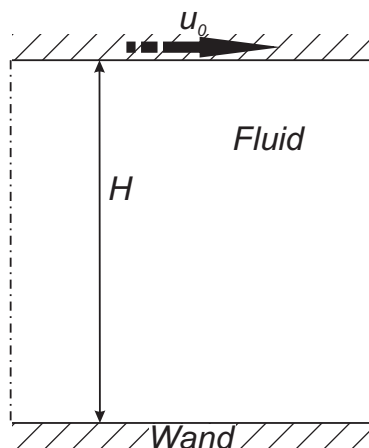


Abbildung 6.20: Skizze der zweidimensionalen Couette Strömung

vollständig mit Diskretisierungspunkten belegt ist, keine freien Ränder auftreten und keine gerichtete Verzerrung der Diskretisierungspunkte stattfindet, werden in diesem Fall keine numerischen Korrekturen, wie z. B. die Normierung der Dichte nach Gl. 4.66 oder die XSPH-Geschwindigkeitskorrektur gemäß Gl. 4.65, vorgenommen. Die Genauigkeit wird durch die Korrekturen nicht verbessert. Der Einfluss der XSPH-Korrektur auf die Simulationsergebnisse wird anhand des Dambruch-Testfalls in Kapitel 6.2.2 diskutiert. Die Berechnung der dissipativen Terme erfolgt direkt über die verschachtelte Bildung zuerst der Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes und im Anschluss daran der Divergenz des Schubspannungstensors. Wird das laminare Viskositätsmodell nach Gl. 4.37 angewendet, treten keine merklichen Veränderungen auf.

Die Geschwindigkeitsprofile entlang einer vertikalen Auswertelinie - zu Beginn der Simulation, während des Einlaufvorganges und nachdem die Strömung als stationär angesehen werden kann - sind in den Abbn. 6.21 - 6.24 für die Reynolds-Zahlen $Re = 1, 5, 10, 100$ abgebildet. Die dimensionslose horizontale Geschwindigkeitskomponente $u^+ = \frac{u}{u_0}$ ist als Funktion der dimensionslosen Kanalhöhe $z^+ = \frac{z}{H}$ aufgetragen. Um die SPH Daten entlang einer Linie auswerten zu können, werden diese zuvor auf ein Hintergrundgitter mit einer Gitterauflösung, welche der anfänglichen Partikelauflösung entspricht, interpoliert. Die analytische Lösung ist nach dem Summenansatz, wie er beispielsweise bei Morris et al. (1997) zu finden ist, berechnet.

Es wird eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den SPH Resultaten und der analytischen Lösung für $Re = 1, 5, 10$ zu allen drei Zeitpunkten erzielt. Die Haftbedingungen an den Wänden werden sehr gut wiedergegeben. Selbst das Auftreten hoher Geschwindigkeitsgradienten zu Beginn der Simulation in der Nähe der oberen, bewegten Wand wird exzellent erfasst. Vernachlässigbare minimale Abweichungen sind jeweils zu Beginn der Simulation zum Zeitpunkt $t = 7 \cdot 10^{-3} s$ in der Transitionsregion zwischen noch ruhenden und den bereits bewegten Fluidpartikeln erkennbar. Diese Abweichungen von der analytischen Lösung treten jedoch im weiteren zeitlichen Verlauf der Rechnungen nicht mehr auf.

Geringe Abweichungen von den analytischen Profilen sind für $Re = 100$ bei $t = 7 \cdot 10^{-2} s$ und $t = 7 \cdot 10^{-1} s$ zu beobachten. Dies ist auf die Partikelverteilung im Kanal zurückzuführen. Die

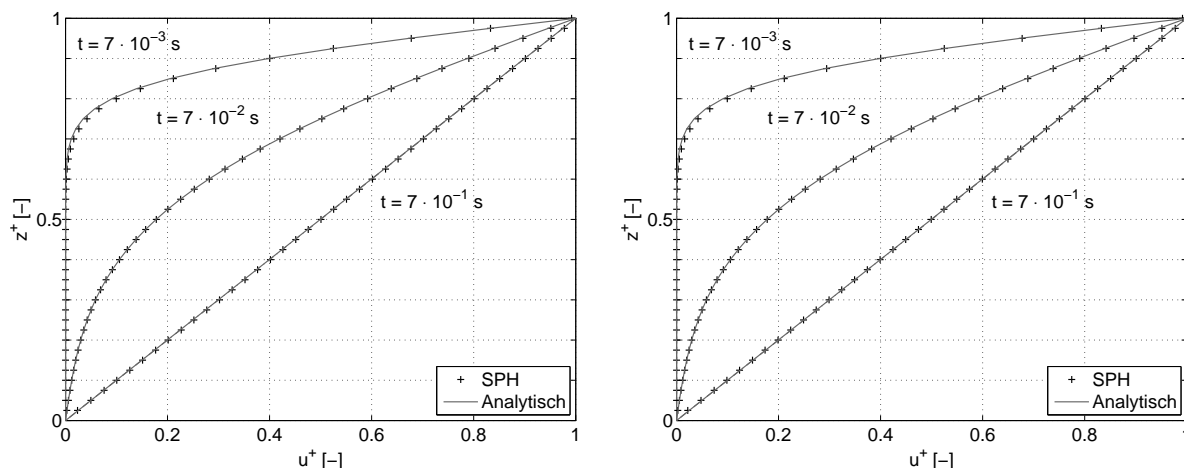


Abbildung 6.21: Instationäre Couette Strömung für $Re = 1$ Abbildung 6.22: Instationäre Couette Strömung für $Re = 5$

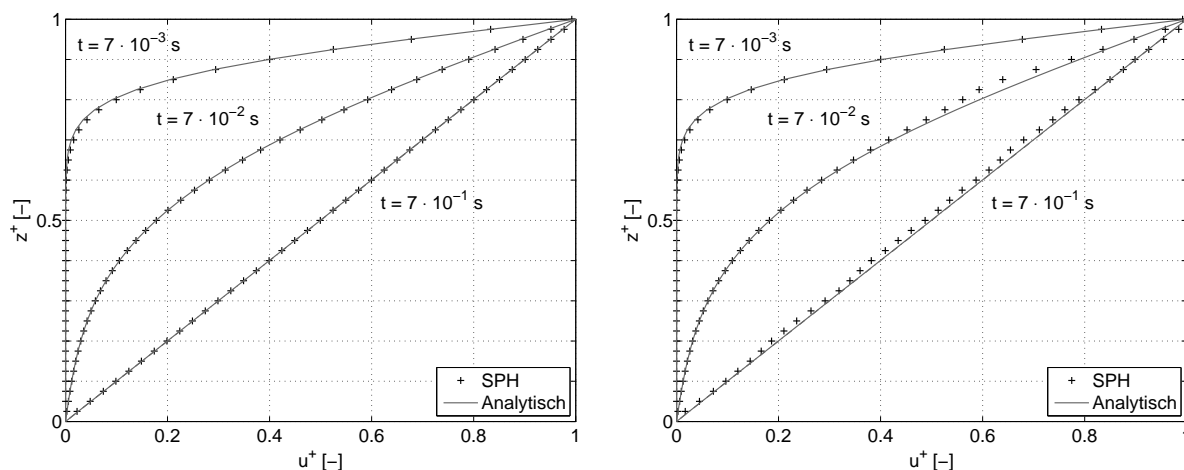


Abbildung 6.23: Instationäre Couette Strömung für $Re = 10$ Abbildung 6.24: Instationäre Couette Strömung für $Re = 100$

Verteilung der Stützstellen ist jeweils für $Re = 10$ und $Re = 100$ in Abb. 6.25 gegeben. Den Diskretisierungspunkten sind Grauwerte entsprechend ihrer dimensionslosen Geschwindigkeit in x -Richtung u^+ zugeordnet. Eine ungeordnete Partikelverteilung führt zu Approximationsfehlern, welche Abweichungen von den analytischen Profilen verursachen. Dieses sogenannte Rauschen wurde auch von Colagrossi (2003) beschrieben. Jedoch muss berücksichtigt werden, dass des Weiteren Ungenauigkeiten bei der Interpolation der SPH Punktdaten auf das Auswertegitter auftreten können. Es ist zu beachten, dass die Datenpunkte der SPH Simulation nicht einem realen Diskretisierungspunkt entsprechen, sondern dem interpolierten Wert im Hintergrundgitter. Somit ist der Fehler nicht eindeutig ausschließlich der SPH Simulation zuzuordnen.

Die Ergebnisse liegen allesamt innerhalb der Toleranz von ca. $\pm 5\%$ von der analytischen Lösung und sind nicht größer als die aufgrund der Transition auftretenden Abweichungen. Dies ist in Abb. 6.26 veranschaulicht.

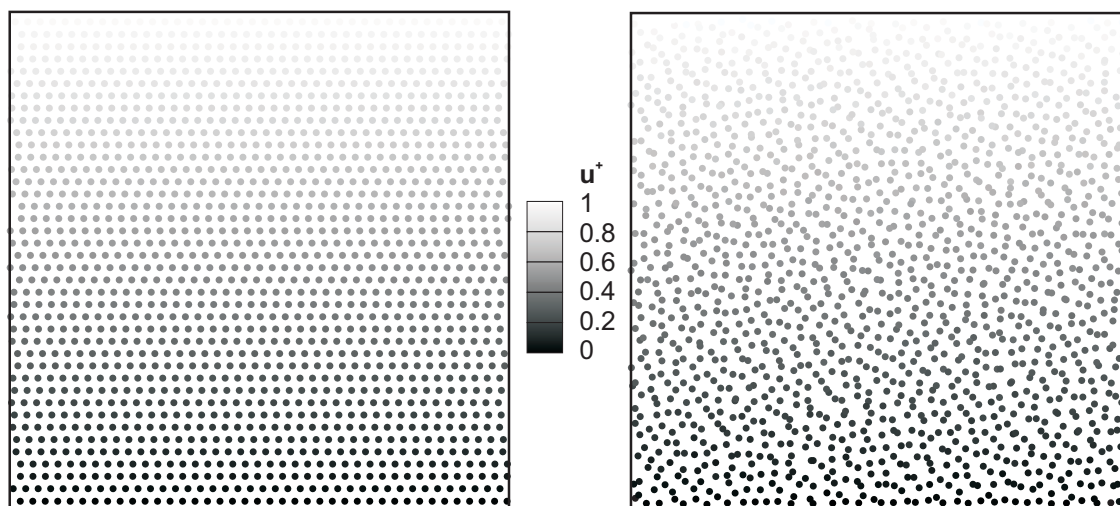


Abbildung 6.25: Partikelanordnung für $Re = 10$ (links) und $Re = 100$ (rechts) zum Zeitpunkt $t = 0,7 \cdot 10^{-1} s$

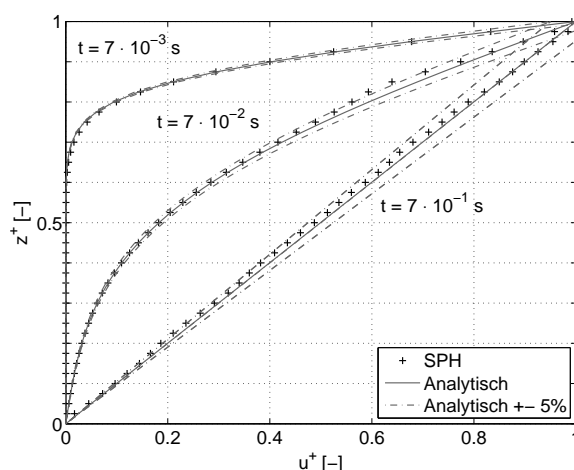


Abbildung 6.26: Instationäre Couette Strömung für $Re = 100$ mit $\pm 5\%$ Abweichungen von der analytischen Lösung

Die korrekte Vorhersage des zeitabhängigen Verhaltens schubspannungsinduzierter Strömungen, der Modellierung fester Wände sowie periodischer Randbedingungen wurde somit über zwei Größenordnungen der Reynolds-Zahl hinweg validiert und verifiziert. Dies ist vor allem für die Strömungssimulation in der Kraftstoffzuleitung und die Wellenbildung, welche dem Primärzerfall vorausgehen, von entscheidender Bedeutung.

6.1.4 Taylor-Green-Wirbel

Zur Validierung der dissipativen Terme wird der zweidimensionale Taylor-Green-Wirbel simuliert. Die korrekte Wiedergabe der Dissipation spielt bei reibungsbehafteten Strömungen, wie sie in einem Airblast-Zerstäuber auftreten, eine enorm wichtige Rolle. Der Primärzerfall des

Films in Ligamente und weiter in Primärtropfen hängt stark von den an der Flüssigkeitsoberfläche angreifenden Scherkräften und der inneren Reibung im Fluid ab. Zur exakten Erfassung dieser Effekte muss die Schubspannung und somit die, insbesondere an der Phasengrenzfläche auftretende, Reibung möglichst genau wiedergegeben werden. Zwei der drei implementierten Viskositätsmodelle kommen für die Berechnung des inkompressiblen Taylor-Green-Wirbels (Taylor und Green (1937)) aufgrund der geringen Mach-Zahl in Frage. Dies ist zum einen die direkte Berechnung der Viskosität, entsprechend der physikalischen Herleitung über verschachtelte Summenapproximationen (s. Gln. 4.30 - 4.33), und zum anderen das laminare Viskositätsmodell von Morris et al. (1997).

Dem quadratischen Simulationsgebiet (s. Abb. 6.27) mit periodischen Rändern (Strichpunktlinie) wird eine initiale Geschwindigkeitsverteilung $v^+ = \frac{v}{u_0}$, wie in Abb. 6.28 anhand der Grauwerte und Vektoren dargestellt, aufgeprägt.

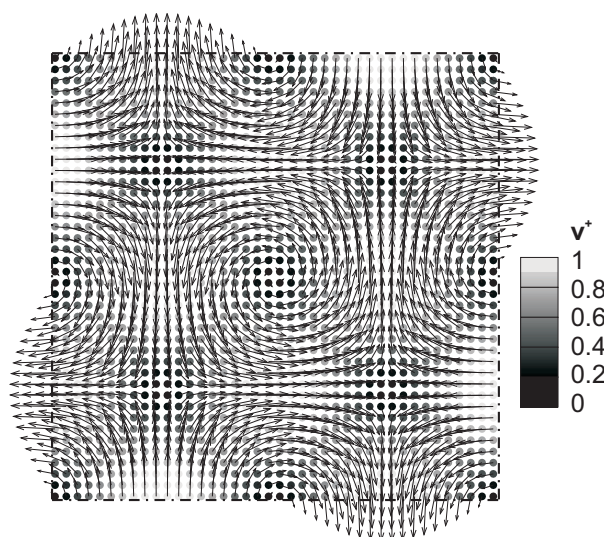
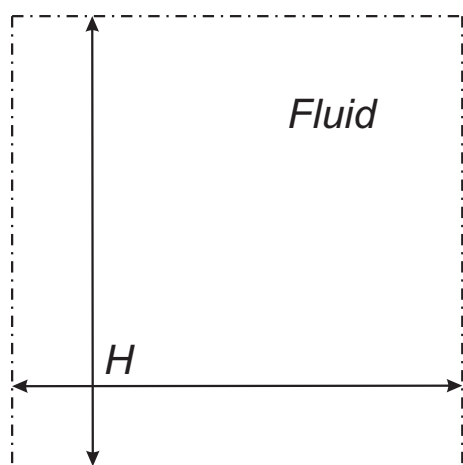


Abbildung 6.27: Skizze des Rechengebiets für den zweidimensionalen Taylor-Green-Wirbel

Abbildung 6.28: Initiale Diskretisierung mit entdimensioniertem absolutem Geschwindigkeitsfeld

Die Gebietsabmessungen betragen $H \times H = 1 \cdot 10^{-3} \text{ m} \times 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. Da sich die Diskretisierung mit 40×40 Partikeln und die Interpolation mittels der quintischen Glättungsfunktion bei $h = 0,96 \cdot \Delta x$ in den vorherigen Untersuchungen als stabil erwiesen hat, wird diese auch hier angesetzt. Das instationäre Geschwindigkeitsfeld lässt sich theoretisch folgendermaßen beschreiben (Mei et al. (2006)):

$$\begin{aligned} u(x,y,t) &= -u_0 \cos(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot e^{-k^2 \nu t} \\ v(x,y,t) &= u_0 \sin(k_x x) \cdot \cos(k_y y) \cdot e^{-k^2 \nu t} \end{aligned} \quad (6.1)$$

mit der Startamplitude der Geschwindigkeitsverteilung u_0 und der Wellenzahl $k = \sqrt{8} \frac{\pi}{H}$. Daraus ergibt sich die Maximalgeschwindigkeit als Funktion der Zeit.

$$v_{max}(t) = u_0 \cdot e^{-k^2 \nu t} = u_0 \cdot e^{-\frac{8\pi^2 u_0}{H Re} t} \quad (6.2)$$

Die kinetische Energie des Gesamtsystems in Abhängigkeit der Zeit wird durch folgende Integration über das zweidimensionale Simulationsgebiet berechnet:

$$e_{kin} = \frac{1}{2} \rho \int_0^H \int_0^H u(x,y,t)^2 + v(x,y,t)^2 dx dy \quad (6.3)$$

Im Vergleich zu anderen Studien (Chaniotis et al. (2002), Ellero et al. (2007)) ist das zeitliche Abklingverhalten der Wirbelstrukturen über zwei Größenordnungen der Maximalgeschwindigkeit hinweg Gegenstand der Untersuchungen. Die Zeit, nach der die maximal auftretende Absolutgeschwindigkeit von anfänglich u_0 auf $0,01 \cdot u_0$ abgeklungen ist, lässt sich über die Relation

$$t(v_{max} = 0,01u_0) = t_{0,01} = -\ln(0,01) \frac{H Re}{8\pi^2 u_0} \quad (6.4)$$

ermitteln.

Zur Berechnung der physikalischen Strömungsgrößen wird die Kontinuitätsgleichung 4.25 herangezogen. Die Druckterme in der Impuls- und Energieerhaltungsgleichung werden nach Gl. 4.27 berechnet. Druck und Dichte im Fluid sind über die Tait-Zustandsgleichung 4.48 gekoppelt, wobei zur Einhaltung der Inkompressibilität die numerische Schallgeschwindigkeit auf $c = 10 \cdot u_0$ beschränkt wird. Das Fluid besitzt eine Dichte von $\rho = 1 \cdot 10^3 \frac{kg}{m^3}$.

Die Variation der Reynolds-Zahl ($Re = 0,01 - 100$) erfolgt bei konstanten Gebietsabmessungen und konstanter anfänglicher Geschwindigkeitsamplitude $u_0 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{m}{s}$ über die dynamische Viskosität μ des Fluids. In den folgenden Abbildungen ist der zeitliche Verlauf der Maximalgeschwindigkeit im System aufgetragen. Die Maximalgeschwindigkeit ist auf u_0 normiert, d.h. $v_{max}^+ = \frac{v_{max}}{u_0}$. Die Zeit wird mittels $t_{0,01}$, der Abklingzeit auf $0,01 \cdot u_0$, normiert, wodurch $t^+ = \frac{t}{t_{0,01}}$ gilt. Es wurden Simulationen im laminaren Reynolds-Zahlbereich von $Re = 0,01 - 100$ durchgeführt. Die Dissipationsterme werden zum einen mittels des laminaren Viskositätsmodells und zum anderen mit dem direkten Ansatz über verschachtelte Summenapproximationen, der im folgenden als physikalische Viskosität bezeichnet wird, berechnet. Neben der Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Maximalgeschwindigkeit im System, wurde das Abklingen der gesamten kinetischen Energie im System als Maß für die Dissipation im Strömungsfeld ausgewertet. In diesem Fall wird die kinetische Energie auf die kinetische Energie des Systems im Ausgangszustand, d.h. zu Beginn der Simulation, normiert. Der analytische Verlauf wurde nach Gl. 6.3 berechnet. Die kinetische Energie des Partikelsystems ist durch Aufsummation der kinetischen Energie über alle Diskretisierungspunkte nach

$$e_{kin,sph} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (u_i^2 + v_i^2) \quad (6.5)$$

gegeben.

Für die ersten Simulationen wurde von einer ursprünglich regulären Anordnung der Stützstellen im Simulationsgebiet, wie in Abb. 6.28 veranschaulicht, ausgegangen.

Aus Abb. 6.29 ist ersichtlich, dass der Verlauf der Maximalgeschwindigkeit mittels des laminaren Viskositätsmodells für geringe Reynolds-Zahlen sehr genau wiedergegeben wird. Der maximale

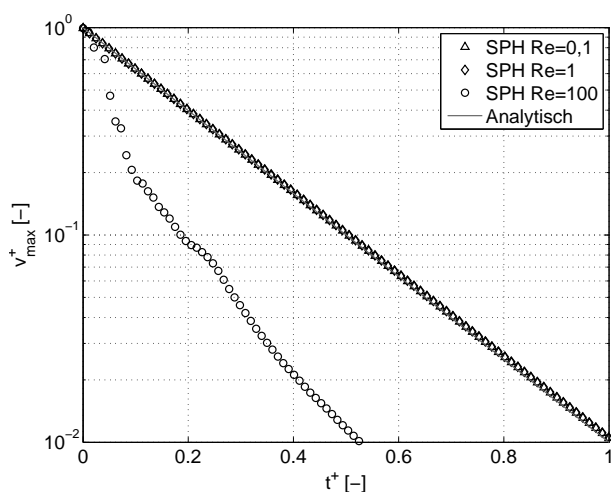


Abbildung 6.29: Abklingverhalten der Maximalgeschwindigkeit bei initialer regulärer Partikelanordnung, laminares Viskositätsmodell

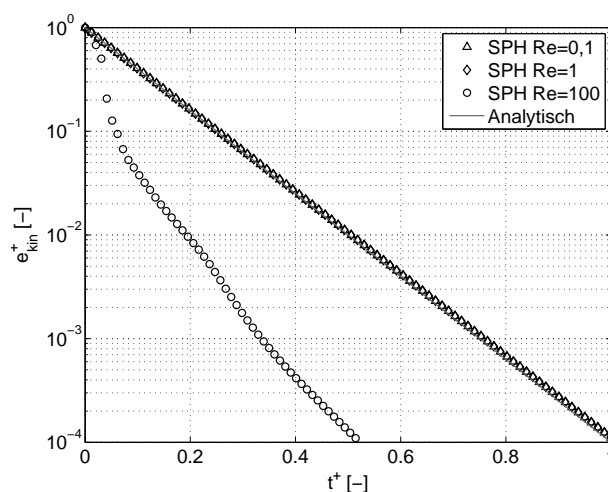


Abbildung 6.30: Abklingverhalten der kinetischen Energie bei initialer regulärer Partikelanordnung, laminares Viskositätsmodell

relative Fehler innerhalb der Abklingzeit liegt bei 5%. Dementsprechend wird auch für den zeitlichen Verlauf der gesamten kinetischen Energie eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung erzielt, wie in Abb. 6.30 zu erkennen ist. Die Initialisierung des Geschwindigkeitsfeldes ist für alle Reynolds-Zahlen gleich, lediglich die Abklingzeit nimmt mit steigender Re zu, da die Dissipation gegenüber der Trägheit eine untergeordnete Rolle spielt. Dies führt dazu, dass bei den Reynolds-Zahlen $Re = 0,1$ und $Re = 1$ keine merkliche Verschiebung der Positionen der Diskretisierungspunkte während der Abklingzeit auf $0,01 \cdot u_0$ zu beobachten ist. Die Interpolationen zur Berechnung der Strömungsgrößen werden quasi auf Basis einer geordneten Punkteschar durchgeführt. Dadurch werden Interpolationsfehler durch Rauschen bzw. ungeordnete Stützstellenverteilung, welche die Konsistenz der Summenapproximationen verletzen können, vermieden. Spielt der Reibungseinfluss gegenüber der Trägheit nur eine untergeordnete Rolle, wie im Fall von $Re = 100$, so ändern die Stützstellen ihre Position entsprechend des Geschwindigkeitsfeldes über die Simulationsdauer merklich gegenüber ihrer anfänglich geordneten Verteilung. Innerhalb der ersten Zeitschritte stauen sich die Partikel aufgrund der Geschwindigkeitsverteilung bzw. des Auftretens von Staupunkten auf. Dies ist anhand der Stützstellenverteilung in Abb. 6.31 dargestellt.

Folglich steigen an den Staupunkten sowohl Dichte wie auch Druck deutlich an. Aufgrund der zu diesem Zeitpunkt noch hohen kinetischen Energie im System und der durch die irreguläre Partikelverteilung künstlich eingebrachten Entropie gleiten die Partikel aneinander ab. Es stellt sich eine ungeordnete Stützstellenverteilung ein. Die Fehler in der Berechnung der Reibungsterme aufgrund unzureichender oder anisotroper Diskretisierung nehmen zu. Die Dissipation wird stark überschätzt, wodurch die Maximalgeschwindigkeit deutlich unterhalb der theoretisch berechneten liegt. Zu Beginn der Simulation, nachdem die Partikel in eine ungeordnete Verteilung übergegangen sind, d.h. bei immer noch hohen Geschwindigkeiten im System, nimmt

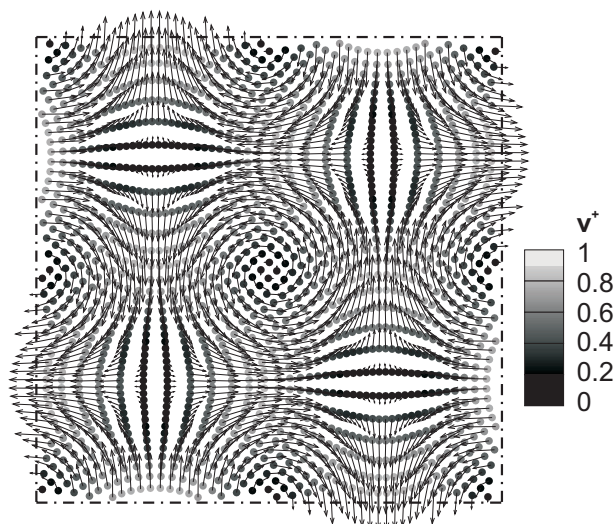


Abbildung 6.31: Partikelverteilung nach $t^+ = 0,02$, $Re = 100$

die Maximalgeschwindigkeit über die Zeit stark ab. Im weiteren Verlauf sinkt die Abnahmerate der Maximalgeschwindigkeit auf einen annähernd konstanten Wert, was durch den nahezu parallelen Verlauf zur analytischen Kennlinie zu beobachten ist. Dies ist auf die geringen Geschwindigkeiten, und somit geringen Geschwindigkeitsgradienten, im System zurückzuführen. Die Fehler aufgrund der ungeordneten Verteilung werden minimiert. Aufgrund der geringeren Maximalgeschwindigkeit, bei zeitlich konstanter Viskosität, überwiegt der Reibungseinfluss die Trägheitseffekte. Das laminare Viskositätsmodell eignet sich daher nicht für die Modellierung der Dissipationsterme bei starker Dominanz der Trägheitseffekte gegenüber dem Reibungseinfluss und ungeordneter Stützstellenverteilung. In diesem Fall wirkt es zu dissipativ.

Werden die Reibungsterme entsprechend der mathematischen Formulierung in der Navier-Stokes Gleichung über verschachtelte Summenapproximationen berechnet, so wird die Dissipation der Wirbel über den gesamten Bereich relativ gut erfasst. Aus den Abbn. 6.32 und 6.33 geht hervor, dass insbesondere für hohe Reynolds-Zahlen eine merkliche Verbesserung im Vergleich zum laminaren Viskositätsmodell erzielt werden kann. Für $Re = 0,1$ und $Re = 1$ liegt der relative Fehler der Maximalgeschwindigkeit für $t^+ = 1$ knapp unterhalb von 10% und somit etwas höher als im Fall des laminaren Viskositätsmodells.

Die ersten drei Datenpunkte der Rechnung für $Re = 100$ stimmen in sehr guter Näherung mit den Ergebnissen aus der Berechnung mittels des laminaren Viskositätsmodells überein. Die Verbesserung bezüglich der Dissipation tritt also erst bei einer ungeordneten Partikelverteilung auf. Im Vergleich zum laminaren Viskositätsmodell wird der Ortsvektor \vec{r}_{ab} nicht explizit in die Berechnung der Reibungsterme einbezogen. Hierdurch ist der Einfluss der ungeordneten Stützstellenverteilung geringer.

Wie bereits angesprochen, treten durch die gerichtete Aufstauung der Partikel hohe Druckgradienten im System auf. Dadurch ergeben sich hohe Beschleunigungen. Dieser Sachverhalt ist am Überschwingen der Maximalgeschwindigkeit (Datenpunkte 4, 5 in Abb. 6.32) erkennbar. Die kinetische Energie nimmt hingegen kontinuierlich ab. Dies lässt den Schluss zu, dass die starken

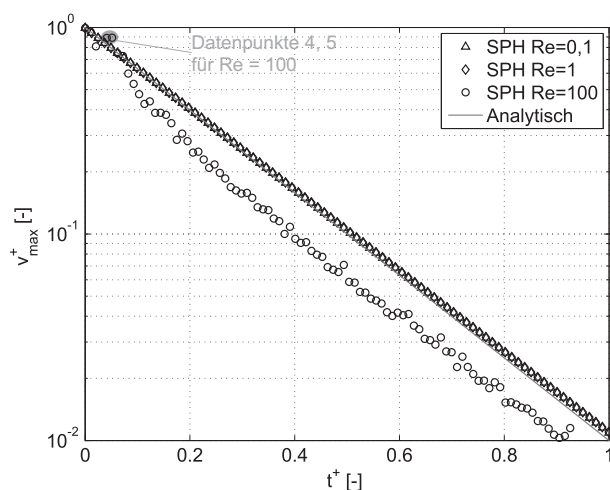


Abbildung 6.32: Abklingverhalten der Maximalgeschwindigkeit bei initialer regulärer Partikelanordnung, physikalische Viskosität

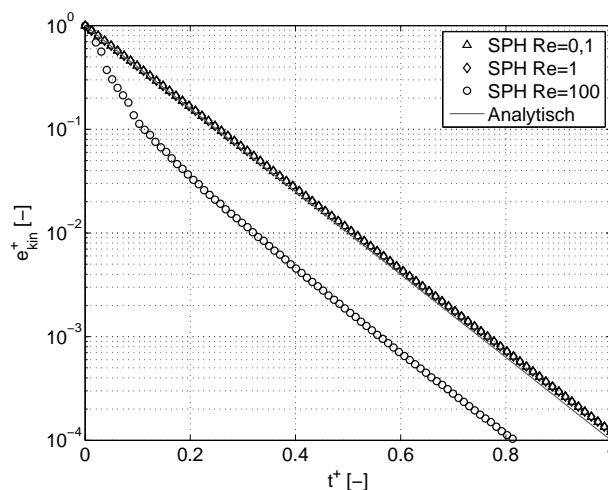


Abbildung 6.33: Abklingverhalten der kinetischen Energie bei initialer regulärer Partikelanordnung, physikalische Viskosität

Beschleunigungen nur lokal an den ursprünglichen Staupunkten auftreten. Im Gesamtsystem treten hohe Geschwindigkeitsgradienten auf. Diese führen vorübergehend dazu, dass die Dissipationsrate überschätzt und damit die Maximalgeschwindigkeit in den nächsten Zeitschritten unterschätzt wird. Nach dem Abklingen der Maximalgeschwindigkeit auf 40% bzw. $0,4 \cdot v_{max}^+$ stimmt die Dissipationsrate sehr gut mit der theoretisch berechneten überein. Dies zeigt sich am parallelen Verlauf der Datenreihe $Re = 100$ (\circ) zur analytischen Linie.

Um den Einfluss der Partikelanstauung zu verringern und gleichzeitig so wenig Rauschen wie möglich in das System einzubringen, wurden Simulationen mit versetzt angeordneten Partikelreihen initialisiert. Hierdurch treten im Verlauf der Simulationen nur noch zwei der zuvor vier Staupunkte auf. Dies ist in Abb. 6.34 deutlich zu erkennen.

