

Modellierung und numerische Simulation der Interaktion von Mehrphasenströmungen mit Festkörpern basierend auf einem Phasenfeldansatz

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

angenommene
Dissertation
von

Martin Dominik Reder, M. Sc.

Tag der mündlichen Prüfung:	27.10.2023
Hauptreferentin:	Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Korreferent:	Prof. Dr. Markus Uhlmann

Abstract

The present work addresses modelling and numerical simulation of problems involving the interaction of solid bodies with multi-phase flow. If multiple bodies are immersed in the fluid, this results in a particulate flow. Such flows are of relevance in various natural processes and technical applications. Examples are the sediment transport in rivers or mixing and transport in suspensions, *e.g.* in the field of process engineering. Numerical simulations yield insights into the physical mechanisms which are involved in such processes. Furthermore, they allow the prediction of the system behaviour, and thus the influence of different process parameters can be investigated. For the problems addressed in the present work, numerous challenges arise. A main aspect is the tracking of complex domains and interfaces which change over time due to the motion of fluid phases and solid bodies. The modelling within this work is based on the phase-field method, which provides advantages in this regard.

At first, an existing method for single-phase particulate flow for rigid bodies is adjusted to a phase-field formulation. Additionally, a collision model is introduced, such that in combination particulate flow within complex boundary geometries can be considered. This method is coupled with a well established phase-field model for two-phase flow. A novel interpolation scheme regarding viscous stress approximation in the diffuse interface for such two-phase flow models is introduced which yields higher accuracy compared to frequently used interpolations. The resulting overall framework for multi-phase particulate flow is applied in numerical experiments in order to validate it and show its usability. This involves the treatment of multi-phase particulate flow within complex geometries, where solid contact, different surface wetting properties, and capillary effects are included. Finally, a visco-elastic behaviour of solid bodies is employed and a corresponding phase-field method is presented. It is formulated for a single body which can consist of different visco-elastic phases. An application example for this model is given in this work. Potential extensions are discussed for both the visco-elastic modelling as well as the multi-phase particulate flow framework employing rigid bodies.

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Modellierung und numerischen Simulation der Interaktion zwischen Festkörpern mit einer Mehrphasenströmung. Befinden sich mehrere Festkörper in der Strömung, liegt eine sogenannte Partikelströmung vor. Derartige Problemstellungen treten in verschiedensten natürlichen Prozessen und technischen Anwendungen auf, beispielsweise bei Sedimenttransport in Flüssen oder während Mischung und Transport von Suspensionen in der Verfahrenstechnik. Für derartige Anwendungen erlauben numerische Simulationen die Vorhersage des Systemverhaltens. Damit können sie Erkenntnisse über zugrunde liegende physikalischen Mechanismen liefern oder zur Untersuchung des Einflusses verschiedener Prozessparameter dienen. Für die hier betrachteten Problemstellungen ergeben sich bei der Modellierung einige Herausforderungen, insbesondere komplexe Geometrien von Lösungsgebieten, die sich zeitlich ändern, da sowohl unterschiedliche Fluidphasen als auch Festkörper innerhalb der Strömung eine Bewegung vollführen. Im Rahmen der Arbeit wird die Modellierung auf Basis der Phasenfeldmethode vorgenommen, die in dieser Hinsicht Vorteile bietet.

Zunächst erfolgt hierzu die Anpassung einer existierenden Methode für einphasige Partikelströmungen von Starrkörpern auf eine Phasenfeldformulierung sowie die Einführung eines Kollisionsmodells. In Kombination ermöglicht dieser Ansatz die Abbildung von Partikelströmungen in komplexen Randgeometrien. Des Weiteren erfolgt die Kopplung dieser Methode mit einem etablierten Phasenfeldmodell zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen. Für letzteres wird zudem ein neues Interpolationsschema für viskose Spannungen im diffusen Übergang zweier Fluide eingeführt, welches eine höhere Genauigkeit verglichen mit gängigen Interpolationen aufweist. In numerischen Experimenten wird das präsentierte Gesamtmodell für mehrphasige Partikelströmungen validiert und dessen Fähigkeiten dargestellt. Dies umfasst die Abbildung mehrphasiger Partikelströmungen mit komplexen Randstrukturen, wobei sowohl Festkörperkontakt als auch verschiedene Oberflächenbenetzbarkeit und Kapillaritätseffekte Berücksichtigung finden. Zuletzt wird eine viskoelastische Modellierung der Festkörper vorgenommen und eine entsprechende Methode im Phasenfeldkontext präsentiert, wobei zunächst nur ein Festkörper enthalten ist, der sich jedoch aus unterschiedlichen Phasen zusammensetzen kann. Dieses Modell wird in Simulationsbeispielen angewendet. Potentielle Erweiterungen sowohl für die viskoelastische Modellierung als auch die Starrkörpermodelle werden aufgezeigt und diskutiert.

Danksagungen

Zunächst möchte ich Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler meinen Dank aussprechen, sowohl für die Möglichkeit diese Doktorarbeit am Institut durchführen zu können als auch für die Betreuung der Promotion. Darüber hinaus danke ich Prof. Dr. Markus Uhlmann für die Übernahme des Koreferats und Prof. Dr. Robert Stieglitz für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes. Für die finanzielle Unterstützung während der Promotionszeit sei der Deutschen Forschungsgesellschaft, dem Europäischen Fonds für regionale Entwicklung sowie dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gedankt.

Ich bedanke mich außerdem bei meinem Kollegenkreis für die positive Arbeitsatmosphäre, die außerdienstlichen Aktivitäten und die vielen hilfreichen Diskussionen fachlicher Natur. Einen besonderen Dank möchte ich dabei an Daniel für die vielschichtige Unterstützung während der gesamten Promotionszeit richten. Ein weiterer Dank geht an Andreas P. für wertvolle Anregungen und das Korrekturlesen einiger Teile der Arbeit. Für die gute Zusammenarbeit, beispielsweise bei Publikationen oder Programmierarbeiten und dergleichen, sei zuvorderst den Kollegen Paul, Simon, Lukas und Jana gedankt sowie allen weiteren Kolleginnen und Kollegen, die hier nicht alle namentlich genannt werden können. Zu erwähnen ist zudem das Management der internen Kaffee- und Snackbar, das durch die Ergebnisse seiner Tätigkeit maßgeblichen Anteil am Gelingen der Arbeit genommen hat. An dieser Stelle soll auch die Mensa gebührende Anerkennung finden, die zur Ernährung des Autors, bisweilen jedoch auch zu dessen Erheiterung, beigetragen hat.

Abschließend möchte ich von Herzen meiner Familie für die andauernde Unterstützung unter anderem während der Promotionszeit danken. Meinen Eltern Edith und Wolfgang danke ich für die stete Unterstützung während meines Studiums und der Promotionszeit. Ganz besonders danke ich darüber hinaus meiner Frau Hanna für das Korrekturlesen der Arbeit, vor allem jedoch für ihre Liebe und den Ausgleich zum Arbeiten, an dem sie großen Anteil hatte.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung und Beiträge der Arbeit	2
1.3	Aufbau und Strukturierung	5
1.4	Verwendete Notation und Darstellung von Tensoren	6
I	Theoretische Grundlagen der Arbeit	9
2	Kontinuumstheorie und bestimmende Gleichungen	11
2.1	Mathematische Repräsentation und Kinematik von Kontinua	12
2.1.1	Konfiguration und Bewegung von Kontinua	12
2.1.2	Parametrierung von Feldgrößen	13
2.1.3	Deformation und Piola-Transformation	14
2.2	Thermomechanische Bilanzgleichungen	17
2.2.1	Allgemeine Bilanzgleichung und Reynolds-Transporttheorem .	17
2.2.2	Masse- und Impulsbilanzbilanz	19
2.2.3	Innere Energie- und Entropiebilanz	20
2.3	Navier-Stokes-System für inkompressible Fluide	21
3	Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode	25
3.1	Phasenfeld im thermodynamische Gleichgewicht	29
3.1.1	Energiefunktional und Gleichgewichtsprofil	29
3.1.2	Gleichgewichtslösung für gängige Potentiale	31
3.2	Dynamik der Phasenfeldevolution	36
3.2.1	Phasenfeldevolutionsgleichungen	36
3.2.2	Modellierung von Phasenumwandlungsprozessen	36
3.3	Grundzüge der Erweiterung auf ein Multiphasenmodell	39
3.4	Approximationen im diffusen Übergangsbereich	41
3.4.1	Interpolation von Größen im diffusen Übergangsbereich	41
3.4.2	Mittelung von Feldern im diffusen Übergangsbereich	42
3.5	Bewegung bei materiell konstantem Phasenfeld	45
3.5.1	Rein konvektive Transportgleichung	45
3.5.2	Bestimmung aus Referenzkonfiguration	46
3.5.3	Annäherung durch eine diffusive Evolutionsgleichung	47
3.6	Hohenberg-Halperin-Modell für Zweiphasenströmungen	49
3.6.1	Modellierung des Kapillaritätsterms	51
3.6.2	Benetzungsrandbedingung	52
3.6.3	Entdimensionalisiertes Modell	53

4	Numerische Diskretisierung mittels finiten Differenzen	55
4.1	Konstruktion von Diskretisierungsschemata	56
4.2	Kriterien für numerische Stabilität der Transportgleichung	59
4.3	Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term	63
II Modellierung der Fluid-Festkörper-Interaktion		71
5	Einphasenströmungen mit eingetauchten Starrkörpern	73
5.1	Überblick über existierende Ansätze	74
5.1.1	Methoden mit körperangepassten Gittern	74
5.1.2	Methoden fiktiver Gebiete	75
5.2	Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete	78
5.2.1	Methode räumlich verteilter Lagrange-Multiplikatoren	79
5.2.2	Anpassungen auf die Multiphasenfeldmethode	80
5.2.3	Handhabung von Partikel-Partikel-Interaktion	84
5.2.4	Partikel-Solid-Kontakte im Phasenfeldkontext	86
5.2.5	Numerische Umsetzung und Algorithmus	88
5.3	Verifikation und Validierung der Fluid-Solid-Interaktion	90
5.3.1	Sphärischer Partikel im freien Fall	90
5.3.2	Validierung bei vorgegebener Bewegung	97
5.4	Anwendung in numerischen Experimenten	101
5.4.1	Umströmung eines rotierenden Kreuzes	101
5.4.2	Partikelkontakt bei fallenden Sphären	102
5.4.3	Simulation eines Wirbelbetts	103
5.4.4	Interaktion von Partikelströmungen mit einer Schaumstruktur	104
5.4.5	Evolvierende Berandungsstrukturen	107
6	Erweiterung zur Kopplung von Mehrphasenströmungen mit Starrkörperbewegung	111
6.1	Existierende Modelle für Zweiphasenströmungen mit starren Körpern	112
6.2	Multiphasenfeld-Ansatz der Fluid- und Starrkörperrepräsentation . .	112
6.2.1	Modellformulierung	113
6.2.2	Numerische Umsetzung und Algorithmus	117
6.3	Validierung und Verifikation	119
6.3.1	Statische Benetzungsrandbedingung	119
6.3.2	Grenzflächendynamik mit Starrkörperbewegung	121
6.4	Anwendung in numerischen Experimenten	122
6.4.1	Partikelauflaufprall auf eine Fluidgrenzfläche	123
6.4.2	Mehrpartikelsysteme in Zweiphasenströmungen	124
6.5	Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang	129
6.5.1	Repräsentation mittels singulärer Grenzflächen	130
6.5.2	Diffuse Approximation	132
6.5.3	Quantifizierung der Genauigkeit	135
7	Fluid-Struktur-Interaktion mit elastischem Festkörperverhalten	141
7.1	Existierende Ansätze in rein Eulerscher Betrachtung	141
7.2	Modellierung im Multiphasenfeldkontext	142
7.3	Anwendung für Strömungen mit viskoelastischen Körper	145

7.4	Diskussion und Weiterentwicklungsperspektiven	148
8	Schlussbetrachtung und Ausblick	151
A	Details zur verwendeten Diskretisierung und numerischen Lösung	153
A.1	Aufbringen der Randbedingungen im Kontext der FDM	153
A.1.1	Knotenzentrierte Stützstellen	153
A.1.2	Zellzentrierte Stützstellen	155
A.2	Komponentenweise versetzte Gitteranordnung	156
A.3	Adaptive Einstellung numerischer Parameter	159
A.4	Estimation numerischer Fehler	160
B	Details zur Behandlung des diffusen Übergang	165
B.1	Geschwindigkeitsrandbedingungen am Fluid-Solid-Übergang	165
B.2	Herleitung der diffusen Benetzungsrandbedingung	167
B.3	Kontinuierliche Approximationen der Dirac-Distribution	169
	Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	171
	Abbildungsverzeichnis	177
	Tabellenverzeichnis	179
	Eigene Publikationen	181
	Literaturverzeichnis	183

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Interaktion von Ein- oder Mehrphasenströmungen mit Festkörpern tritt in vielen natürlichen Prozessen und technischen Anwendungen auf. Beispiele sind schwimmende Körper, der Sedimenttransport in Flüssen, fluidisierte Wirbelschichten in der Verfahrenstechnik sowie Mischung und Transport von Suspensionen. Derartige Strömungen können innerhalb einfacher Randgeometrien, wie quaderförmigen oder zylindrischen Behältern, aber auch in Kombination mit komplexen Berandungsstrukturen auftreten. Letzteres tritt beispielsweise im Zuge des Herstellungsprozesses sogenannter Hybrid-Schäume auf, wobei es sich um durch Polymere verstärkte Metallschäume handelt. Das Einbringen des Polymers kann durch ein Granulat erfolgen, das nach dem Einfüllen versintert oder expandiert wird. Während des Einfüllprozesses liegt eine einphasige Partikelströmung vor, welche die finale Partikelverteilung vor dem Sintern und damit die Mikrostruktur des resultierenden Stoffes maßgeblich bestimmt. Die Interaktion von Festkörpern mit Mehrphasenströmungen spielt beispielsweise im Herstellungsprozess von Batterieelektroden eine wichtige Rolle. Dabei wird der Film einer Suspension bestehend aus einer flüssigen Lösung und festen, aktiven Partikeln getrocknet. Im Verlauf des Trocknungsprozesses verdunstet das Lösungsmittel, während sich der gelöste Binder ablagert. Die Verdunstung führt zu einer zweiten Fluidphase, die aufgrund von Dichteunterschieden eine Strömung und damit auch eine Partikelbewegung induziert. Zudem ergeben sich in den Zwischenräumen der Partikel starke kapillare Einflüsse in der Strömung. Der Trocknungsprozess beeinflusst die resultierende Elektrodenmikrostruktur und wirkt sich somit stark auf deren Kapazität und Degradationsverhalten aus.

Numerische Simulationen tragen dazu bei, derartige Prozesse quantitativ zu betrachten. Sie ermöglichen die Beschreibung und Prädiktion der Prozesse unter einer Variation von Parametern oder Geometrien und machen diese somit einer Optimierung zugänglich. Derartige Simulationen erfordern Modelle, die einerseits alle relevanten physikalischen Prozesse abbilden und die sich andererseits effektiv mit numerischen Methoden implementieren lassen, sodass mit vertretbarem Rechenaufwand repräsentative Problemstellungen abgebildet werden können. Die Entwicklung und Implementierung derartiger Modelle im Kontext mehrphasiger Partikelströmungen ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Diese Modelle können der Untersuchungen im Bereich der eingangs genannten Anwendungsfelder mit Hilfe von numerischen Simulationen dienen. In diesen Anwendungen liegen eine Vielzahl an Festkörpern in der Strömung eines oder mehrerer Fluide vor, wobei die Körper sowohl mit der Strömung als auch untereinander interagieren. Entsprechend geht die Modellierung solcher mehrphasiger Partikelströmungen mit einigen Herausforderungen einher. Sowohl die sich bewegende Oberfläche der Körper als auch die Grenzflächen zwischen nicht mischbaren Fluiden führen zu einer komplexen Topologie des Problems durch

zeitlich variierende Grenzflächen und Geometrien, die parametrisiert und nachverfolgt werden müssen. An Schnittlinien zwischen Fluid-Fluid-Grenzflächen und einer Festkörperoberfläche ergibt sich eine Kontaktliniendynamik, die im Allgemeinen abhängig von den Oberflächenenergien zwischen verschiedenen Phasen ist und durch ein Modell geeignet abzubilden ist. Gleichzeitig bedarf es einer adäquaten Modellierung von Kontakt zwischen Festkörpern. Eine zusätzliche Herausforderung kommt hinzu, wenn komplexe Festkörperstrukturen als Berandungsgeometrien der Partikelströmung vorliegen. Dies verkomplizieren die numerische Diskretisierung und erfordert zudem ein Vorgehen, um Kollisionen von sich bewegenden Festkörperpartikeln mit der Randstruktur zu identifizieren.

1.2 Zielsetzung und Beiträge der Arbeit

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Modellierung von mehrphasigen Partikelströmungen auf Basis der Phasenfeldmethode. Diese hat sich bereits als zweckmäßig zur Behandlung dynamischer Grenzflächen erwiesen z. B. zur Beschreibung von Erstarrungsprozessen [115], im Zusammenhang mit Mehrphasenströmungen [75, 52], zur Modellierung von Rissausbreitung [138] oder im Bereich mechanisch getriebener Phasenumwandlungen wie der Martensitumwandlung [142]. Die Verwendung der Phasenfeldmethode ist u. a. dadurch motiviert, dass sie eine einheitliche Handhabung aller Phasengebiete ermöglicht und sich darüber hinaus durch deren Einsatz perspektivisch viele Möglichkeiten der Erweiterung und Multiphysikkopplung, z. B. im Bereich von Phasenumwandlungen, ergeben.

Die angestrebte Modellierung mehrphasiger Partikelströmungen soll mehrere Aspekte abdecken. Dies umfasst die korrekte Abbildung von Starrkörperbewegung gekoppelt mit Strömungsprozessen, sowohl für sphärische als auch beliebig geformte Körper. In der Partikelströmung muss Festkörperinteraktion in Form von Kollisionen ohne unphysikalische Überlappungseffekte modelliert werden. Der Fokus liegt zunächst auf sphärischen Partikeln, wobei Kontakt zwischen den Partikeln untereinander sowie mit beliebig geformten Randstrukturen zu berücksichtigen ist, um Partikelströmungen in komplexen Geometrien simulieren zu können. Des Weiteren soll das Modell Probleme mit zwei auftretenden Fluidphasen abdecken. Dabei muss sowohl die Kontaktflächendynamik mit kapillaren Effekten als auch unterschiedlicher Oberflächenbenetzbarkeiten der Festkörper enthalten sein. Künftig scheint zudem die Berücksichtigung elastischen Festkörperverhaltens sinnvoll. Hierzu wird anhand existierender Methoden ein Modell für die Fluid-Struktur-Interaktion im Multiphasenfeldkontext vorgestellt. Es ist zudem skizziert, wie die Methoden des eingeführten Starrkörpermodells für mehrphasige Partikelströmungen auf die Modellierung der Interaktion von Mehrphasenströmungen mit elastischen Körpern übertragen werden kann. Im Rahmen der Arbeit erfolgt die Implementierung aller vorgestellten Modelle und deren Anwendung in Simulationsbeispielen und für Validierungsfälle. Die Beiträge der vorliegenden Arbeit zur Erreichung dieser Zielstellungen sowie die methodischen Neuheiten sind im Folgenden zusammenfassend dargestellt.

Zunächst wird eine existierende Methode fiktiver Gebiete [121, 145] zur Behandlung von einphasigen Partikelströmungen auf eine Phasenfeldformulierung angepasst, wobei die Modellierung von Festkörperpartikeln als starre Körper erfolgt. Methoden mit

1.2 Zielsetzung und Beiträge der Arbeit

diffusum Übergang zwischen Phasengebieten, worunter die Phasenfeldmethode fällt, existieren in diesem Kontext bereits. Diese Methoden unterscheiden sich jedoch vom hier vorgestellten Ansatz in der Art des diffusen Übergangs und in der Zeitentwicklung der Gebietsparametrierung. Für diffuse Übergänge ist eine Interpolation von Größen notwendig. In der Literatur kommt hierzu üblicherweise eine einfache lineare Interpolation der Geschwindigkeiten im Übergang zum Einsatz, z. B. in [178, 8]. Es wird gezeigt, dass diese Approximation keine impulserhaltende Projektion darstellt und eine erweiterte Projektionsmethode mit Impulskorrektur eingeführt, die genauere Ergebnisse liefert. Für die Handhabung von Kontakt zwischen Partikeln kann auf existierende Kontaktmodelle zurückgegriffen werden. Um darüber hinaus die Interaktion der Partikelströmung mit beliebig geformten Randstrukturen berücksichtigen zu können, wird ein neuer Algorithmus präsentiert. Dieser erlaubt im Kontext der Phasenfeldmethode die Anwendung von Kollisionsmodellen, die den Kontakt zwischen Partikeln mit beliebigen Strukturen abbilden (siehe [129]). Während in der Literatur meist Problemstellungen mit quaderförmigen oder zylindrischen Rechengebieten vorliegen, kann der hier verwendete Ansatz die Interaktion mit komplizierten Randgeometrien abbilden, was durch ein Simulationsbeispiel von Partikelströmungen in einer Schaumstruktur gezeigt wird. Die Beiträge der Arbeit im Blick auf dieses Modell lassen sich in zwei Neuheiten zusammenfassen. Diese bestehen zum einen in Anpassungen auf die Phasenfeldmethode, insbesondere hinsichtlich der impulserhaltenden Projektion, und zum zweiten im eingeführte Kollisionsmodell für beliebige Randgeometrien. Dieses Modell mit entsprechenden Anwendungen wurde durch den Autor im Fachartikel [129] publiziert.

Ein weiterer Beitrag der Arbeit besteht in der Erweiterung des Modells für Partikelströmungen auf eine Verwendung in Zweiphasenströmungen. Für die Modellierung von Zweiphasenströmungen sind Hohenberg-Halperin-Modelle verbreitet, die ebenfalls auf der Phasenfeldmethode basieren [65, 75]. Die vorliegende Arbeit verfolgt den Ansatz der Kombination eines solchen Modells mit der oben beschriebenen Methode fiktiver Gebiete, wodurch die Phasenfeldmethode sowohl für die Parametrierung der Partikel als auch der Fluidphasen dient. Um beide Modelle kombinieren zu können, wird eine Normierung eingeführt, welche die entkoppelte Handhabung von Zweiphasenströmung und Partikelströmung erlaubt, sodass die numerische Lösung des Gesamtproblems in einem Zeitschritt nicht simultan erfolgen muss. Stattdessen ergibt sich die Kopplung a posteriori durch Rücknormierung, wobei der Einfluss von Festkörpern auf die Zweiphasenströmung durch diffuse Benetzungsrandbedingungen in der zweiphasigen Evolutionsgleichung des Fluidproblems abgedeckt ist. Zu diesem Zweck findet das allgemeine Vorgehen zum Aufbringen von Randbedingungen bei diffusen Übergängen von Li et al. [102] Anwendung, was im Kontext der Benetzung bereits bei Aland et al. [3] für unbewegte Festkörper umgesetzt wurde. Dieser Ansatz berücksichtigt die Oberflächenbenetzbarkeit von Festkörpern bei beliebigen Kontaktwinkeln. Damit ergibt sich ein breiteres Anwendungsspektrum des Modells verglichen mit anderen existierenden Methoden zur Interaktion von Starrkörpern und Zweiphasenströmungen, z. B. [23, 106], die implizit einen rechtwinkligen Kontakt an der Tripellinie zweier Fluide mit Festkörpern annehmen und somit für ein davon abweichendes Benetzungsverhalten nicht mehr anwendbar sind. Einige Aspekte des vorgestellten Modells existieren bereits. Dies umfasst das Modell der Zweiphasenströmung und das diffuse Aufprägen der Randbedingungen. Das Neuartige der Arbeit besteht in der

1 Einleitung

Normierungsprozedur und der damit einhergehenden Einbettung des Modells in eine Multiphasenfeldmethode anstelle zweier unabhängiger Phasenvariablen. Auch die Kombination mit der bereits beschriebenen Modellierung der Starrkörperbewegung findet sich nach Kenntnis des Autors nicht in der bisher vorhandenen Literatur. Die Publikation dieser Modellerweiterung auf zwei Fluidphasen erfolgte durch den Autor in [126]. Darüber hinaus wird ein Sprungbedingungsansatz zur Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang zweier Fluide eingeführt, der eine höhere Genauigkeit zu gängigen Viskositätsinterpolationen aufweist. Dieser Ansatz kann ebenfalls für mehrphasige Partikelströmungen angewendet werden, um genauere Ergebnisse zu erzielen. Eine Publikation wurde eingereicht befindet aktuell im Begutachtungsprozess [128].