Beim Vergleich der Ergebnisse des laminaren Viskositätsmodells (s. Abbn. 6.35 und 6.36) mit der direkten Berechnung (s. Abbn. 6.37 und 6.38) treten dieselben Merkmale, wie für den Fall der regulären Ausgangsanordnung bereits geschildert, auf. Wird der zeitliche Verlauf der Maximalgeschwindigkeit betrachtet, so liegen die maximalen relativen Fehler für die niedrigen Reynolds-Zahlen $Re = 0,1$ und $Re = 1$ wiederum bei 5% im Falle des laminaren Viskositätsmodells und 10% bei direkter Berechnung der Dissipationsterme. Das Abklingen der kinetischen Energie wird für $Re = 0,1$ und $Re = 1$ mit beiden Berechnungsansätzen gut erfasst. Jedoch kann vor allem bei der direkten Berechnung der Dissipationsterme eine deutliche Verbesserung der Genauigkeit in Bezug auf die Vorhersage der Maximalgeschwindigkeit für $Re = 100$ erzielt werden. Bei regulärer Partikelinitialisierung liegt der maximal auftretende relative Fehler für $t^+ > 0,1$ bei 40%, während dieser bei versetzter Ausgangsanordnung nur noch bei 20% liegt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die unphysikalischen hohen Drücke sowie die dadurch bedingten Druckgradienten und Beschleunigungen, welche sich aufgrund der Aufstauung der Partikel ergeben, nun in geringerem Ausmaß bezogen auf die Gesamtmasse des Systems auftreten. Somit

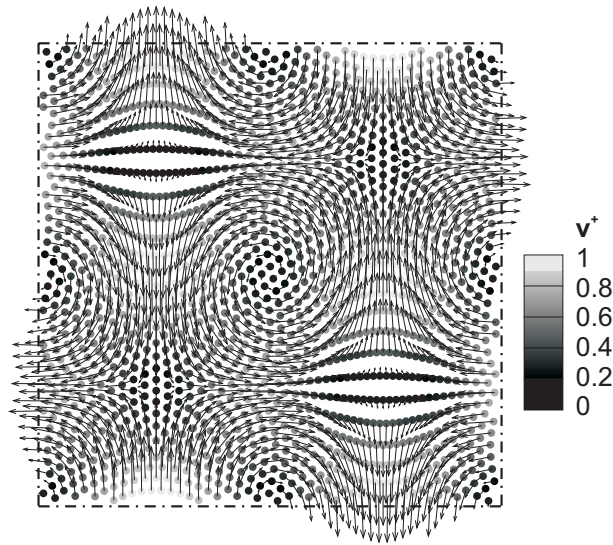


Abbildung 6.34: Partikelverteilung nach $t^+ = 0,02$, $Re = 100$ bei initialer versetzter Partikelanordnung

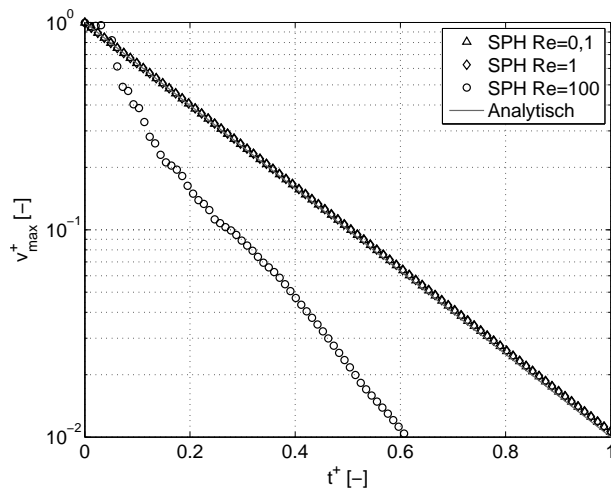


Abbildung 6.35: Abklingverhalten der Maximalgeschwindigkeit bei initialer versetzter Partikelanordnung, laminares Viskositätsmodell

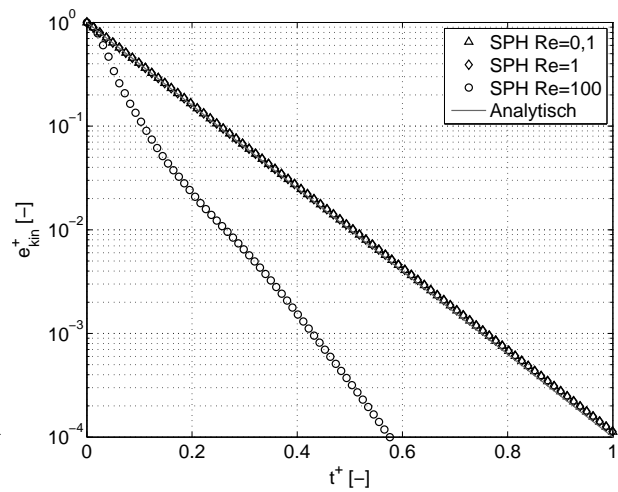


Abbildung 6.36: Abklingverhalten der kinetischen Energie bei initialer versetzter Partikelanordnung, laminares Viskositätsmodell

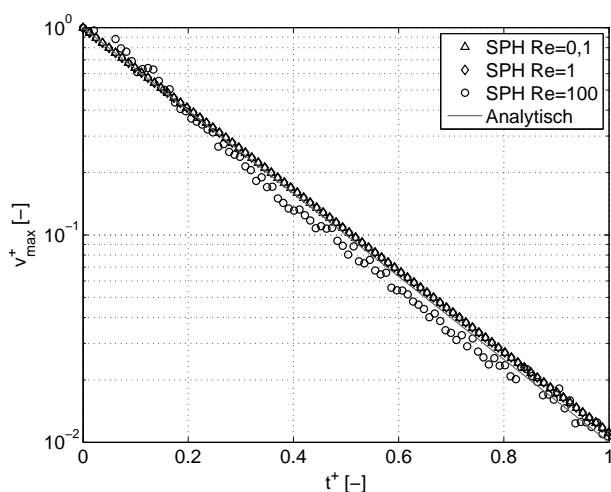


Abbildung 6.37: Abklingverhalten der Maximalgeschwindigkeit bei initialer versetzter Partikelanordnung, physikalische Viskosität

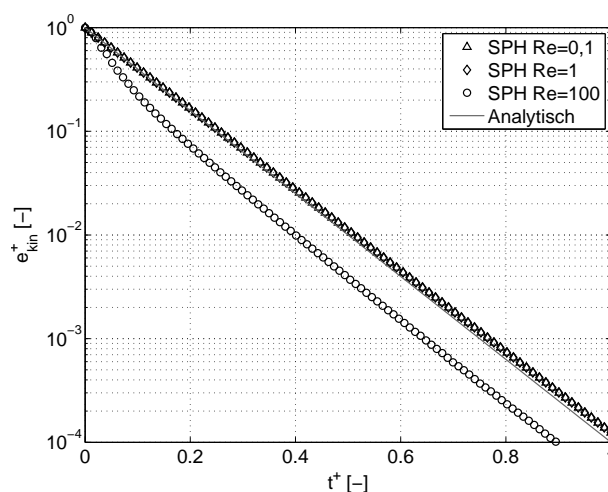


Abbildung 6.38: Abklingverhalten der kinetischen Energie bei initialer versetzter Partikelanordnung, physikalische Viskosität

ist auch die Dissipation im Gesamtsystem für $Re = 100$ geringer, wie am zeitlichen Verlauf der kinetischen Energie in den Abbn. 6.36 und 6.38 zu erkennen ist. Deren Änderung im Zeitintervall $0,02 \leq t^+ \leq 0,2$ fällt bei initialer versetzter Partikelanordnung deutlich geringer aus als bei einer regulären Ausgangsanordnung (s. Abbn. 6.30 und 6.33) aus. Im weiteren Simulationsverlauf wird die Dissipation bei Verwendung des laminaren Viskositätsmodells überschätzt, was an der zu starken Abnahme der kinetischen Energie im Vergleich zur analytischen Lösung in Abb. 6.36 zu erkennen ist. Werden die dissipativen Terme direkt berechnet, so wird die Dissipation im weiteren Verlauf der Simulation hingegen gut modelliert. Dies ist am parallelen zeitlichen Verlauf der kinetischen Energie zur analytischen Lösung in Abb. 6.38 zu sehen.

Die Veränderung der örtlichen Diskretisierung wurde in der Arbeit von Braun (2010) untersucht und führte zu keiner Verbesserung der Simulationsergebnisse. Außerdem konnte in weiteren Testreihen die korrekte Modellierung der Dissipation und die einwandfreie Funktionsweise der periodischen Randbedingungen für den dreidimensionalen Fall nachgewiesen werden.

Das laminare Viskositätsmodell ist durch die explizite Berücksichtigung des Partikelabstandes und des dazugehörigen Abstandsvektors (s. Gl. 4.37) sensitiver gegenüber einer ungeordneten Stützstellenverteilung, welche insbesondere bei hohen Reynolds-Zahlen auftritt. Das Modell wirkt in diesem Fall zu stark dissipativ.

Zusammenfassend gilt, dass die implementierten Viskositätsmodelle die Physik in ihrem jeweiligen Gültigkeitsbereich in guter Übereinstimmung mit der analytischen Lösung wiedergeben. Die Reibungsterme in den Navier-Stokes-Gleichungen werden korrekt berechnet. Reibungsbehaftete Strömungen können mittels des SPH Codes numerisch vorhergesagt werden. Sind bei Simulationen Vorzugsrichtungen der Strömung und dadurch bedingt Stauchungen oder Verzerrungen der Stützstellenanordnung zu erwarten, so gestaltet es sich als vorteilhaft, die Diskretisierungspunkte

aus ihrer geordneten regulären Anfangsverteilung in gewissem Maße auszulenken bzw. umzusortieren. Dies kann die Entstehung von nicht diskretisierten Gebieten und dadurch bedingten Fehlern aufgrund der Summenapproximation sowie das Zustandekommen enormer Druckkräfte aufgrund der Relativbewegung zweier Partikel aufeinander zu verhindern. Andererseits ist die Fehleranfälligkeit der Approximation bei einer ungeordneten Stützstellenverteilung zu beachten. Eine Umsortierung der Partikel ist ausreichend, um stabile und genaue Simulationen innerhalb einer minimalen Rechenzeit durchzuführen.

Speziell ausgelegte inkompressible Codes (s. Kapitel 2.3.1) vermeiden das Aufstauen der Stützstellen z. B. durch die Verschiebung dieser entlang ihrer Stromlinie (Xu et al. (2009)). Eine weitere Möglichkeit wäre die Anwendung von geeigneten Korrekturverfahren auf die Summeninterpolation oder die Reinitialisierung der Stützstellen auf Basis eines Hintergrundgitters (Chaniotis et al. (2002)). Dies führt jedoch zu einer beträchtlichen Erhöhung der Rechenzeit. Durch die Verwendung von Hintergrundgittern wird die Flexibilität der Methode stark eingeschränkt. Diese Nachteile und Einschränkungen sollen jedoch im aktuellen Code vermieden werden, um später eine praktikable, vielseitige numerische Alternative zu der experimentellen Zerstäuberauslegung zu ermöglichen.

Durch die Validierung der Einphasen-Testfälle wurde die korrekte Funktionsweise des Codes für grundlegende physikalische Phänomene, die bei der Zerstäubung eine wichtige Rolle spielen, sichergestellt. Ein großer Vorteil gegenüber anderen SPH Codes ist die enorme Flexibilität in der Anwendung auf die unterschiedlichsten Strömungsphänomene. Es wurde bewiesen, dass mit diesem Code sowohl kompressible, wie auch inkompressible Effekte in gasförmigen und flüssigen Medien korrekt simuliert werden können. Die Genauigkeit der Ergebnisse reicht an die Genauigkeit gängiger Finite Volumen Verfahren heran und übertrifft diese, wie im Fall der Simulation eines instationären Verdichtungsstoßes, sogar. Der nächste Schritt hin zur numerischen Vorhersage der Primärzerstäubung ist die Simulation von Einphasenströmungen mit freien Oberflächen.

6.2 Einphasen-Testfälle mit freier Oberfläche

Mittels der SPH Methode ist es möglich, eine Mehrphasenströmung, bei der die Grenzflächeneffekte der Phasen vernachlässigbar sind, als sogenanntes Fluids mit freier Oberfläche zu simulieren. Dabei wird ausschließlich das interessierende Fluid diskretisiert und somit der Rechenaufwand erheblich reduziert. Um Fehler, insbesondere an den freien Oberflächen, zu vermeiden, müssen numerische Maßnahmen ergriffen werden. So darf z.B. die Dichte zur freien Oberfläche hin nicht abnehmen, wie dies bei Anwendung von Gl. 4.22 ohne weitere Korrekturen, der Fall wäre. Zudem müssen die Druckrandbedingungen an der freien Oberfläche korrekt modelliert werden.

Nach der Untersuchung der Einphasenströmungen in abgeschlossenen, vollständig diskretisierten Gebieten (s. Kapitel 6.1), sind diese Simulationen die nächste Stufe zur Berechnung von Zweiphasenströmungen und letztlich der numerischen Vorhersage des Primärzerfalls. In Hinblick auf die Kraftstoffzerstäubung in einem Airblast-Zerstäuber in der Brennkammer eines Flugtriebwerks, wird im Rahmen dieser Arbeit die inkompressible Flüssigphase diskretisiert.

Die zur Validierung des Codes herangezogenen Testfälle

- Tropfenformation
- Zerfall einer Wassersäule
- Düsenströmung
- Tropfen-Film-Interaktion

bauen in ihrer Komplexität und den untersuchten physikalischen Effekten aufeinander auf.

6.2.1 Tropfenformation

Bei der Abscherung der Flüssigkeitsligamente vom Brennstofffilm an der Zerstäuberkante und der Bildung von Primärtropfen spielt die Oberflächenspannungskraft eine entscheidende Rolle. Zur vorerst qualitativen Untersuchung der Modellierung der Oberflächenspannungseffekte wird die Verformung eines zweidimensionalen Quadrats betrachtet. Dabei sind zwei Charakteristika zu erwarten. Aufgrund der Minimierung der Grenzflächenenergie sollte sich aus dem Quadrat eine Kreisfläche, im Folgenden auch Tropfen genannt, bilden. Dabei sollte der Druck innerhalb des Tropfens gegenüber dem Außendruck steigen. Daraus folgt, dass die Dichte, aufgrund der direkten Kopplung zwischen Relativdruck und Dichte über die Tait-Gleichung 4.62, größer als die Referenzdichte ρ_0 wird.

In diesem Testfall werden die Oberflächenspannungsmodelle qualitativ hinsichtlich ihrer Eignung für Simulationen mit freien Oberflächen untersucht. Es sei bereits auf Kapitel 6.3.1 verwiesen. Dort wird die quantitative Betrachtung der Tropfenformation bei Berücksichtigung beider Phasen (flüssig und gasförmig) diskutiert.

Das Quadrat besitzt die Abmessungen $L \times L = 1 \cdot 10^{-3} \text{ m} \times 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. Um hohe Kräfte, bedingt durch das initiale Nicht-Gleichgewicht des Systems, zu vermeiden und Instabilitäten in der Simulation zu minimieren, werden die Ecken des Quadrats abgerundet. Das Fluid wird durch 1596 äquidistant angeordnete Partikel diskretisiert. Die Initialisierung des Systems ist anhand der Partikeldiskretisierung in Abb. 6.39 veranschaulicht.

Die Gewichtung des Einflusses der Nachbarpartikel erfolgt über die quintische Glättungsfunktion. Zur Stabilisierung der Rechnung wird eine Glättungslänge von $h = 3,2 \cdot \Delta x$ benötigt, wie in Vorversuchen ermittelt wurde. Somit können unphysikalische Beschleunigungsspitzen, die durch die stark ungeordnete Stützstellenverteilung im Lauf der Simulation entstehen, geglättet werden. Zu Beginn der Simulation besitzt das Fluid die Referenzdichte ρ_0 . Der Referenzdruck B in der Zustandsgleichung entspricht dem atmosphärischen Druck von 1,013 bar. Aufgrund der während der Transformation auftretenden hohen Beschleunigungen, wird die numerische Schallgeschwindigkeit auf $c_{num} = 0,1 \cdot c_{phys,H_2O} = 148 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ festgelegt. Hierdurch erfolgt die Limitierung des adaptiven Zeitschritts. Die Dichteänderungsrate wird über den Kontinuitätsansatz (Gl. 4.25) berechnet, um unphysikalische Dichtegradienten hin zur freien Oberfläche zu vermeiden.

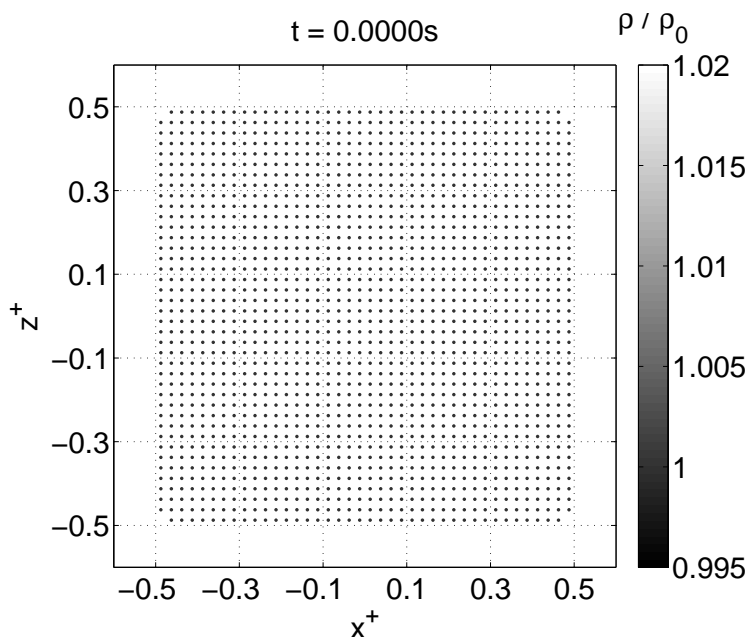


Abbildung 6.39: Partikeldiskretisierung im Anfangszustand

Die Oberflächenspannungseffekte wurden zum einen durch an der Grenzfläche auftretende Interpartikelkräfte (CF Modell), wie in Kapitel 4.6.2 erläutert, modelliert. Zum anderen wurde das CSF Modell (s. Kapitel 4.6.1) zur Berechnung der Oberflächenspannungskräfte herangezogen. Bei beiden Modellen wurde die Stärke der Oberflächenspannungskräfte über den entsprechenden Parameter a' bzw. σ variiert. Die zeitliche Entwicklung des Systems ist jeweils in den Abbn. 6.40 - 6.43 dargestellt. Explizite Zeiten sind aufgrund des variierenden Systemparameters a' bzw. σ nicht aussagekräftig. Die Einführung einer dimensionslosen Zeit erlaubt keinen Vergleich zwischen dem CF und dem CSF Modell, da a' nicht mit σ skaliert werden kann. Aus diesem Grund ist das System jeweils zu Beginn der Simulation und im quasi-stationären Zustand abgebildet.

Aus der zweidimensionalen theoretischen Betrachtung für inkompressible Medien ($A_{\text{Quadrat}} = A_{\text{Scheibe}}$) lässt sich der theoretische Radius der Kreisfläche im stationären Zustand

$$R_{th,inkompr} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N m_i}{\rho_0 \pi}} = 0,563 \cdot 10^{-3} \text{ m} \quad (6.6)$$

ermitteln. Die schwarze Linie in den Abbn. 6.40 - 6.43 definiert die theoretisch berechnete Kreisfläche $A_{th} = \frac{\sum_{i=1}^N m_i}{\rho}$ als Funktion der Gesamtmasse aller Partikel und der mittleren Dichte im Fluid. Der dazugehörige theoretische Radius R_{th} im stationären Zustand ist jeweils für den letzten dargestellten Zeitschritt bzw. den quasi-stationären Zustand angegeben. Der Grauwert der Partikel repräsentiert die lokale Fluidichte.

In Abb. 6.40 ist die zeitliche Entwicklung des Systems in Abhängigkeit des Kohäsionsdruckparameters a' , der ein Maß für die Oberflächenspannungskräfte darstellt (s. Gl. 4.63), veranschaulicht.

Die dissipativen Terme wurden dabei zunächst direkt nach den Gln. 4.30 - 4.33 mit einer dynamischen Viskosität von $\mu = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$ berechnet. Dies entspricht der dynamischen Viskosität von Wasser bei $p = 1 \text{ bar}$ und $T = 293 \text{ K}$.

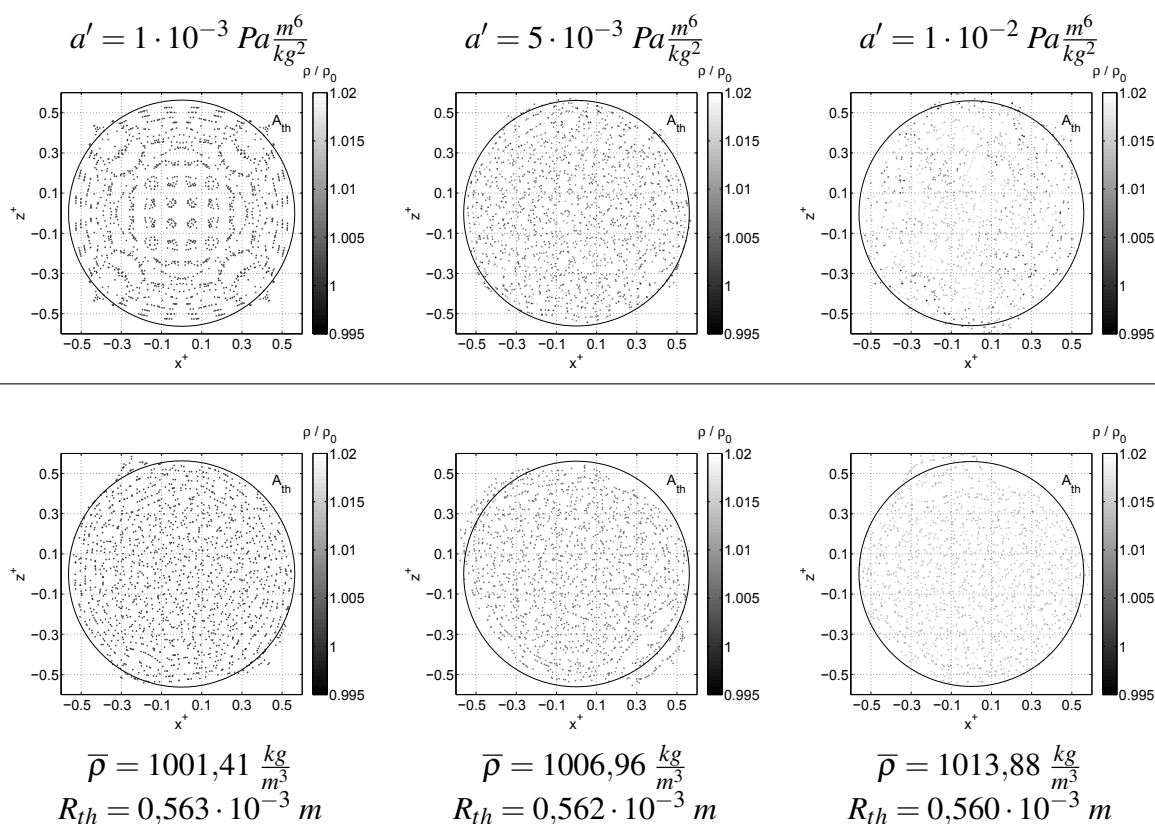


Abbildung 6.40: Simulation der Tropfenformation mittels des CF Modells bei Skalierung der Oberflächenspannungskräfte (1. Zeile: Simulationsbeginn, 2. Zeile: Quasi-stationärer Zustand)

In allen Fällen ist der Übergang des Quadrats in eine Kreisfläche, und die dadurch bedingte Minimierung der Phasengrenzfläche, bereits kurz nach dem Start der Simulation (*s. 1. Zeile*) deutlich zu erkennen. Die schwarze Linie markiert die als Funktion der mittleren Fluidichte theoretisch ermittelte Kreisfläche A_{th} . Diese stimmt sehr gut mit der tatsächlichen Partikelverteilung überein. Im weiteren zeitlichen Verlauf wird die kreisrunde Tropfenform beibehalten, das System geht in den stabilen, quasi-stationären Zustand (*s. 2. Zeile*) über. Es treten keine Tropfenschwingungen mehr auf. Die mittlere kinetische Energie hat um mehr als eine Größenordnung abgenommen. Während der Simulation nehmen die Dichteschwankungen im Fluid, welche zu Beginn der Simulation durch starke Beschleunigungskräfte infolge der Initialisierung des Systems im Nicht-Gleichgewichtszustand hervorgerufen werden, ab. Die Dichte stellt sich in Abhängigkeit des Kohäsionsdruckparameters a' ein. Je größer a' , desto höher ist die mittlere Fluidichte $\bar{\rho}$. In Anbetracht der direkten Druck-Dichte-Kopplung über die Zustandsgleichung, repräsentiert dies den erwarteten Drucksprung über die gekrümmte Tropfengrenzfläche hinweg. Bedingt durch den damit verbundenen schwach kompressiblen Ansatz, entstehen geringfügige Abweichungen des Radius des simulierten Tropfens R_{th} vom theoretisch berechneten Wert für den inkompressiblen

Fall $R_{th,inkompr}$, diese liegen jedoch unter 1%. R_{th} sowie $\bar{\rho}$ sind in Abb. 6.40 für den letzten dargestellten Zeitschritt (quasi-stationärer Zustand) angegeben. Im Verlauf der Simulation tritt eine ungeordnete Stützstellenverteilung auf, wodurch die Genauigkeit der Summenapproximationen beeinträchtigt wird. Diese werden durch die verschachtelten Interpolationen bei der direkten Berechnung der dissipativen Terme verstärkt.

Aus diesem Grund wurden dieselben Simulationen unter Verwendung des künstlichen Viskositätsmodells durchgeführt. Da keine Überschallströmung auftritt, wird der Term der Neumann-Richtmyer-Viskosität vernachlässigt, d. h. $\beta = 0$. Die Scher- und Volumenviskosität wird durch $\alpha = 0,01$ skaliert, wie von Monaghan (1994) für Wasser vorgeschlagen.

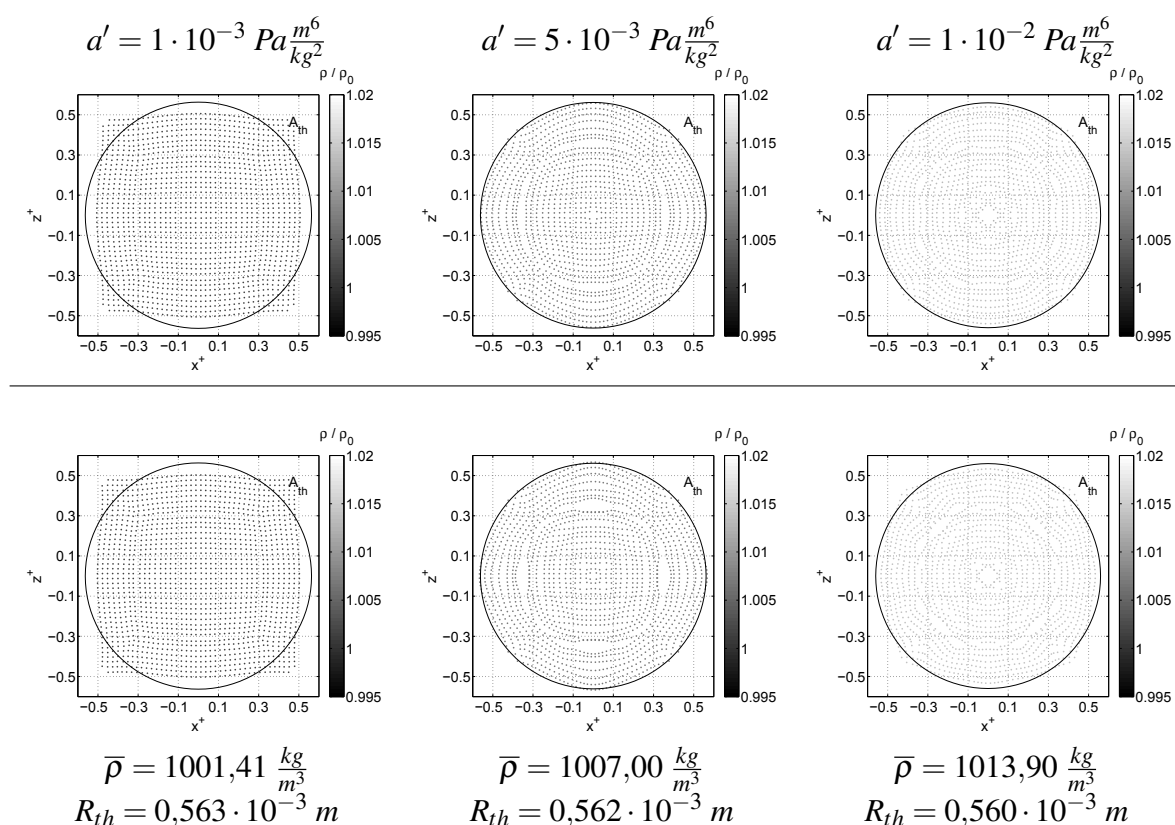


Abbildung 6.41: Simulation der Tropfenformation mittels des CF Modells bei Skalierung der Oberflächenspannungskräfte, künstliches Viskositätsmodell (1. Zeile: Simulationsbeginn, 2. Zeile: Quasi-stationärer Zustand)

Für die Parametervariationen $a' = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$ und $a' = 1 \cdot 10^{-2} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$ ist in Abb. 6.41 die Ausbildung einer näherungsweise kreisrunden Fläche während der Simulation zu erkennen. Die Stützstellenverteilung bleibt nahezu geordnet und äquidistant. Je höher der Kohäsionsdruckparameter a' , desto größer ist der Anstieg der Dichte im Vergleich zur Referenzdichte ρ_0 . Die mittlere kinetische Energie zu Beginn der Simulation ist im Fall von $a' = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$ um zwei Größenordnungen geringer als für $a' = 1 \cdot 10^{-2} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$. Ursache hierfür sind die geringeren Oberflächenspannungskräfte bei geringerem Kohäsionsdruckparameter. In der zweiten Zeile in Abb. 6.41 sind die Systemzustände nach einer Abnahme der mittleren kinetischen Energie

um mehr als sieben Größenordnungen dargestellt. Die mittleren Dichten $\bar{\rho}$ und somit auch die theoretisch ermittelten Radien R_{th} im stationären Zustand stimmen unabhängig von der Anwendung des Viskositätsmodells überein.

Zusätzlich wurde die Modellierung der Oberflächenspannungseffekte durch das CSF Modell untersucht. Hierbei erfolgt die Skalierung der Oberflächenspannungskräfte über den Oberflächenspannungskoeffizienten σ . Alle weiteren Parameter und Formulierungen der Erhaltungsgleichungen sind identisch zu den zuvor durchgeführten Simulationen auf Basis des CF Modells. Der zeitliche Verlauf der Simulationen für $\alpha = 0,07 \frac{N}{m}$ und $\alpha = 0,14 \frac{N}{m}$ bei der direkten Berechnung der dissipativen Terme ist in Abb. 6.42 dargestellt.

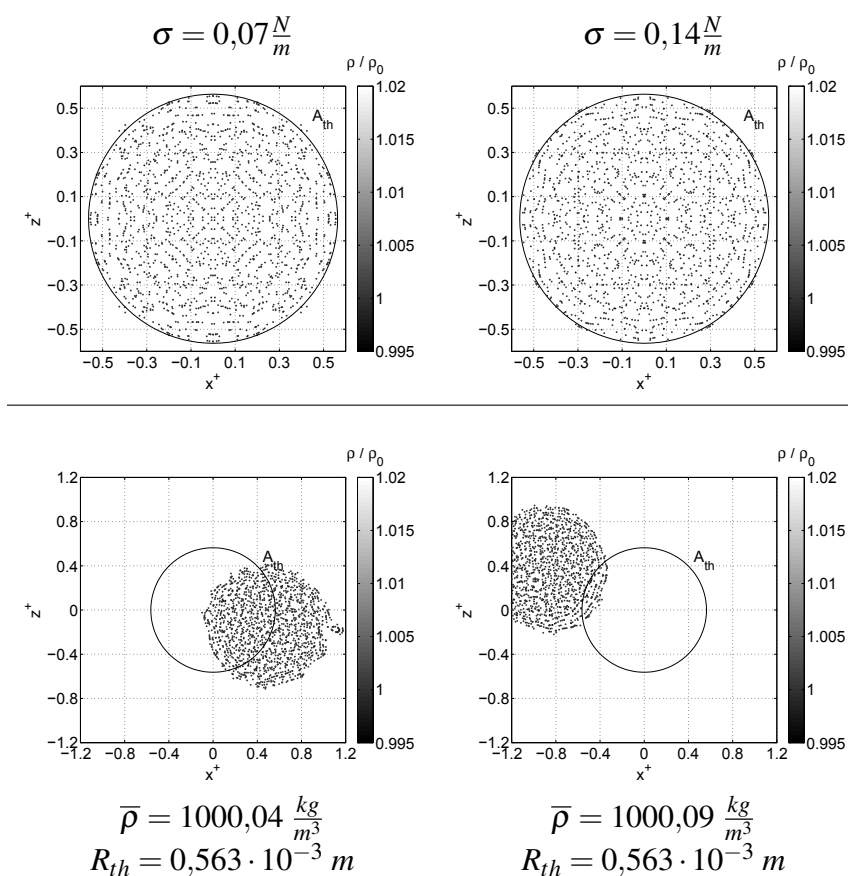


Abbildung 6.42: Simulation der Tropfenformation mittels des CSF Modells bei Skalierung der Oberflächenspannungskräfte (1. Zeile: Simulationsbeginn, 2. Zeile: Quasi-stationärer Zustand)

Die Minimierung der Grenzfläche beim Übergang des Quadrats in eine Kreisfläche wird durch das CSF Modell korrekt dargestellt. Weiterhin ist ein Anstieg der Dichte im Vergleich zum Initialisierungszustand zu verzeichnen und somit auch der Drucksprung über die gekrümmte Grenzfläche hinweg erfasst. Im weiteren Verlauf der Rechnung beginnt der Tropfenmittelpunkt jedoch zu driften, die Tropfenform an sich wird beibehalten. Die Ursache hierfür ist die asymmetrische Partikelverteilung, wodurch sich hohe Abweichungen in den Berechnungen der Terme des CSF Modells für sich diametral gegenüberliegende Punkte im Grenzflächenbereich ergeben. Das Vorliegen einer freien Oberfläche führt weiterhin dazu, dass Interpolationsfehler

bei der Approximation der Flächennormalen auftreten. Der Bereich, in dem die Grenzflächenkraft als Volumenkraft aufgeprägt werden kann, beschränkt sich auf die diskretisierte Seite der Grenzfläche. Bei Ermittlung der Normalenvektoren wird die Glättungsfunktion abgeschnitten. Die asymmetrische Stützstellenverteilung sowie die Interpolationsfehler haben zur Folge, dass die an gegenüberliegenden Punkten auf der Oberfläche angreifenden Grenzflächenkräfte sich nicht ausgleichen. Dem Tropfen wird dadurch eine unphysikalische Relativgeschwindigkeit zur Umgebung aufgeprägt. Außerdem können durch die ungeordnete Partikelverteilung kurzzeitig Unebenheiten der Grenzfläche, wie in Abb. 6.42 im unteren linken Bild ersichtlich, auftreten. Durch die Oberflächenspannung werden diese jedoch im weiteren Verlauf der Rechnung gedämpft, der Tropfen behält seine runde Form bei. R_{th} sowie $\bar{\rho}$ für den letzten dargestellten Zeitschritt sind Abb. 6.42 zu entnehmen. Die Zunahme der mittleren Dichte mit steigendem Oberflächenspannungskoeffizient σ wird korrekt vorhergesagt. Der aus der mittleren Dichte ermittelte Radius stimmt sehr gut mit dem theoretischen Radius für inkompressible Medien überein.