Das resultierende Modell für mehrphasige Partikelströmungen zeichnet sich dadurch aus, dass sowohl die Zweiphasenströmung als auch die darin enthaltenen Festkörper mittels einer Multiphasenfeldrepräsentation abgebildet wird. Im Gegensatz dazu verwenden andere existierende Methoden zwar einen Phasenfeldansatz für die Mehrphasenströmung, handhaben die Festkörper jedoch z. B. mittels Lagrange-Oberflächenelementen oder einer Zwischenkonfiguration (Arbitrary Lagrange-Euler). Der hier vorgestellte Ansatz vermeidet derartige Zwischenkonfigurationen. Die Formulierung des Modells ausschließlich in der Momentankonfiguration sowie die Verwendung der Phasenfeldmethode für alle auftretenden Phasen bietet Vorteile im Hinblick auf die Diskretisierung des Rechengebietes. Es lassen sich beliebige numerische Gitter einsetzen, wodurch auf die aufwendige Erzeugung von geometriangepassten Gittern verzichtet werden kann. Auch eine zeitliche Gitteranpassung an die sich bewegenden Grenzflächen entfällt. Da die Geometrie durch ein weiteres Lösungsfeld repräsentiert wird, muss sie nicht notwendigerweise Berücksichtigung in der Diskretisierung finden. Es können somit auch zeitlich konstante, strukturierte Gitter genutzt werden. Die Gebietsdiskretisierung kann z. B. mit einem kartesischen Gitter erfolgen, was eine einfache numerische Implementierung und die Verwendung effizienter Lösungsverfahren in Form von Mehrgittermethoden ermöglicht. Die Phasenfeldmethode bietet dadurch viel Flexibilität, da sich beliebig komplexe Geometrien mit der gleichen numerischen Diskretisierung handhaben lassen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Einzelaspekte des entwickelten Modells für zweiphasige Partikelströmungen anhand mehrerer Vergleichsfälle validiert. Darüber hinaus findet eine Untersuchung des Einflusses verschiedener Formulierungen und Parameter des Modells sowie dessen Konvergenzverhalten in der numerischen Umsetzung statt. Anhand von numerischen Experimenten werden die Möglichkeiten der entwickelten Methode sowie potentielle Erweiterungsmöglichkeiten aufgezeigt. Dies umfasst die Behandlung mehrerer, in einer Zweiphasenströmung befindlicher Starrkörper, wobei sowohl Kontakt zwischen den Körpern oder mit starren Randstrukturen als auch das Benetzungsverhalten der Festkörperoberflächen abgebildet werden kann. Die Möglichkeit der Berücksichtigung von Phasenumwandlungsprozessen in Partikelströmungen wird qualitativ aufgezeigt, wobei für eine quantitative Abbildung weitere Anpassungen des Modells notwendig sind. Diese Anpassungen werden skizziert, sind jedoch noch nicht implementiert und angewendet.

Neben der beschriebenen Modellierung von Festkörperpartikel als starre Körper wird ein Ansatz für die viskoelastische Modellierung von Körpern präsentiert. Die-

ser beruht auf der Kombination einiger bereits bestehender Methoden zur Fluid-Struktur-Interaktion und deren Formulierung im Kontext der Multiphasenfeldmethode. Dagegen beschränken sich ähnliche Ansätze zur Modellierung von Fluid-Struktur-Interaktion basierend auf der Phasenfeldmethode bisher auf zweiphasige Probleme (siehe [113, 155]). In einer ersten Anwendung des eingeführten Modells zeigt sich dessen Fähigkeit, Strömungen mit viskoelastischen Festkörper abzubilden, wobei diese wiederum aus verschiedenen Solidphasen, z. B. mit unterschiedlicher Steifigkeit, zusammengesetzt sein können. Eine Erweiterung auf Mehrkörpersysteme oder die Kombination mit Zweiphasenströmungen ist möglich. Hierzu können Methoden, die in dieser Arbeit im Kontext einer Starrkörpermodellierung umgesetzt sind, auf die Verwendung mit elastischen Körpern übertragen oder erweitert werden. Dies kann Gegenstand zukünftiger Forschungsarbeiten sein. Das vorgestellte Modell wurde im Rahmen der Publikation [36] veröffentlicht, wobei eine geteilte Hauptautorenschaft mit zwei weiteren Personen vorliegt. Aus diesem Papier sind lediglich die Teile entnommen, die sich mit der Fluid-Struktur-Interaktion befassen. Für die übrigen Teile dieser Publikation zeichnen sich die beiden anderen Mithauptautoren hauptverantwortlich.

1.3 Aufbau und Strukturierung

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile. Der Erste befasst sich mit der Vorstellung und Diskussion etablierter theoretischer Grundlagen, auf die in der Arbeit zurückgegriffen wird. Hierzu zählen kontinuumsmechanische Grundlagen wie Kinematik, thermomechanische Bilanzgleichungen und die Modellierung von Strömungen im Rahmen der Navier-Stokes-Theorie. Diese stellen partielle Differentialgleichungssysteme als Basis zur Beschreibung der hier relevanten Probleme zur Verfügung und finden sich in Kapitel 2 und den entsprechenden Unterabschnitten. Kapitel 3 widmet sich der Phasenfeldmethode sowie dem darauf basierenden Hohenberg-Halperin-Modell für Zweiphasenströmungen. Die Umsetzung der in dieser Arbeit verwendeten Modelle erfolgt in numerischen Simulationen mittels finiter Differenzenmethode. Entsprechend sind in Kapitel 4 die Grundlagen der verwendeten Diskretisierungs- und Lösungsverfahren in Raum und Zeit gegeben.

Im zweiten Teil der Arbeit erfolgt die Modellierung gemäß der genannten Zielsetzungen. Dieser Teil gliedert sich in drei Kapitel, die sich jeweils Teilaspekten der Modellierung widmen. In jedem dieser Kapitel findet sich eine Darstellung des entsprechenden Stands der Technik sowie die Abgrenzung der vorliegenden Arbeit gegenüber bereits existierenden Ansätzen. In Kapitel 5 erfolgt die Anpassung einer Methode fiktiver Gebiete in die Phasenfeldformulierung. Das entsprechende Modell wird in dieser Arbeit als Phasenfeld-DLM-Methode bezeichnet. Außerdem findet sich dort die Einführung des Kollisionsmodells für Partikel mit beliebigen Berandungsstrukturen. Entsprechende Validierungs- und Anwendungsfälle für Partikelströmungen mit einem Fluid sind in den Unterkapiteln 5.3 und 5.4 gegeben. Die Erweiterung der Phasenfeld-DLM-Methode zur Benutzung in Zweiphasenströmungen ist in Kapitel 6 dargelegt. Auch hierfür erfolgen Validierungs- und Anwendungssimulationen. Dieses Kapitel zeigt in Abschnitt 6.5 zudem die Entwicklung einer Approximation viskoser Spannungen beider Fluide im diffusen Übergang, die höhere Genauigkeit gegenüber existierenden Methoden zur Viskositätsinterpolation aufweist. Ein Modell zur Fluid-Struktur-Interaktion mit Berücksichtigung viskoelastischer Körper im Kontext der

Multiphasenfeldmethode wird in Kapitel 7 eingeführt und an zwei Anwendungsbeispielen erprobt. Es ist anzumerken, dass der Fokus und die Hauptbeiträge der Arbeit in den Starrkörpermodellen für mehrphasige Partikelströmungen liegt. Die elastische Modellierung hat in dieser Arbeit zunächst eher perspektivischen Charakter und wird darum weniger ausführlich behandelt.

Abschließend ist der Anhang zu erwähnen, in dem sich weitere Details im Hinblick auf die numerischen Umsetzung, Herleitungen und dergleichen findet. Anhang A enthält zusätzliche Informationen der hier verwendeten numerischen Diskretisierung und Estimation numerischer Fehler. In Anhang B finden sich u. a. Herleitungen und Diskussion zu diffusen Randbedingungen im Fluid-Solid-Übergang.

1.4 Verwendete Notation und Darstellung von Tensoren

An dieser Stelle seien einige Bemerkungen bezüglich der in dieser Arbeit verwendeten Notation, v. a. im Hinblick auf Tensoren, gegeben. Während skalarwertige Größen normal gedruckt dargestellt sind, werden tensorielle Größen, also Vektoren und Tensoren höherer Stufe, im Fettdruck gesetzt. Zur Veranschaulichung verschiedener Operationen seien folgend die Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} sowie Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} gegeben. Die lineare Abbildung eines Vektors über einen Tensor zweiter Stufe ist als $\mathbf{A}\mathbf{b} = A_{ij}b_j\mathbf{e}_i$ notiert, wobei in Indexnotation gemäß der Einsteinschen Summationskonvention für doppelt auftretende lateinische Indizes über die entsprechenden Dimensionen summiert wird. Des Weiteren sind \mathbf{e}_i Einheitsvektoren einer Orthonormalbasis. Das Tensorprodukt zwischen zwei Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B} ist $\mathbf{A}\mathbf{B} = A_{ij}B_{jk}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k$, wobei \otimes das Außenprodukt bezeichnet. Das Innenprodukt zwischen Vektoren ist $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$ und dasjenige für Tensoren zweiter Stufe durch $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$ als doppelte Überschiebung der Indexpaare gegeben. Es findet in dieser Arbeit zudem die Frobenius-Norm $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ Verwendung. Für Tensoren zweiter Stufe wird die Identität als $\mathbf{1}$ verwendet. Die lineare Abbildung von Tensoren zweiter Stufe durch einen Tensor vierter Stufe ist als $\mathcal{T}[\mathbf{A}] = T_{ijkl}A_{kl}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ dargestellt, wobei vierstufige Tensoren zusätzlich kalligrafisch gesetzt sind. Das Kastenprodukt \square ist derart definiert, dass $(\mathbf{A}\square\mathbf{B})[\mathbf{C}] = \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{B}$ gilt, d. h. in Indexnotation folgt $(\mathbf{A}\square\mathbf{B})_{ijkl} = A_{ik}B_{lj}$. Die Identität für Tensoren vierter Stufe ist damit $\mathcal{I} = \mathbf{1}\square\mathbf{1}$. Des Weiteren bildet

$$\mathcal{I}^S = \frac{1}{2} (\mathcal{I} + \mathcal{I}^{\top_R})$$

Tensoren zweiter Stufe auf ihren symmetrischen Anteil ab, d. h. $\mathcal{I}^S[\mathbf{A}] = \text{sym}(\mathbf{A})$. Das hochgestellte \top_R bezeichnet dabei die Rechtstransposition im Sinne einer Vertauschung des rechten Indexpaars. Darüber hinaus findet das Kreuzprodukt zweier Vektoren als

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} := \epsilon[\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}]$$

1.4 Verwendete Notation und Darstellung von Tensoren

Verwendung. Dabei ist ϵ der Permutationstensor dritter Stufe mit

$$(\epsilon)_{ijk} = \begin{cases} 1 & \{i, j, k\} \in \{\{1, 2, 3\}, \{3, 1, 2\}, \{2, 3, 1\}\} \\ -1 & \{i, j, k\} \in \{\{3, 2, 1\}, \{1, 3, 2\}, \{2, 1, 3\}\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Dies entspricht dem Levi-Civita-Symbol, welches für gerade Permutationen den Wert 1, für ungerade Permutationen -1 und bei Gleichheit zweier Indizes 0 ergibt. Für Ableitungen ersten Grades ist bisweilen die abkürzende Schreibweise

$$d_x f := \frac{df}{dx} \quad \text{und} \quad \partial_x f := \frac{\partial f}{\partial x}$$

der totalen bzw. partiellen Ableitung in Gebrauch. Darüber hinaus finden Rechtsgradient und Rechtsrotation gemäß

$$\nabla(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \quad \text{und} \quad \nabla \times (\cdot) = \epsilon[\nabla(\cdot)]$$

Verwendung. Der Operator ∇ bezieht sich dabei auf den räumlichen Gradienten in der Momentankonfiguration. Entsprechend liegen für ein Skalarfeld ϕ und ein Vektorfeld \mathbf{v} die Divergenz $\nabla \cdot \mathbf{v} := \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{1}$ und der Laplace-Operator $\nabla^2 \phi := \nabla \cdot \nabla \phi$ bzw. $\nabla^2 \mathbf{v} := \nabla \cdot \nabla \mathbf{v}$ in der Momentankonfiguration vor. Für Tensorfelder ergibt sich die Divergenz aus der Überschiebung des Gradienten mit $\mathbf{1}$ von der rechten Seite. Die entsprechenden Differentialoperatoren bezüglich der Anfangskonfiguration sind als Grad und Div notiert. Für Feldgrößen wird zumeist auf die explizite Angabe der Argumente verzichtet. Die Parametrierung spielt in diesen Fällen entweder keine Rolle oder geht eindeutig aus dem Kontext hervor, z. B. durch die verwendeten Operatoren oder Integralgrenzen.

Teil I

Theoretische Grundlagen der Arbeit

2 Kontinuumstheorie und bestimmende Gleichungen

Die Methoden und Modelle, die Gegenstand der vorliegenden Arbeit sind, bewegen sich ausschließlich im Rahmen einer *Kontinuumstheorie*. Dabei werden die Eigenschaften der betrachteten Moleküle makroskopisch über die Verwendung statistisch gemittelter Größen abgebildet und somit über ein räumliches Volumen verwischt. Die Mittelung erfolgt über ein sogenanntes *repräsentatives Volumenelement* (RVE), welches hinreichend viele Moleküle enthalten muss, sodass die gemittelte Größe nicht von deren Anzahl abhängt und dadurch die molekulare Struktur der Materie nicht mehr bemerkbar ist. Gleichzeitig muss das RVE jedoch klein im Vergleich zur Längenskala der charakteristischen Abmessungen des betrachteten Systems sein. Lässt sich ein solches RVE finden, stellt die Kontinuumsannahme ein geeignetes Modell für die Beschreibung technischer oder natürlicher Systeme bereit. Dies ist nicht immer möglich, etwa bei der Betrachtung dünner Gase oder von Problemstellungen auf sehr kleinen Längenskalen. In diesen Fällen muss beispielsweise auf molekulardynamische oder hybride Methoden zurückgegriffen werden. Für eine große Klasse technischer Systeme ist die Existenz eines RVE jedoch gegeben, sodass sich deren Repräsentation durch Kontinua als sehr zweckmäßig erweist. Dies umfasst makroskopische Betrachtungen bis hin zu Längenskalen im Mikrometerbereich und darunter. Zur Verdeutlichung dessen sei die Loschmidtsche Zahl genannt, welche die Anzahl der Moleküle, die im Volumen eines Kubikzentimeters enthalten sind, bei Gasen im Normalzustand auf $2,7 \cdot 10^{19}$ beziffert. Bei Flüssigkeiten und Festkörpern liegen nochmals höhere Moleküldichten vor. Daraus ist ersichtlich, dass bei vielen Problemstellungen ein RVE mit den genannten Eigenschaften gefunden werden kann. Diese Arbeit befasst sich ausschließlich mit Systemen, für deren Beschreibung die Kontinuumsannahme gerechtfertigt ist. Im Rahmen der Kontinuumstheorie ist die Materie stetig, d. h. lückenlos im Raum verteilt. Kontinua bestehen aus einer Menge überabzählbar vieler *materieller Punkte*, die keine Ausdehnung besitzen. Größen wie z. B. Dichte oder Geschwindigkeit können als Feldgrößen betrachtet werden und sind stetige Funktionen des Ortes und der Zeit. Nachfolgend wird ein Überblick über die im Rahmen der Arbeit relevanten Grundlagen gegeben. Für detailliertere Ausführungen sei auf die Literatur verwiesen, z. B. [66, 71, 149, 163].

2.1 Mathematische Repräsentation und Kinematik von Kontinua

2.1.1 Konfiguration und Bewegung von Kontinua

Ein Festkörper oder eine Menge an Fluid wird im Rahmen dieser Arbeit als ein Kontinuum modelliert, dessen materielle Punkte als Elemente des dreidimensionalen Euklidischen Punktraums \mathbb{E}^3 aufzufassen sind. Das Kontinuum ist somit durch die Menge $\mathbb{M} \subset \mathbb{E}^3$ gegeben. Ein *Koordinatensystem* bildet eine Teilmenge $\mathbb{M}_i \subseteq \mathbb{M}$ in den Vektorraum des \mathbb{R}^3 ab. Eine Menge an Koordinatensystemen, mit deren Definitionsbereichen \mathbb{M} komplett abgedeckt ist, heißt *Atlas*. Existiert zu \mathbb{M} mindestens ein Atlas, dann ist \mathbb{M} eine *Mannigfaltigkeit*. Es ist anzumerken, dass ein einzelnes Koordinatensystem nicht unbedingt ausreichend ist, um eine Mannigfaltigkeit komplett abzudecken und somit ein Atlas mit mehreren lokalen Koordinatensystemen notwendig ist. Ein Beispiel hierfür ist die Abdeckung einer Kugeloberfläche. Bei allen nachfolgend betrachteten Systemen wird von einer Beschreibung als differenzierbare Mannigfaltigkeit ausgegangen, die zudem orientierbar ist. Die *Konfiguration* bzw. *Platzierung* [66, Kapitel 2.1]

$$\mathcal{K}_t : \mathbb{M} \subset \mathbb{E}^3 \rightarrow V(t) \subset \mathbb{R}^3 \quad (2.1a)$$

$$P \mapsto \mathbf{x} \quad (2.1b)$$

bildet die betrachtete Menge materieller Punkte \mathbb{M} aus dem Euklidischen Punktraum auf das zeitabhängige Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$ ab, das gerade von der Materie eingenommen wird. Die Konfiguration am Startzeitpunkt t_0 heißt *Anfangskonfiguration*, diejenige zu einem Zeitpunkt $t > t_0$ heißt *Momentankonfiguration*. Sei $P \in \mathbb{M}$ ein materieller Punkt, dann ergeben sich für dessen Position im Raum in der Anfangsplatzierung

$$\mathbf{X} = \mathcal{K}_{t_0}(P) \quad (2.2)$$

und in der Momentanplatzierung

$$\mathbf{x} = \mathcal{K}_t(P). \quad (2.3)$$

Es ist zweckmäßig, einen materiellen Punkt P über dessen Anfangsplatzierung \mathbf{X} zu identifizieren. Damit dient die Anfangskonfiguration gleichzeitig als Referenzkonfiguration und es ist nicht mehr nötig, mit dem abstrakten Raum der Mannigfaltigkeit zu arbeiten. Streng genommen ist \mathbf{X} nicht der materielle Punkt selbst, sondern nur dessen Anfangsposition. Es liegt allerdings eine eindeutige Zuordnung vor, da \mathcal{K}_{t_0} bijektiv ist, sodass in dieser Arbeit vereinfachender Weise bisweilen der materielle Punkt mit \mathbf{X} bezeichnet wird. Die *Bewegungsfunktion*

$$\chi : V^0 \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow V(t) \subset \mathbb{R}^3 \quad (2.4a)$$

$$(\mathbf{X}, t) \mapsto \mathbf{x} \quad (2.4b)$$

bildet jeden, durch die Anfangsposition \mathbf{X} beschriebenen materiellen Punkt auf seine momentane Position \mathbf{x} im Raum zur Zeit t ab, folglich ist

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t). \quad (2.5)$$

2.1 Mathematische Repräsentation und Kinematik von Kontinua

Die Bewegungsfunktion ist bijektiv und stetig differenzierbar. Mit ihrer Inversen $\xi := \chi^{-1}$ ergibt sich entsprechend

$$\mathbf{X} = \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.6)$$

sodass bei Kenntnis der Bewegung beliebig zwischen Anfangs- und Momentankonfiguration gewechselt werden kann. Anschaulich zeichnet die Bewegung für feste materielle Punkte Kurven im Raum, d. h. deren *Bahnlinien*, während die inverse Bewegung für feste räumliche Punkte Kurven auf \mathbb{M} zeichnet, die *Streichlinien* heißen. Durch Relativvektoren zwischen Anfangs- und Momentanposition eines materiellen Punktes ergibt sich das Verschiebungsfeld

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} - \xi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{s}(\mathbf{X}, t) = \chi(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} \quad (2.7)$$

in räumlicher und materieller Parametrierung.

2.1.2 Parametrierung von Feldgrößen

Eine beliebige Feldgröße ϕ lässt sich sowohl materiell als auch räumlich parametrieren. Die Darstellung in der Anfangskonfiguration heißt *Lagrange-Darstellung*, die räumliche Parametrierung bezüglich der Momentankonfiguration heißt *Euler-Darstellung*. Damit folgt

$$\phi = \phi_L(\mathbf{X}, t) = \phi_E(\mathbf{x}, t). \quad (2.8)$$

Mit der Bewegungsfunktion und ihrer Inversen kann durch Verkettung zwischen beiden Darstellungen gewechselt werden, z. B. $\phi_L(\mathbf{X}, t) = \phi_E(\chi(\mathbf{X}, t), t)$. Aus der zeitlichen Ableitung der Bewegung ergibt sich die räumliche Geschwindigkeit

$$\mathbf{u}_L(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t}, \quad (2.9)$$

d. h. die Geschwindigkeit eines festen materiellen Punktes im Raum. Analog resultiert aus der Inversen die materielle Geschwindigkeit eines festen räumlichen Punktes auf dem Körper

$$\mathbf{u}_E^m(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \xi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}. \quad (2.10)$$

Es ist zu beachten, dass es sich bei \mathbf{u} und \mathbf{u}^m unabhängig von der Parametrierung um unterschiedliche Felder handelt. Oftmals sind Größen und deren zeitliche Änderung an materielle Punkte gekoppelt, was die Einführung der *materiellen Zeitableitung*

$$\dot{\phi} = \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{\mathbf{X}=\text{konst}} \quad (2.11)$$

motiviert. Diese ergibt sich in der Lagrange-Darstellung unmittelbar durch partielles Ableiten und in der Eulerschen Darstellung mit der Kettenregel zu

$$\dot{\phi} = \frac{\partial \phi_E}{\partial t} + \nabla \phi_E \cdot \mathbf{u}_E. \quad (2.12)$$

Analog gilt für die räumliche Zeitableitung

$$\left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{x=\text{konst}} = \frac{\partial\phi_E}{\partial t} = \frac{\partial\phi_L}{\partial t} + \text{Grad } \phi_L \cdot \mathbf{u}_L^m. \quad (2.13)$$

Hierbei ist

$$\text{Grad}(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \mathbf{X}} \quad \text{und} \quad \nabla(\cdot) = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.14)$$

der räumliche Gradient in der Anfangs- bzw. Momentankonfiguration. Entsprechend ergibt sich die materielle Beschleunigung des räumlichen Geschwindigkeitsfeldes in Eulerscher Darstellung zu

$$\left. \frac{d\mathbf{u}_E}{dt} \right|_{x=\text{konst}} = \frac{\partial\mathbf{u}_E}{\partial t} + (\nabla\mathbf{u}_E)\mathbf{u}_E. \quad (2.15)$$

Für $\partial_t\mathbf{u}_E = \mathbf{0}$ heißt das Geschwindigkeitsfeld *stationär* und es ist *homogen*, falls $\nabla\mathbf{u}_E = \mathbf{0}$ gilt. Im Folgenden wird für Felder meist auf eine explizite Aufführung der Parameter verzichtet. In diesen Fällen ist entweder die Parametrierung nicht von Bedeutung oder geht aus dem Zusammenhang hervor.