Abb. 6.43 veranschaulicht die Ergebnisse der Simulation der Tropfenformation auf Basis des CSF Modells bei Modellierung der dissipativen Terme mit dem künstlichen Viskositätsmodell.

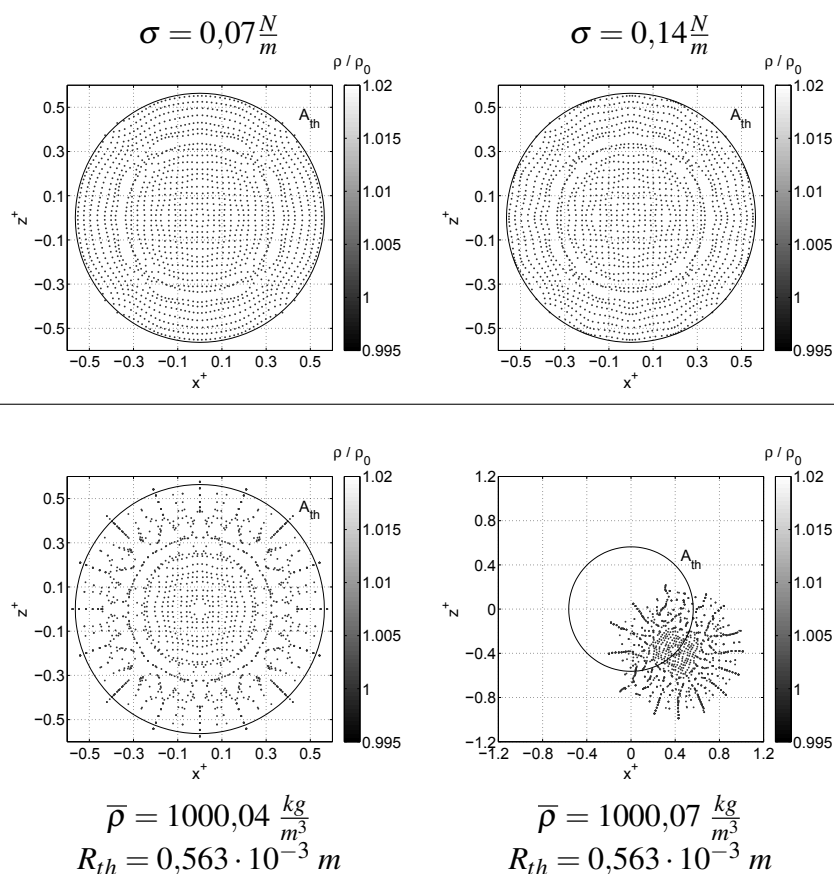


Abbildung 6.43: Simulation der Tropfenformation mittels des CSF Modells bei Skalierung der Oberflächenspannungskräfte, künstliches Viskositätsmodell (1. Zeile: Simulationsbeginn, 2. Zeile: Quasi-stationärer Zustand)

Unabhängig vom Oberflächenspannungskoeffizienten σ wird im Verlauf der Simulation eine

Tropfenform gebildet. Die Stützstellenabstände sind nicht mehr äquidistant, jedoch sind die Diskretisierungspunkte innerhalb der ersten Zeitschritte symmetrisch verteilt. Daher wird vorerst keine Relativbewegung des Tropfens hervorgerufen. Wie jedoch zu den späteren Zeitpunkten in Abb. 6.43 zu erkennen, tritt das sogenannte Clustern von Partikeln, gekennzeichnet durch Anhäufungen von Diskretisierungspunkten im Rechengebiet, auf. Dies führt zu teilweise nicht diskretisierten Gebieten und Inkonsistenzen in der Berechnung der Summenapproximationen der Terme der Erhaltungsgleichungen. Insbesondere beim Auftreten hoher Gradienten im Strömungsfeld kann dies Ungenauigkeiten und schlimmstenfalls den Abbruch der Simulation verursachen. Je größer die Oberflächenspannungskräfte bzw. der Oberflächenspannungskoeffizient σ , desto stärker ist der Effekt des Partikelclusterns ausgeprägt. Sobald eine asymmetrische Verteilung der Stützstellen vorliegt, setzt die Driftbewegung des Tropfens ein. Numerisch bedingt ist das Auftreten einer asymmetrischen Diskretisierung für hohe Oberflächenspannungskräfte wahrscheinlicher. Im Fall von $\sigma = 0,14 \frac{N}{m}$ ist die Driftbewegung des Tropfens aus der ursprünglichen Ruhelage aufgrund der unausgeglichene Kräftebilanz an der Oberfläche zu erkennen.

Als Zwischenergebnis kann nach Auswertung dieser Untersuchungen festgehalten werden, dass beide Modelle in der Lage sind, die Oberflächenminimierung korrekt zu erfassen. Die Modellierung eines inkompressiblen Mediums durch den schwach kompressiblen Ansatz auf Basis der Druck-Dichte-Kopplung über die Zustandsgleichung ist vertretbar, wie an der Übereinstimmung der Tropfenradien nachgewiesen wurde.

Das CF Modell bildet die Oberflächenminimierung bei ausreichend hohen Werten des Kohäsionsdruckparameters a' korrekt ab und erfasst die Änderung des Drucksprungs bei Variation von a' . Trotz des Auftretens einer ungeordneten, asymmetrischen Stützstellenverteilung bleibt die Tropfenform erhalten. Die Position des Tropfenmittelpunkts bleibt weiterhin unverändert. Unphysikalisches Driften ist ausgeschlossen. Wird das künstliche Viskositätsmodell, welches geringere Interpolationsfehler bei ungeordneten Stützstellenverteilungen und freien Oberflächen liefert, wie von Monaghan (1994) mit $\alpha = 0,01$ für Wasser angewendet, so sollte $a' = 5 \cdot 10^{-3} Pa \frac{m^6}{kg^2}$ gewählt werden, damit die Oberflächenspannungskräfte innerhalb einer realistischen Einschwingzeit mit den Druckkräften ins Gleichgewicht gelangen und es zur Minimierung der Grenzfläche kommt.

Das CSF Modell weist Schwachstellen in der Interpolation der Oberflächenspannungskräfte bei Simulationen mit freien Oberflächen auf. Dies liegt zum einen an dem verminderten Grenzflächenbereich, innerhalb dessen die Volumenkraft aufgeprägt wird. Außerdem treten Interpolationsfehler in der Berechnung der Normalen- und Einheitsnormalenvektoren bedingt durch nichtdiskretisierte Bereiche im Einflussradius von Partikeln nahe der freien Oberfläche auf. Entsteht darüber hinaus, z. B. aufgrund des Viskositätsmodells, eine ungeordnete asymmetrische Stützstellenverteilung, so gleichen sich die Oberflächenspannungskräfte diametral gegenüberliegender Punkte auf der Tropfenoberfläche nicht mehr aus, und es kommt zum beobachteten unphysikalischen Driften des gesamten Tropfens. Das Lösen zusätzlicher Gleichungen zur Berechnung der Oberflächennormalen bzw. der Krümmung (Gln. 4.55 - 4.59) wirkt sich nachteilig auf die Gesamtrechenzeit aus. So benötigt die Simulation mittels des CSF Modells 17% mehr Rechenzeit als bei Verwendung des CF Modells. Bei beiden Oberflächenspannungsmodellen sind deutlich geringere Standardabweichungen der Dichte bei Verwendung des künstlichen Viskositätsmodells zu beobachten.

Zusammenfassend kann die Aussage getroffen werden, dass das CF Modell die qualitativ richtigen Aussagen zur Berücksichtigung der Oberflächenspannungseffekte liefert. Das CSF Modell ist für Strömungen mit freien Oberflächen, vor allem bei Auftreten asymmetrischer Partikelverteilungen, nicht geeignet. Da in den folgenden Einphasentestfällen mit freien Oberflächen stets eine ungeordnete, asymmetrische Stützstellenverteilung aufgrund der Lagrange'schen Formulierung der SPH Methode zu erwarten ist, wird in diesen Fällen das CF Modell mit $a' = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$ sowie das künstliche Viskositätsmodell angewendet. Das künstliche Viskositätsmodell gewährleistet gleichmäßigere Partikelverteilungen und somit stabilere Simulationen bei hohen Beschleunigungen im Fluid.

6.2.2 Dambruch - Zerfall einer Wassersäule

Die Simulation des Zerfalls einer Wassersäule unter Einwirkung der Schwerkraft wird zur Validierung der Simulationen mit freien Oberflächen herangezogen. Hierzu existieren umfangreiche belastbare experimentelle Daten von Martin und Moyce (1952) über das zeitliche Fortschreiten der Wasserfront und der Höhe des Wasserspiegels.

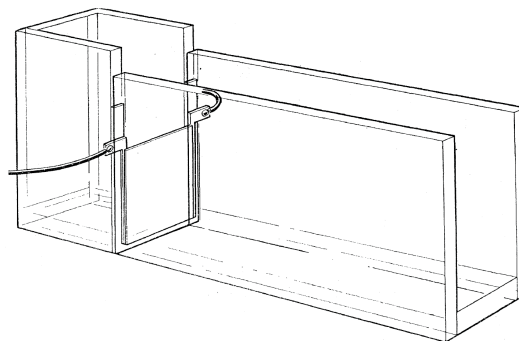


Abbildung 6.44: Experimenteller Versuchsaufbau von Martin und Moyce (1952)

Abb. 6.44 zeigt den experimentellen Versuchsaufbau zur Untersuchung des Zerfalls von Wassersäulen. An das Reservoir schließt der dreidimensionale Plexiglaskanal an, welcher auf der rechten Seite offen ist. Der Kanal ist minimal breiter als das Reservoir. Die Wassersäule wird anfangs durch ein Wachspapier zurückgehalten, welches zu Beginn der Messungen schlagartig durch einen elektrischen Kurzschluss aus seiner Fassung gelöst wird. Es wurden Kameraaufnahmen des Versuchs mit 300 *fps* aufgezeichnet.

Der Aufbau des numerischen Testfalls ist in Abb. 6.45 skizziert.

Die quadratische Wassersäule mit den Abmessungen $h \times h = 25 \times 25 \text{ m}$ befindet sich in einem von festen Wänden umschlossenen Tank der Größe $H \times L = 80 \times 130 \text{ m}$, welcher nach oben offen ist. Die Schwerkraft wirkt in negative y -Richtung. Es werden ausschließlich die festen Wände und das Fluid, welches die physikalischen Eigenschaften von Wasser aufweist, diskretisiert. Die Fluidpartikel unterliegen anfangs einer geordneten Partikelverteilung mit einem äquidistanten Abstand von $\Delta x = 0,25 \text{ m}$. Die Randbedingungen der festen Wände werden durch eine Reihe an Randpartikeln mit der Interpartikeldistanz von $\Delta x_r = 0,5 \cdot \Delta x = 0,125 \text{ m}$ aufgeprägt. Die

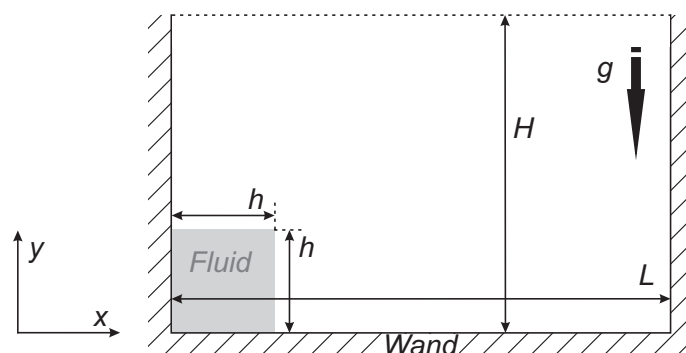


Abbildung 6.45: Aufbau des Dammbrech-Testfalls

Gewichtung der Summeninterpolationen basiert auf der quintischen Glättungsfunktion mit einer Glättungslänge von $h = 0,96 \cdot \Delta x$. Um unphysikalische Druckoszillationen zu vermeiden, wird die Dichte zu jedem 50. Zeitschritt über den Shepard-Filter gemäß Gl. 4.66 reinitialisiert.

Zur Vermeidung unphysikalischer Dichtegradienten hin zur freien Oberfläche, wird die Dichteänderungsrate nach Gl. 4.25 berechnet. Die Druck-Dichte-Kopplung erfolgt über die Tait-Zustandsgleichung 4.48 für inkompressible Medien. Die Druckterme in der Impuls- und Energieerhaltungsgleichung werden nach der symmetrischen Formulierung analog zu den Gln. 4.27 und 4.40 approximiert. Zur Modellierung der dissipativen Terme wird das künstliche Viskositätsmodell von Monaghan (1994) angewendet. Die Randpartikel üben repulsive Kräfte entsprechend eines Lennard-Jones-Potentials nach Gl. 4.68 auf die Fluidpartikel aus, welche sich innerhalb eines vorab definierten minimalen Wandabstandes befinden. Die numerische Schallgeschwindigkeit beträgt $c = 10 \cdot v_{max} = \sqrt{200 g h}$.

Anhand von vier Testfällen werden die Auswirkungen der Oberflächenspannungseffekte aufgrund interpartikulärer Kräfte an der Oberfläche (CF), wie in Kapitel 4.6.2 erläutert, und der XSPH-Korrektur (XSPH) aus Kapitel 4.7.1 untersucht. Die auf Basis der SPH Methode durchgeführten Berechnungen sind folgendermaßen benannt:

Tabelle 6.3: Nomenklatur der SPH Simulationen

| Name | CF | XSPH |
|-----------|----|------|
| SPH | – | – |
| SPH(X) | – | + |
| SPH(CF) | + | – |
| SPH(CF,X) | + | + |

Als Vergleichsrechnung wurde eine ebenfalls zweidimensionale Simulation auf Basis der Volume of Fluid Methode mittels OpenFOAM durchgeführt. Die Auflösung wurde entsprechend der Partikeldiskretisierung der SPH Rechnungen gewählt, d.h. die Abmessung einer Gitterzelle beträgt Δx . Dies entspricht 166 400 Zellen für das gesamte Rechengebiet. Die SPH Rechnung kommt mit 10 000 Fluidpartikeln und 2319 Randpartikeln aus. Die Stoffdaten für Dichte und

Viskosität beider Phasen entsprechen denen für Wasser und Luft bei einer Temperatur von 293 K und einem Druck von $1,013\text{ bar}$. Der Oberflächenspannungskoeffizient der Wasser-Luft-Paarung liegt bei $\sigma = 0,07 \frac{\text{N}}{\text{m}}$. Die Grenzflächeneffekte zwischen den festen Wänden und der Flüssig-Gas-Grenzfläche wurden vernachlässigt.

Das Fortschreiten der Wasserfront in x-Richtung ($x^+ = \frac{x}{h}$) ist in Abb. 6.46 über die Zeit $t^+ = t\sqrt{\frac{g}{h}}$ aufgetragen.

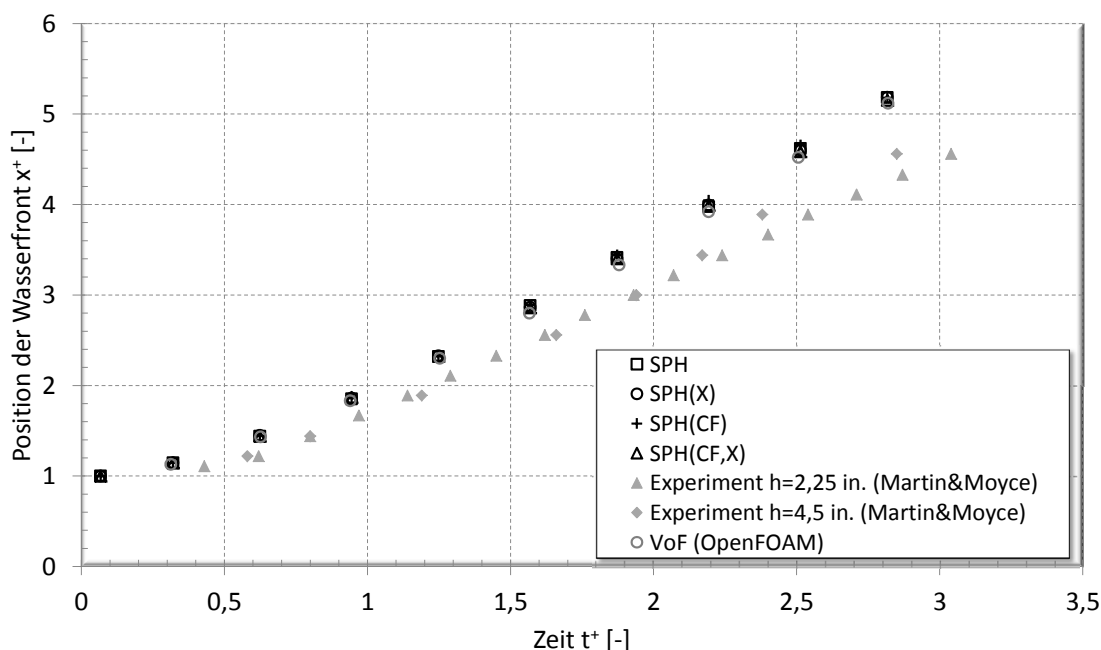


Abbildung 6.46: Zeitlicher Verlauf der Wasserfront

Die Experimente lassen die Schlußfolgerung zu, dass die Wasserfront, nahezu unabhängig von den absoluten Abmessungen der Wassersäule $h \times h$, proportional zur dimensionslosen Zeit t^+ fortschreitet. Alle numerischen Simulationen liefern nahezu identische Ergebnisse. Dies deutet darauf hin, dass die Oberflächenspannungseffekte in diesem Fall vernachlässigbar sind und die Stützstellen sich durch die wiederholte Dichtereinitialisierung in regelmäßigen Abständen befinden und somit der Approximationsfehler minimiert wird. Die Simulationen sagen eine schnellere Ausbreitung der Wasserfront im Vergleich zu den Messungen voraus. Die Abweichungen sind zum einen auf die Reduzierung des dreidimensionalen Experiments auf eine zweidimensionale Simulation zurückzuführen. Vor allem die Reibung an den Seitenwänden wird in der Simulation komplett vernachlässigt. Zum anderen ist der Kanal im Experiment minimal breiter als das Reservoir, wodurch sich das Wasser nicht nur in x-Richtung ausbreitet, sondern eine, wenn auch minimale Querströmung, auftritt. Ein dritter Grund für die schnellere Ausbreitung der Wasserfront in den numerischen Berechnungen ist die Startbedingung. Im Experiment muss das Wachspapier, welches die Wassersäule vor Beginn der Messung stabilisiert, gelöst werden. In der Simulation tritt sofort der ungestörte Zerfall der Flüssigkeitssäule ein.

Im Folgenden soll nun das Strömungsverhalten der Berechnungen mittels der SPH und der VoF Methode verglichen werden. In Abb. 6.47 ist der Zerfall der Wassersäule zu vier Zeitpunkten

dargestellt. Die Ergebnisse der SPH Simulation ($SPH(CF)$) sind in der linken Spalte zu sehen. Die Grauwertskala entspricht dem aus der Tait-Gleichung berechneten Relativdruck. Die mittlere Spalte enthält die Resultate der Berechnungen auf Basis der VoF Methode. Hierbei ist wiederum die Verteilung des Relativdrucks im flüssigen Medium abgebildet. Um die Phasengrenze deutlich darzustellen, wurden die Werte aller Zellen, welche einen Volumenanteil an Wasser von $c_v < 0,9$ aufweisen, ausgeblendet. Dass diese Maßnahme zur Darstellung der Grenzfläche gerechtfertigt ist, ist in der rechten Spalte zu erkennen, in der die Verteilung des Volumenanteils an Wasser durch die Grauwertskala wiedergegeben wird.

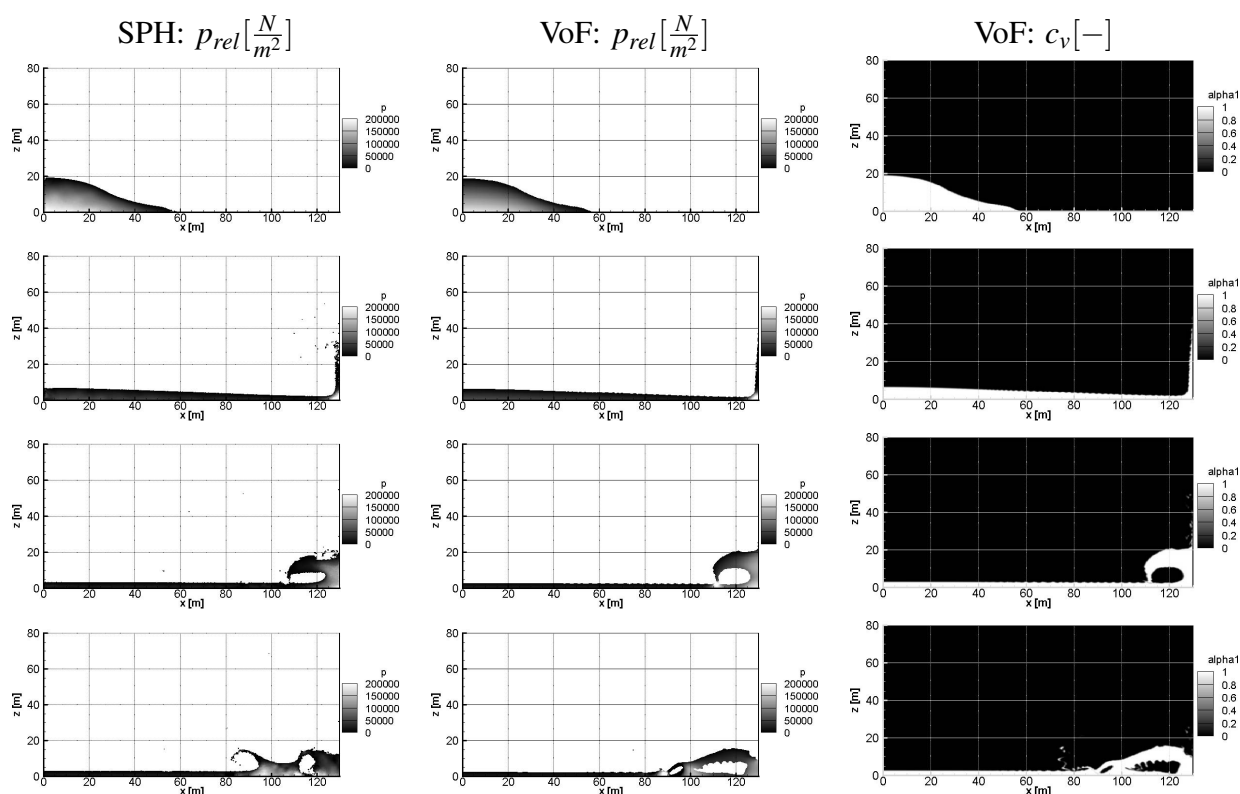


Abbildung 6.47: Zeitlicher Verlauf der Simulationen des Dammbbruchs zu den Zeitpunkten $t^+ = 1,25$, $t^+ = 3,76$, $t^+ = 6,58$ und $t^+ = 7,21$ (von oben nach unten)

Es ist zu erkennen, dass das Druckfeld der SPH Berechnung sehr gut mit den Resultaten aus der VoF Simulation übereinstimmt. Zu Beginn der Berechnungen wird die hydrostatische Druckverteilung korrekt wiedergegeben. Wie erwartet, wird der Relativdruck an der Phasengrenzfläche zu Null. Sobald das Fluid auf die gegenüberliegende Wand trifft (s. 2. Zeile in Abb. 6.47), ist der Staupunkt an der Druckerhöhung in der rechten unteren Ecke des Simulationsgebietes deutlich sichtbar. Für $x \geq 50$ m ist die unphysikalische Bildung von kleinskaligen Wellen auf der Wasseroberfläche im Fall der VoF Simulation zu beobachten, während durch die SPH Methode eine glatte Wasseroberfläche berechnet wird. Dieser Effekt ist für $t^+ = 3,76$ in Abb. 6.48 im Detail abgebildet. Die Steighöhen an der rechten Wand unterscheiden sich geringfügig. Bei der SPH Simulation kommt es bereits früher zur Überwindung der Wandhaftung und Abscherung einzelner Flüssigkeitsligamente. Dadurch bildet sich im weiteren Verlauf ein breiterer, flacherer Lufteinschluss. Die grundlegenden Effekte der Wellenbildung und des Überschwappens sowie

das Auftreten der Folgewelle werden jedoch erfasst. Beim Auftreffen der Wellenspitze auf den Film werden die Druckerhöhungen korrekt vorhergesagt. Der Lufteinschluss der VoF Rechnung weist einen unphysikalisch gezackten Verlauf der Grenzfläche auf. Dies ist auf Fehler in der Grenzflächenrekonstruktion und die Grenzflächendiffusion zurückzuführen, welche besonders deutlich in den Gebieten mit $0 < c_v < 1$ bei $x = 75 \text{ m}$ und $x = 130 \text{ m}$ zu erkennen ist. Dort kann auf Basis der VoF Rechnungen keine eindeutige Aussage über das vorliegende Fluid - Wasser oder Luft - getroffen werden. Die Ergebnisse der SPH Simulation hingegen lassen eindeutige Rückschlüsse über die Flüssigkeitsverteilung im Simulationsgebiet zu. Die Phasengrenze wird ohne zusätzlichen Aufwand explizit sehr genau dargestellt. Eine Genauigkeitssteigerung der VoF Rechnung, z. B. durch adaptive lokale Gitterverfeinerung in der Nähe der Phasengrenzfläche, würde sich immens zu Lasten der Rechenzeit auswirken. Die Rechenzeit für $13,5 \text{ s}$ Echtzeit des diskutierten Testfalls beträgt $7,8 \text{ CPUh}$ im Fall der VoF Simulation und $7,1 \text{ CPUh}$ für die Berechnung mittels der SPH Methode.

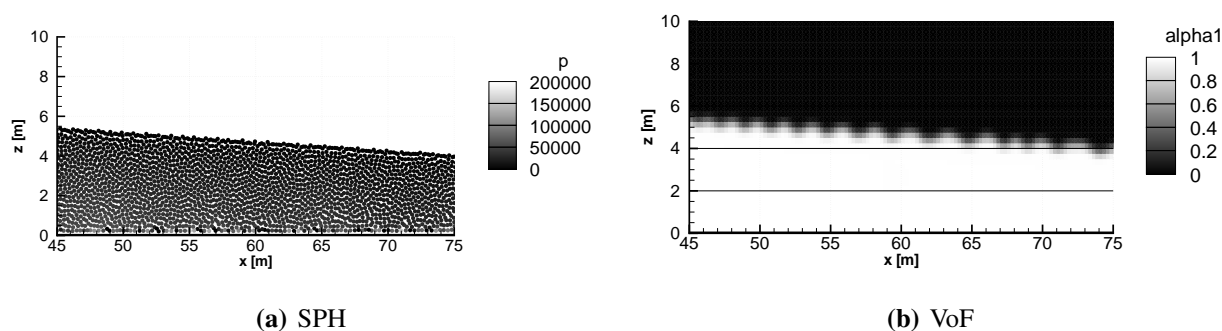


Abbildung 6.48: Detaillierte Darstellung der Flüssigkeitsoberfläche für die SPH und die VoF Simulation zum Zeitpunkt $t^+ = 3,76$

Die Simulationen mit freien Oberflächen zeigen, dass die SPH Methode im Vergleich mit gängigen Finite Volumen Verfahren korrekte Vorhersagen zur Entwicklung des Strömungsfeldes mit einer weitaus geringeren Anzahl an notwendigen Diskretisierungspunkten liefert. Die charakteristischen physikalischen Effekte, wie das Abscheren von Ligamenten und die Druckänderungen in der Flüssigkeit beim Tropfenaufprall, welche für die Primärerstäubung von entscheidender Bedeutung sind, werden sehr gut erfasst. Die genaue explizite Erfassung der Grenzflächenadvektion und die Vermeidung der Grenzflächendiffusion sind eindeutige Vorteile des SPH Verfahrens gegenüber der VoF Methode.

6.2.3 Generische Düsenströmung

Auf Basis der Validierung der zuvor untersuchten Testfälle wird schließlich die zweidimensionale Simulation einer generischen Düsenströmung durchgeführt (Höfler et al., 2011). Hierbei wird nur die Flüssigphase diskretisiert. Die Modellierung der Luft wird vorerst vernachlässigt, nicht jedoch die Oberflächenspannungseffekte. Diese werden durch das Modell der Tait-Gleichung inklusive des zusätzlichen Kohäsionsterms aus der van der Waals-Gleichung 4.62 berücksichtigt. Es soll vorerst eine qualitative Analyse der Simulationsergebnisse erfolgen.

Der zweidimensionale numerische Testfall, dessen Aufbau in Abb. 6.49 skizziert ist, besteht aus einem mit Flüssigkeit gefüllten Behälter. In der Mitte der Bodenplatte befindet sich eine Bohrung, aus der die Flüssigkeit schwerkraftgetrieben ausströmen kann. Um die Ausdehnung des Simulationsgebietes zu beschränken, wird die ausströmende Flüssigkeit in einem zweiten Behälter aufgefangen. Neben der Einschränkung des Rechengebietes hat dies den Vorteil, das Strömungsverhalten beim Auftreffen der Flüssigkeit auf feste Wände und die Tropfen-Film-Interaktion qualitativ untersuchen zu können. Der Aufbau besitzt die in Abb. 6.49 angegebenen Abmessungen mit $L = 0,05 \text{ m}$ und einer Fallhöhe $h_F = 0,49 \text{ m}$. Die Diskretisierung der festen Wände wird durch einreihig gesetzte Randpartikel und die der Flüssigkeit durch 100 000 Fluidpartikel, welchen die Dichte von Wasser $\rho = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ zugewiesen wird, umgesetzt. Der initiale Abstand der Fluidpartikel Δx entspricht dem doppelten Abstand der Randpartikel. Hierdurch und durch die zusätzliche Aufprägung einer repulsiven Randkraft, sollten sich Fluidpartikel innerhalb des sogenannten cut-off Radius der Randpartikel befinden, wird ein unphysikalisches Durchdringen der festen Wände von Fluidpartikeln vermieden.

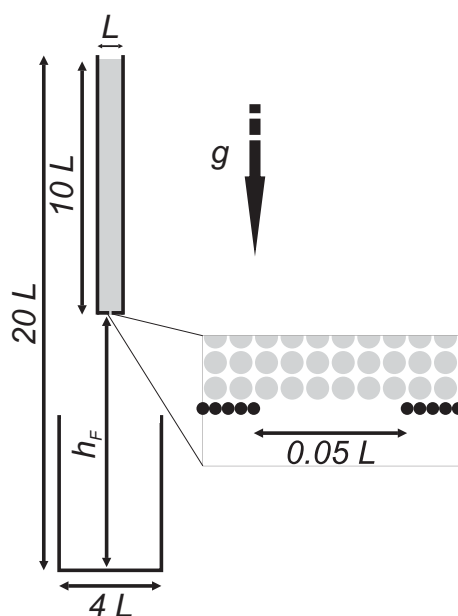


Abbildung 6.49: Skizze der zweidimensionalen generischen Düsenströmung

Aufgrund der im Laufe der Simulation auftretenden ungeordneten Stützstellenverteilung hat es sich als vorteilhaft erwiesen, das künstliche Viskositätsmodell (Gl. 4.34) nach Monaghan (1992) anzuwenden. Da das Auftreten von Verdichtungsstößen nicht zu erwarten ist, wird der Anteil der Neumann-Richtmyer-Viskosität vernachlässigt, d.h. $\beta = 0$. Der Parameter für die Scher- und Volumenviskosität wird auf Basis der Ergebnisse des Dammbuch-Testfalles aus Kapitel 6.2.2 vorerst auf den Wert $\alpha = 0,01$ festgelegt. In einer Vergleichsrechnung wird dieser um zwei Größenordnungen auf $\alpha = 1$ erhöht. Die Druck-Dichte-Kopplung erfolgt über die Tait-Zustandsgleichung. Diese ist durch den kohäsiven Term erweitert, um die Oberflächenspannungseffekte zu berücksichtigen. Die Inkompressibilität wird durch die geeignete Wahl der numerischen Schallgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Fallhöhe h_F sichergestellt.

$$c = 10 \cdot v_{max} = \sqrt{200 g h_F} \quad (6.7)$$

Die Interpolationen werden auf Basis der kubischen Glättungsfunktion gewichtet. Die Glättungslänge entspricht $h = 1,2 \cdot \Delta x$. Im Vergleich zur quintischen weist die kubische Glättungsfunktion bei gleichem relativen maximalen Einflussradius $\frac{r_{max}}{\Delta x}$, und somit derselben Größenskala der auflösbaren physikalischen Phänomene, geringere relative Fehler in den Summenapproximationen auf (s. Abb. 4.4). Bei Verwendung der quintischen Glättungsfunktion mit gleicher relativer Glättungslänge $\frac{h}{\Delta x}$ ergibt sich ein größerer maximaler Einflussradius. Hierdurch werden die Fehler durch das Abschneiden der Glättungsfunktion am Rand größer. Zudem nimmt der Rechenaufwand durch die steigende Anzahl an Interaktionspaaren deutlich zu.