2.1.3 Deformation und Piola-Transformation

Die Bewegungsfunktion beschreibt die Kinematik von Kontinua bereits vollständig. Allerdings ist bei der Modellierung des Materialverhaltens nur ein Teil der Bewegung relevant. In Fluiden oder Festkörpern treten Spannungen z. B. lediglich aufgrund der Verzerrung oder der Verzerrungsgeschwindigkeit eines materiellen RVE auf, d. h. Rotation oder Translation führen nicht zu einer Materialantwort in Form mechanischer Spannungen. Im Folgenden werden einige Größen eingeführt, die für eine Modellierung des Materialverhaltens relevant sind und sich aus der Bewegungsfunktion ergeben. Eng verknüpft mit der Bewegung ist der sogenannte *Deformationsgradient*

$$\mathbf{F} = \text{Grad } \chi(\mathbf{X}, t) \quad (2.16)$$

beschreibt die relative Positionsänderung anfangs benachbarter materieller Punkte zueinander, wobei durch den Gradienten der Translationsanteil der Bewegung entfällt. Der Deformationsgradient erlaubt die Transformation von Strecken-, Flächen- und Volumenelementen zwischen Momentan- und Anfangskonfiguration über die *Piola-Transformation*

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}, \quad d\mathbf{X} = \mathbf{F}^{-1}d\mathbf{x}, \quad (2.17a)$$

$$d\mathbf{O} = \det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-\top}d\mathbf{O}^0, \quad d\mathbf{O}^0 = \det(\mathbf{F}^{-1})\mathbf{F}^{\top}d\mathbf{O}, \quad (2.17b)$$

$$dV = \det(\mathbf{F})dV^0, \quad dV^0 = \det(\mathbf{F}^{-1})dV. \quad (2.17c)$$

Hierbei ist $d\mathbf{O}$ das Oberflächenelement und dV das Volumenelement in der Momentankonfiguration, während diejenigen in der Anfangskonfiguration jeweils durch die hochgestellte Null gekennzeichnet sind. Mit den entsprechenden Normalenvektoren \mathbf{n}^0 und \mathbf{n} in Anfangs- und Momentankonfiguration lassen sich die Oberflächenelemente zudem durch $d\mathbf{O} = \mathbf{n}dO$ bzw. $d\mathbf{O}^0 = \mathbf{n}^0dO^0$ ausdrücken. Es zeigt sich, dass

2.1 Mathematische Repräsentation und Kinematik von Kontinua

die Determinante $\det(\mathbf{F})$ des Deformationsgradienten ein Maß für die lokale Volumenänderung darstellt, wobei $\det(\mathbf{F}) < 1$ einer Kompression und $\det(\mathbf{F}) > 1$ einer Expansion entspricht. Der Deformationsgradient erlaubt es darüber hinaus, materielle und räumliche Größen, die Längenskalen enthalten, ineinander umzurechnen. Für die räumliche Geschwindigkeit \mathbf{u} und die materielle Geschwindigkeit \mathbf{u}^m gilt z. B.

$$\mathbf{u} = -\mathbf{F}\mathbf{u}^m \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{u}^m = -\mathbf{F}^{-1}\mathbf{u}. \quad (2.18)$$

Die Transformation der Gradienten folgt aus der Kettenregel zu

$$\text{Grad}(\cdot) = \nabla(\cdot)\mathbf{F}. \quad (2.19)$$

Wird mittels Lagrange-Darstellung in der Anfangskonfiguration gearbeitet, lässt sich der Deformationsgradient direkt aus Gleichung (2.16) bestimmen. In der Euler-Darstellung gilt für dessen Inverse

$$\mathbf{F}^{-1} = \nabla\xi. \quad (2.20)$$

Aufgrund der Bijektivität der Bewegungsfunktion besitzt der Deformationsgradient eine Determinante mit $\det(\mathbf{F}) > 0$. Er ist somit invertierbar und lässt sich durch die polare Zerlegung¹

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}, \quad \mathbf{R} \in \text{Orth}^+; \quad \mathbf{U}, \mathbf{V} \in \text{Sym} \quad (2.21)$$

in einen Rotationsanteil \mathbf{R} mit $\mathbf{R}^\top = \mathbf{R}^{-1}$ und einen Streckungsanteil \mathbf{U} bzw. \mathbf{V} aufspalten. Die Reihenfolge von Rotation und Streckung spielt dabei keine Rolle. Die polare Zerlegung ist schematisch in Abbildung 2.1 abgebildet. Zwischen \mathbf{U} und \mathbf{V} gilt der Zusammenhang

$$\mathbf{U} = \mathbf{R}^\top \mathbf{V} \mathbf{R} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{V} = \mathbf{R} \mathbf{U} \mathbf{R}^\top. \quad (2.22)$$

Die Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} haben identische Eigenwerte, die stets reell sind [107, Kapitel 1.3]. Beide Tensoren unterscheiden sich darin, dass \mathbf{U} die Streckung in der bereits gedrehten Konfiguration vornimmt, während \mathbf{V} in der zunächst nicht rotierten Konfiguration operiert. Die Eigenvektoren von \mathbf{V} liegen somit in materieller, d. h. unrotierter Konfiguration vor, die von \mathbf{U} in räumlicher Konfiguration. Der Rotationsanteil hingegen weist für $\mathbf{R} \neq \mathbf{1}$ komplexwertige Eigenwerte mit Betrag 1 auf [66, Kapitel 2]. Es erweist sich aufgrund dieser Eigenschaften als zweckmäßig, die Vektorräume \mathbb{V}^0 und \mathbb{V} als Kopien des \mathbb{R}^3 einzuführen, wobei \mathbb{V}^0 der Raum materieller Vektoren in der Anfangskonfiguration und \mathbb{V} der Raum von Vektoren in der Momentankonfiguration ist [58, Gleichung 2.6]. Für die Bewegung gilt

$$\chi : \mathbb{V}^0 \rightarrow \mathbb{V} \quad (2.23)$$

und somit bilden der Deformationsgradient \mathbf{F} und seine transponierte Inverse $\mathbf{F}^{-\top}$ materielle Vektoren linear auf räumliche Vektoren ab, während \mathbf{F}^\top und \mathbf{F}^{-1} in umgekehrte Richtung abbilden [58].

Im Hinblick auf die Kinematik führt sowohl bei Festkörpern als auch bei Fluiden der Rotationsanteil einer Bewegung nicht zu Spannungen. Größen, die allein den

¹Für invertierbare Tensoren existiert eine eindeutige polare Zerlegung, d. h. eine multiplikative Aufspaltung in einen orthogonalen Tensor und einen positiv semidefiniten, symmetrischen Tensor.

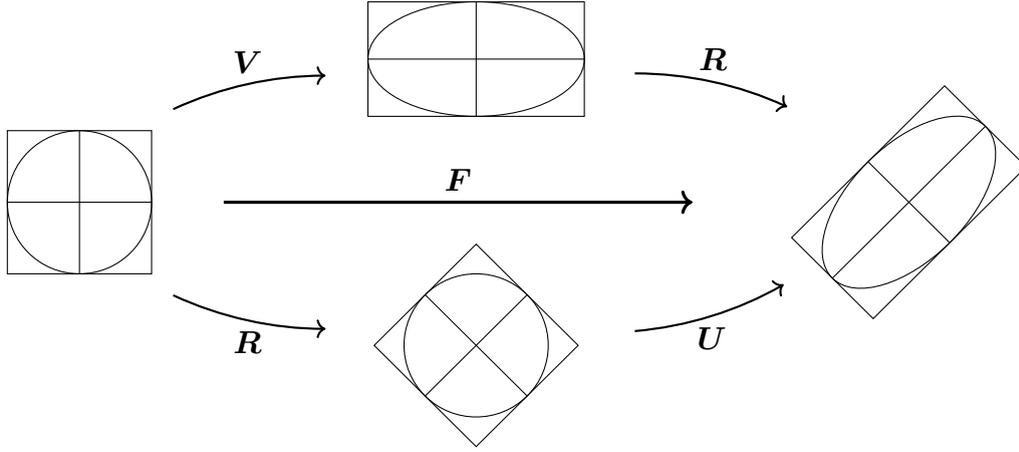


Abbildung 2.1: Visualisierung der polaren Zerlegung des Deformationsgradienten gemäß $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}$.

Streckungsanteil der Deformation enthalten, sind z. B. der *rechte Cauchy-Green-Tensor*

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F} = \mathbf{U}\mathbf{U} \quad (2.24)$$

und der *linke Cauchy-Green-Tensor*

$$\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^\top = \mathbf{V}\mathbf{V}, \quad (2.25)$$

wobei der Rotationsanteil aufgrund von $\mathbf{R}\mathbf{R}^\top = \mathbf{1}$ entfällt. Anders als der Deformationsgradient, bilden die Cauchy-Green-Tensoren nicht vom materiellem und räumlichem Vektorraum ab, vielmehr gilt $\mathbf{C} : \mathbb{V}^0 \rightarrow \mathbb{V}^0$ und $\mathbf{B} : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$. Basierend auf den Cauchy-Green-Tensoren lassen sich verschiedene Verzerrungstensoren definieren, die bei elastischem Verhalten der Spannungsbestimmung dienen können. Bei viskosem Materialverhalten, insbesondere bei Fluiden, ist die Verzerrungsgeschwindigkeit maßgeblich für auftretende Spannungen. Hierfür stellt der räumliche *Geschwindigkeitsgradient*

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{u} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}. \quad (2.26)$$

ein geeignetes Maß dar. Dieser lässt sich additiv in einen symmetrischen Anteil $\mathbf{D} = \text{sym}(\mathbf{L})$ und einen schiefsymmetrischen Anteil $\mathbf{W} = \text{skw}(\mathbf{L})$ zerlegen, was auf

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (2.27)$$

führt. Dabei ist \mathbf{D} der *Streckgeschwindigkeitstensor*, während der *Spintensor* \mathbf{W} den Rotationsanteil der Bewegung beschreibt. Die Zerlegung auf Geschwindigkeitsebene ist additiv, was durch die Anwendung der Produktregel zustande kommt, wenn für $\dot{\mathbf{F}}$ die polare Zerlegung vorgenommen wird. Daraus folgt²

$$\mathbf{D} = \mathbf{R}\dot{\mathbf{U}}\mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{V}}\mathbf{R}\mathbf{F}^{-1} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{W} = \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^\top = -\mathbf{R}\dot{\mathbf{R}}^\top = -\mathbf{W}^\top. \quad (2.29)$$

²Es kann ausgenutzt werden, dass $d_t(\mathbf{R}\mathbf{R}^\top) = d_t\mathbf{1} = \mathbf{0}$ gilt, woraus $\dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^\top = -\mathbf{R}\dot{\mathbf{R}}^\top$ folgt.

2.2 Thermomechanische Bilanzgleichungen

Im Rahmen der Kontinuumsmechanik liegt die Problemstellung in der Bestimmung aller relevanten Feldgrößen unter gegebenen Rand- und Anfangsbedingungen. Dabei genügt die Kenntnis einiger Lösungsfelder, von denen sich alle anderen Größen von Interesse berechnen lassen [30]. Zur Modellierung kontinuumsmechanischer Probleme werden Feldgleichungen in Form partieller Differentialgleichungen verwendet, die das Systemverhalten vollständig beschreiben. Diese können aus der zeitlichen Bilanzierung extensiver Größen wie Masse, Impuls und Energie gewonnen werden. Da die Bilanzgleichungen ein unterbestimmtes Gleichungssystem darstellen, werden materialspezifische Konstitutivgesetze benötigt, um das Gleichungssystem zu schließen und damit bestimmende Feldgleichungen zu gewinnen. Die zu bilanzierenden, extensiven Größen ergeben sich durch die Integration ihrer entsprechenden Dichte über einen räumlichen Bereich und sind damit ortsunabhängig. Die korrespondierenden Bilanzgleichungen haben in jedem beliebigen räumlichen Teilbereich des betrachteten Systems Gültigkeit und lassen sich dadurch in allen regulären Punkten, die nicht Teil singulärer Oberflächen sind, lokalisieren. Im Folgenden wird die allgemeine Bilanzgleichung eingeführt und für die grundlegenden extensiven Größen der Thermo-Mechanik, namentlich Masse, Impuls, innere Energie und Entropie, spezifiziert.

2.2.1 Allgemeine Bilanzgleichung und Reynolds-Transporttheorem

Sei \mathbb{M} die Menge aller materieller Punkte des betrachteten Kontinuums, V^0 dessen anfangs eingenommenes Volumen und $V(t)$ das momentane Volumen, dann ergibt sich eine beliebige extensive Größe G durch die Integration über ihre Dichte a als

$$G(t) = \int_{V^0} a^m(\mathbf{X}, t) dV^0 = \int_{V(t)} a(\mathbf{x}, t) dV. \quad (2.30)$$

Es spielt dabei keine Rolle, ob die Integration in der Anfangskonfiguration über die *materielle Dichte* a^m vorgenommen wird oder in der Momentankonfiguration über die *räumliche Dichte* a . Die Änderung der extensiven Größe ist entweder durch Flüsse über die Oberfläche oder durch Quellen bzw. Senken im Volumen möglich. Dies führt zur Darstellung der allgemeinen Bilanzgleichung

$$\frac{d}{dt} \int_{V^0} a^m(\mathbf{X}, t) dV^0 = \int_{V^0} b^m(\mathbf{X}, t) dV^0 + \int_{\partial V^0} \mathbf{c}^m(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{n}^0 dO^0 \quad (2.31a)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} a(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} b(\mathbf{x}, t) dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{c}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} dO \quad (2.31b)$$

in materieller bzw. räumlicher Darstellung. Das Oberflächenintegral kann mit dem *Satz von Gauß* ebenfalls in ein Volumenintegral über $\text{Div } \mathbf{c}^m$ bzw. $\nabla \cdot \mathbf{c}$ überführt werden. Es ist anzumerken, dass aufgrund der *Leibniz-Regel* die Zeitableitung in der materiellen Darstellung ohne Weiteres mit der Integration vertauscht werden kann, da das Integrationsvolumen zeitunabhängig ist. In der räumlichen Darstellung ist dies aufgrund des zeitlich variablen Volumens jedoch nicht möglich. Über die Piola-Transformation (2.17) ergeben sich die Zusammenhänge

$$a^m = Ja, \quad (2.32a)$$

$$b^m = Jb, \quad (2.32b)$$

$$\mathbf{c}^m = J\mathbf{F}^{-1}\mathbf{c} \quad (2.32c)$$

mit der Determinante $J := \det \mathbf{F}$ des Deformationsgradienten, wodurch sich materielle und räumliche Darstellung ineinander überführen lassen. Das *Reynolds-Transporttheorem* (RTT) erlaubt es, in der räumlichen Darstellung die Zeitableitung in das Integral zu ziehen. Mit den Relationen (2.32) folgt

$$\frac{\partial a^m}{\partial t} = \left. \frac{dJa}{dt} \right|_{\mathbf{x}=\text{konst}} = \dot{J}a + J\dot{a} = aJ\nabla \cdot \mathbf{u} + J\dot{a}, \quad (2.33)$$

wobei die letzte Umformung unter Ausnutzung der Euler-Identität [71, Gleichung 2.2.7] erfolgt. Das RTT ergibt sich somit in lokaler Form zu

$$\frac{\partial a^m}{\partial t} = J \left[\frac{\partial a}{\partial t} + \nabla \cdot (a\mathbf{u}) \right]. \quad (2.34)$$

Hiermit kann die partielle Zeitableitung im materiellen Integral der Gleichung (2.31a) ersetzt werden. Eine anschließende Transformation des Integrals mittels Piola-Transformation liefert das RTT in integraler Form mit

$$d_t G = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} a \, dV = \int_{V(t)} \partial_t a \, dV + \int_{\partial V(t)} a\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dO. \quad (2.35)$$

Es ist oftmals wünschenswert, anstelle des materiellen Volumens $V(t)$ einen festen räumlichen Bereich Ω zu betrachten. Dies ist meist in der Strömungsmechanik relevant, wo weniger eine bestimmte Menge an Fluid von Interesse ist, sondern vielmehr ein festes Kontrollvolumen (KV), z. B. in der Umgebung eines umströmten Körpers. Die zeitliche Änderung der extensiven Größe G^Ω im KV ergibt sich, indem Gleichung (2.34) über das Anfangsvolumen $V^{0,\Omega}$ derjenigen materiellen Punkte integriert wird, die sich momentan in Ω aufhalten. Diese Integration lässt sich mit der Piola-Transformation wiederum auf Ω selbst transformieren, was zu

$$d_t G^\Omega = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} a \, dV = \int_{\Omega} \partial_t a \, dV + \int_{\partial\Omega} a\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dO \quad (2.36)$$

führt. Dies ist auf den ersten Blick ein identisches Ergebnis zu Gleichung (2.35). Es ist jedoch zu beachten, dass diese sich auf eine feste Menge materieller Punkte bezieht, während in Gleichung (2.36) eine Durchströmung des KVs mit einer sich ändernden Menge materieller Punkte vorliegt. Insbesondere unterscheiden sich die Größen G und G^Ω . Der Oberflächenterm in Gleichung (2.36) berücksichtigt die Änderung der extensiven Größe G^Ω durch einen Massenstrom in das KV und heißt *konvektiver Term*. Wird ein mit der Geschwindigkeit \mathbf{u}^{KV} bewegtes Kontrollvolumen verwendet, resultiert der Fluss in (2.36) aus der Relativgeschwindigkeit $\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\text{KV}}$ [25]. Die globalen Bilanzgleichungen (2.31) lassen sich auch lokalisieren. Da diese in jedem Teilbereich für sich gültig sind, müssen sie auch allein für die Integranden der Volumenintegrale in jedem Punkt gelten. Nach Anwendung des Satzes von Gauß, und im räumlichen Fall des RTTs, ergibt sich die lokale Bilanzgleichung

$$\partial_t a^m = b^m + \text{Div } \mathbf{c}^m \quad (2.37a)$$

$$\partial_t a + \nabla \cdot (a\mathbf{u}) = b + \nabla \cdot \mathbf{c} \quad (2.37b)$$

in materieller und räumlicher Darstellung.

2.2.2 Masse- und Impulsbilanzbilanz

Eine erste Bilanzgleichung ergibt sich aus der Forderung von Massenerhaltung. Liegt keine Massenproduktion³ und kein Massenfluss in Form von Diffusion vor, ergibt sich die Forderung $d_t m = 0$ für eine feste Menge materieller Punkte. Sei ρ die Massendichte bezogen auf das aktuelle Volumen und ρ^m jene bezogen auf das Referenzvolumen, dann folgt die Massenbilanz

$$\partial_t \rho^m = 0, \quad \mathbf{X} \in V^0 \quad (2.38)$$

und in der räumlichen Darstellung

$$\int_{V(t)} \partial_t \rho \, dV + \int_{\partial V(t)} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dO = 0 \quad (2.39a)$$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.39b)$$

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0. \quad (2.39c)$$

Die beiden lokalen Formulierungen können durch die Produktregel und Gleichung (2.12) ineinander überführt werden. Aufgrund der Transformation (2.32) gilt dabei $\rho^m = J\rho$. Die Massenbilanz hat Implikationen für Dichtefelder a , die sich durch $a = \rho \tilde{a}$ ausdrücken lassen. Für die linke Seite der Bilanzgleichung folgt in dem Fall

$$\partial_t(\rho \tilde{a}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{a} \mathbf{u}) = \rho \dot{\tilde{a}} + \tilde{a} [\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})] = \rho \dot{\tilde{a}}. \quad (2.40)$$

Die Betrachtung des Impulses

$$\mathbf{p} = \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} \, dV = \int_{V^0} \rho^m \mathbf{u} \, dV^0 \quad (2.41)$$

führt zur Impulsbilanz

$$\int_{V(t)} \partial_t \rho \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial V(t)} \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \, dO = \int_{V(t)} \rho \mathbf{f}^V \, dV + \int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, dO \quad (2.42a)$$

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f}^V. \quad (2.42b)$$

Dabei ist $\boldsymbol{\sigma}$ der *Cauchy-Spannungstensor* und $\rho \mathbf{f}^V$ eine Volumenkraftdichte z. B. durch Gravitation. Es ist anzumerken, dass aufgrund von Gleichung (2.40)

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \quad (2.43)$$

mit dem Außenprodukt \otimes gilt. Durch das *Lemma von Cauchy*

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \quad (2.44)$$

lässt sich aus $\boldsymbol{\sigma}$ der Spannungsvektor \mathbf{t} auf eine Oberfläche in der Momentankonfiguration bestimmen. In der materiellen Darstellung ergeben sich die gesamten Oberflächenkräfte über den *ersten Piola-Kirchhoff-Tensor*

$$\mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-\top}. \quad (2.45)$$

³D. h. Prozesse, bei denen Masse und Energie ineinander umgesetzt werden, sind ausgenommen.

Dieser definiert die Spannungen bezüglich Oberflächenelementen $d\mathbf{O}^0$ in der Anfangskonfiguration, wohingegen sich der Cauchy-Spannungstensor auf Oberflächenelemente $d\mathbf{O}$ in der Momentankonfiguration bezieht. Für die Impulsbilanz in materieller Darstellung folgt

$$\int_{V^0} \rho^m \dot{\mathbf{u}} \, dV^0 = \int_{V^0} \rho^m \mathbf{f}^V \, dV^0 + \int_{\partial V^0} \mathbf{P} \mathbf{n}^0 \, dO^0. \quad (2.46)$$

Es ist anzumerken, dass der erste Piola-Kirchhoff-Tensor analog zum Deformationsgradienten eine lineare Abbildung zwischen materiellen und räumlichen Vektoren darstellt. Der inkrementelle Kraftvektor $\mathbf{P}d\mathbf{O}^0$ liegt seinerseits also in der Momentankonfiguration vor. Dies ist bei der Betrachtung der Drehimpulsbilanz von Relevanz. Diese ist hier nicht vollständig dargestellt, da sie typischerweise nicht zur Gewinnung einer Feldgleichung genutzt wird, sondern sich daraus vielmehr Symmetriebedingungen an die Spannungstensoren ergeben. Für die vollständige Darstellung der Drehimpulsbilanz sei auf z. B. Holzapfel [66, Kapitel 4.3] verwiesen. Im Folgenden werden lediglich deren Implikationen bezüglich der Spannung vorgestellt. Das aus Oberflächenkräften resultierende Drehmoment bezogen auf einen festen räumlichen Punkt \mathbf{x}^{ref} ergibt sich über

$$\int_{\partial V(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\text{ref}}) \times \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, dO = \int_{\partial V^0} (\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{x}^{\text{ref}}) \times \mathbf{P} \mathbf{n}^0 \, dO^0. \quad (2.47)$$

Da der erste Piola-Kirchhoff-Tensor in die Momentankonfiguration transformiert, muss sich der Relativvektor zur Bestimmung des Drehmoments ebenfalls auf diese beziehen, wobei $\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ ausgenutzt werden kann. Die Transformation des inkrementellen Kraftvektors $\mathbf{P}d\mathbf{O}^0$ in die Anfangskonfiguration mit dem Deformationsgradienten führt zur Definition des *zweiten Piola-Kirchhoff-Tensors* (siehe z. B. [107, Seite 7])

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P}. \quad (2.48)$$

Dieser stellt ein nützliches Spannungsmaß für die Formulierung von konstitutiven Gleichungen für Festkörper bereit. Die Drehimpulsbilanz impliziert die Symmetrie des Cauchy-Spannungstensors und des zweiten Piola-Kirchhoff-Tensors, d. h. es gilt

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^\top \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^\top. \quad (2.49)$$

Der erste Piola-Kirchhoff-Tensor besitzt hingegen keine Symmetrieeigenschaft. Für diesen gilt vielmehr $\mathbf{P}^\top = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}^\top$.

2.2.3 Innere Energie- und Entropiebilanz

Sei ρe die Dichte der inneren Energie, dann ist durch

$$\int_V \partial_t(\rho e) \, dV + \int_{\partial V} \rho e(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \, dO = - \int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, dO + \int_V \rho q^w + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \, dV \quad (2.50a)$$

$$\rho \dot{e} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \rho q^w + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \quad (2.50b)$$

die Bilanz der inneren Energie in räumlicher Darstellung gegeben. Dabei ist \mathbf{q} der Wärmestrom, q^w ein Quellterm und $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}$ stellt die innere Leistung der Spannungen

2.3 Navier-Stokes-System für inkompressible Fluide

dar. Es zeigt sich, dass aufgrund der Symmetrie von $\boldsymbol{\sigma}$ nur der Streckungsanteil \mathbf{D} des Geschwindigkeitsgradienten zur inneren Leistung beiträgt, sodass diese auch durch $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}$ angegeben werden kann. Die materielle Darstellung der inneren Energiebilanz ist

$$\int_{V^0} \rho^m \partial_t e \, dV^0 = - \int_{\partial V^0} \mathbf{q}^m \cdot \mathbf{n}^0 \, dO^0 + \int_{V^0} \rho^m q^w + \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} \, dV^0. \quad (2.51)$$

In der Praxis ergibt sich aus der inneren Energiebilanz eine Bestimmungsgleichung für das Temperaturfeld T . Es gilt $e = c_v T$ mit der Wärmekapazität c_v bei konstantem Volumen. Für inkompressible Materialien ist die Wärmekapazität c_p bei konstantem Druck und jene bei konstantem Volumen identisch und es ist $c = c_p = c_v$. Zur Bestimmung des Wärmestroms ist eine konstitutive Gleichung von Nöten, wobei meist das *Fouriersche Wärmeleitungsgesetz* $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$ mit der Wärmeleitfähigkeit λ Verwendung findet.