Um Fehler in der Dichteapproximation zu minimieren, erfolgt zu jedem 50. Zeitschritt die Reinitialisierung des Dichtefeldes durch den Shepard-Filter (s. Kapitel 4.66).

Im Folgenden wird das Strömungsfeld im Bereich der Bohrung näher betrachtet. In den Abbn. 6.50 und 6.51 sind die Unterschiede im Strömungsfeld ohne und mit Oberflächenspannungsmodellierung zu Beginn der Simulation deutlich zu erkennen.

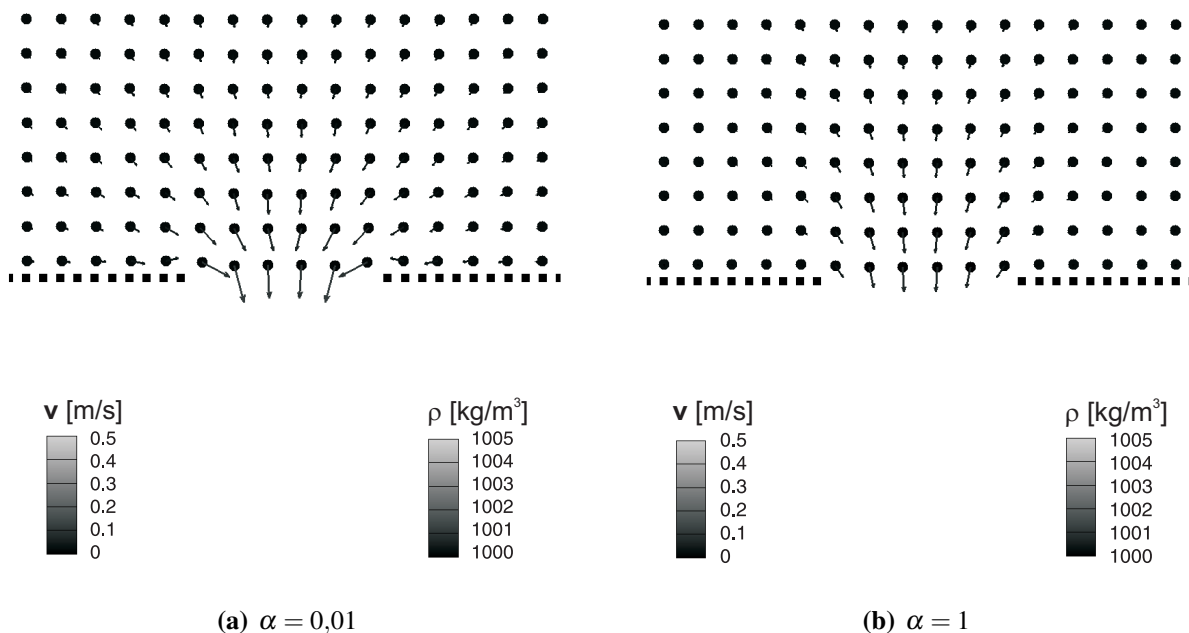


Abbildung 6.50: Geschwindigkeitsfeld und Partikelverteilung in Bohrungsnähe ohne Berücksichtigung der Oberflächenspannung $a' = 0 \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$, $t^+ = 0,007$

Wird diese vernachlässigt, d.h. $a' = 0 \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$, so strömt das Fluid sofort zu Beginn der Simulation aus der Bohrung in der Bodenplatte aus. Die Geschwindigkeitsvektoren in Abb. 6.50 verdeutlichen dies. Die Pfeile beschreiben die Richtung der Partikelbewegung, wobei deren Länge und Grauwert ein Maß für den Betrag der Absolutgeschwindigkeit v ist. Die Grauwertskala der Partikel repräsentiert die Fluidichte. Die dimensionslose Zeit $t^+ = t \sqrt{\frac{g}{10L}}$ berücksichtigt die Schwerkraft und die Höhe der Wassersäule. Der Einfluss der Viskosität ist vernachlässigbar.

Die Berücksichtigung der Oberflächenspannung über $a' = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$ führt zur charakteristischen Ausbildung eines Flüssigkeitsmeniskus an der Bohrung innerhalb der ersten Zeitschritte, wie in Abb. 6.51 dargestellt.

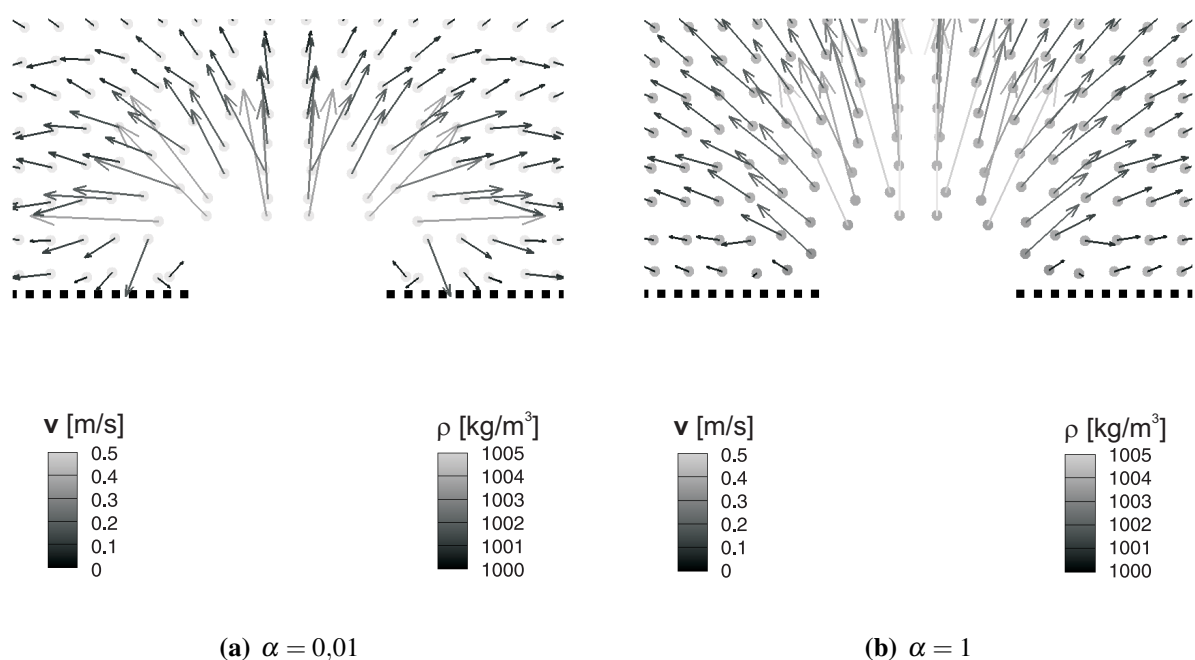


Abbildung 6.51: Geschwindigkeitsfeld und Partikelverteilung in Bohrungsnähe mit Berücksichtigung der Oberflächenspannung $a' = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$, $t^+ = 0,007$

Dieser Effekt tritt ungeachtet der Viskosität, wobei α um zwei Größenordnungen variiert wurde, auf. Der Viskositätseinfluss beschränkt sich auf die Änderung der Geschwindigkeiten am Bohrungsaustritt. Im weiteren Verlauf der Simulationen tritt das Fluid ebenfalls schwerkraftgetrieben aus der Bohrung aus.

In den Abbn. 6.52 und 6.53 ist das Strömungsfeld am Düsenaustritt für alle Simulationen zu einem späteren Zeitschritt $t^+ = 0,107$ wiedergegeben. Zu erkennen ist, dass das Fluid im Fall der Simulationen mit Berücksichtigung der Oberflächenspannungseffekte (s. Abb. 6.53) eine höhere Dichte aufweist als in den in Abb. 6.52 abgebildeten Fällen mit $a' = 0 \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$. Dies beruht auf der expliziten Druck-Dichte-Relation und gibt den Drucksprung über die Grenzfläche aufgrund der Oberflächenspannungskräfte wieder. Im Fall der Flüssigkeit mit geringer Viskosität ist bei Berücksichtigung der Oberflächenspannung eine Verringerung des Spraykegelwinkels im Vergleich zur Simulation ohne Oberflächenspannungseffekte zu beobachten. Für die Simulationen der Flüssigkeit höherer Viskosität wird korrekterweise ein geringerer Strahldurchmesser bei Berücksichtigung der Oberflächenspannung vorhergesagt.

Im Folgenden soll nur noch auf die Simulationen mit Berücksichtigung der Oberflächenspannungseffekte eingegangen werden. Dabei wurde der Flüssigkeitszerfall für zwei Fluide mit unterschiedlichen Viskositäten ($\alpha = 0,01$ und $\alpha = 1$) untersucht. Die zeitliche Entwicklung des Flüssigkeitsstrahls ist in den Abbn. 6.54 und 6.55 dargestellt. Nach der anfänglichen Bildung des Meniskus, wie zuvor anschaulich erläutert, tritt das Fluid schwerkraftgetrieben aus der Düsenöffnung aus und wird stromab beschleunigt. Im Fall der geringen Viskosität weist die Strahlspitze kurz nach dem Austritt aus der Bohrung eine abgerundete Form aufgrund der nach innen gerichteten Oberflächenspannungskräfte auf. Dies führt weiterhin dazu, dass an der

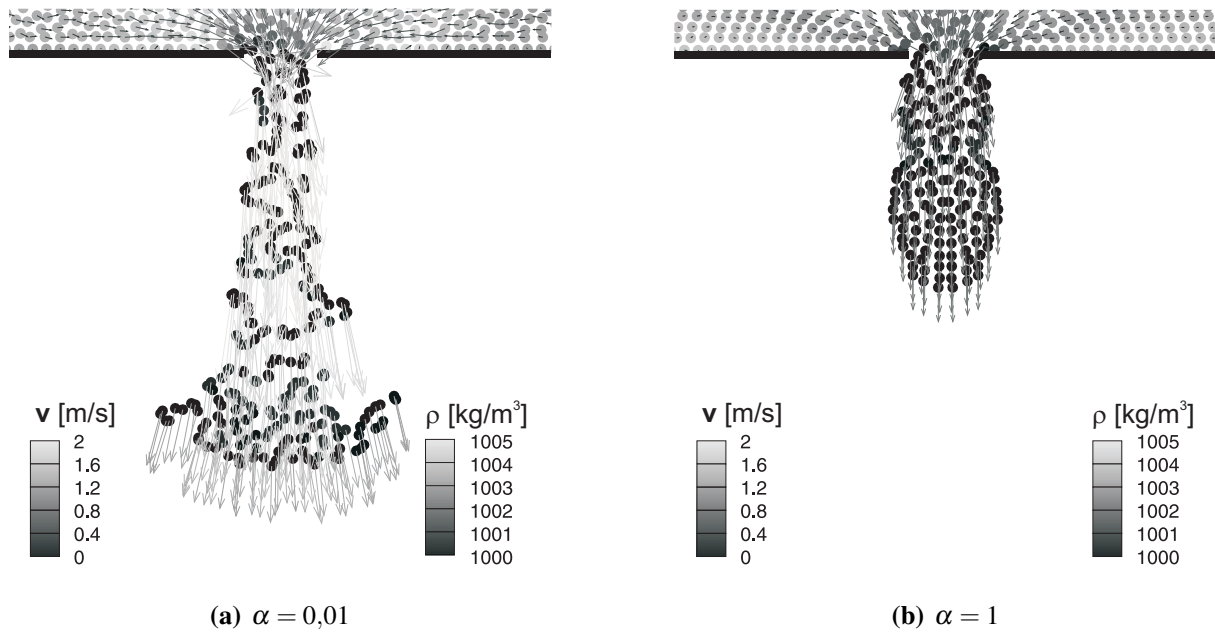


Abbildung 6.52: Geschwindigkeitsfeld und Partikelverteilung in Bohrungsnähe ohne Berücksichtigung der Oberflächenspannung $a' = 0 \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$, $t^+ = 0,107$

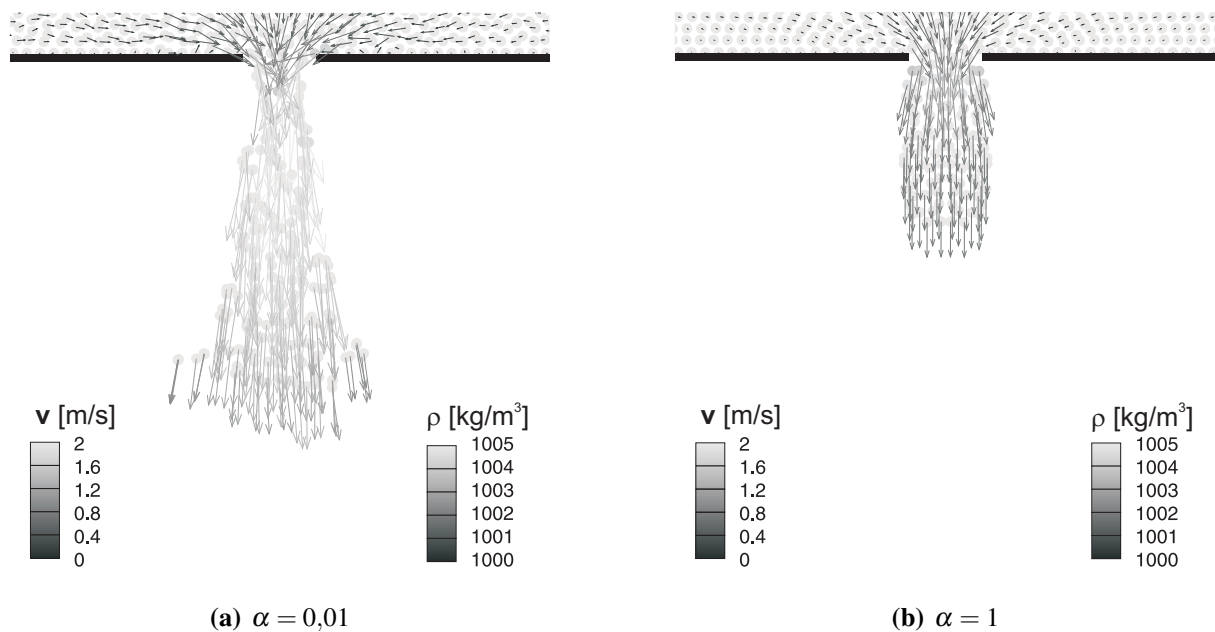


Abbildung 6.53: Geschwindigkeitsfeld und Partikelverteilung in Bohrungsnähe mit Berücksichtigung der Oberflächenspannung $a' = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \frac{\text{m}^6}{\text{kg}^2}$, $t^+ = 0,107$

Strahlspitze eine geringere Absolutgeschwindigkeit als im Nahbereich der Öffnung herrscht. Im weiteren zeitlichen Verlauf zerfällt der Strahl in einzelne Ligamente und Tropfen, welche sich aus mehreren Partikeln zusammensetzen. Die Änderung der Absolutgeschwindigkeit entlang der Spraymittelachse wird durch die Wechselwirkung zwischen Fluidagglomeration, bedingt durch

die Oberflächenspannung, und Beschleunigung des Fluids durch die Schwerkraft verursacht. Die geringere Viskosität führt dazu, dass die Reynolds-Zahl aufgrund der Proportionalität $Re \propto \frac{1}{\mu}$ steigt. Dadurch tritt kein Rayleigh-Zerfall (Bereich I in Abb. 2.4) ein, sondern die spontane Zerstäubung (Bereich III in Abb. 2.4). Dies ist anhand der Ausbildung des Spraykegels in Abb. 6.54 zu erkennen. Die Größe der Partikelanhäufungen nimmt, analog zu Tropfen im Spray, stromab ab. Des Weiteren kann die Spray-Film- sowie die Fluid-Wand-Interaktion im Auffangbehälter beobachtet werden. Das Durchdringen der festen Wände wird durch die Konfiguration der Randpartikel vermieden. Trifft die Flüssigkeit mit hohem Impuls auf den Boden, so entstehen erneut Spritzer und Tropfen, welche mit dem Spray interagieren. Im Fluid im Auffangbehälter sind starke Wellenbewegungen und Luft einschüsse aufgrund der hohen Relativgeschwindigkeiten zwischen Wand bzw. ruhendem Film und Spraytropfen zu erkennen. Bedingt durch die geringere Viskosität tritt kaum Dissipation bzw. Reduktion der kinetischen Energie im System auf.

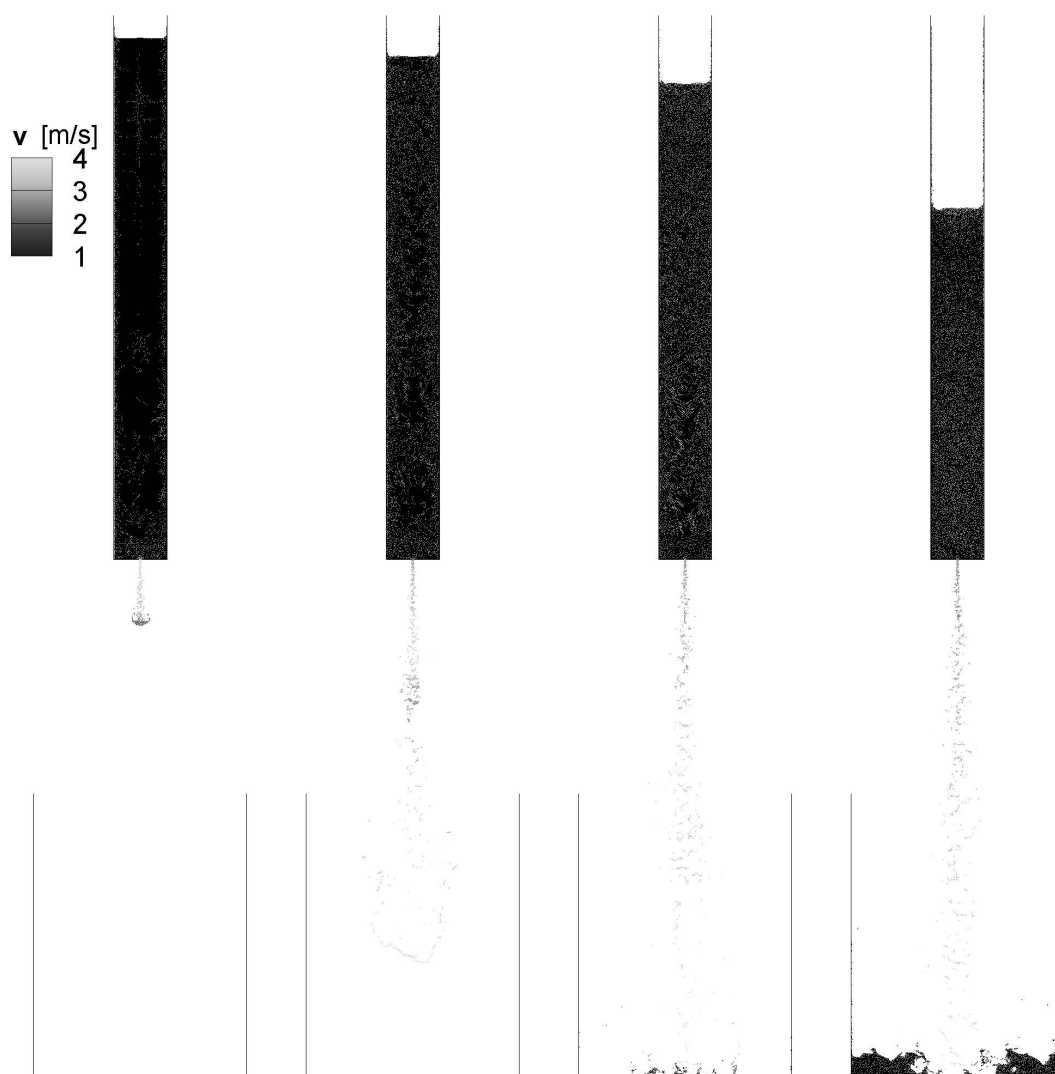


Abbildung 6.54: Zeitliche Entwicklung des Strahlzerfalls für ein Medium geringer Viskosität

Der Strahlzerfall eines hochviskosen Mediums ist in Abb. 6.55 veranschaulicht. Die darge-

stellten Zeitschritte entsprechen denen des Zerfalls des Fluids geringer Viskosität in Abb. 6.54. Anstatt der Entstehung eines Spraykegels ist die Ausbildung eines Einzelstrahls festzustellen. Da die Viskosität steigt, nimmt die Reynolds-Zahl bei ansonsten konstanten Parametern und Abmessungen ab. Dies führt zu einer Verschiebung des Betriebspunktes im *Re-Oh*-Diagramm (s. Abb. 2.4) in den Bereich I des Rayleigh-Zerfalls.

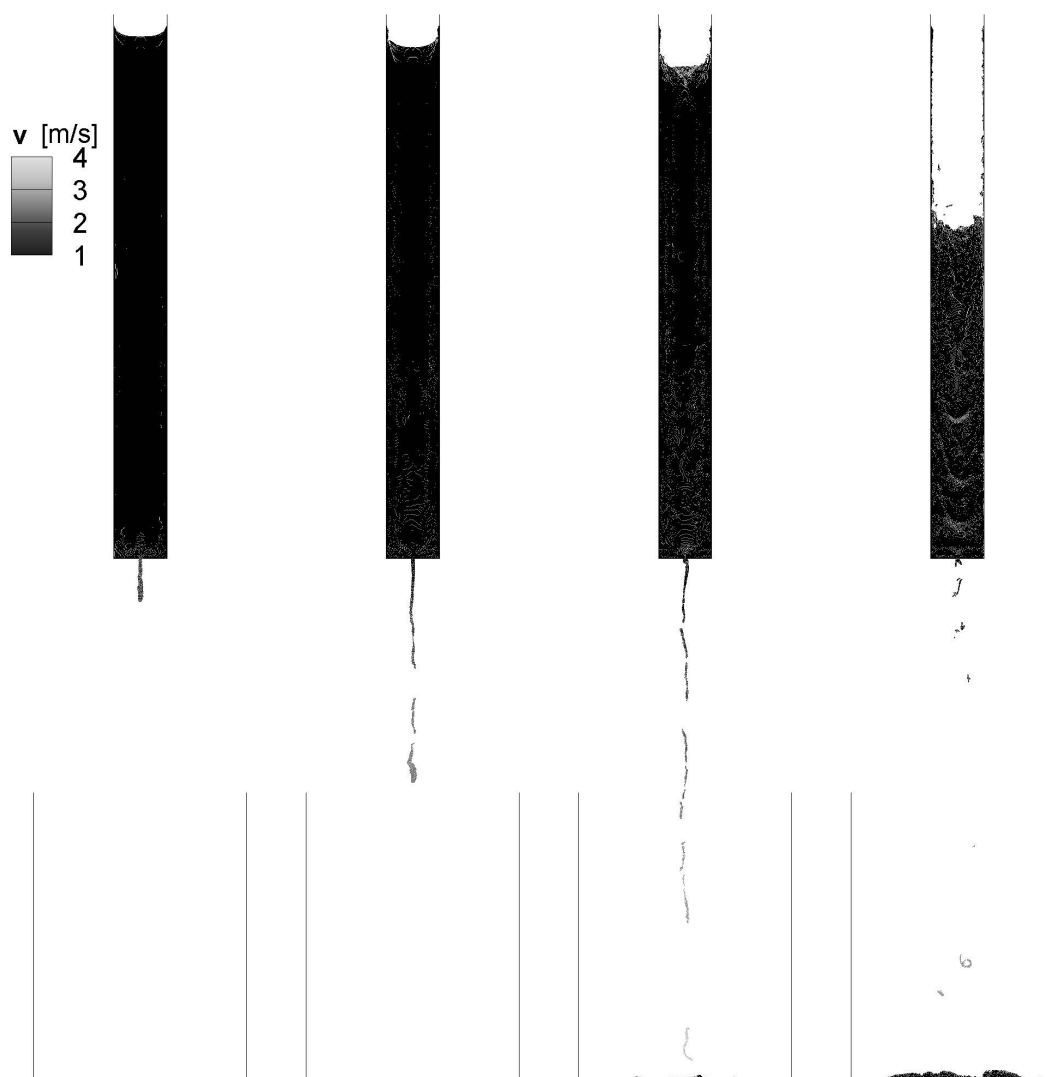


Abbildung 6.55: Zeitliche Entwicklung des Strahlzerfalls für ein Medium hoher Viskosität

Das Fluid tritt als zusammenhängender Strahl aus der Bohrung aus und wird aufgrund der Schwerkraft beschleunigt. Bedingt durch die angreifenden Oberflächenspannungskräfte ist die Strahlspitze abgerundet. Auch hierbei ist die Verringerung der Absolutgeschwindigkeit an der Strahlspitze im Vergleich zur Auslassbohrung zu erkennen. In der Nähe der Bohrung entspricht der Strahldurchmesser näherungsweise dem Bohrungsdurchmesser. Weiter stromab treten Instabilitäten an der Strahloberfläche auf, welche Einschnürungen des Strahls verursachen. An diesen Stellen scheren sich im weiteren Verlauf längliche Fluidligamente ab. Theoretisch liegt die kritische Wellenlänge nach Gl. 2.1 bei $\lambda = 0,01127 \text{ m}$. In den Simulationsergebnissen lässt

sich eine mittlere Ligamentlänge, bzw. ein mittlerer Abstand zwischen den Einschnürungen, von ca. $0,01\text{ m}$ beobachten. Dieses Verhalten stimmt sehr gut mit der Theorie des Rayleigh-Zerfalls bei geringen Reynolds-Zahlen überein. Die Fallhöhe h ist zu gering, als dass sich während der Fallzeit die Ligamente in sphärische Tropfen verformen könnten. Den Oberflächenspannungskräften stehen zu hohe viskose Kräfte gegenüber, weshalb kein Zerstäubungsvorgang eintritt. Es sind weder eine merkliche Strahlaufweitung noch die Entstehung eines Sprays zu beobachten. Durch die hohe Dissipation im Fluid sind die maximal auftretenden Fluidgeschwindigkeiten deutlich geringer als im Fall der Zerstäubungssimulation des Mediums geringer Viskosität.

Abschließend ist jeweils eine Momentaufnahme der Simulation der Düsenströmung und eines Experiments für das nieder- und hochviskose Fluid mitsamt der auftretenden Charakteristika dargestellt. In Abb. 6.56 ist die Ausbildung des Sprays unter einem bestimmten Spraykegelwinkel, aufgrund der geringen Viskosität, deutlich erkennbar. Es treten maximale absolute Fluidgeschwindigkeiten von $4\frac{\text{m}}{\text{s}}$ auf. Zudem konnte die Fluid-Wand-Interaktion im Auffangbehälter und die Tropfen-Film-Interaktion beim Auftreffen des Sprays auf den Flüssigkeitsfilm simuliert werden.

In Ausschnitt **a** ist die Flüssigkeitsoberfläche im Vorratsbehälter vergrößert dargestellt. Aufgrund der geringeren Viskosität besteht nur eine geringe Haftung der Flüssigkeit an der Wand. Die Oberfläche ist nahezu eben. Die Diskretisierungspunkte sind relativ gleichmäßig verteilt. An der Austrittsbohrung (s. Ausschnitt **b**) steigt die Fluidgeschwindigkeit aufgrund der sprunghaften Querschnittsverengung stark an. Die Deformation des Flüssigkeitsstrahls tritt circa einen Bohrungsdurchmesser stromab der Düsenöffnung ein. Die Abscherung der Flüssigkeitsstrahls und die Bildung von Ligamenten weiter stromab sind in Ausschnitt **c** im Detail zu sehen. Dabei ist die vollständige Desintegration des Strahl und die eintretende Strahlaufweitung zu erkennen. Nach dem Austritt aus der Düse wird das Fluid durch die Schwerkraft beschleunigt. Die Ligamente zerfallen weiter und es treten, wie in Ausschnitt **d** zu beobachten, Partikelanhäufungen, welche Tropfen repräsentieren, auf. Die Tropfengröße ist dabei kleiner als der Durchmesser der Düsenöffnung, wie dies für das Zerstäuben im Bereich III der in Abb. 2.4 gezeigten Regime zu erwarten ist. In den Ecken des Auffangbehälters (s. Ausschnitt **e**) entstehen Wirbel, welche durch ein Überschwappen des Fluids und dadurch entstehende Lufteinschlüsse gekennzeichnet sind. Die Gegenüberstellung von Simulation und experimentellen Aufnahmen von Lin und Reitz (1998) bestätigt die qualitativ korrekte Vorhersage des Flüssigkeitszerfalls für Medien geringer Viskosität.

Eine Momentaufnahme der Simulation der Düsenströmung einer Flüssigkeit hoher Viskosität ist in Abb. 6.57 illustriert.

Die Dissipation reduziert die kinetische Energie des Fluids. Demnach reichen die angreifenden Scher- und Oberflächenspannungskräfte nicht aus, um eine Tropfenabscherung und die Ausbildung eines Spraykegels zu initiieren. Wellen und Störungen in der Flüssigkeit im Auffangbehälter durch Fluid-Fluid-Interaktion werden ebenfalls sofort gedämpft, wodurch weder Überschwappen noch Lufteinschlüsse auftreten. In Ausschnitt **a** ist zu erkennen, dass der Kontaktwinkel zwischen Wand und Fluid deutlich größer als im Fall des niederviskosen Fluids ist. Die freie Fluidoberfläche im Vorratsbehälter ist dadurch stärker gekrümmt und welliger. Durch die Bohrung in der Bodenplatte tritt ein zusammenhängender Flüssigkeitsstrahl aus, welcher sich geringfügig

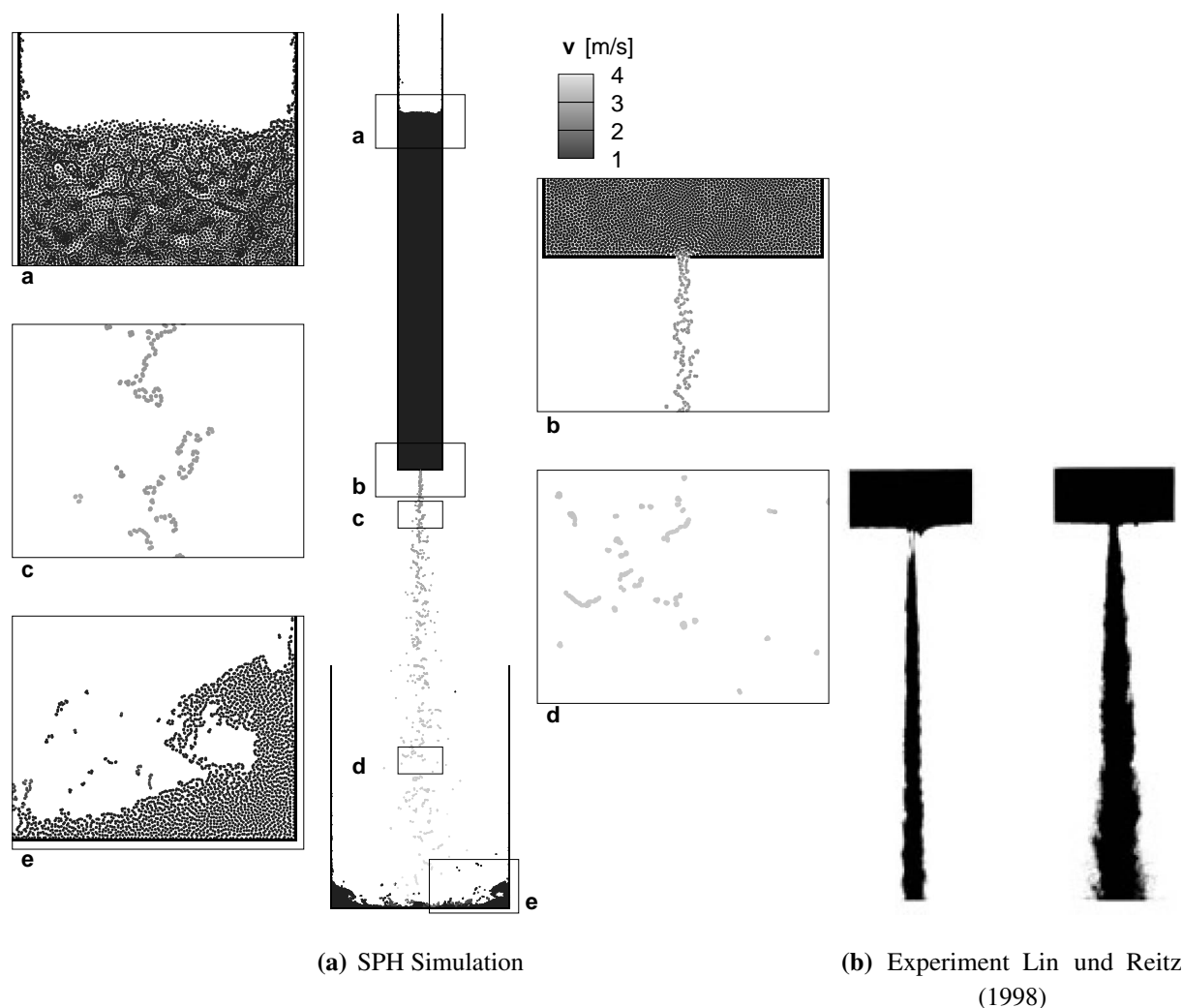


Abbildung 6.56: Charakteristika der Simulation und des Experiments der Zerstäubung eines Fluids mit geringer Viskosität

aufweitet, bevor die Einschnürung aufgrund der Oberflächenspannung eintritt (s. Ausschnitt **b**). Stromab erfolgt die schwerkraftbedingte Beschleunigung des Fluids und die Abscherung einzelner länglicher Flüssigkeitsligamente. Der Ligamentdurchmesser, wie in Ausschnitt **c** beispielhaft dargestellt, entspricht in etwa dem Durchmesser der Düsenöffnung. Ausschnitt **d** zeigt, dass sich nach weiterer Fallstrecke des Fluids kürzere Ligamente einer Länge von ca. $0,01\text{ m}$ abscheren. Dies liegt in sehr guter Übereinstimmung mit der nach der Rayleigh-Theorie erwarteten kritischen Wellenlänge für die Strahleinschnürung von $\lambda = 4,508 \cdot D = 0,01127\text{ m}$. Beim Auftreffen des Fluids im Auffangbehälter, das in Ausschnitt **e** abgebildet ist, wird die kinetische Energie durch die hohe Dissipation sofort reduziert. Es ist keine Wellenbildung zu beobachten. Aus diesem Grund entstehen auch bei der Interaktion des ruhenden Fluids im Behälter mit den beschleunigten Fluidligamenten keine Sekundärtropfen. Der Simulation ist eine Momentaufnahme des experimentell untersuchten Primärzerfalls an einer ebenen Filmlegetrippe von Gepperth et al. (2010) gegenübergestellt. Diese Aufnahme des Zerfalls eines Fluids hoher Viskosität weist dieselben Charakteristika, die auch von der SPH Simulation vorhergesagt

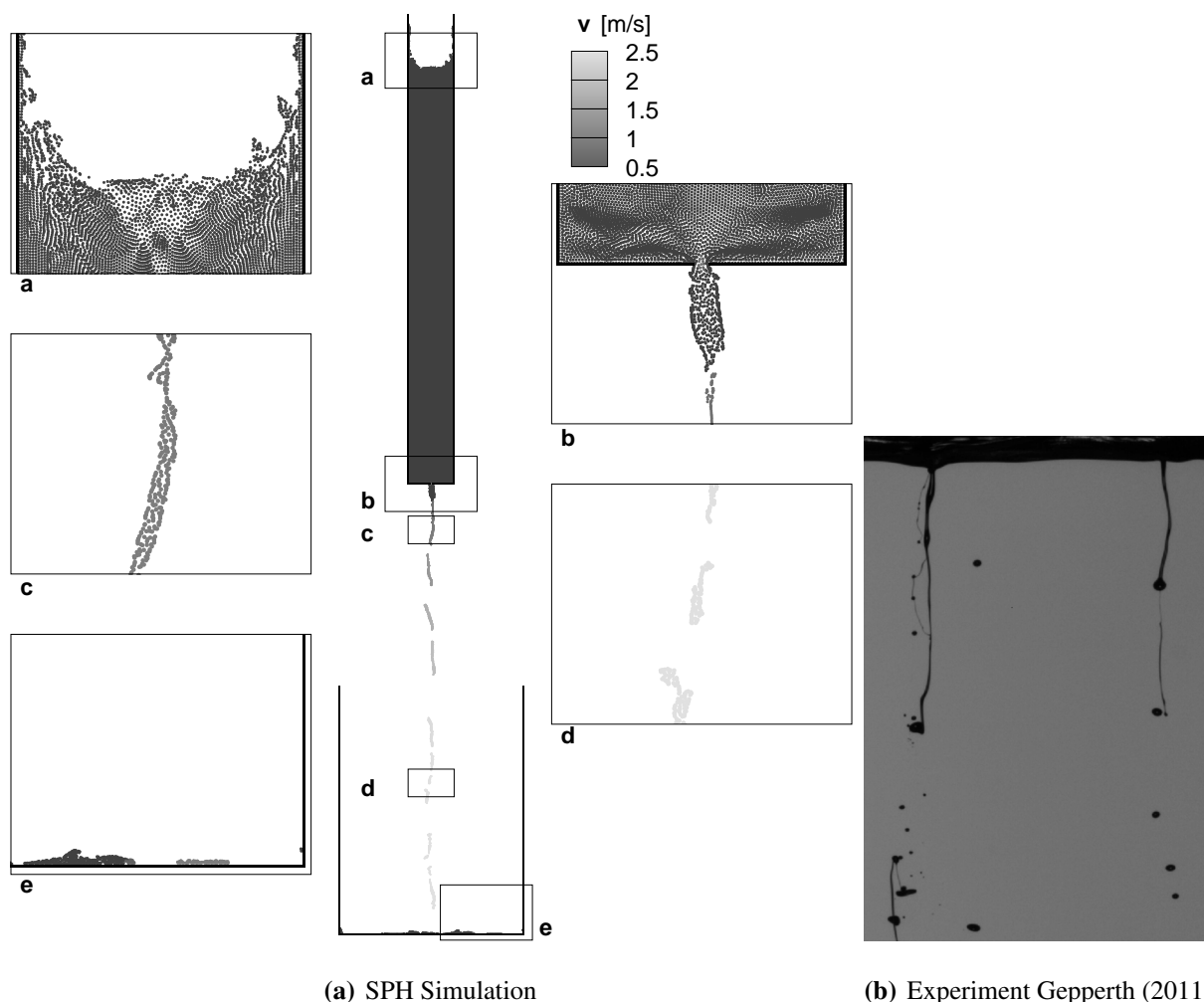


Abbildung 6.57: Charakteristika der Simulation und des Experiments der Zerstäubung eines Fluids mit hoher Viskosität

werden, auf.

Um den Strahlzerfall des Fluids geringer Viskosität innerhalb einer Echtzeit von circa 0,5 s numerisch vorherzusagen, werden bei der Verwendung eines adaptiven Zeitschritts ungefähr 200 000 Zeitschritte benötigt. Dies entspricht einer Rechenzeit von knapp 72 CPUh bei einer Diskretisierung des gesamten Rechengebiets mit 107 231 Partikeln. Für die Simulation des Fluids höherer Viskosität sinkt die zulässige Zeitschrittweite gemäß Gl. 5.6. Innerhalb derselben Rechenzeit werden somit lediglich etwa 0,3 s Echtzeit berechnet.

Die Grenzfläche kann mittels der SPH Methode ohne ein zusätzliches Grenzflächenverfolgungsverfahren sehr präzise dargestellt und Lufteinschlüsse sowie Tropfen identifiziert werden. Zur qualitativen Vorhersage des Primärzerfalls reicht die Modellierung des Systems als Fluid mit freier Oberfläche in erster Näherung aus. Die Berücksichtigung der Oberflächenspannung durch das CF Modell erlaubt die qualitativ korrekte Simulation der charakteristischen Merkmale des Flüssigkeitszerfalls, sowohl für Fluide geringer Viskosität als auch für hochviskose Fluide.

6.2.4 Tropfen-Film-Interaktion

Aufbauend auf dem zuvor beschriebenen Testfall soll nun die Interaktion eines Tropfens mit einem Flüssigkeitsfilm untersucht werden. Die Interaktion zwischen Tropfen und einem Wandfilm tritt bei luftgestützten Zerstäubern bei denen der Kraftstoff über eine Druckdüse auf den Filmleger aufgebracht wird, wie in Abb. 6.58 dargestellt, auf.

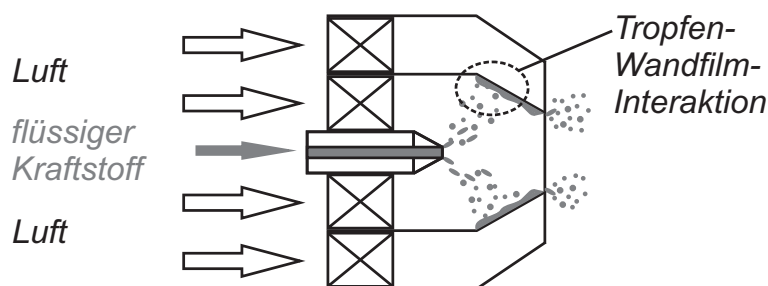


Abbildung 6.58: Tropfen-Wandfilm-Interaktion in einer luftgestützten Zerstäuberdüse

Außerdem soll die Entstehung eines flüssigen Wandfilms an den Brennkammerwänden nach Austritt des Sprays aus der Düse vermieden werden. Dies ist z. B. an den Brennkammerwänden oder bei der AdBlue-Einspritzung in den Abgastrakt von Nutzfahrzeugen zur Abgasnachbehandlung bzw. Reduzierung der NO_x -Emissionen zu beachten. Des Weiteren beeinflussen Tropfen-Wandfilm-Interaktionen in Triebwerkslagerkammern die Kühlung und Schmierung des Lagers, sowie die Abscheiderate.

Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Tropfen-Film-Interaktion wurden unter anderem von Cossali et al. (1997, 2004) und Peduto et al. (2011) durchgeführt. Dabei wird zwischen den zwei Regimen *splashing* und *deposition* unterschieden. Eine empirische Korrelation für deren Klassifizierung lieferten Cossali et al. (1997).

$$We \cdot Oh^{-0,4} = K_L = 2100 + 5880 \cdot h_F^{+1,44} \quad (6.8)$$

Diese wurde für die Interaktion von Tropfen mit dünnen Filmen ermittelt, d. h. die dimensionslose Filmdicke $h_F^+ = \frac{h_F}{2R}$ liegt im Bereich $0,1 < h_F^+ < 1$.

Der Aufbau des hier untersuchten Testfalls ist in Abb. 6.59 skizziert. Dabei sind die geometrischen Abmessungen im linken Bild eingetragen, wohingegen die Partikeldiskretisierung des Fluids im rechten Bild dargestellt ist.

Vor der Simulation der eigentlichen Tropfen-Wandfilm-Interaktion, bei der der Tropfen aus seiner Ausgangslage aufgrund der Schwerkraft über die Fallhöhe hinweg beschleunigt wird, wurde das System ohne Einwirkung der Schwerkraft simuliert. Die Oberflächenspannungseffekte, berücksichtigt durch das CF Modell, bewirken dabei, dass sich ein erhöhter Druck im Fluid und eine geringfügige Partikelumverteilung im stationären Gleichgewichtszustand einstellen. Hierbei greifen die in Kapitel 6.2.1 geschilderten Mechanismen. Das Auffangbehältnis entspricht einem nach oben geöffneten Würfel der Kantenlänge $L = 1 \text{ m}$. Die initiale Filmhöhe darin beträgt $h_F^+ = 0,75$, wobei der Tropfen, dessen Schwerpunkt sich $h = 0,9 \text{ m}$ über dem Boden befindet,

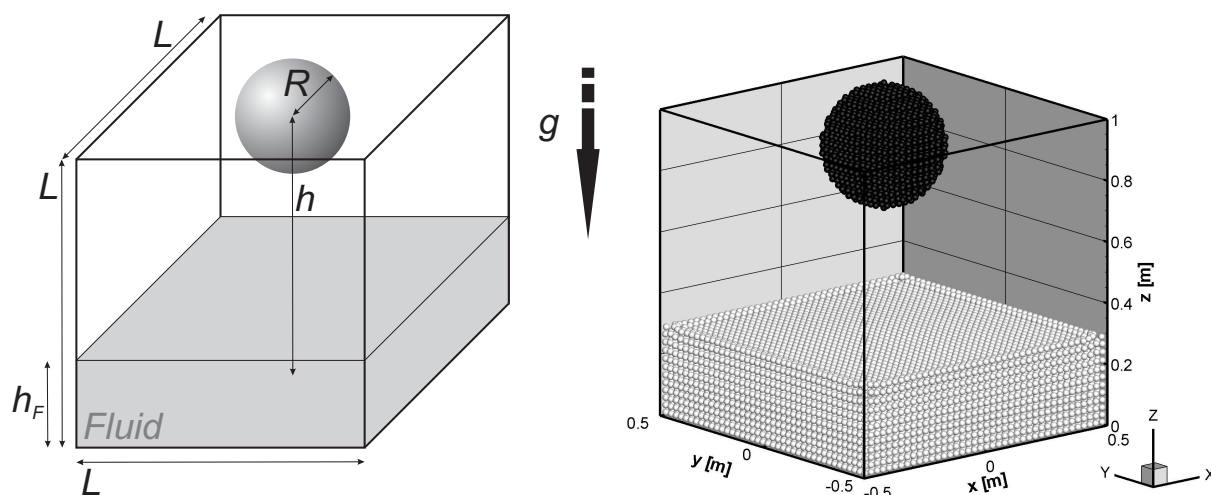


Abbildung 6.59: Simulationsaufbau der Tropfen-Film-Interaktion: Skizze (links) und Partikeldiskretisierung des Fluids (rechts)

einen Radius von $R = 0,2 \text{ m}$ aufweist. Die 53 470 Partikel sind entsprechend ihrer Zuordnung zu Tropfen oder Film farblich gekennzeichnet.

Theoretisch erreicht der Tropfen im Moment des Auftreffens auf den Flüssigkeitsfilm eine Auftreffgeschwindigkeit von $v_a = 2,8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ nach einer Fallzeit von $0,285 \text{ s}$. Ausgehend von der Annahme der physikalischen Eigenschaften von Wasser für die Flüssigkeit ergibt sich nach der Klassifizierung nach Gl. 6.8, dass der Testfall dem *splashing* Regime zuzuordnen ist. Zu beachten ist jedoch, dass sich der Flüssigkeitsfilm im untersuchten Testfall in einem von festen Wänden begrenzten Behältnis befindet. Somit beeinflusst die Wechselwirkung zwischen Wand und Flüssigkeit auch die Tropfen-Film-Interaktion.

Die Summeninterpolationen wurden mit der quintischen Glättungsfunktion bei einer Glättungslänge von $h = 0,96 \cdot \Delta x$ gewichtet. Zur Berechnung des Drucks auf Basis des Dichtefelds kommt die Tait-Zustandsgleichung inklusive des Kohäsionsterms (Gl. 4.62) zum Einsatz. Hierbei ist der Referenzdruck B als Funktion der numerischen Schallgeschwindigkeit $c = \sqrt{200 g (h - h_F)}$ gegeben. Die Dissipation wird mittels des künstlichen Viskositätsmodells mit den Parametern $\alpha = 0,01$ und $\beta = 0$ modelliert. Der Zeitschritt wird adaptiv gesetzt.

In Abb. 6.60 ist eine Bilderfolge der Tropfen-Film-Interaktion über die dimensionslose Zeit $t^+ = t \frac{v_a}{2R}$ dargestellt. Die Partikeldata wurden zur grafischen Darstellung auf ein Gitter interpoliert und daraus die Oberfläche ermittelt. Dabei ist die Ausbildung konzentrischer Wellen direkt nach dem Aufprall des Tropfens auf der Filmoberfläche zu erkennen. Nach der maximalen Ausdehnung des Flüssigkeitskraters bildet sich in dessen Zentrum ein sogenannter vertikal nach oben gerichteter Rayleigh-Jet aus. Von dessen Spitze scheren sich Einzeltropfen ab. Durch das Markieren der Partikel des ursprünglichen Tropfens und des Films kann gezeigt werden, dass sich der entstehende Rayleigh-Jet nahezu ausschließlich aus dem Fluid des Tropfens zusammensetzt. Dies ist in Abb. 6.61 anhand der beiden Partikelverteilungen während der Entstehung des Rayleigh-Jets zu erkennen. Zur Verdeutlichung des Sachverhalts wurde nur ein 90° -Ausschnitt des diskretisierten Fluids abgebildet. Nach $t^+ = 120$ befindet sich das System im stationären

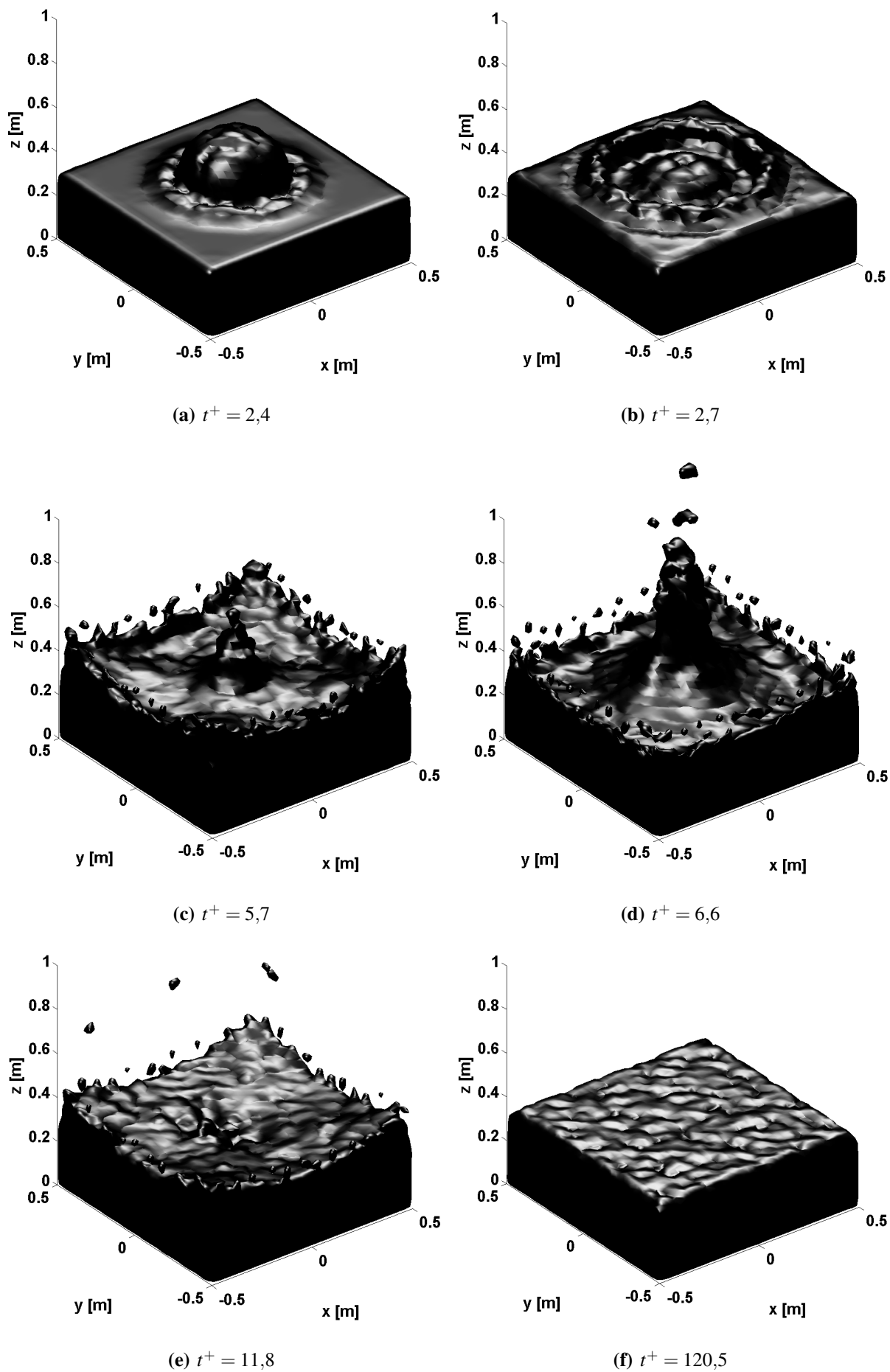


Abbildung 6.60: Simulation der Tropfen-Wandfilm-Interaktion

Zustand, die Flüssigkeitsoberfläche ist nahezu eben. Die integrale kinetische Energie hat um mehr als vier Größenordnungen im Vergleich zum Startvorgang des fallenden Tropfens abgenommen.

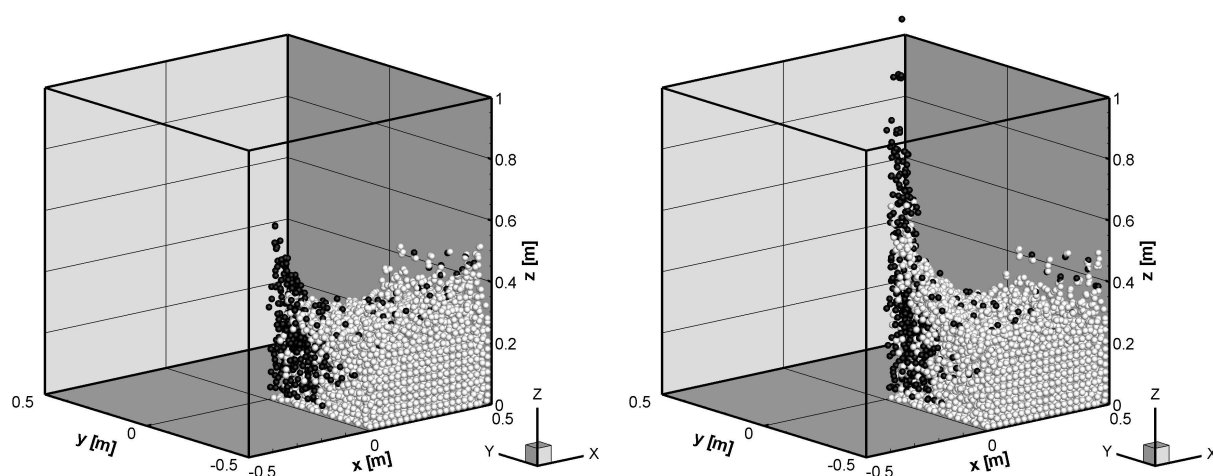


Abbildung 6.61: Entstehung des Rayleigh-Jets (Ausschnitt) zu den Zeitpunkten $t^+ = 5,7$ (links) und $t^+ = 6,6$ (rechts)

Dreidimensionale Simulationen können ohne jegliche Modifikation im Code durchgeführt werden. Die Bildung des Rayleigh-Jets und der Sekundärtropfen, sowie der Ligamente an der Wand wird ohne zusätzlichen Grenzflächenverfolgungsalgorithmus sehr gut erfasst. Die Kraterbildung, welche von Peduto et al. (2011) untersucht wurde, ist deutlich erkennbar. Mittels der SPH Methode kann dies schon bei einer Diskretisierung von 21 309 Fluidpartikeln und 32 161 Randpartikel ohne weitere Verfeinerung simuliert werden. Außerdem ist ohne weiteren Aufwand direkt die Verteilung der Fluide des ursprünglichen Tropfens und des Wandfilms nachvollziehbar. Dies ist mit der Volume of Fluid Methode so nicht möglich. Um belastbare, quantitative Aussagen über die Tropfen-Film-Interaktion treffen zu können, müsste die örtliche Auflösung weiter erhöht werden. Ziel dieser Untersuchung ist es jedoch, die Möglichkeiten und Vorteile der SPH Methode aufzuzeigen.

Durch die umfangreiche Validierung der Einphasenströmungen ohne und mit freier Oberfläche wurde demonstriert, dass der Code für die Simulation unterschiedlichster strömungsmechanischer Effekte sehr genaue Vorhersagen liefert. Ein großer Vorteil ist die explizite Darstellung der Grenzflächen, wodurch rechenintensive und fehleranfällige *interface capturing* Verfahren (z. B. VoF oder Level Set) überflüssig werden. Wie aus den Simulationen zu erkennen ist, tritt keine Grenzflächendiffusion auf. Dies sind fundamentale Voraussetzungen für die Simulation des Primärzerfalls. Bisher verfügbare SPH Codes wurden jeweils für spezifische Anwendungen entwickelt und verfügen nicht über die Flexibilität des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verfahrens. Die relevanten Strömungs- und Zerfallscharakteristika werden durch die Simulation freier Oberflächen und Berücksichtigung der Oberflächenspannung durch das CF Modell qualitativ korrekt erfasst. Für die quantitative Analyse von Strömungsfeldern, in denen Oberflächenspannungseffekte relevant sind, ist das CF Modell ungeeignet. Die Rechenzeit der Simulationen kann aufgrund der ausschließlichen Diskretisierung der Flüssigphase im Vergleich

zu Mehrphasenrechnungen mittels der Volume of Fluid Methode erheblich reduziert werden.

6.3 Zweiphasen-Testfälle

Im letzten Schritt der Grundlagenentwicklung und Modellvalidierung des Codes zur numerischen Vorhersage des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen werden Zweiphasen-Testfälle untersucht. In komplexen technischen Systemen wie einem Airblast-Zerstäuber spielen neben den Oberflächenspannungskräften weitere Grenzflächeneffekte, wie etwa die Wärmeübertragung, die Impulsübertragung oder die Interaktion aufgrund von Turbulenz eine wichtige Rolle. Um diese Effekte korrekt vorherzusagen, müssen beide Phasen betrachtet und berechnet werden. Im Gegensatz zu den in Kapitel 6.1 und 6.2 diskutierten Testfällen werden nun sowohl die Flüssig- wie auch die Gasphase diskretisiert bzw. simuliert und somit deren Interaktion explizit berechnet. Aus im nächsten Kapitel 6.4 detaillierter erläuterten Gründen wird für die hier untersuchten Testfälle

- Tropfenformation
- Tropfen in Scherströmung

das CSF Modell zur Berücksichtigung der Oberflächenspannungseffekte verwendet.

Die SPH Methode bietet den gewichtigen Vorteil gegenüber gitterbasierten Verfahren, dass die Grenzfläche automatisch mittransportiert wird. Die Notwendigkeit eines fehleranfälligen und zeitaufwändigen Algorithmus zur Grenzflächenverfolgung entfällt. Numerische Diffusion an der Phasengrenzfläche tritt nicht auf.

6.3.1 Tropfenformation

Anhand dieses Testfalls soll die Modellierung der Oberflächenspannung mittels der Continuum Surface Force Methode validiert werden (Höfler et al., 2013). Um den Rechenaufwand verhältnismäßig gering zu halten, werden zweidimensionale Simulationen durchgeführt. Im Gegensatz zu den in Kapitel 6.2.1 diskutierten Berechnungen sind hierbei sowohl der flüssige Tropfen wie auch die umgebende Luft mittels Partikeln diskretisiert. Der Fokus liegt nun auf der quantitativen Auswertung der Ergebnisse. Ziel ist es, sowohl die Minimierung der Grenzfläche bzw. der Grenzflächenenergie wie auch den korrekten Drucksprung über die gekrümmte Tropfenoberfläche hinweg exakt wiederzugeben. Ein im Nicht-Gleichgewicht befindliches Mehrphasensystem strebt stets die Minimierung der Grenzflächenenergie und somit die Minimierung der tatsächlichen Grenzfläche aufgrund der Oberflächenspannung an. Der Drucksprung über die gekrümmte Phasengrenzfläche hinweg, bedingt durch die Oberflächenspannungskräfte, kann anhand der Young-Laplace-Gleichung ermittelt werden. Diese lautet für den zweidimensionalen Fall:

$$\Delta p = \frac{\sigma}{R} \quad (6.9)$$

Ausgangszustand dieses Testfalls ist ein zweidimensionales Quadrat einer Flüssigkeit, welches von einer weiteren Phase umgeben ist. Dies ist in Abb. 6.62 skizziert. Das Rechengebiet mit den Abmaßen $H \times H = 3 \cdot 10^{-2} \text{ m} \times 3 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ ist durch periodische Randbedingungen (Strichpunktlinie) begrenzt. Die Kantenlänge des Fluidgebietes 1 entspricht $\frac{H}{6}$. Da das System sich anfänglich in einem Nicht-Gleichgewichtszustand befindet, treten starke Beschleunigungen und dadurch bedingt hohe Druckoszillationen während des Einschwingvorgangs in den stabilen Gleichgewichtszustand auf. Die geometrischen Abmessungen und die Viskosität der Medien sind daher so gewählt, dass die Übertragung von Druckoszillationen über die periodischen Ränder möglichst vermieden wird. Das gesamte Gebiet ist durch 120×120 Fluidpartikel diskretisiert. Diese sind im Anfangszustand äquidistant verteilt.

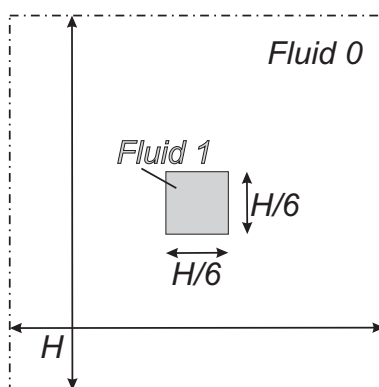


Abbildung 6.62: Aufbau der Mehrphasensimulation der Tropfenbildung

Um die Druckoszillationen zu dämpfen, wird zusätzlich die dynamische Viskosität beider Medien auf die Werte $\mu_0 = \mu_1 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ Pa s}$ gesetzt. Das Dichteverhältnis der beiden Fluide liegt bei $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$ und entspricht somit dem System eines von Luft umgebenen Brennstofftropfens unter Standardbedingungen. Um die Dichtediskontinuität an der Phasengrenzfläche zu erhalten, wird die Dichteänderungsrate über die Divergenz des Geschwindigkeitsfelds berechnet. Die Berechnung der Druckterme der Navier-Stokes-Gleichungen erfolgt nach der Formulierung für Mehrphasensysteme. Zur Modellierung der Viskosität wurde das laminare Viskositätsmodell angewendet, da dies eine geringere Rechenleistung in Anspruch nimmt.

Aufgrund der starken Krümmungen der Phasengrenzfläche im Anfangszustand treten vor allem in den Ecken des Flüssigkeitsgebiets (Fluid 1) hohe Beschleunigungen, verursacht durch die Oberflächenspannungskräfte, auf. Diese rufen Störschwingungen an der Phasengrenzfläche im Verlauf des Einschwingens in den stabilen Zustand hervor. In Abb. 6.63 ist der Einschwingvorgang bis hin zum stationären Zustand der Tropfenformation über die dimensionslose Zeit $t^+ = \frac{t}{\tau}$ wiedergegeben, wobei τ der Periodendauer der Schwingung nach Gl. 6.11 entspricht. Die Grauwertverteilung der Partikel ist den Farbwerten ζ (s. Kapitel 4.6.1) der beiden Fluide zuzuordnen.

Durch die Erhöhung der Viskosität beider Phasen im Vergleich zur realen Anwendung wird gewährleistet, dass diese Nebeneffekte die Rechnung nicht negativ beeinträchtigen. Anzumerken ist, dass Simulationen von realen Strömungsphänomena nicht aus dem Nicht-Gleichgewichtszustand gestartet werden und dabei somit auch mit realen Viskositäten gerechnet werden kann. In Abb.

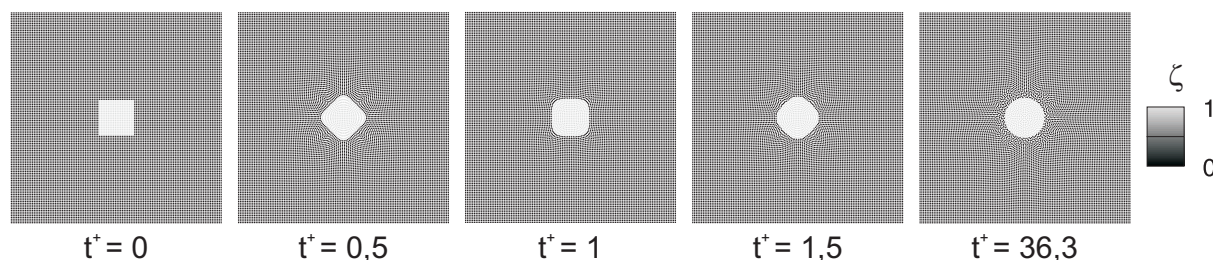


Abbildung 6.63: Einschwingvorgang aus dem Nicht-Gleichgewicht und stationärer Zustand

6.64 ist der Verlauf der kinetischen Energie im Gesamtsystem über die Simulation aufgezeichnet. Die Minima der kinetischen Energie entsprechen jeweils der maximalen geometrischen Auslenkung des Fluidgebietes 1 während des Einschwingvorgangs. Nach ca. 2,5 Mio. Zeitschritten befindet sich das System im stabilen, stationären Zustand. Die kinetische Gesamtenergie hat sich um zwei Größenordnungen im Vergleich zum Beginn der Rechnung verringert.

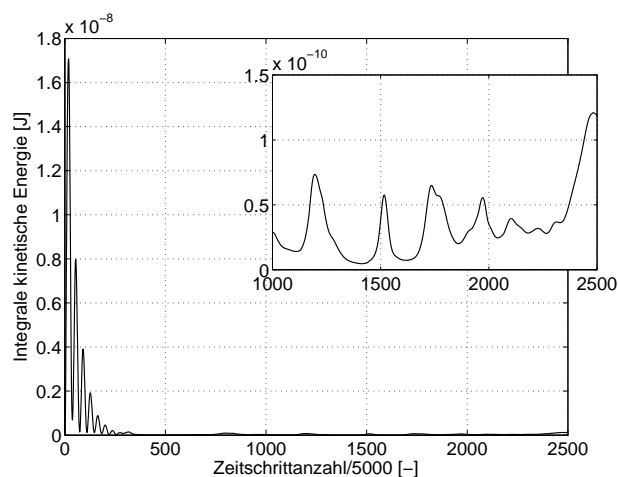


Abbildung 6.64: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie im System

Um den Testfall auch quantitativ zu validieren, wurde die Druckentwicklung in beiden Fluiden untersucht. Der Relativdruck in beiden Phasen ist mit dem Wert Null initialisiert und wird im weiteren Verlauf nach der Tait-Gleichung 4.48 berechnet. In Abb. 6.65 sind die Relativdrücke in Fluid 0 und Fluid 1 für einen Oberflächenspannungskoeffizienten von $\sigma = 0,07 \frac{N}{m}$ über die Simulationsdauer aufgetragen. Die Druckverläufe sowie der zeitliche Verlauf der Druckdifferenz, wie in Abb. 6.66 dargestellt, weisen nach 2,5 Mio. Zeitschritten nur noch geringe Fluktuationen auf. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Verlauf der kinetischen Energie im Gesamtsystem.