Eine Bilanz der Gesamtenergie ergibt sich durch zusätzliche Berücksichtigung der kinetischen Energie. Die Multiplikation der lokalen Impulsbilanz (2.42b) mit der Geschwindigkeit im Sinne des Innenprodukts führt nach einigen Umformungen zur mechanischen Leistungsbilanz

$$(\rho/2 \mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^\cdot = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{f}^V - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}.$$

Deren Addition mit Gleichung (2.50b) und eine Volumenintegration führt zur räumlichen Darstellung der Bilanz für die Gesamtenergie

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho e + \frac{\rho}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, dV = \int_{\partial V(t)} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n} \, dO + \int_{V(t)} \rho q^w + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{f}^V \, dV \quad (2.52)$$

und damit den ersten Hauptsatz der Thermodynamik. Die innere Leistung $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}$ beschreibt die Umwandlung kinetischer Energie in innere Energie und koppelt die entsprechenden Bilanzgleichungen, wobei sie in der jeweiligen Bilanz mit umgekehrtem Vorzeichen auftritt. Somit entfällt der Term in der Gesamtenergiebilanz.

Zuletzt wird die Entropiebilanz betrachtet. Diese lässt sich in räumlicher Darstellung mit der Entropiedichte ρs und der Produktion p_s als

$$\int_V \partial_t (\rho s) \, dV + \int_{\partial V} \rho s (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \, dO = - \int_{\partial V} \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, dO + \int_V \frac{\rho}{T} q^w + \rho p_s \, dV \quad (2.53a)$$

$$\rho \dot{s} = -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + \frac{\rho}{T} q^w + \rho p_s \quad (2.53b)$$

angeben. Aufgrund des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik muss stets $p_s \geq 0$ gelten, sodass die Entropiebilanz tatsächlich eine Ungleichung darstellt.

2.3 Navier-Stokes-System für inkompressible Fluide

Die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und innere Energie allein sind nicht ausreichend, um die darin auftretenden Feldgrößen eindeutig zu bestimmen. Zur Schließung des Gleichungssystems ist ein *Materialgesetz* als konstitutive Gleichung notwendig,

das die Materialeigenschaften modelliert. Bei Fluiden ergeben sich keine Spannungen, die nach Wegnahme der Last eine Rückstellung der Deformation bewirken. Die Spannungen, die sich in einem Fluid als Materialantwort ergeben, sind somit unabhängig von der Deformationshistorie und lediglich eine Funktion der momentanen Verzerrungsgeschwindigkeit. Die weitere Betrachtung beschränkt sich auf Fluide, die linear viskoses Verhalten aufweisen. Dies trifft auf die meisten technisch relevanten Fluide zu [149]. In diesem Fall gilt das sogenannte *Newtonsche Materialgesetz*

$$\boldsymbol{\sigma} = (\lambda^{\text{kp}} \nabla \cdot \mathbf{u} - p) \mathbf{1} + 2\mu \mathbf{D}, \quad (2.54a)$$

$$\text{sph}(\boldsymbol{\sigma}) = \left((\lambda^{\text{kp}} + \frac{2}{3}\mu) \nabla \cdot \mathbf{u} - p \right) \mathbf{1} \quad (2.54b)$$

$$\text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) = 2\mu \mathbf{D} - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{1}. \quad (2.54c)$$

Hierbei ist $\text{sph}(\boldsymbol{\sigma}) = \text{sp}(\boldsymbol{\sigma})/3 \mathbf{1}$ der sphärische und $\text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma} - \text{sph}(\boldsymbol{\sigma})$ der deviatorische Anteil des Spannungstensors, p der Druck und \mathbf{D} der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten. Die Materialparameter μ und λ^{kp} heißen *Lamé-Konstanten*. Der viskose Anteil des Spannungstensors ist damit als

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{v}} = 2\mu \mathbf{D} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{1} \quad (2.55)$$

gegeben, wobei μ die dynamische Viskosität und $\zeta := \lambda^{\text{kp}} + 2\mu/3$ die Volumenviskosität bezeichnet. Letztere verschwindet bei einatomigen Gasen und wird darüber hinaus auch bei Gemischen oftmals im Rahmen der Stokeschen Hypothese vernachlässigt [149]. Im Allgemeinen ist der Druck über eine Zustandsgleichung mit der Temperatur und Massendichte verknüpft. In vielen Fällen können Strömungen allerdings als *inkompressibel* angenommen werden. Dann gilt $\dot{\rho} = 0$, sodass die Massendichte ρ eines materiellen Punktes zeitlich konstant bleibt. In diesem Fall reduziert sich die Massenbilanz (2.39) auf die *Kontinuitätsgleichung*

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.56)$$

und der Spannungstensor auf

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + 2\mu \mathbf{D}, \quad \text{sph}(\boldsymbol{\sigma}) = -p\mathbf{1}, \quad \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma}^{\text{v}} = 2\mu \mathbf{D}. \quad (2.57)$$

Das Einsetzen des Newtonschen Materialgesetzes in die räumliche Impulsbilanz (2.42) führt zur *Navier-Stokes-Gleichung* (NSGL), deren inkompressible Darstellung durch

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = -\nabla p + \rho \mathbf{f}^{\text{V}} + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^{\text{T}} \mathbf{u}) \right] \quad (2.58)$$

gegeben ist. Für eine räumlich konstante dynamische Viskosität vereinfacht sie sich zu

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = -\nabla p + \rho \mathbf{f}^{\text{V}} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (2.59)$$

In Kombination mit der Kontinuitätsgleichung (2.56) ergibt sich damit das *Navier-Stokes-System* für inkompressible Fluide. Der Druck stellt sich im inkompressiblen Fall so ein, dass die Kontinuitätsgleichung (2.56) gilt. Er kann in diesem Sinne als Lagrange-Multiplikator in der NSGL aufgefasst werden, der die Erfüllung der Kontinuitätsgleichung als kinematische Zwangsbedingung sicherstellt. Es erweist sich

2.3 Navier-Stokes-System für inkompressible Fluide

meist als zweckmäßig, nicht das Navier-Stokes-System direkt zu lösen, sondern eine *Poisson-Gleichung* für den Druck zu gewinnen. Diese ergibt sich aus der Divergenz der NSGL unter Ausnutzung der Massenbilanz allgemein zu

$$\nabla \cdot \nabla p = \nabla \cdot [\nabla \cdot (2\mu \mathbf{D} - \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u})] + \nabla \cdot (\rho \mathbf{f}^V) + \partial_{tt} \rho. \quad (2.60)$$

Unter der Annahme, dass Dichte, Viskosität und Volumenkraftdichte konstant sind, vereinfacht sie sich zu

$$\nabla \cdot \nabla p = -\nabla \cdot [\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u})]. \quad (2.61)$$

In inkompressiblen Strömungen tritt in der Druckgleichung keine Zeitableitung auf. In der numerischen Lösung muss somit sichergestellt sein, dass das Geschwindigkeitsfeld im neuen Zeitschritt divergenzfrei ist, d. h. der Druck und damit die rechte Seite der Druckgleichung (2.61) muss bereits in der neuen Zeitebene vorliegen, was zu einem impliziten Gleichungssystem führt. Um eine mit der Navier-Stokes-Gleichung gekoppelte Lösung zu umgehen, kann eine Projektionsmethode angewendet werden, wie sie erstmals von Chorin [29] vorgeschlagen wurde. Die Integration der Navier-Stokes-Gleichung über das Zeitintervall $[t^n, t^{n+1}]$ führt zu

$$(\rho \mathbf{u})^{n+1} - (\rho \mathbf{u})^n = \int_{t^n}^{t^{n+1}} -\nabla p + \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D} - \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}^V dt \quad (2.62)$$

und somit

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^{\text{pre}} - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\rho} \nabla p dt \quad (2.63)$$

mit dem vorläufigen Testfeld für die Geschwindigkeit zum neuen Zeitschritt

$$\mathbf{u}^{\text{pre}} = \mathbf{u}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D} - \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \mathbf{f}^V dt, \quad (2.64)$$

das bei expliziter Zeitintegration bekannt ist. Die Anwendung des Divergenzoperators auf Gleichung (2.63) und die Forderung, dass $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ gelte, führt zu

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla^2 p dt = \rho \nabla \cdot \mathbf{u}^{\text{pre}}. \quad (2.65)$$

Grundsätzlich kann das Zeitintegral auf der linken Seite beliebig diskretisiert werden, wodurch sich eine Poisson-Gleichung für den Druck zum neuen Zeitschritt gewinnen lässt. Die Verwendung eines impliziten Euler-Verfahrens mit der Zeitschrittweite Δt ergibt beispielsweise die Druckgleichung

$$\nabla^2 p(\mathbf{x}, t^{n+1}) = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^{\text{pre}}. \quad (2.66)$$

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

Viele technische Anwendungen und natürliche Prozesse sind als *Mehrphasenproblem* gegeben. Unter *Phase* wird in dieser Arbeit ein materieller Bereich verstanden, innerhalb dem physikalische Eigenschaften homogen sind und sich von denen anderer Phasen unterscheiden. Dies kann sich auf einzelne Materialeigenschaften wie z. B. Massendichte, Steifigkeit oder Viskosität beziehen, die je nach Phase verschiedene Werte annehmen. Darüber hinaus können sich die auftretenden Phasen auch in ihrem grundsätzlichen physikalischen Verhalten in dem Sinne unterscheiden, dass die bestimmenden Gleichungen andere sind. Dies tritt beispielsweise im Kontext der Fluid-Struktur-Interaktion auf. So ist die Beschreibung des Fluids beispielsweise durch das Navier-Stokes-Differentialgleichungssystem möglich, während der Festkörper mit einem gänzlich anderen Gleichungssatz abgebildet wird. Dieser kann z. B. als starrer oder elastischer Körper mit entsprechenden Differentialgleichungen und ggf. Zwangsbedingungen bezüglich dem Verschiebungsfeld modelliert werden. Innerhalb eines Mehrphasenproblems lässt sich der Bereich jeder einzelnen Phase somit als eigenes Rand- und Anfangswertproblem ansehen, wobei an der Grenzfläche zweier Phasen Übergangsbedingungen vorliegen. Dies entspricht der Formulierung des Mehrphasenproblems mittels singulärer Grenzflächen (englisch: sharp Interface), die im Rahmen der Kontinuumstheorie gängig ist. Diese wird im Folgenden grob skizziert, um sodann die Phasenfeldmethode einzuführen und die Unterschiede zwischen beiden Modellen zu diskutieren. Sei N_α die Anzahl der Phasen im betrachteten System, wobei diese durch $\alpha = 1 \dots N_\alpha$ indiziert sind, und Ω_α der Teil des Rechengebiets, das

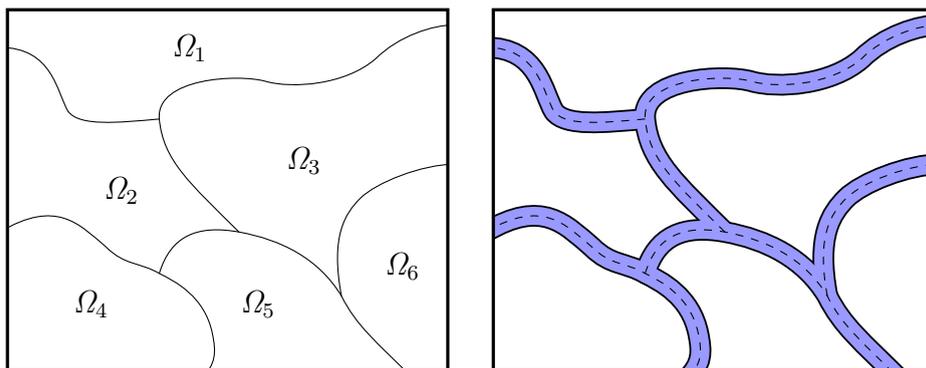


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Mehrphasenproblems. Links: Repräsentation mittels singulärer Grenzflächen. Rechts: Modellierung über die Phasenfeldmethode mit diffusem Übergang (blau).