Die berechnete mittlere Druckdifferenz im stationären Zustand für $\sigma = 0,07 \frac{N}{m}$ liegt bei $22,94 Pa$. Unter der Annahme der Inkompressibilität

$$A_{\text{Quadrat}} = A_{\text{Scheibe}} \quad \rightarrow \quad R_{th, \text{inkompr}} = \frac{H}{6\sqrt{\pi}} \quad (6.10)$$

ergibt sich nach der Young-Laplace-Gleichung eine theoretische Druckdifferenz von $24,81 Pa$ für einen Oberflächenspannungskoeffizienten von $\sigma = 0,07 \frac{N}{m}$. Dies entspricht einem gemittelten

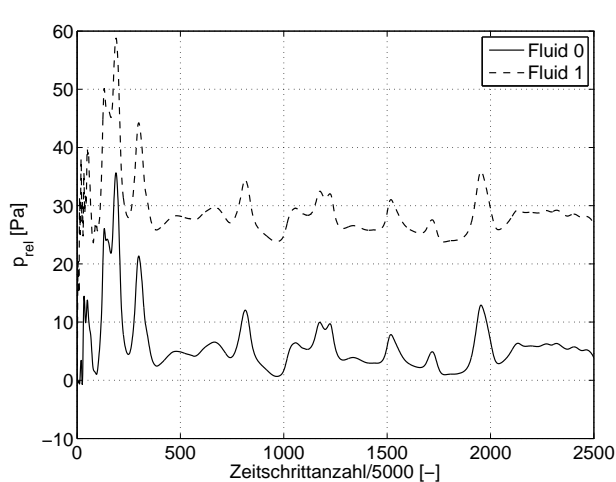


Abbildung 6.65: Zeitlicher Verlauf des Relativdruckes in beiden Phasen

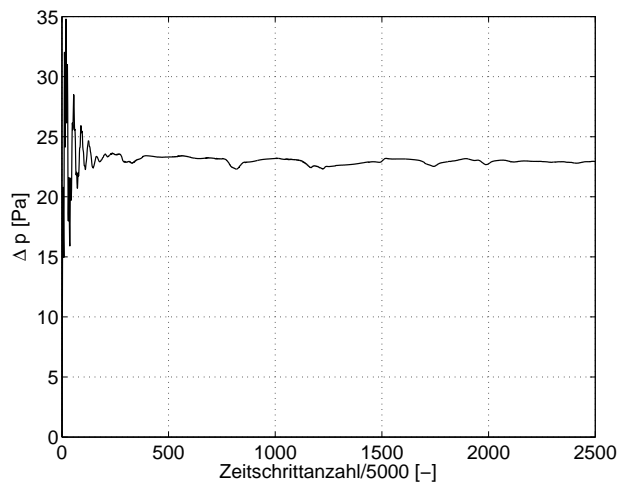


Abbildung 6.66: Zeitlicher Verlauf der Druckdifferenz

relativen Fehler von 7,5%. Damit zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit der Theorie in Anbetracht der schwach kompressiblen Formulierung der SPH Methode.

Nach Rayleigh (1879) kann die Periodendauer der Schwingung gemäß

$$\tau = 2\pi \sqrt{\frac{\rho R^3}{\sigma(n^3 - n)}} \quad (6.11)$$

berechnet werden, wobei der Parameter n von der geometrischen Form im Ausgangszustand abhängt. Für ein Quadrat gilt demnach $n = 4$, woraus sich eine theoretische Periodendauer von $\tau = 0,015 \text{ s}$ ergibt. Die aus den Auswertungen der SPH Simulation ermittelte Zeit zwischen dem Auftreten der zweier Energieminima liegt bei $0,008 \text{ s}$, womit sich eine gemittelte Periodendauer aus dem Auftreten der ersten fünf Energieminima von $\tau_{SPH} = 0,016 \text{ s}$ ergibt. Das zeitliche Verhalten der Tropfenbildung kann mit einem relativen Fehler von weniger als 7% mittels der SPH Methode mit guter Genauigkeit vorhergesagt werden.

Außerdem wurde eine Simulation mit einem Oberflächenspannungskoeffizienten von $\sigma = 0,14 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ durchgeführt. Daraus ergibt sich eine mittlere Druckdifferenz im stationären Zustand von $46,06 \text{ Pa}$. Die theoretische Druckdifferenz nach Gl. 6.9 beträgt $49,63 \text{ Pa}$. Somit liegt der relative Fehler bei 7,2%.

Aus den Untersuchungen wird deutlich, dass das CSF Modell die qualitativ und quantitativ korrekte Modellierung der Oberflächenspannungseffekte in Mehrphasensimulationen ermöglicht. Stabile Rechnungen können selbst für hohe Dichteverhältnisse durchgeführt werden. Die SPH Methode erweist sich als sehr robust, selbst bei Anfangsbedingungen bei denen kein Phasengleichgewicht vorliegt.

6.3.2 Tropfen in Scherströmung

Abschließend wird ein Tropfen im Gleichgewichtszustand einer stationären Scherströmung ausgesetzt. Dieser Effekt tritt beim Zerfall des Flüssigkeitsfilms in Primärtropfen an der Filmlegerkante in Airblast-Zerstäubern auf. Der Aufbau des zweidimensionalen Testfalls ist in Abb. 6.67 skizziert. Dabei erfährt der Tropfen eine charakteristische Verformung aufgrund der auftretenden Scherkräfte. Diesen wirkt die stabilisierende Oberflächenspannungskraft entgegen. Der zweidimensionale Kanal wird links und rechts durch periodische Ränder begrenzt. Die festen, jedoch beweglichen Wände unten und oben prägen dem Fluid die Schergeschwindigkeit auf. Die Schwerkraft wird vernachlässigt.

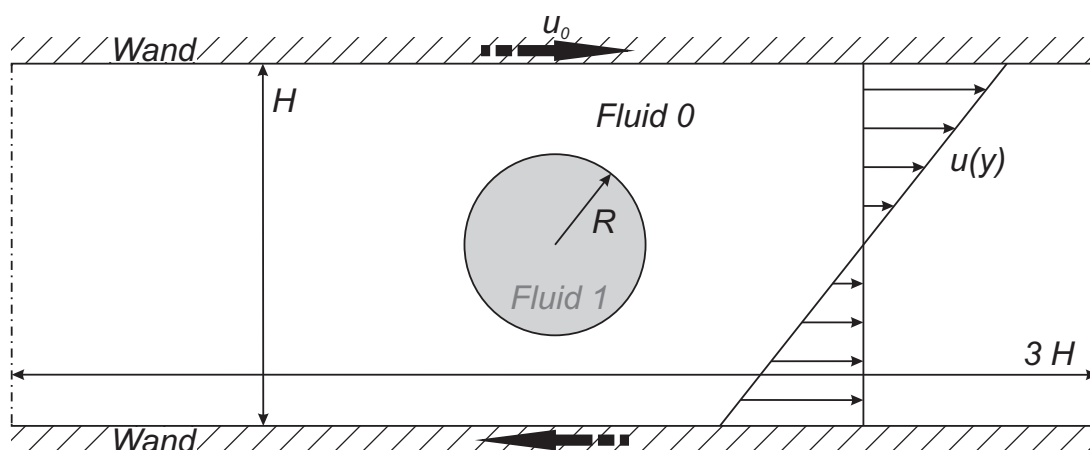


Abbildung 6.67: Skizze des zweidimensionalen Tropfens in einer Scherströmung

Die Abmessungen des Rechengebiets sind als Vielfache der Kanalhöhe $H = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ angegeben. Der Tropfenradius beträgt $R = \frac{H}{4}$. Den festen Wänden wird die Horizontalgeschwindigkeit $\pm u_0$ aufgeprägt. Zwischen Fluid und Wänden gilt die Haftbedingung. Die Viskosität beider Fluide beträgt $\mu = \mu_0 = \mu_1 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ Pa s}$. Das Dichteverhältnis $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$ entspricht dem von Brennstoff zu Luft. Die laterale Wandgeschwindigkeit u_0 sowie der Oberflächenspannungskoeffizient werden zwischen $u_0 = \pm 1 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und $u_0 = \pm 2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ sowie $\sigma = 0,07 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ und $\sigma = 0,14 \frac{\text{N}}{\text{m}}$ variiert. Das gesamte Rechengebiet ist durch 4800 anfänglich gleichmäßig angeordnete Fluidpartikel diskretisiert.

Das Deformationsverhalten des Tropfens in der Scherströmung kann über die Reynolds-Zahl Re und die Kapillar-Zahl Ca als Funktion der Scherrate $\varepsilon = \frac{2u_0}{H}$ beschrieben werden (Adami et al. (2010)).

$$Re = \frac{\varepsilon \rho R^2}{\mu} = \frac{2u_0 \rho R^2}{\mu H} \quad (6.12)$$

$$Ca = \frac{\varepsilon \mu R}{\sigma} = \frac{2u_0 \mu R}{\sigma H} \quad (6.13)$$

Die Kapillar-Zahl Ca gibt das Verhältnis der destruktiven Scherkräfte zu den der Tropfenverformung entgegenwirkenden Oberflächenspannungskräften wieder. Je höher Ca , desto stärker ist die Deformation des Tropfens. Wenn ein anfangs sphärischer Tropfen einer schwachen

stationären Scherströmung ausgesetzt wird, so verformt sich dieser bis sich schließlich die am Tropfen angreifenden Scher- und Druckkräfte mit dem Widerstand, den die Oberflächenspannung der Verformung entgegengesetzt, im Gleichgewicht befinden (Stone (1994)). Bei moderaten Kapillarzahlen verformt sich der Tropfen zwar elliptisch, schert jedoch nicht ab. Oberhalb einer kritischen Kapillar-Zahl tritt keine Relaxation des Einzeltropfens ein. Der Tropfen zerfällt in kleinere Satellitentropfen.

Frühe experimentelle Untersuchungen zur Tropfendehformation in einer Scherströmung führte Taylor (1934) durch. Er stellte einen theoretischen Zusammenhang für schwache Verformungen in Abhängigkeit von Ca und des Viskositätsverhältnisses zwischen Tropfen und umgebendem Medium bei kleinen Reynolds-Zahlen auf. Für $\mu = \mu_0 = \mu_1$ gilt

$$D = \frac{L - B}{L + B} = Ca \frac{35}{32} \quad (6.14)$$

Der Deformationsparameter D ist als Funktion von L und B definiert, welche die lange bzw. kurze Halbachse des Tropfens repräsentieren. Dies ist in Abb. 6.68 veranschaulicht.

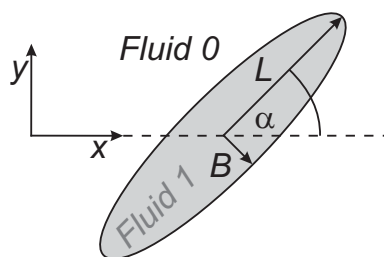


Abbildung 6.68: Skizze der langen und kurzen Halbachse (L bzw. B) des deformierten Tropfens

Die aus den SPH Simulationen erhaltenen Ergebnisse im stationären Zustand spiegeln dieses theoretische Verhalten in Abhängigkeit der Kapillar-Zahl wieder, wie in Abb. 6.69 zu sehen ist. Die dimensionslose Zeit entspricht $t^+ = t \frac{\sigma}{\mu R}$. Der Grauwert der Partikel repräsentiert den Farbwert ζ (s. Kapitel 4.6.1), wodurch jedes Partikel entweder der Gas- (0) oder der Flüssigphase (1) zugeordnet ist.

Die Ellipse nähert die verformte Tropfenoberfläche an. Je geringer Ca bei gleicher Re , desto schwächer ist die Deformation des ursprünglich sphärischen Tropfens. Aus den Simulationen (s. Abb. 6.69) kann der jeweilige Deformationsparameter D ermittelt werden. Diese liegen bei $D_{SPH} = 0,07$ für Abb. 6.69(a) und $D_{SPH} = 0,04$ für Abb. 6.69(b). Die theoretischen Werte für D , berechnet nach Gl. 6.14, betragen $D = 0,08$ bzw. $D = 0,04$. Es wird eine gute Übereinstimmung zwischen numerischer Vorhersage mittels der SPH Methode und der Theorie erzielt.

Nach Rallison (1984) ändert sich die Richtung der maximalen Tropfenausdehnung in Abhängigkeit von Ca und der Zeit. Dabei ist der Übergang des anfangs ruhenden, sphärischen Tropfens in den verformten Gleichgewichtszustand kein monotoner, instationärer Vorgang, sondern gleicht dem Einschwingen eines oszillierenden Systems. Für kurze Zeit stellt sich ein Winkel von $\alpha = 45^\circ$ zwischen der Horizontalen und der Tropfenlängsachse ein, wobei der Deformationsparameter D zunimmt. Danach nimmt α ab, bis hin zu negativen Werten, während D überschwingt.

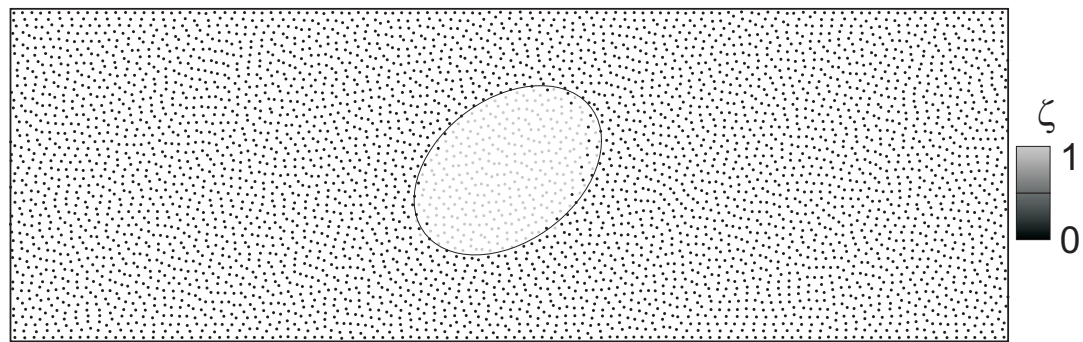
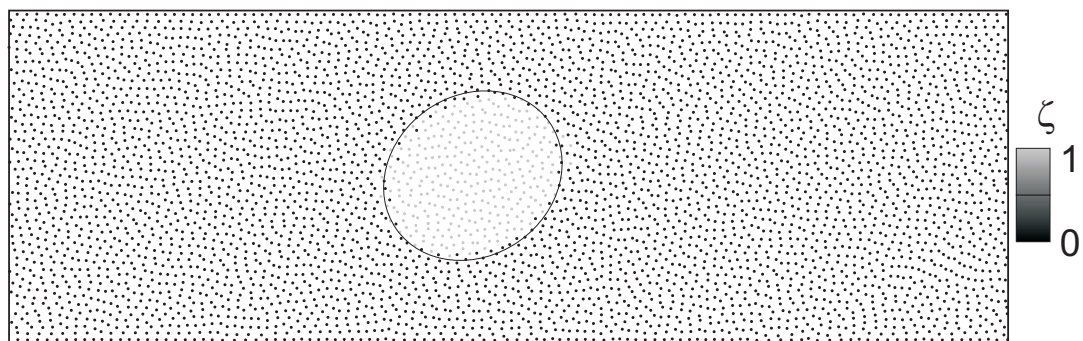
(a) $Ca = 0,07, Re_1 = 125, t^+ = 708$ (b) $Ca = 0,04, Re_1 = 125, t^+ = 708$

Abbildung 6.69: Tropfenverformung in Abhängigkeit der Kapillar-Zahl bei gleicher Reynolds-Zahl

Anschließend steigt α wieder über den Gleichgewichtszustand hinaus an bei zeitgleicher Abnahme von D . Die Tropfenszillation wird allmählich durch die dissipativen Kräfte gedämpft, bis der Gleichgewichtszustand erreicht ist. Dieses instationäre oszillierende Verhalten ist auch in den durchgeführten Simulationen zu beobachten, wie die Zeitreihe des Einschwingvorgangs in Abb. 6.70 zeigt.

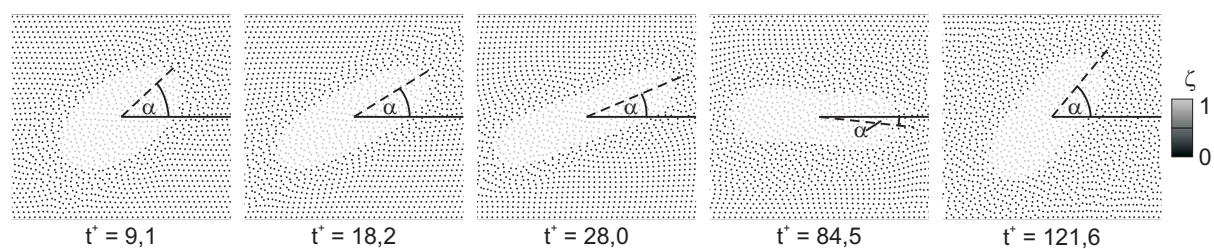


Abbildung 6.70: Einschwingvorgang des Tropfens in der Scherströmung für $Ca = 0,07, Re_1 = 125$

Nach der Theorie von Barthès-Biesel und Acrivos (1973) liegt die kritische Kapillar-Zahl für ein Viskositätsverhältnis von $\frac{\mu_1}{\mu_0} = 1$ in einer einfachen Scherströmung bei einem Wert von $Ca_{krit} \approx 0,1$. Wird in der Simulation die Lateralgeschwindigkeit auf $u_0 = 2 \frac{m}{s}$ bei $\sigma = 0,07 \frac{N}{m}$

erhöht, so ergibt sich $Ca = 0,14 > Ca_{krit}$. Der zeitliche Verlauf des unter diesen Bedingungen auftretenden Tropfenzerfalls ist in Abb. 6.71 dargestellt.

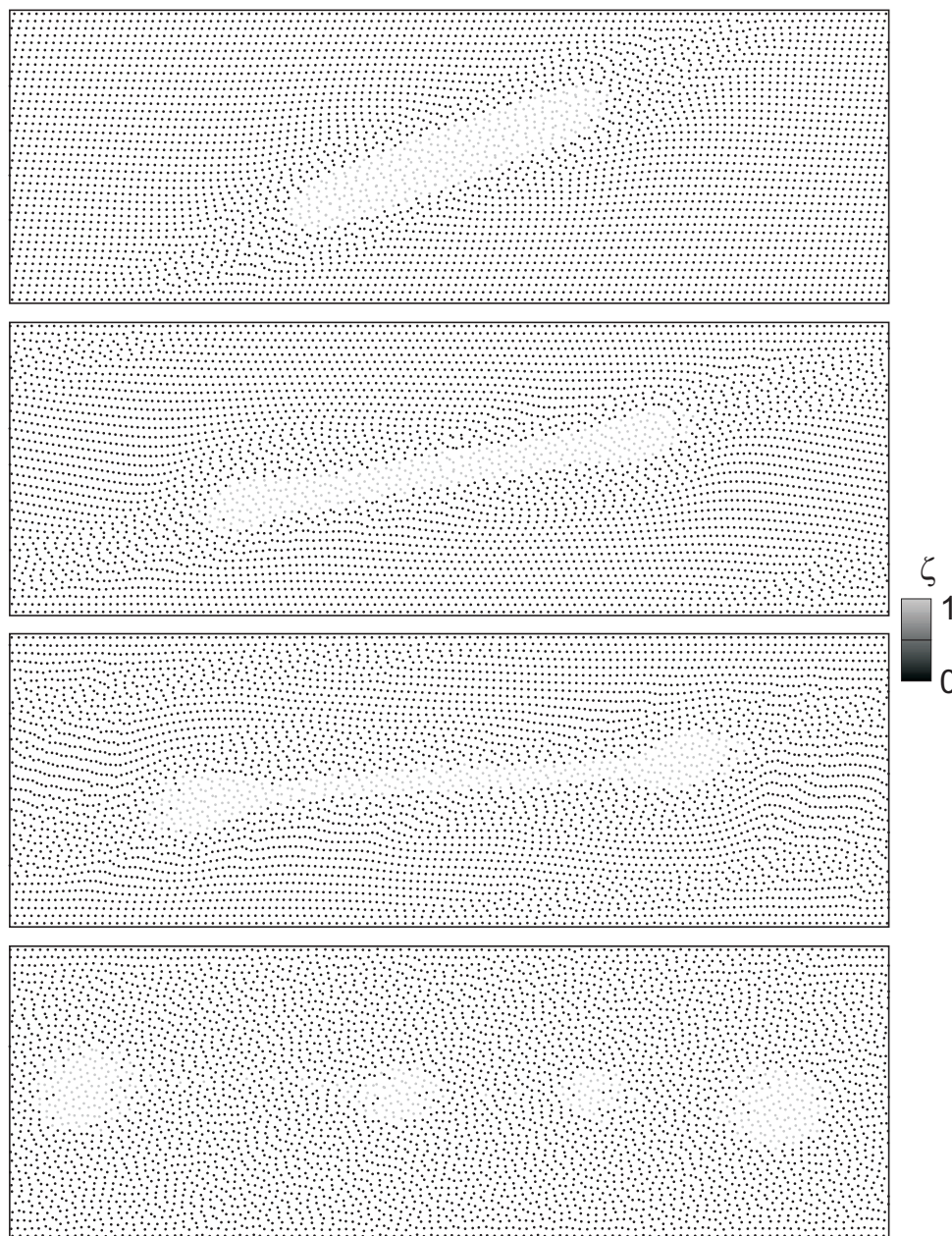


Abbildung 6.71: Tropfenzerfall bei $Ca = 0,14$, $Re_1 = 250$ zu den Zeitpunkten $t^+ = 15,6$; $t^+ = 31,9$; $t^+ = 48,1$ und $t^+ = 113,2$ (von oben nach unten)

In den ersten beiden Bildern ist die zunehmende Deformation des Tropfens und die Abnahme des Winkels α zur Horizontalen mit der Zeit zu erkennen. Die angreifenden Scherkräfte führen zu einer Verjüngung des länglichen Tropfens in der Mitte und der Aufdickung der Tropfendenen. Die Oberflächenspannungskräfte wirken nun nicht mehr als stabilisierende Kräfte, sondern führen dazu, dass sich kleinere Satellitentropfen ($t^+ = 113,2$) ausbilden und somit die Oberfläche bzw. die Krümmung minimiert wird. Um die Instabilitäten an der Phasengrenzfläche der Satelli-

tentropfen nach dem Abscheren zu vermeiden, wäre eine adaptive Diskretisierungsverfeinerung erforderlich, welche jedoch im aktuellen Code noch nicht umgesetzt ist.

Bei allen durchgeführten Simulationen ist zu beobachten, dass nach einiger Zeit eine Bewegung des Tropfens aus der vertikalen Ruhelage auftritt. Dies ist auf die ungeordnete Partikelverteilung zurückzuführen, wodurch sich aufgrund der diskreten Summenapproximation der Impulsterme kein vertikales Kräftegleichgewicht einstellt. Der Tropfenschwerpunkt liegt daraufhin nicht mehr in der Kanalmitte bei $u(y = \frac{H}{2}) = 0 \frac{m}{s}$. Dies hat eine horizontale Bewegung des Tropfens zur Folge.

Die Kombination von angreifenden Scherkräften und entgegenwirkenden Oberflächenspannungskräften wird mittels der implementierten SPH Methode bei verschiedenen Ca - und Re -Zahlen korrekt erfasst. Die Ergebnisse der schwachen Tropfendeformation stimmen mit der Theorie nach Taylor (1934) überein. Die starke Tropfendeformation sowie der anschließende Zerfall und die Ausbildung von Satellitentropfen bei hohen Scherkräften werden von der SPH Methode ohne aufwändiges Grenzflächenverfolgungsverfahren vorhergesagt.

Aus den Ergebnissen der Simulationen von Mehrphasenströmungen kann festgehalten werden, dass das CSF Modell zur Berücksichtigung von Oberflächenspannungskräften sowohl qualitativ, wie auch quantitativ sehr gute Ergebnisse liefert. Das stark instationäre Strömungsverhalten beim Tropfenzerfall wird korrekt vorhergesagt. Es sind keinerlei Grenzflächenverfolgungsalgorithmen oder Transportgleichungen zur Rekonstruktion der Oberfläche notwendig. Die Phasenwechselwirkung wird durch die Interaktion der Partikel beider Phasen untereinander sichergestellt.

6.4 Diskussion der Oberflächenspannungsmodelle

Abschließend sollen kurz die beiden verwendeten Oberflächenspannungsmodelle bzw. ihre Anwendung für Einphasenströmungen mit freien Oberflächen und Mehrphasenströmungen diskutiert werden. Auf Basis der durchgeführten Simulationen können dazu folgende Schlussfolgerungen gezogen werden.

6.4.1 Einphasenströmungen mit freier Oberfläche

Die Modellierung der Oberflächenspannung auf Basis intermolekularer Kräfte, welche durch eine Erweiterung der Zustandsgleichung (s. Kapitel 4.6.2) erzielt werden, ermöglicht die Simulation von Oberflächenspannungseffekten ohne zusätzlichen Rechenaufwand. Bei der Anwendung dieses Modells für Einphasensimulationen mit freien Oberflächen treten zusätzliche nach innen, normal zur freien Oberfläche gerichtete Kräfte auf. Physikalisch führen diese zu einer qualitativ betrachtet zur Oberflächenminimierung, zum anderen tritt eine quantifizierbare Druckerhöhung innerhalb der diskretisierten Phase auf. Dieser Drucksprung aufgrund des Zusatzterms $-a'\rho^2$ ist direkt von der Dichte des Mediums sowie dem Parameter a' abhängig. Die Krümmung geht nicht explizit in die Berechnung der Oberflächenspannung ein. Durch die direkte Modifikation der

Zustandsgleichung bedingt, können hohe Druckschwankungen bei instationären Simulationen aus der Nicht-Gleichgewichtslage heraus auftreten.

Mittels des CSF Modells werden die Flächenkräfte der Oberflächenspannung in Volumenkräfte transformiert, welche innerhalb eines definierten Bereichs in Grenzflächennähe auftreten. Die resultierende Oberflächenspannung wird als Funktion der Krümmung der Grenzfläche und des physikalischen Oberflächenspannungskoeffizienten berechnet. Dadurch kann der Tropfeninnendruck ohne vorherige Kalibrierung in Abhängigkeit der Krümmung korrekt vorhergesagt werden.

Der Effekt der Oberflächenminimierung wurde ausgehend von einem zweidimensionalen Flüssigkeitsquadrat in Kapitel 6.2.1 untersucht. Dabei ist zu erkennen, dass sich bei beiden Modellen nach dem Einschwingvorgang eine Scheibe und somit die Konfiguration mit minimaler Grenzfläche ausbildet.

Bei Variation des Kohäsionsdruckparameters a' ist ein qualitativ korrekter Trend des Tropfeninnendrucks im quasi-stationären Zustand in den Simulationsergebnissen zu beobachten. Die Initialisierung der Simulation im Nicht-Gleichgewichtszustand ist stark anfällig für Instabilitäten. Diese werden durch die Stützstellenverteilung und die Wahl der Glättungslänge stark beeinflusst. Des Weiteren ist aufgrund der hohen Druckschwankungen nur ein sehr geringer Zeitschritt für die Simulationen zulässig. Da der Parameter a' in keinem direkten Zusammenhang mit dem messbaren Oberflächenspannungskoeffizienten σ steht, muss eine fallabhängige Kalibrierung erfolgen. Außerdem treten auch bei ebenen, ungekrümmten Oberflächen ($\frac{1}{R} \rightarrow 0$) nach innen gerichtete Kräfte auf, welche zur Druckerhöhung im diskretisierten Fluid führen. Dieser Effekt widerspricht den physikalischen Gesetzen. Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Modellierung der Oberflächenspannung mittels intermolekularer Kräfte qualitativ korrekte Aussagen liefert, jedoch für die quantitative Analyse von Strömungsfeldern ungeeignet ist.

Aufgrund des schmalen Bereichs, auf den die Oberflächenspannungskraft als Volumenkraft projiziert wird, weist das CSF Modell Schwachstellen in der Interpolation der Oberflächenspannungskräfte beim Auftreten freier Oberflächen auf. Es kann zu Partikelanhäufungen und dadurch bedingt zu lokalen Diskretisierungsfehlern kommen. Die Modellierung der dissipativen Terme kann diesen Effekt noch verstärken. Dies führt dazu, dass sich die an der Grenzfläche angreifenden Kräfte nicht ausgleichen und der Tropfen einen nicht realistischen Impuls aus seiner Ruhelage heraus erfährt. Daher wären für die exakte Simulation der einphasigen Tropfenformation mittels des CSF Modells weitere Modifikationen notwendig. Für ebene Grenzflächen liefert dieses Modell korrekterweise keine nach innen gerichtete Kraft.

6.4.2 Mehrphasenströmungen

Im Folgenden soll die Anwendbarkeit der Modellierung der Oberflächenspannungseffekte über die Erweiterung der Tait-Zustandsgleichung durch den kohäsiven Druckterm für Mehrphasensysteme diskutiert werden. Dazu wird die Phasengrenzfläche zwischen einem Tropfen und seiner Umgebung betrachtet. Dies ist beispielhaft in Abb. 6.72 dargestellt.

Die Partikelabstände seien in beiden Phasen identisch ($\Delta x = konst.$), um Diskretisierungsfehler

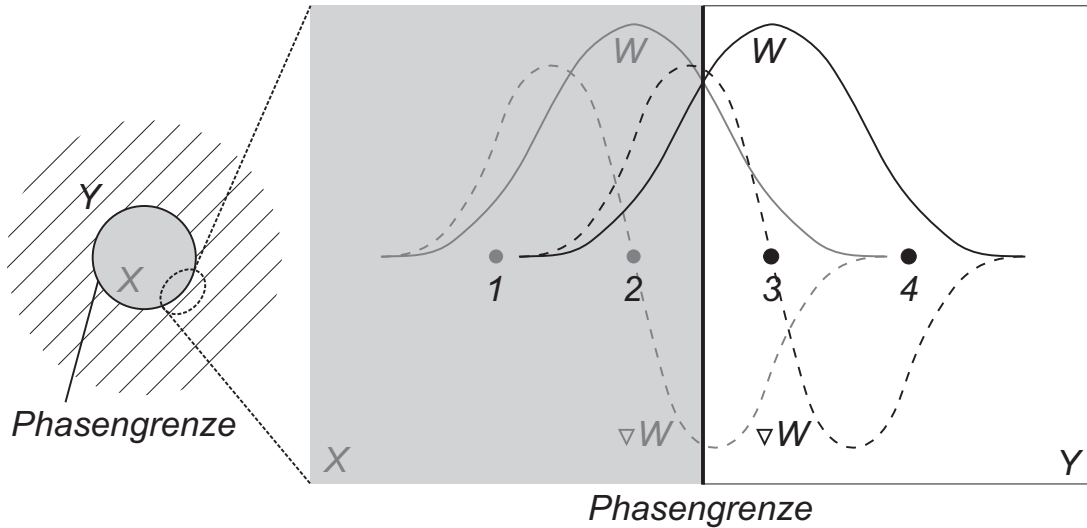


Abbildung 6.72: Wechselwirkungen an der Phasengrenzfläche zwischen Tropfen der Phase X und Umgebung der Phase Y

zu minimieren. Etwaige Dichteunterschiede der Fluide werden über die Zuordnung verschiedener Massen zu den Partikeln der beiden Fluide umgesetzt. Vorerst sollen zur theoretischen Betrachtung eine konstante Dichte, jedoch unterschiedliche Kohäsionsdruckparameter a' beider Phasen angenommen werden. Es sei $m = konst.$ und $a'_X = a'_1 = a'_2$ bzw. $a'_Y = a'_3 = a'_4$. Für die Gradienten der Glättungsfunktion gilt der Zusammenhang $\nabla W_{21} = \nabla W_{32} = -\nabla W_{23} = -\nabla W_{34}$. Die an der Phasengrenzfläche auf Partikel 2, welches eine Diskretisierungsstelle des Tropfens der Phase X sei, wirkende spezifische Kraft ergibt sich nach Gl. 4.63:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_{2,0} &= \sum_b m_b (a'_a + a'_b) \nabla W_{ab} \\
 &= m_1 (a'_2 + a'_1) \nabla W_{21} + m_3 (a'_2 + a'_3) \nabla W_{23} \\
 &= 2 m a'_X \nabla W_{21} - m (a'_X + a'_Y) \nabla W_{21} \\
 &= m (a'_X - a'_Y) \nabla W_{21}
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Diese Betrachtung kann analog für die auf Partikel 3, welches eine Diskretisierungsstelle der umgebenden Phase Y sei, wirkende spezifische Kraft durchgeführt werden:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{D\vec{v}}{Dt} \right\rangle_{3,0} &= \sum_b m_b (a'_a + a'_b) \nabla W_{ab} \\
 &= m_2 (a'_3 + a'_2) \nabla W_{32} + m_4 (a'_3 + a'_4) \nabla W_{34} \\
 &= m (a'_Y + a'_X) \nabla W_{21} - 2 m a'_Y \nabla W_{21} \\
 &= m (a'_X - a'_Y) \nabla W_{21}
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Korrekt an diesem Modell ist, dass für beide Partikel dieselbe spezifische Kraft aufgeprägt wird. Falsch hingegen ist, dass sich für dieselbe Fluidpaarung in Abhängigkeit, welche der Phasen innen bzw. aussen liegt, entgegengesetzte Beschleunigungsrichtungen ergeben. Im Fall

$a'_X - a'_Y = a'_{diff} > 0$ resultiert nach der Betrachtung für den eindimensionalen Fall in Abb.6.72 eine Beschleunigung der Partikel an der Phasengrenzfläche in negative Koordinatenrichtung, d.h. eine nach innen gerichtete Kraft im Falle eines Tropfens. Besteht der Tropfen aus Phase Y und die Umgebung aus Phase X entspricht dies im betrachteten vereinfachten Fall der Annahme $a'_X - a'_Y = -|a'_{diff}| < 0$. Daraus resultiert eine Beschleunigung der Partikel an der Phasengrenzfläche in positive Koordinatenrichtung. Dies bedeutet im Fall eines Tropfens eine Bewegung der Grenzfläche nach aussen normal zu ihrer ursprünglichen Lage. Dies würde einer unphysikalischen Vergrößerung der Grenzfläche sowie einem negativen Drucksprung über die Phasengrenze hinweg entsprechen und widerspricht somit dem Prinzip der Energieminimierung.

Möglichkeiten, diesen Widerspruch zu umgehen, wären zum einen, die Zuweisung des resultierenden Parameters a'_{diff} ausschließlich für die innenliegende Tropfenphase, zum anderen kann in Erwägung gezogen werden, dass nur Partikel derselben Phase jeweils zur Berechnung der Oberflächenspannungskräfte beitragen. Erstere Lösung verliert ihre Machbarkeit, sobald eine Vermischung der beiden Phasen eintritt und keine klare Aussage über eingeschlossenes und umschließendes Fluid getroffen werden kann. Die zweite Möglichkeit führt dazu, dass sich eine Diskretisierungslücke zwischen den beiden Phasen einstellt und ist somit nicht weiter in Betracht zu ziehen. Beide Ansätze weisen beträchtliche Nachteile in der Anwendung, besonders hinsichtlich der Stabilität und Genauigkeit der Berechnungen, und Fehler bei der Modellierung physikalischer Effekte auf und wurden daher im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt.

Das CSF Modell liefert sowohl qualitativ, wie auch quantitativ korrekte Aussagen über den Strömungszustand und insbesondere das Grenzflächenverhalten in Mehrphasenströmungen. Dies wurde anhand der in Kapitel 6.3 untersuchten Testfälle nachgewiesen. Die Instabilitäten an der Phasengrenzfläche, welche bei Einphasensimulationen mit freien Oberflächen zu beobachten waren (s. Kapitel 6.2.1), treten bei der Simulation von Mehrphasensystemen so nicht auf, da eine vollständige Diskretisierung beider Phasen vorliegt. Die Oberflächenspannungskraft wird dadurch beiderseits der Grenzfläche den Fluiden als Volumenkraft aufgeprägt. Die Glättungsfunktion wird somit nicht abgeschnitten und es entstehen dadurch keine Fehler in der Summenapproximation der Normalenvektoren.

Weitere Untersuchungen zur Anwendbarkeit beider in Kapitel 4.6 aufgeführten Oberflächenspannungsmodelle sind in der Arbeit von Bühler (2011) nachzulesen.

6.5 Zusammenfassende Beurteilung der Modellvalidierung

Die ausführliche Validierung des SPH Codes lässt die Schlussfolgerung zu, dass auf Basis der implementierten Modelle die charakteristischen physikalischen Grundlageneffekte des Primärzerfalls korrekt berechnet werden. Der Code ist äußerst flexibel in der Anwendung hinsichtlich der unterschiedlichsten Strömungsphänomene. Es können Simulationen in ein-, zwei- und dreidimensionalen Rechengebieten ohne weitere Modifikationen vorgenommen werden. Sowohl kompressible wie auch inkompressible Medien sowie deren Interaktion können simuliert werden. Dies ist zur Vorhersage des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen in Triebwerksbrennkammern unerlässlich. Der Einfluss und das Zusammenspiel von Schwerkraft, viskosen Effekten und

Oberflächenspannungen wird korrekt vorhergesagt. Die Physik der Mehrphasenströmung wird sehr gut erfasst. Durch Erweiterungen zur Darstellung von Randbedingungen können technische Systeme modelliert werden. Einer der großen Vorteile der SPH Methode ist der Verzicht auf ein fehleranfälliges Grenzflächenverfolgungs- und -rekonstruktionsverfahren. Des Weiteren kann die Strömung in komplexen Geometrien, wie z. B. einem Airblast-Zerstäuber, relativ einfach simuliert werden, da keine Gittergenerierung notwendig ist. Der SPH Ansatz stellt sich als robuste Berechnungsmethode heraus, bei der selbst bei Initiierung des Strömungsfeldes im Nicht-Gleichgewichtszustand die Stabilität und Konvergenz der Rechnung erreicht wird. Es wurde somit die Ausgangsbasis geschaffen, mit Hilfe der implementierten Modelle den Primärzerfall auf Basis der SPH Methode numerisch vorhersagen zu können.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Aufgrund der strengen Schadstoffemissionsrestriktionen zukünftiger Triebwerksgenerationen bedarf es der Entwicklung innovativer und effizienter Triebwerkskonzepte. Eine Optimierung des Zerstäubersystems ist in diesem Zusammenhang unerlässlich. Daher ist es wünschenswert, die Kraftstoffaufbereitung in der Brennkammer unter Verwendung von Airblast-Zerstäubern und insbesondere den bisher noch nicht mit ausreichender Genauigkeit modellierbaren Primärzerfall, in Zukunft numerisch vorherzusagen zu können.

Ziel der vorliegenden Arbeit war es systematisch zu untersuchen, ob und inwiefern die gitterfreie Lagrange'sche Smoothed Particle Hydrodynamics Methode in diesem Kontext anwendbar ist. Hat der SPH Ansatz das Potential, den Primärzerfall in technisch relevanten Systemen exakt beschreiben zu können? Können die charakteristischen Effekte, die während des Primärzerfalls von Bedeutung sind, korrekt vorhergesagt werden? Welche Modelle sind dafür einsetzbar oder müssen in geeigneter Weise modifiziert werden?

Der zentrale Teil dieser Arbeit beschäftigte sich mit der Entwicklung und der umfassenden Validierung des auf der SPH Methode basierenden Strömungslösers. Um die physikalischen Effekte, welche den Primärzerfall maßgeblich beeinflussen, korrekt abzubilden und somit das Strömungsfeld der Zweiphasenströmung exakt numerisch vorherzusagen, wurden geeignete Modelle in den Code implementiert. Dabei wurde auf die Flexibilität der Codestruktur geachtet, um die zukünftige Erweiterung zu erleichtern. Die Möglichkeit der Darstellung verschiedenster Randbedingungen und der Simulation von ein- bis hin zu dreidimensionalen Systemen ist gegeben. Anhand der durchgeführten Untersuchungen von Einphasentestfällen wurden die Einflüsse der verschiedenen Glättungsfunktionen und der Diskretisierung ermittelt. Die kubische und quintische Glättungsfunktion liefern bereits bei einer geringen Anzahl an Interpolationsstützstellen eine ausreichend genaue Approximation. Sowohl kompressible Phänomene, wie z. B. Verdichtungsstöße, wie auch inkompressible Strömungen lassen sich mittels der SPH Methode mit einer Genauigkeit besser oder im Bereich der von gitterbasierten Verfahren simulieren. Die implementierten Modelle für die dissipativen Terme und die Wärmeleitung ermöglichen die korrekte Darstellung der physikalischen Vorgänge in Strömungen verschiedenster Reynolds-Zahlbereiche. Dabei kann die Stützstellenverteilung durchaus Auswirkungen auf das Ergebnis haben.

Die Oberflächenspannung lässt sich im Fall der Simulation eines Fluids mit freier Oberfläche qualitativ mittels des CF Modells berücksichtigen. Dabei werden die Charakteristika einer Düsenströmung sehr gut erfasst. Für Mehrphasenströmungen sollte das CSF Modell eingesetzt werden. Untersuchungen ergaben, dass hiermit quantitativ korrekte Vorhersagen des Fluidverhaltens gemacht werden können. Stabile Rechnungen sind bis hin zu hohen Dichteverhältnissen, entsprechend eines Brennstofftropfens in Luft, durchführbar. Die Phasengrenzfläche wird automatisch mittransportiert, Grenzflächendiffusion tritt nicht auf. Dadurch kann das Grenzflächenverhalten - sowohl für Simulationen mit freier Oberfläche, wie auch für Mehrphasensimulationen - ohne zusätzliche fehleranfällige Grenzflächenverfolgungs- und -rekonstruktionsalgorithmen exakt wiedergegeben werden.

Das SPH Verfahren erwies sich als vielversprechende Methode, um den Primärzerfall in Brennstoffeinspritzdüsen numerisch vorherzusagen und dabei die Nachteile der gitterbasierten Methoden wie z. B. fehleranfällige Grenzflächenrekonstruktion, Grenzflächendiffusion, Massenverlust und extrem hoher Rechenaufwand zu vermeiden. Im Vergleich zu anderen SPH Codes weist der hier geschaffene Code eine hohe Flexibilität bezüglich der simulierbaren Strömungseffekte auf. Es stehen nun die validierten Modelle und numerischen Werkzeuge zur Simulation des Primärzerfalls in Brennstoffeinspritzdüsen zur Verfügung. Um jedoch zukünftig effiziente Simulationen in Airblast-Zerstäubern zu ermöglichen, bedarf es weiterer Untersuchungen hinsichtlich verschiedener technischer und numerischer Aspekte. Dies beinhaltet zum einen die Verfügbarkeit von Ein- und Auslassrandbedingungen, zum anderen sollte die Modellierung der Grenzflächenspannungen bei mehr als zwei Fluiden oder Fluid-Wand-Wechselwirkungen berücksichtigt werden. Ein weiterer Schritt ist die Implementierung geeigneter Turbulenzmodelle, um Simulationen in höheren Re -Bereichen durchführen zu können, und die Berücksichtigung der Verdunstung. Von numerischer Seite her wäre die adaptive lokale Diskretisierung, um die Approximationsfehler zu kontrollieren, sowie die Parallelisierung des Codes zur Effizienzsteigerung erstrebenswert.

Literaturverzeichnis

- ACARE (2010): *Aeronautics and Air Transport: Beyond Vision 2020 (Towards 2050)*. Techn. ber., Advisory Council for Aeronautics Research in Europe - Strategy Review Group.
- Adami, S., Hu, X.Y. und Adams, N.A. (2010): *A new surface-tension formulation for multi-phase SPH using a reproducing divergence approximation*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 229, S. 5011 – 5021.
- Aigner, M. und Wittig, S. (1985): *Performance and Optimisation of an Airblast Nozzle: Drop Size Distribution and Volumetric Air Flow*. In: *ICLASS 1985 - 3rd International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, London, England, July 1985*.
- Aigner, M. und Wittig, S. (1988): *Swirl and Counterswirl Effects in Prefilming Airblast Atomizers*. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Bd. 110, S. 105 – 110.
- Aigner, Manfred Martin (1986): *Charakterisierung der bestimmenden Einflussgrößen bei der luftgestützten Zerstäubung: Physikalische Grundlagen und messtechnische Erfassung*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Allen, M. P. und Tildesley, D. J. (1999): *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press Inc., New York.
- Anderson, J.D. (1995): *Computational Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, Inc. Singapore.
- Ashgriz, Nasser (Hrsg.) (2011): *Handbook of atomization and sprays: theory and applications*. Springer, New York.
- Barthès-Biesel, D. und Acrivos, A. (1973): *Deformation and burst of a liquid droplet freely suspended in a linear shear field*. *Journal of Fluid Mechanics*, Bd. 61, S. 1 – 22.
- Bartz, F.-O., Schmehl, R., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2010): *An extension of dynamic droplet deformation models to secondary atomization*. In: *ILASS - Europe 2010, 23rd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*.
- Bartz, F.-O., Guildenbecher, D. R., Schmehl, R., Koch, R., Bauer, H.-J. und Sojka, P. E. (2011): *Model comparison for single droplet fragmentation under varying accelerations*. In: *ILASS - Europe 2011, 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Estoril, Portugal*.
- Batchelor, G.K. (2000): *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge Univ. Press.
- Bayvel, L. und Orzechowski, Z. (1993): *Liquid Atomization*. Taylor and Francis.
- Becker, M. und Teschner, M. (2007): *Weakly compressible SPH for free surface flows*. In: Metaxas, D. und Popovic, J. (Hrsg.), *Eurographics/ ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation*, S. 209 – 217.

- Bühler, Simon (2011): *Untersuchung von Oberflächenspannungsmodellen für einen gitterfreien Partikelcode (Smoothed Particle Hydrodynamics)*. Diplomarbeit, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Karlsruher Institut für Technologie.
- Binder, K. ans Levesque, D., Weis, J.-J., Hansen, J.P., Ceperley, D.M., Kalos, M.H., Müller-Krumbhaar, H., Stauffer, D. und Landau, D.P. (1986): *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2. Aufl.
- Bonet, J. und Lok, T.-S. L. (1999): *Variational and momentum preservation aspects of Smooth Particle Hydrodynamic formulations*. Computer methods in applied mechanics and engineering, Bd. 180, S. 97 – 115.
- Brackbill, J.U., Kothe, D.B. und Zemach, C. (1992): *A Continuum Method for Modeling Surface Tension*. Journal of Computational Physics, Bd. 100, S. 335 – 354.
- Braun, Samuel (2010): *Implementierung und Validierung periodischer Randbedingungen für einen gitterfreien Partikelcode (Smoothed Particle Hydrodynamics)*. Diplomarbeit, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Karlsruher Institut für Technologie.
- Brennen, Christopher E. (2005): *Fundamentals of Multiphase Flows*. Cambridge University Press.
- Brookshaw, L. (1985): *A Method of Calculating Radiative Heat Diffusion in Particle Simulations*. Proceedings of the Astronomical Society of Australia, Bd. 6(2), S. 207 – 210.
- Brookshaw, L. (1994): *Solving the Heat Diffusion Equation in SPH*. Memorie della Societa Astronomia Italiana, Bd. 65, S. 1033.
- CFX, ANSYS (2009): *ANSYS CFX-Solver Theory Guide*.
- Chanotis, A. K., Poulikakos, D. und Koumoutsakos, P. (2002): *Remeshed Smoothed Particle Hydrodynamics for the Simulation of Viscous and Heat Conducting Flows*. Journal of Computational Physics, Bd. 182, S. 67 – 90.
- Chen, J.K., Beraun, J.E. und C.J., Jih (1999): *Completeness of corrective smoothed particle method for linear elastodynamics*. Computational Mechanics, Bd. 24, S. 273 – 285.
- Chen, Shiyi und Doolen, Gary D. (1998): *Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows*. Annual Review in Fluid Mechanics, Bd. 30, S. 329 – 364.
- Clavet, S., Beaudoin, P. und Poulin, P. (2005): *Particle-based viscoelastic fluid simulation*. In: *Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation*.
- Cleary, P.W. und Monaghan, J.J. (1999): *Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics*. Journal of Computational Physics, Bd. 148, S. 227 – 264.
- Cleary, P. W., Ha, J., Prakash, M. und Nguyen, T. (2006): *3D SPH flow predictions and validation for high pressure die casting of automotive components*. Applied Mathematical Modelling, Bd. 30, S. 1406 – 1427.

- Colagrossi, A. (2003): *A Meshless Lagrangian Method for Free-Surface and Interface Flows with Fragmentation*. Dissertation, Università di Roma La Sapienza.
- Colagrossi, A. und Landrini, M. (2003): *Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics*. Journal of Computational Physics, Bd. 191, S. 448 – 475.
- Cole, R.H. (1948): *Underwater Explosions*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- Cossali, G. E., Coghe, A. und Marengo, M. (1997): *The impact of a single drop on a wetted solid surface*. Experiments in Fluids, Bd. 22, S. 463 – 472.
- Cossali, G. E., Marngo, M., Coghe, A. und Zhdanov, S. (2004): *The role of time in single drop splash on thin film*. Experiments in Fluids 36, Bd. 36, S. 888 – 900.
- Courant, R., Friedrichs, K. und Lewy, H. (1928): *Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik*. Mathematische Annalen, Bd. 100, S. 32 – 74.
- Cousin, J., Menard, T., Berlemont, A. und Helie, J. (2010): *Numerical Simulations of the Interactions between a Vortex and a Liquid Gas Interface*. In: *ILASS - Europe 2010, 23rd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*.
- Crespo, A. (2008): *Application of the smoothed particle hydrodynamics model SPHysics to free-surface hydrodynamics*. Phd thesis, Universidade de Vigo, Departamento de física aplicada.
- Desjardins, O. (2009): *Detailed numerical investigation of turbulent atomization of liquid jets*. In: *ICLASS 2009, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, 2009*.
- Desjardins, Olivier, Moureau, Vincent und Pitsch, Heinz (2008): *An accurate conservative level set / ghost fluid method for simulating turbulent atomization*. Journal of Computational Physics, Bd. 277, S. 8395 – 8416.
- Dombrowski, N. und Johns, W. R. (1963): *The aerodynamic instability and disintegration of viscous liquid sheets*. Chemical Engineering Science, Bd. 18, S. 203 – 214.
- Ebner, J., Schober, P., Schäfer, O., Koch, R. und Wittig, S. (2004): *Modelling of shear-driven liquid wall films: effect of accelerated air flow on the film flow propagation*. Progress in Computational Fluid Dynamics, Bd. 4, S. 183 – 190.
- Ebner, J., Schober, P., Schäfer, O. und Wittig, S. (2009): *Modelling of Shear-driven Liquid Wall Films on Curved Surfaces: Effect of Accelerated Air Flow and Variable Film Load*. In: *ICLASS*.
- Eggers, Jens (1995): *Theory of Drop Formation*. Physics of Fluids, Bd. 7 (5), S. 941 – 953.
- Eggers, Jens (2005): *Drop formation - an overview*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Bd. 85 (6), S. 400 – 410.

- Eggers, Jens und Villiermaux, Emmanuel (2008): *Physics of liquid jets*. Reports on Progress in Physics, Bd. 71, S. 1 – 79.
- Ellero, M., Serrano, M. und Espanol, P. (2007): *Incompressible smoothed particle hydrodynamics*. Journal of Computational Physics, Bd. 226, S. 1731 – 1752.
- Elsäßer, Alfred (1998): *Kraftstoffaufbereitung in Verbrennungskraftmaschinen: Grundlagen der Strömung schubspannungsgetriebener Wandfilme*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Elsäßer, A., Samenfink, W., Ebner, J., Dullenkopf, K. und Wittig, S. (1997): *Dynamics of Shear-driven Liquid Films*. Proceedings of the 7th International Conference on Laser Anemometry - Advances and Applications.
- Elsäßer, A., Samenfink, W., Ebner, J., Dullenkopf, K. und Wittig, S. (1998): *Effect of Variable Liquid Properties on the Flow Structure Within Shear-driven Wall Films*. In: *Ninth Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*.
- Fang, J., Owens, R. G., Tacher, L. und Parriaux, A. (2006): *A numerical study of the SPH method for simulating transient viscoelastic free surface flows*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Bd. 139, S. 68 – 84.
- Fang, J., Parriaux, A., Rentschler, M. und Ancey, C. (2008): *Improved SPH methods for simulating free surface flows of viscous fluids*. Applied Numerical Mathematics.
- Fedkiw, R. P., Aslam, T., Merriman, B. und Osher, S. (1999): *A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method)*. Journal of Computational Physics, Bd. 152, S. 457 – 492.
- Fernandez, V. G., Berthoumie, P. und Lavergne, G. (2009): *Liquid sheet disintegration at high pressure: An experimental approach*. Comptes Rendus Mecanique, Bd. 337, S. 481 – 491.
- Flebbe, O., Münzel, S., Herold, H., Riffert, H. und Ruder, H. (1994): *Smoothed Particle Hydrodynamics: Physical Viscosity and the Simulation of Accretion Disks*. The Astrophysical Journal, Bd. 431, S. 754 – 760.
- FLUENT, ANSYS (2009): *ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide*.
- Fuster, D., Bagué, A., Boeck, T., Le Moyne, L., Leboissetier, A., Popinet, A., Ray, P., Scardovelli, R. und Zaleski, S. (2009): *Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method*. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 35, S. 550 – 565.
- Gepperth, Sebastian (2011): *Internal communications*.
- Gepperth, Sebastian, Guildenbecher, Daniel, Koch, Rainer und Bauer, Hans-Jörg (2010): *Pre-filming primary atomization: Experiments and modeling*. In: *ILASS - Europe 2010, 23rd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Brno, Czech Republic, September 2010*.

- Gepperth, S., Müller, A., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2012): *Ligament and Droplet Characteristics in Prefilming Airblast Atomization*. In: *ICLASS 2012 - 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Heidelberg, Germany, September 2012*.
- Gesteira, M.G., Rogers, B.D., Dalrymple, R.A., Crespo, A.J.C. und Narayanaswamy, M. (2010): *User Guide for the SPHysics code*.
- Gingold, R.A. und Monaghan, J.J. (1977): *Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Bd. 181, S. 375 – 389.
- Gomaa, H., Huber, C., Sander, W. und Weigand, B. (2010): *Direkte Numerische Simulation des primären Strahlzerfalls von Rundstrahlen*. In: *SPRAY 2010, 9. Workshop über Sprays, Techniken der Fluidzerstäubung und Untersuchung von Sprühvorgängen, Heidelberg, 3.-5. Mai 2010*.
- Gomez-Gesteira, Moncho, Rogers, Benedict D., Dalrymple, Robert A. und Crespo, Alex J. C. (2010): *State-of-the-art of classical SPH for free-surface flows*. Journal of Hydraulic Research, Bd. 48, S. 6 – 27.
- Gorokhovski, Mikhael und Herrmann, Marcus (2008): *Modeling Primary Atomization*. Annual Review of Fluid Mechanics, Bd. 40, S. 343 – 366.
- Graham, D.I. und Hughes, J.P. (2008): *Accuracy of SPH viscous flow models*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Bd. 56, S. 1261 – 1269.
- Harlow, Francis H. (1988): *PIC and its progeny*. Computer Physics Communications, Bd. 48, S. 1 – 10.
- Harlow, F. H. und Welch, J. E. (1965): *Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface*. The Physics of Fluids, Bd. 8, S. 2182 – 2189.
- Hashmi, A. A., Dullenkopf, Klaus, Koch, Rainer und Bauer, Hans-Jörg (2010): *CFD methods for shear driven liquid wall films*. Proceedings of ASME Turbo Expo 2010: Power for Land, Sea and Air, S. 1 – 9.
- Hernquist, L. und Katz, N. (1989): *TreeSPH: A unification of SPH with the hierarchical tree method*. The Astrophysical Journal Supplement Series, Bd. 70, S. 419 – 446.
- Herrmann, M. (2003): *Modeling primary breakup: A three-dimensional Eulerian level set / vortex sheet method for two-phase interface dynamics*. Center for Turbulence Research Annual Research Briefs 2003, S. 185 – 196.
- Herrmann, Marcus (2009a): *Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow*. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air GT2009-59563*.

- Herrmann, M. (2009b): *Detailed Simulations of the Breakup Processes of Turbulent Liquid Jets in Subsonic Crossflows*. In: *ICLASS 2009, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, 2009*.
- Herrmann, Marcus (2010): *A parallel Eulerian interface tracking / Lagrangian point particle multi-scale coupling procedure*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 229, S. 745 – 759.
- Höfler, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2010): *Entwicklung eines Smoothed Particle Hydrodynamics Codes zur numerischen Berechnung des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen*. In: *Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress 2010, Hamburg*.
- Höfler, C., Braun, S., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2011): *Towards the Numerical Prediction of Primary Atomization Using Smoothed Particle Hydrodynamics*. In: *ILASS - Europe 2011, 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Estoril, Portugal, September 2011*.
- Höfler, C., Braun, S., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2012): *Multiphase Flow Simulations Using the Meshfree Smoothed Particle Hydrodynamics Method*. In: *ICLASS 2012 - 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Heidelberg, Germany, September 2012*.
- Höfler, C., Braun, S., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2013): *Modeling Spray Formation in Gas Turbines - A New Meshless Approach*. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Bd. 135, S. 1 – 8.
- Himmelsbach, J., Noll, B. und Wittig, S. (1994): *Experimental and numerical studies of evaporating wavy fuel films in turbulent air flow*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 37, S. 1217 – 1226.
- Hirt, C. W. und Nichols, B. D. (1981): *Volume of Fluid (VoF) Method for the Dynamics of Free Boundaries*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 39, S. 201 – 225.
- Hockney, R. W. und Eastwood, J. W. (1992): *Computer simulation using particles*. Hilger.
- Hoogerbrugge, P.J. und Koelman, J.M.V.A. (1992): *Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics*. *Europhysics Letters*, Bd. 19, S. 155 – 160.
- Hu, X.Y. und Adams, N.A. (2006): *A multi-phase SPH method for macroscopic and mesoscopic flows*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 213, S. 844 – 861.
- Hu, X.Y und Adams, N.A. (2007): *An incompressible multi-phase SPH method*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 227, S. 264 – 278.
- ICAO (2010): *Green Agenda*. Techn. Ber. Bd. 65, Nr. 3, International Civil Aviation Organization.
- Jeong, J. H. und Yang, D. Y. (1998): *Finite Element Analysis of Transient Fluid Flow with Free Surface Using VOF (Volume-of-Fluid) Method and Adaptive Grid*. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 26, S. 1127 – 1154.

- Joos, Franz (2006): *Technische Verbrennung*. Springer Berlin / Heidelberg.
- Josserand, Christophe und Zaleski, Stéphane (2003): *Droplet splashing on a thin liquid film*. Physics of Fluids, Bd. 15, S. 1650 – 1657.
- Kabelac, S. (1998): *Die Schallgeschwindigkeit als thermodynamische Zustandsgröße*. Forschung im Ingenieurwesen, Bd. 64, S. 47 – 54.
- Klein, Bernd (2010): *FEM - Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau*. Vieweg + Teubner, Wiesbaden.
- Koch, R., Schäfer, O. und Ebner, J. (2003): *Computational Fluid Dynamics For Combustion - Report on film flow module for curved surfaces with ITS code, Report on validation calculation of film flow module*. Techn. ber., Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Kum, O., Hoover, W. G. und Posch, H. A. (1995): *Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics*. Physical Review E, Bd. 52, S. 4899 – 4908.
- Lebas, R., Menard, T., Beau, P.A., Berlemont, A. und Demoulin, F.X. (2009): *Numerical simulation of primary break-up and atomization: DNS and modelling study*. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 35, S. 247 – 260.
- Lefebvre, Arthur H. (1980): *Airblast Atomization*. Progress in Energy and Combustion Science, Bd. 6, S. 233 – 261.
- Lefebvre, Arthur Henry (1989): *Atomization and Sprays*. Taylor and Francis.
- LeVeque, Randell J. (2007): *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.
- Li, Shaofan und Liu, Wing Kam (2002): *Meshfree and particle methods and their applications*. Applied Mechanics Review, Bd. 55, S. 1 – 34.
- Lin, S.P. und Reitz, R.D. (1998): *Drop and Spray Formation From a Liquid Jet*. Annual Review in Fluid Mechanics, Bd. 30, S. 85 – 105.
- Liu, G.R. und Liu, M.B. (2007): *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific, New Jersey, NJ.
- Liu, M.B. und Liu, G.R. (2010): *Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): an Overview and Recent Developments*. Archives of Computational Methods in Engineering, Bd. 17, S. 25 – 76.
- Liu, M. B. und Liu, G. R. (2005): *Meshfree particle simulation of micro channel flows with surface tension*. Computational Mechanics, Bd. 35, S. 332–341. ISSN 0178-7675. 10.1007/s00466-004-0620-y.

- Liu, M. B., Liu, G. R. und Lam, K. Y. (2003): *Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications*. Journal of Computational and Applied Mathematics, Bd. 155, S. 263 – 284.
- López, H. und Sigalotti, L.D.G. (2006): *Oscillation of viscous drops with smoothed particle hydrodynamics*. Physical review E, Bd. 73, S. 1 – 12.
- Lucy, L.B. (1977): *A numerical approach to the testing of fission hypothesis*. The Astronomical Journal, Bd. 82, S. 1013 – 1024.
- Marek, M., Tyliszczak, A. und Boguslawski, A. (2008): *Modeling of liquid jet break-up with level set and ghost fluid method*. In: *7th International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*.
- Marongiu, Jean-Christophe, Leboeuf, Francis, Caro, Joelle und Parkinson, Etienne (2010): *Free surface flows simulations in Pelton turbines using an hybrid SPH-ALE*. Journal of Hydraulic Research, Bd. 48, S. 40 – 49.
- Martin, J.C. und Moyce, W.J. (1952): *An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Bd. 244, S. 312 – 324.
- McKee, S., Tomé, M. F., Ferreira, V. G., Cuminato, J. A., Castelo, A., Sousa, F. S. und Mangiavacchi, N. (2008): *The MAC method*. Computers & Fluids, Bd. 37, S. 907 – 930.
- Mei, Renwei, Luo, Li-Shi, Lallemand, Pierre und d’Humières, Dominique (2006): *Consistent initial conditions for lattice Boltzmann simulations*. Computers & Fluids, Bd. 35, S. 855 – 862.
- Meleán, Y und Sigalotti, L.D.G. (2005): *Coalescence of colliding van der Waals liquid drops*. International Journal of Heat and Mass Transfer, Bd. 48, S. 4041 – 4061.
- Meleán, Y., Sigalotti, L.D.G. und Hasmy, A. (2004): *On the SPH tensile instability in forming viscous liquid drops*. Computer Physics Communications, Bd. 157, S. 191 – 200.
- Meleán, Y., Sigalotti, L.D.G. und Hasmy, A. (2006): *Modeling the dynamics of liquid drops with SPH*. Revista Mexicana de Física S, Bd. 52, S. 38 – 41.
- Metropolis, Nicholas und Ulam, S. (1949): *The Monte Carlo Method*. Journal of the American Statistical Society, Bd. 44 (247), S. 335 – 341.
- Müller, A., Meier, R., Schäfer, O. und Wittig, S. (2004): *The Influence of Unsteady Flow Conditions on Liquid Sheet Atomisation*. Techn. ber., DFG-Schwerpunktprogramm Fluidzerstäubung und Sprühvorgänge.
- Müller, A., Koch, R., Bauer, H.-J., Hehle, M. und Schäfer, O. (Hrsg.) (2006): *Performance of Prefilming Airblast Atomizers in Unsteady Flow Conditions*. ASME Turbo Expo 2006: Power for Land, Sea and Air.

- Müller, A., Dullenkopf, K. und Bauer, H.-J. (2008): *Application of an Extended Particle Tracking Method to Analyze Droplet Wall Interaction*. In: *14th Int. Symp. on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*.
- Ménard, T., Tanguy, S. und Berlemont, A. (2007): *Coupling level set / VOF / ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet*. *International Journal of Multiphase Flow*, Bd. 33, S. 510 – 524.
- Monaghan, J.J. (1985): *Particle methods for hydrodynamics*. *Computer Physics Reports*, Bd. 3, S. 71 – 124.
- Monaghan, J.J. (1988): *An introduction to SPH*. *Computer Physics Communications*, Bd. 48, S. 89 – 96.
- Monaghan, J.J. (1989): *On the problems of penetration in particle methods*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 82, S. 1 – 15.
- Monaghan, J.J. (1992): *Smoothed Particle Hydrodynamics*. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, Bd. 30, S. 543 – 574.
- Monaghan, J.J. (1994): *Simulating Free Surface Flows with SPH*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 110, S. 399 – 406.
- Monaghan, J.J. (2005): *Smoothed particle hydrodynamics*. *Reports on Progress in Physics*, Bd. 68, S. 1703 – 1759.
- Monaghan, J.J. und Gingold, R.A. (1983): *Shock Simulation by the Particle Method SPH*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 52, S. 374 – 389.
- Monaghan, J.J. und Kocharyan, A. (1995): *SPH simulation of multi-phase flow*. *Computer Physics Communications*, Bd. 87, S. 225 – 235.
- Monaghan, J. J. (2000): *SPH without a Tensile Instability*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 159, S. 290 – 311.
- Monaghan, J. J. und Kajtar, J. B. (2009): *SPH particle boundary forces for arbitrary boundaries*. *Computer Physics Communications*, Bd. 180, S. 1811 – 1820.
- Morris, J.P. (1996): *Analysis of Smoothed Particle Hydrodynamics with Applications*. Phd thesis, Department of Mathematics, Monash University.
- Morris, J.P. (2000): *Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics*. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 33, S. 333 – 353.
- Morris, J.P. und Monaghan, J.J. (1997): *A Switch to Reduce SPH Viscosity*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 136, S. 41 – 50.
- Morris, J.P., Fox, P.J. und Zhu, Y. (1997): *Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 136, S. 214 – 226.

- Mundo, C., Sommerfeld, M. und Tropea, C. (1995): *Droplet-wall collisions: experimental studies on the deformation and breakup process*. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 21 (2), S. 151 – 173.
- Nugent, S. und Posch, H.A. (2000): *Liquid drops and surface tension with smoothed particle applied mechanics*. Physical Review E, Bd. 62, S. 4968 – 4975.
- Oertel, Herbert (1966): *Stoßrohre*. Springer-Verlag, Wien.
- Oertel jr., Herbert und Boehle, Martin (2004): *Strömungsmechanik*. Vieweg Verlag, Wiesbaden.
- Oertel jr., Herbert und Laurien, Eckart (2003): *Numerische Strömungsmechanik*. Vieweg Verlag, Braunschweig / Wiesbaden.
- Ohnesorge, Wolfgang (1936): *Die Bildung von Tropfen an Düsen und die Auflösung flüssiger Strahlen*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Bd. 16 (6), S. 355 – 358.
- Osher, Stanley und Fedkiw, Ronald P. (2001): *Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results*. Journal of Computational Physics, Bd. 169, S. 463 – 502.
- Osher, Stanley und Sethian, James, A. (1988): *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*. Journal of Computational Physics, Bd. 79, S. 12 – 49.
- Ott, F. (1999): *Weiterentwicklung und Untersuchung von Smoothed Particle Hydrodynamics im Hinblick auf den Zerfall von Dieselfreistrahlen in Luft*. Dissertation, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Fakultät für Physik.
- Peduto, D., Koch, R., Morvan, H., Dullenkopf, K. und Bauer, H.-J. (2011): *Numerical studies of drop impact onto a plane shallow and deep liquid pool*. In: *ILASS - Europe 2011, 24th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Estoril, Portugal, September 2011*.
- Poling, Bruce E., Prausnitz, John M. und O'Connell, John P. (2004): *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill, 5. Aufl.
- Price (2004): *Smoothed Particle Hydrodynamics*. Phd thesis, Institute of Astronomy & Churchill College, University of Cambridge.
- Rahmann, A. (1964): *Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon*. Physical Review, Bd. 136, S. A405 – A411.
- Rallison, J. M. (1984): *The deformation of small viscous drops in shear flows*. Annual Review in Fluid Mechanics, Bd. 16, S. 45 – 66.
- Randles, P.W. und Libersky, L.D. (1996): *Smoothed Particle Hydrodynamics: Some recent improvements and applications*. Computer methods in applied mechanics and engineering, Bd. 139, S. 375 – 408.

- Rayleigh, Lord (1878): *On the Instability of Jets*. Proceedings of the London Mathematical Society, Bd. 10, S. 4 – 12.
- Rayleigh, Lord (1879): *On the Capillary Phenomena of Jets*. Proceeding of the Royal Society of London, Bd. 29, S. 71 – 97.
- Reitz, R. D. und Bracco, F. V. (1982): *Mechanism of atomization of a liquid jet*. Physics of Fluids, Bd. 25 (10), S. 1730 – 1742.
- Richter, B., Dullenkopf, K. und Bauer, H.-J. (2005): *Investigation of secondary droplet characteristics produced by an isoctane drop chain impact onto a heated piston surface*. Experiments in Fluids, Bd. 39, S. 351 – 363.
- Roisman, I. V., Araneo, Lucio und Tropea, C. (2007): *Effect of ambient pressure on penetration of a Diesel spray*. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 33, S. 904 – 920.
- Roßkamp, H., Elsäßer, A., Samenfink, W., Meisl, J., Willmann, M. und Wittig, S. (1998): *An enhanced model for predicting the heat transfer to wavy shear-driven liquid wall films*. In: *Third International Conference on Multiphase Flow*.
- Rolls-Royce (2005): *The Jet Engine*. Rolls-Royce plc.
- Samenfink, W., Elsäßer, A., Wittig, S. und Dullenkopf, K. (1996): *Internal Transport Mechanisms of Shear-driven Liquid Films*. In: *Eighth International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*.
- Sattelmayer, T. und Wittig, S. (1986): *Internal Flow Effects in Prefilming Airblast Atomizers: Mechanisms of Atomization and Droplet Spectra*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Bd. 108, S. 465 – 472.
- Sattelmayer, T. und Wittig, S. (1989): *Encyclopedia of Fluid Mechanics - Aerodynamics and Compressible Flows, Vol. 8*. Gulf Publishing Company, Houston, Texas, USA.
- Sattelmayer, T., Sill, K. H. und Wittig, S. (1987): *Optisches Meßgerät zur Bestimmung der Eigenschaften welliger Flüssigkeitsfilme*. Technisches Messen, Bd. 4, S. 155 – 160.
- Sattelmayer, Thomas Ferdinand (1985): *Zum Einfluss der ausgebildeten, turbulenten Luft-Flüssigkeitsfilm-Strömung auf den Filmzerfall und die Tropfenbildung am Austritt von Spalten geringer Höhe*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Schlichting, Hermann und Gersten, Klaus (2006): *Grenzschicht-Theorie*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Schmehl, R. (2003): *Tropfendeformation und Nachzerfall bei der technischen Gemischaufbereitung*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).

- Schmehl, R., Maier, G. und Wittig, S. (2000): *CFD analysis of Fuel Atomization, Secondary Droplet Breakup and Spray Dispersion in the Premix Duct of a LPP Combustor*. In: *Eighth International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*.
- Schober, Peter (2009): *Berührungsfreie Erfassung beschleunigter schubspannungsgetriebener Kraftstoffwandfilme unter Druckeinfluss*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Schober, P., Ebner, J., Schäfer, O. und Wittig, S. (2003): *Experimental Study on the Effect of a Strong Negative Pressure Gradient on a Shear-Driven Liquid Fuel Film*. In: *ICLASS 2003, 9th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Sorrento, Italy, 2003*.
- Sethian, J. A. (1999): *Level Set Methods and Fast Marching Methods Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, Material Science*. Cambridge University Press.
- Sethian, J. A. (2001): *Evolution, Implementation, and Application of Level Set and Fast Marching Methods for Advancing Fronts*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 169, S. 503 – 555.
- Sethian, J. A. und Smereka, Peter (2003): *Level Set Methods for Fluid Interfaces*. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Bd. 35, S. 241 – 272.
- Shepard, Donald (1968): *A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data*. In: *Proceedings of the 1968 23rd ACM national conference*, S. 517 – 524. ACM, New York, NY, USA.
- Sigalotti, L.D.G., Daza, J. und Donoso, A. (2006): *Modelling free surface flows with smoothed particle hydrodynamics*. *Condensed Matter Physics*, Bd. 9, S. 359 – 366.
- Sigalotti, Leonardo Di G. und López, Hender (2008): *Adaptive kernel estimation and SPH tensile instability*. *Computers and Mathematics with Applications*, Bd. 55, S. 23 – 50.
- Speith, R. (1998): *Untersuchung von Smoothed Particle Hydrodynamics anhand astrophysikalischer Beispiele*. Dissertation, Eberhard-Karls-Universität Tübingen.
- Stone, Howard A. (1994): *Dynamics of Drop Deformation and Breakup in Viscous Fluids*. *Annual Review in Fluid Mechanics*, Bd. 26, S. 65 – 102.
- Sussman, Mark, Fatemi, Emad, Smereka, Peter und Osher, Stanley (1995): *A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow II*. In: *Sixth International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Volume III*.
- Takeda, H., Miyama, S.M. und Sekiya, M. (1994): *Numerical simulation of viscous flow by smoothed particle hydrodynamics*. *Progress of Theoretical Physics*, Bd. 92, S. 939 – 960.
- Tam, D. und Radovitzky, R. (2004): *An extension of the ghost fluid method for coupling fluids with thin, open structures*. 45th AIAA/ASME/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics & Materials Conference.

- Tartakovsky, A. und Meakin, P. (2005): *Modeling of surface tension and contact angles with smoothed particle hydrodynamics*. Physical Review E, Bd. 72, S. 1 – 9.
- Tartakovsky, A. M., Ferris, K. F. und Meakin, P. (2009): *Lagrangian particle model for multiphase flows*. Computer Physics Communications, Bd. 180, S. 1874 – 1881.
- Taylor, G. I. (1934): *The Formation of Emulsions in Definable Fields of Flow*. Proceeding of the Royal Society of London, Bd. 146, S. 501 – 523.
- Taylor, G. I. und Green, A. E. (1937): *Mechanism of the Production of Small Eddies from Large Ones*. Proceeding of the Royal Society A, Bd. 158, S. 499 – 521.
- Valizadeh, A., Shafieefar, M., Monaghan, J.J. und Neyshaboori, S.A.A. (2008): *Modeling of Two-Phase Flows Using SPH Method*. Journal of Applied Sciences, Bd. 8, S. 3817 – 3826.
- Veen, D.J. und Gourlay, T.P. (Hrsg.) (2008): *SPH Study of High Speed Ship Slamming*, Proceedings ERCOFTAC SPHERIC 3rd International Workshop, Lausanne, Switzerland. ERCOFTAC.
- Versteeg, H.K. und Malalasekera, W. (1995): *An introduction to computational fluid dynamics – The finite volume method*. Longman Scientific & Technical, Essex / England.
- von Neumann, J. und Richtmyer, R.D. (1950): *A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks*. Journal of Applied Physics, Bd. 21, S. 232 – 237.
- Watkins, S.J., Bhattal, A.S., Francis, N., Turner, J.A. und Whitworth, A.P. (1996): *A new prescription for viscosity in Smoothed Particle Hydrodynamics*. Astronomy & Astrophysics Supplement Series, Bd. 119, S. 1772 – 187.
- Weber, Constantin (1931): *Zum Zerfall eines Flüssigkeitsstrahles*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Bd. 11 (2), S. 136 – 154.
- Weiland, Jakob (2011): *Modellierung und Validierung eines Verdichtungsstoßes mittels der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode*. Studienarbeit, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Karlsruher Institut für Technologie.
- Wendland, Holger (1995): *Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree*. Advances in Computational Mathematics, Bd. 4, S. 389 – 396.
- Willmann, Michael (1999): *Charakterisierung eines Airblastzerstäubers - Bestätigung numerischer Simulationen mit einem angepassten Phasen-Doppler-Tropfenmessverfahren*. Dissertation, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Wittig, S., Himmelsbach, J., Noll, B., Feld, H. J. und Samenfink, W. (1991): *Motion and Evaporation of Shear-Driven Liquid Films in Turbulent Gases*. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 1991*.

- Wittig, S., Elsäßer, A., Samenfink, W., Ebner, J. und Dullenkopf, K. (1996): *Velocity profiles in shear-driven liquid films: LDV-measurements*. In: *Eighth International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*.
- Wittig, S., Koch, R., Schäfer, O. und Ebner, J. (2000): *Computational Fluid Dynamics For Combustion - Report on film flow calculations on plane surfaces at atmospheric pressures with ITS code*. Techn. ber., Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH).
- Wróblewski, P., Boryczko, K. und Kopec, M. (2008): *Modeling Incompressible Fluids by Means of the SPH Method: Surface Tension and Viscosity*. In: *ICCS 2008, Part I, LNCS 5101*.
- Xu, Rui, Stansby, Peter und Laurence, Dominique (2009): *Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach*. *Journal of Computational Physics*, Bd. 228, S. 6703 – 6725.
- Zhang, M.Y., Zhang, H. und Zheng, L.L. (2008): *Simulation of droplet spreading, splashing and solidification using smoothed particle hydrodynamics method*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 51, S. 3410 – 3419.
- Zhang, S., Morita, K., Fukuda, K. und Shirakawa, N. (2007): *A new algorithm for surface tension model in moving particle methods*. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 55, S. 225 – 240.
- Zhou, G., Ge, W. und Li, J. (2008): *A revised surface tension model for macro-scale particle methods*. *Powder Technology*, Bd. 183, S. 21 – 26.

Anhang

A.1 Glättungsfunktionen

Gauß Glättungsfunktion

$0 \leq q \leq 3$:

$$W(q,h) = \alpha \exp(-q^2)$$
$$\nabla W(q,h) = \alpha \exp(-q^2) (-2q) \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$3 < q$:

$$W(q,h) = 0$$
$$\nabla W(q,h) = 0$$

$$\alpha_{1D} = \frac{1}{h\sqrt{\pi}} \quad \alpha_{2D} = \frac{1}{h^2\pi} \quad \alpha_{3D} = \frac{1}{h^3\sqrt{\pi^3}} \quad (\text{A.1})$$

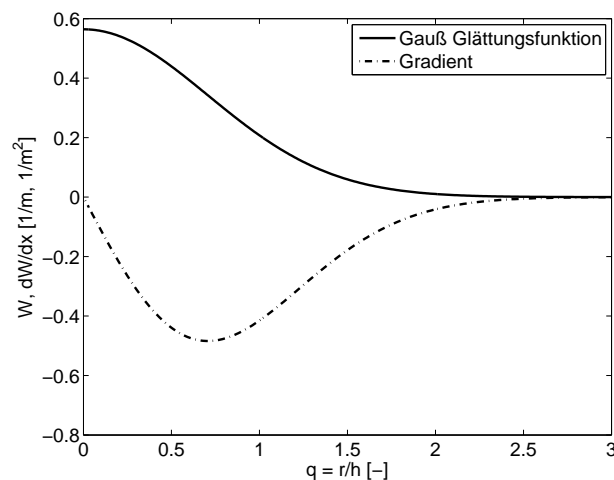


Abbildung A.1: Eindimensionale Gauß Glättungsfunktion ($h = 1\text{m}$) nach Gingold und Monaghan (1977)

Quintische Glättungsfunktion

$0 \leq q \leq 1$:

$$W(q,h) = \alpha \left[(3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5 \right]$$
$$\nabla W(q,h) = \alpha \left[-5(3-q)^4 + 30(2-q)^4 - 75(1-q)^4 \right] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$1 < q \leq 2$:

$$W(q,h) = \alpha \left[(3-q)^5 - 6(2-q)^5 \right]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha \left[-5(3-q)^4 + 30(2-q)^4 \right] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$2 < q \leq 3$:

$$W(q,h) = \alpha \left[(3-q)^5 \right]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha \left[-5(3-q)^4 \right] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$3 < q$:

$$W(q,h) = 0$$

$$\nabla W(q,h) = 0$$

$$\alpha_{1D} = \frac{1}{120h} \quad \alpha_{2D} = \frac{7}{478\pi h^2} \quad \alpha_{3D} = \frac{1}{120\pi h^3} \quad (\text{A.2})$$

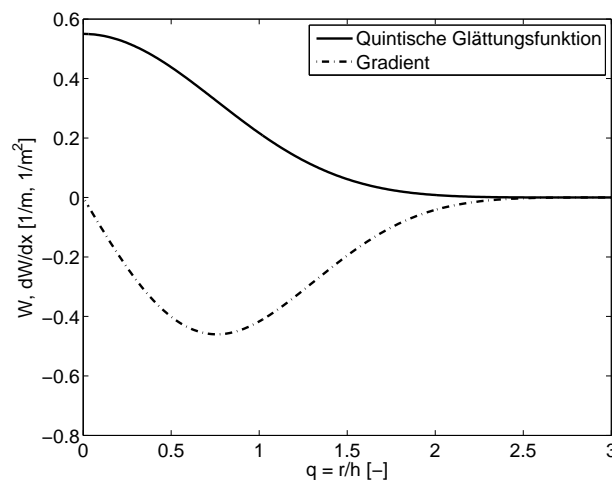


Abbildung A.2: Eindimensionale quintische Glättungsfunktion ($h = 1m$) nach Morris et al. (1997)

Quartische Glättungsfunktion

$0 \leq q < \frac{1}{2}$:

$$W(q,h) = \alpha \frac{1}{192} [48q^4 - 120q^2 + 115]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha \frac{1}{4} [4q^3 - 5q] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$$\frac{1}{2} \leq q < \frac{3}{2}:$$

$$W(q,h) = \alpha \frac{1}{96} [-16q^4 + 80q^3 - 120q^2 + 20q + 55]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha \frac{1}{24} [-16q^3 + 60q^2 - 60q + 5] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$$\frac{3}{2} \leq q < \frac{5}{2}:$$

$$W(q,h) = \alpha \frac{1}{24} [(2,5 - q)^4]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha \frac{1}{6} [-(2,5 - q)^3] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$$\frac{5}{2} \leq q:$$

$$W(q,h) = 0$$

$$\nabla W(q,h) = 0$$

$$\alpha_{1D} = \frac{1}{h} \quad \alpha_{2D} = \frac{1}{1.6348826h^2} \quad \alpha_{3D} = \frac{1}{2.6179939h^3} \quad (\text{A.3})$$

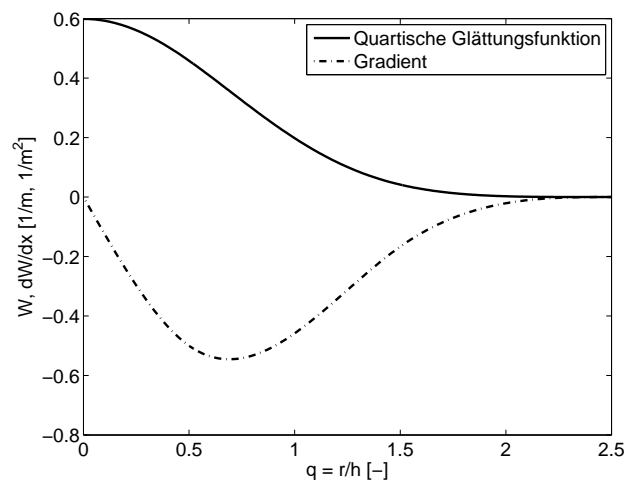


Abbildung A.3: Eindimensionale quartische Glättungsfunktion ($h = 1\text{m}$) nach Chaniotis et al. (2002)

Lucy Glättungsfunktion

$$0 \leq q \leq 1:$$

$$W(q,h) = \alpha [(1 + 3q) (1 - q)^3]$$

$$\nabla W(q,h) = \alpha [(-12q) (1 - q)^2] \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h}$$

$1 < q$:

$$\begin{aligned} W(q,h) &= 0 \\ \nabla W(q,h) &= 0 \end{aligned}$$

$$\alpha_{1D} = \frac{5}{4h} \quad \alpha_{2D} = \frac{5}{\pi h^2} \quad \alpha_{3D} = \frac{105}{16\pi h^3} \quad (\text{A.4})$$

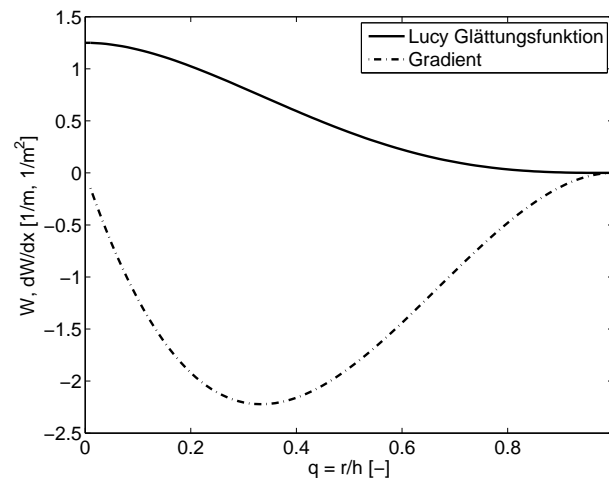


Abbildung A.4: Eindimensionale Lucy Glättungsfunktion ($h = 1m$) nach Lucy (1977)

Wendland Glättungsfunktion

$0 \leq q \leq 2$:

$$\begin{aligned} W(q,h) &= \alpha (2-q)^4 (1+2q) \\ \nabla W(q,h) &= \alpha (-10q) (2-q)^3 \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'| h} \end{aligned}$$

$2 < q$:

$$\begin{aligned} W(q,h) &= 0 \\ \nabla W(q,h) &= 0 \end{aligned}$$

$$\alpha_{1D} = \frac{3}{64h} \quad \alpha_{2D} = \frac{7}{64\pi h^2} \quad \alpha_{3D} = \frac{21}{256\pi h^3} \quad (\text{A.5})$$

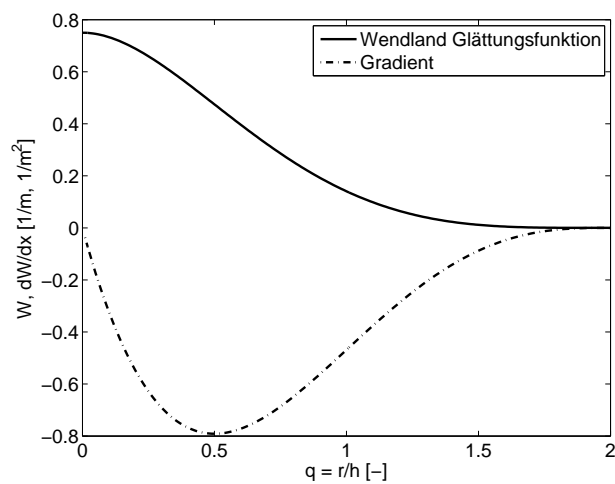


Abbildung A.5: Eindimensionale Wendland Glättungsfunktion ($h = 1m$) nach Wendland (1995)

A.2 Stoßrohr

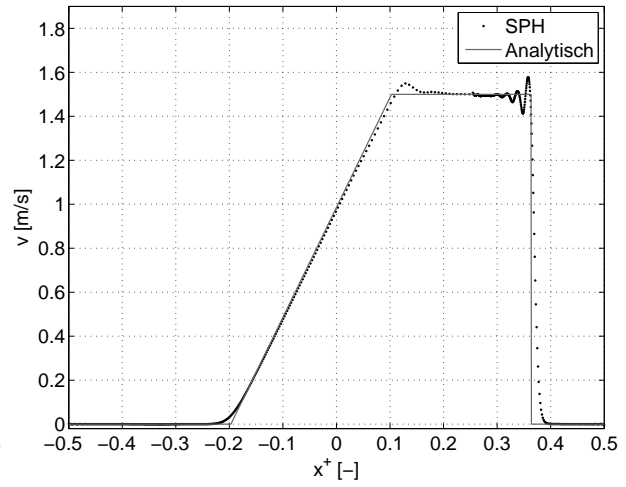
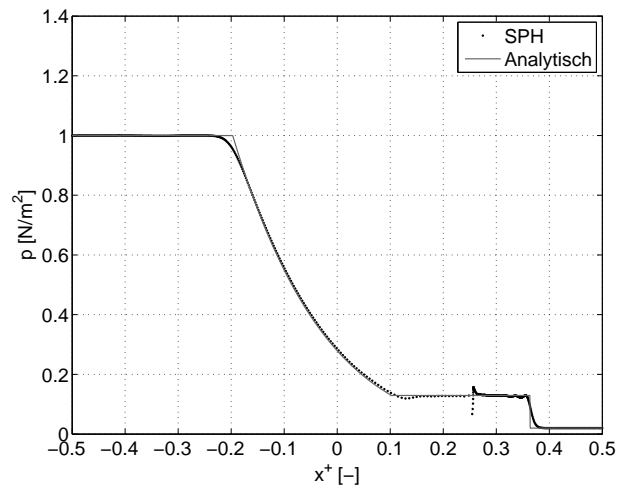


Abbildung A.6: Druckverlauf im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,2 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 50$

Abbildung A.7: Geschwindigkeitsverlauf im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,2 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 50$

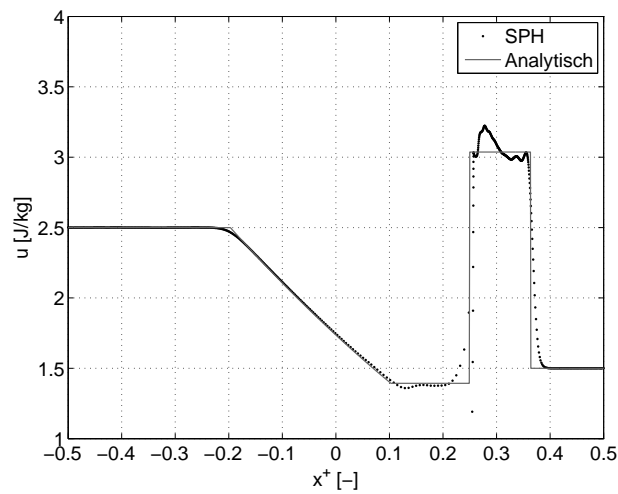


Abbildung A.8: Verlauf der inneren Energie im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,2 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 50$

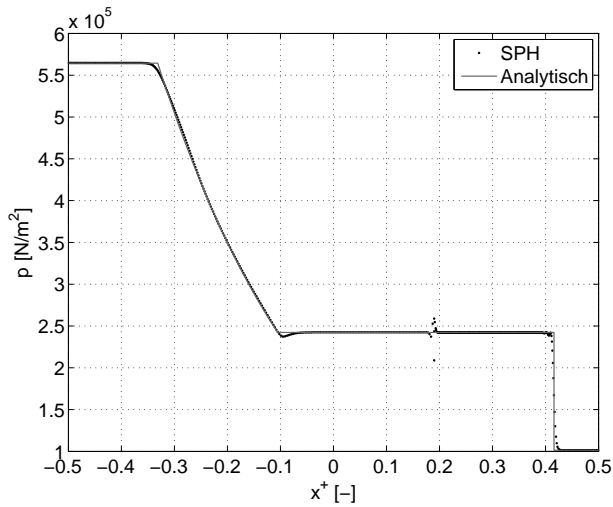


Abbildung A.9: Druckverlauf im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,01 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 5,57$ unter der Annahme von Normalbedingungen für Gaszustand 1

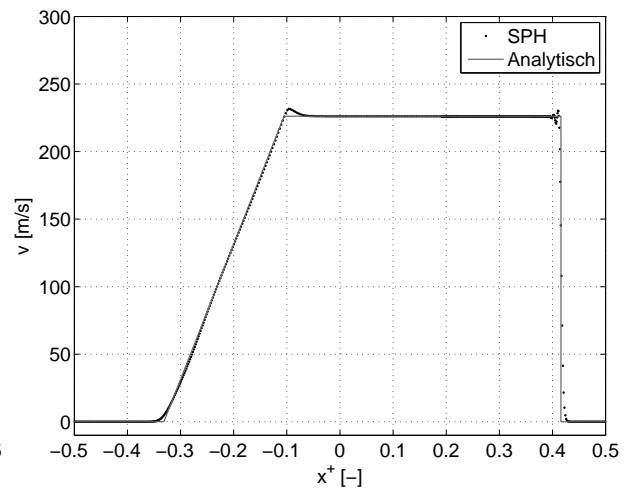


Abbildung A.10: Geschwindigkeitsverlauf im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,01 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 5,57$ unter der Annahme von Normalbedingungen für Gaszustand 1

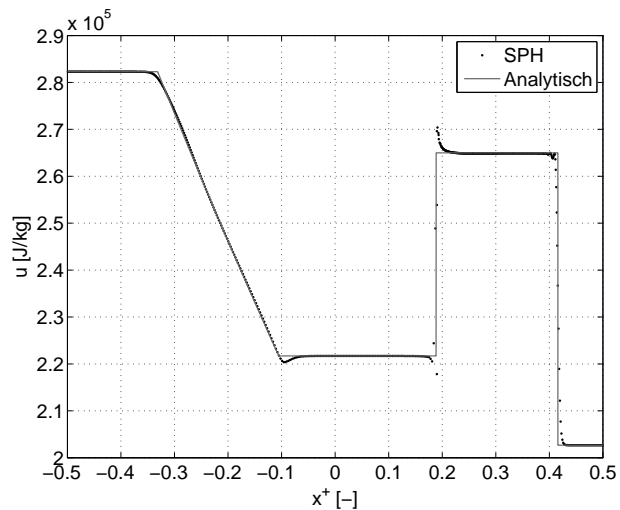


Abbildung A.11: Verlauf der inneren Energie im Stoßrohr zum Zeitpunkt $t = 0,01 \text{ s}$ für $\frac{p_5}{p_1} = 5,57$ unter der Annahme von Normalbedingungen für Gaszustand 1

A.3 Wärmeleitung

Die Wärmeleitung in Medien wird über den Fourier'schen Wärmeleitungsterm in der Energiegleichung berücksichtigt. Dessen Implementierung wird anhand der instationären Wärmeleitung in einem Festkörper validiert. Hintergrund hierfür ist die Aufheizung des Brennstoffes in der Brennkammer und die damit verbundene Veränderung der Stoffeigenschaften. Insbesondere die Temperaturabhängigkeit der Oberflächenspannung kann den Primärzerfall maßgeblich beeinflussen. Des Weiteren soll die Grundlage für die zukünftige Implementierung von Verdunstungsmodellen geschaffen werden.

Hierzu wird einem Stab der Länge $L = 1 \text{ m}$ das folgende Temperaturfeld, entsprechend einer Heaviside-Funktion, als Startbedingung aufgeprägt.

$$T(x) = \begin{cases} 0 & , \text{für } x < \frac{L}{2} \\ 10 & , \text{für } x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Die innere Energie lässt sich als Funktion der Temperatur über die Relation $u = c_v \cdot T$, mit der spezifischen isochoren Wärmekapazität $c_v = 1 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$, berechnen. Die Temperaturleitfähigkeit beträgt $\alpha = \frac{k}{\rho c_v} = 1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Der Stab ist durch 100 x 2 Stützstellen in x- bzw. y-Richtung, welche in äquidistantem Abstand positioniert sind, diskretisiert.

Die analytische Lösung dieses Falles entspricht für die ersten Zeitschritte der Lösung der eindimensionalen instationären Wärmeleitungsgleichung bei Kontakt zweier halbumendlicher Körper unterschiedlicher Temperatur. Diese ist durch die abschnittsweise definierte Funktion für beide Körper folgendermaßen gegeben:

$$T(x,t) = \begin{cases} -\text{erf}\left(\frac{x-\frac{L}{2}}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \cdot (T_l - T_m) + T_m & , \text{für } x < \frac{L}{2} \\ \text{erf}\left(\frac{x-\frac{L}{2}}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \cdot (T_r - T_m) + T_m & , \text{für } x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Die mittlere Temperatur an der Kontaktgrenze ist $T_m = 0,5 (T_l + T_r)$. Der Wärmeleitungsterm wird auf zwei Arten berechnet. Zum einen wird der Modellansatz in Gl. 4.46 angewendet (*SPH_1*), zum anderen erfolgt die Approximation des Temperaturgradienten nach Gl. 4.44 und die anschließende Summenapproximation zur Bestimmung der Divergenz des Gradientenfeldes gemäß Gl. 4.45 (*SPH_2*). Die Ergebnisse der beiden Simulationen sind in Abb. A.12 der analytischen Lösung (Gl. A.7) für drei Zeitschritte zu Beginn der Simulation gegenübergestellt. Hierbei ist die dimensionslose Temperatur $T^+ = \frac{T}{T_{0,max}} = \frac{T}{T_r}$ als Funktion der Lauflänge $x^+ = \frac{x}{L}$ dargestellt. Die ausgefüllten Symbole entsprechen den Ergebnissen bei Anwendung des *SPH_1*-Ansatzes, die nicht ausgefüllten Symbole denen der Berechnung nach dem *SPH_2*-Ansatz.

Zum Zeitpunkt $t = 0,1 \text{ s}$ liegt eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Berechnungsansätze mit der analytischen Lösung vor. Im weiteren zeitlichen Verlauf der Simulation wird die Wärmeleitung leicht unterschätzt. Dies liegt daran, dass die Abweichung des betrachteten Testfalls von der theoretischen Annahme halbumendlicher Körper mehr zum Tragen kommt. Der maximale relative Fehler zum Zeitpunkt $t = 20 \text{ s}$ für $x^+ > 0,5$ liegt jedoch noch unterhalb von 10%. Die

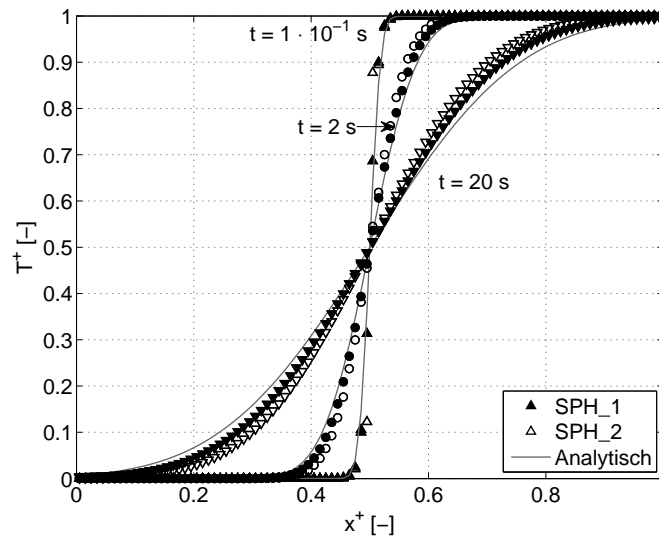


Abbildung A.12: Temperaturverlauf im Stab zu den Zeitpunkten $t = 0,1 \text{ s}$, $t = 2 \text{ s}$ und $t = 20 \text{ s}$

Berechnung über den Modellansatz liefert genauere Ergebnisse aufgrund der nur ein Mal durchzuführenden Approximation. Im Vergleich zur Berechnung über verschachtelte Summen sind die Approximationsfehler somit geringer.

Im stationären Zustand weist der Stab ein nahezu konstantes Temperaturfeld von $T^+ = 0,5$ auf. Für beide Verfahren treten minimale Abweichungen von unter 1% am linken ($x^+ = 0$) und rechten ($x^+ = 1$) Ende auf. Die Wärmeübertragung durch Konduktion kann durch die implementierten Modelle korrekt wiedergegeben werden.

Lebenslauf

Persönliches

Name Corina Höfler
Geburtsdatum 17. November 1982
Geburtsort Ostfildern-Ruit

Schulbildung

1989 – 1993 Besuch der Grundschule in Neuhausen a. d. F. und Ötisheim
1993 – 2002 Besuch des Allgemeinen Gymnasiums in Mühlacker

Studium

2002 – 2007 Studium der Verfahrenstechnik
an der Universität Karlsruhe (TH)
2004 Vordiplomprüfung
2007 Diplomarbeit an der University of Southern California, Los Angeles
2007 Diplomprüfung mit den Hauptfächern "Strömungsmechanik"
und "Verbrennungstechnik"

Berufserfahrung

2007 – 2013 Wissenschaftliche Mitarbeiterin
am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS)
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)