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

von der Phase α eingenommen wird, dann ergibt sich das Gesamtgebiet zu

$$\Omega = \bigcup_{\alpha=1}^{N_\alpha} \Omega_\alpha. \quad (3.1)$$

Die Teilgebiete Ω_α sind im Allgemeinen zeitabhängig, während im Folgenden davon ausgegangen wird, dass das Gesamtgebiet Ω zeitlich konstant ist. Die Grenzfläche Γ zwischen zwei Phasen α und β ist durch

$$\Gamma_{\alpha\beta}(t) = \partial\Omega_\alpha \cap \partial\Omega_\beta \quad (3.2)$$

gegeben, wobei $\partial\Omega_\alpha$ den Rand des Gebiets Ω_α bezeichnet. Um festzustellen, ob an einem räumlichen Punkt \mathbf{x} Phase α vorliegt, dient die *Indikatorfunktion*

$$I_\alpha(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Omega_\alpha \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.3)$$

Diese weist auf dem Rand $\partial\Omega_\alpha$ einen Sprung auf und entspricht damit der *Heaviside-Funktion* H bezüglich der Oberflächennormalenkoordinate η . Die Topologie des Mehrphasenproblems lässt sich durch das Tupel aus N_α Indikatorfunktionen jeder Phase beschreiben. Die Indikatorfunktion erlaubt es, eine Integration über das Gebiet einer Phase α auf das gesamte Rechengebiet Ω auszuweiten, indem für $\Omega_\alpha \subset \Omega$

$$\int_{\Omega_\alpha} (\cdot) dV = \int_{\Omega} I_\alpha(\cdot) dV \quad (3.4)$$

ausgenutzt wird. Zudem ergibt sich der Gradient $\nabla I_\alpha = -\delta_\Gamma \mathbf{n}^\alpha$ der Indikatorfunktion mit der Oberflächennormale \mathbf{n}^α die vom Gebiet Ω_α nach außen gerichtet ist und der *Dirac-Distribution* δ_Γ der Oberfläche $\partial\Omega_\alpha$, mit der Eigenschaft

$$\int_{\Omega} (\cdot) \delta_\Gamma dV = \int_{\partial\Omega_\alpha} (\cdot) dO. \quad (3.5)$$

Sofern keine Phasenumwandlungsprozesse vorliegen, ergibt sich im Falle rein konvektiven Transports von Materie durch das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} die zeitliche Entwicklung der Indikatorfunktionen durch das System von Transportgleichungen

$$\dot{I}_\alpha = \partial_t I_\alpha + \nabla I_\alpha \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N_\alpha. \quad (3.6)$$

Dies bedeutet, dass sich die Zugehörigkeit eines festen, materiellen Punkts zu einer Phase zeitlich nicht ändert. Eine solche Modellierung eignet sich beispielsweise für die Abbildung von Strömungen nicht mischbarer Fluide oder der Festkörperdynamik in Fluiden, was beides Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist. Die Repräsentation des Mehrphasenproblems mit scharfen Übergängen bringt in der numerischen Umsetzung jedoch einige Schwierigkeiten v. a. bezüglich der Grenzflächen mit sich. Bei einer numerischen Simulation ist die Lösung nur an diskreten Stützstellen gegeben. Da die Indikatorfunktion diskontinuierlich ist und auf der Grenzfläche $\Gamma_{\alpha\beta}$ zweier Phasen Übergangsbedingungen vorzugeben sind, muss sichergestellt sein, dass sich bei der räumlichen Diskretisierung Stützstellen auf der Grenzfläche befinden. Es bedarf folglich eines an die Geometrie angepassten Netzes zur Raumdiskretisierung. Aufwendig ist die Behandlung von Grenzflächen insbesondere dann, wenn diese zeitlich evolvieren. Werden Stützstellen auf den Grenzflächen verwendet, ist das Netz mit der

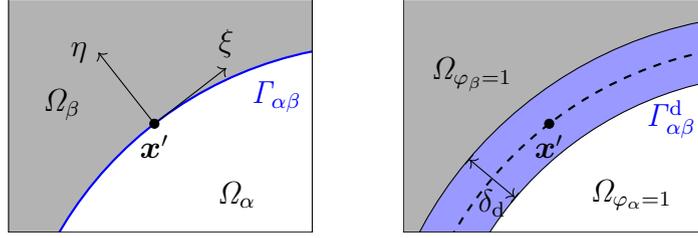


Abbildung 3.2: Grenze zweier Phasen α (weiß) und β (grau). Links: Singuläre Grenzfläche $\Gamma_{\alpha\beta}$. Rechts: Diffuser Übergangsbereich $\Gamma_{\alpha\beta}^d$ der Phasenfeldmethode. Die Grenzfläche entspricht dort der Iso-Oberfläche $\{\mathbf{x} \in \Omega : \varphi_\alpha = \varphi_\beta = 1/2\}$.

Zeit immer neu an die Geometrie anzupassen. Dies kann durch eine Verschiebung der Stützstellen erreicht werden, die sich aus einer entsprechenden Transportgleichung ergibt [94]. Wird die Deformation des Netzes jedoch zu groß, muss dieses neu erzeugt werden [11]. Alternative Ansätze stellen die Interpolation der Übergangsbedingungen (siehe [44, 86]) oder kontinuierliche Approximationen an die Dirac-Distribution [26] dar, wobei dies eine zusätzliche Ungenauigkeit in der approximativen Lösung einführt. Interpolierte Übergangsbedingungen gestatten die Verwendung fester Netze, wobei die Nachverfolgung der Grenzflächenbewegung notwendig ist. Dies ermöglicht approximativ z. B. die *Fluidvolumenmethode* (englisch: Volume of Fluid Method) nach Hirt und Nicols [63], die aus dem Bereich der Mechanik von Mehrphasenströmung herrührt. Gängig sind daneben Distanzfunktionsmethoden (englisch: *Level-Set*), die ein Feld des Abstands eines Punktes zu einer Grenzfläche einführen und mittels einer Transportgleichung evolvieren [118, 144].

Im Rahmen dieser Arbeit findet zur Verfolgung der Grenzflächen und zum Aufbringen von Übergangsbedingungen die *Phasenfeldmethode* Verwendung. Diese erlaubt die Simulation von Mehrphasenproblemen auf zeitlich unveränderten und räumlich beliebigen Netzen [102]. Es können komplexe Geometrien ohne angepasste Netze und z. B. mit rein kartesischen Gittern abgebildet werden, sodass eine aufwendige Gittererzeugung und Gitteranpassung entfallen kann. Darüber hinaus liefert die Phasenfeldmethode eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Grenzflächendynamik und bildet Grenzflächenenergien korrekt ab. Aufgrund dieser Eigenschaften ist sie bereits für die Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen, wie sie beispielsweise bei Kristallwachstum auftreten, etabliert und wird dort erfolgreich eingesetzt [115, 16]. Aber auch in anderen Bereichen, wie z. B. Mehrphasenströmungen, ist sie verbreitet [1, 75].

Die Grundidee der Methode besteht darin, anstelle einer singulären Grenzfläche zwischen zwei Phasen einen stetigen Übergangsbereich zu betrachten, innerhalb dem sie ineinander übergehen (vgl. Abbildung 3.2). Hierfür wird für jede Phase eine Phasenvariable φ_α analog zur Indikatorfunktion eingeführt. An die Stelle der Diskontinuität über die Grenzfläche tritt dabei ein steiler, aber stetiger Übergang von $\varphi_\alpha = 1$ zu $\varphi_\alpha = 0$. Die Phasenvariable kann als lokale Volumenfraktion der entsprechenden Phase aufgefasst werden, die im Inneren eines Phasenbereichs durch den Wert 0 oder 1 gegeben ist und lediglich in dem klein zu wählenden Übergangsbereich zweier Phasen Zwischenwerte annimmt. Entsprechend erfüllen alle Phasenvariablen

die Summationsbedingung

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega, t > 0: \quad \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1. \quad (3.7)$$

Die singuläre Grenzfläche kann im Kontext der Phasenfeldmethode als Iso-Oberfläche der Phasenvariable mit dem Wert $1/2$ angesehen werden, d. h. es gilt

$$\Gamma_{\alpha\beta}(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega: \quad \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1/2 \wedge \varphi_\beta(\mathbf{x}, t) = 1/2\} \quad (3.8)$$

im binären Übergang¹. Der *diffuse Übergangsbereich* Γ^d zwischen zwei Phasen ist durch

$$\Gamma_{\alpha\beta}^d(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega: \quad \min_{\mathbf{x}' \in \Gamma(t)} (\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|) < \delta_d/2\} \quad (3.9)$$

gegeben, wobei δ_d dessen Breite bezeichnet. Die Koordinate η in Richtung der Oberflächennormale ergibt sich als

$$\eta(\mathbf{x}, t) = \min_{\mathbf{x}' \in \Gamma(t)} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\| \quad (3.10)$$

und entspricht einer vorzeichenbehafteten Distanzfunktion zur Grenzfläche. Das Gebiet, in dem eine Phase α vorliegt ist

$$\Omega_{\varphi_\alpha > 0}(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega: \quad \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) > 0\}. \quad (3.11)$$

Damit kann der diffuse Übergang auch als $\Gamma_{\alpha\beta}^d = \Omega_{\varphi_\alpha > 0} \cup \Omega_{\varphi_\beta > 0}$ definiert werden. Im Folgenden wird das Gebiet $\Omega_{\varphi_\alpha=1} \subset \Omega_{\varphi_\alpha > 0}$ mit

$$\Omega_{\varphi_\alpha=1}(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega: \quad \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1\} \quad (3.12)$$

als *inneres Gebiet* der Phase α bezeichnet. Alle Punkte, die nicht Teil eines diffusen Übergangsbereichs sind, gehören somit zum inneren Bereich einer der Phasen.

Es greift zu kurz, die Phasenfeldmethode als reine Regularisierung des Kontinuumsmodells mit singulären Oberflächen anzusehen. Tatsächlich lässt sich eine Längenskala finden, welche hinreichend groß ist, um die Verwendung eines Kontinuumsmodells zu rechtfertigen und auf der ein diffuser Übergang vorliegt. Dies ist selbst dann der Fall, wenn es sich um das Grenzgebiet der Bereiche zweier makroskopisch nicht mischbarer Phasen handelt. Diese Beobachtung geht bereits auf van der Waals [168] zurück. Allerdings ist die Größenordnung der Längenskalen, auf denen der diffuse Übergang zweier Phasen stattfindet, derart klein, dass der tatsächliche Übergangsbereich bei makroskopischen Betrachtungen praktisch kaum aufgelöst werden kann. Diese physikalische Dicke eines Übergangs zweier Phasen liegt typischerweise im Bereich von Nanometern [146]. In der Praxis ist die Grenzbereichsbreite δ_d im Rahmen einer makroskopischen Phasenfeldmodellierung von der Größenordnung der räumlichen Diskretisierungsschrittweite zu wählen, da der Übergangsbereich numerisch hinreichend aufgelöst werden muss. Gleichzeitig sollte dieser möglichst klein im Verhältnis

¹Liegen in einem Gebiet mehr als zwei Phasen vor, kann eine Normierung gemäß der Formulierung $\Gamma_{\alpha\beta} = \{\mathbf{x} \in \Omega: \quad \varphi_\alpha/(\varphi_\alpha + \varphi_\beta) = 1/2 \wedge \varphi_\alpha + \varphi_\beta \geq 1/2\}$ für die Grenzfläche verwendet werden (Siehe z. B. [126, Anhang D].)

zum Gesamtvolumen der einzelnen Phasen sein, da eine hohe Grenzbereichsbreite die Genauigkeit des Modells beeinträchtigt. Oft ist die Breite des physikalischen Übergangs um Größenordnungen kleiner als die Diskretisierungsschrittweite, sodass Modelle mit singulärer Grenzfläche die Realität in diesen Fällen genauer abbilden als ein künstlich aufgeweiteter Übergang. Die Phasenfeldmethode stellt in dieser Hinsicht somit keine Approximation an eine Formulierung mittels singulärer Grenzflächen dar, sondern vielmehr eine Approximation durch die Aufweitung des tatsächlichen Übergangsbereichs auf die Größenordnung der Diskretisierungsschrittweite. Es lässt sich zeigen, dass geeignete Phasenfeldmodelle mit $\delta_d \rightarrow 0$ wiederum asymptotisch in die Formulierung mit singulärer Grenzfläche übergehen müssen [43, 113], sodass beide Möglichkeiten der Modellierung konsistent sind.

3.1 Phasenfeld im thermodynamische Gleichgewicht

3.1.1 Energiefunktional und Gleichgewichtsprofil

Im Rahmen der Phasenfeldmethode ist das Ziel die Bestimmung des Phasenfeldes, also des Tupels der Phasenvariablen, in Abhängigkeit der Zeit. Im Gleichgewicht resultiert das Phasenfeld aus der Stationarität eines *Ljapunow-Funktional*s. Hierzu kann z. B. die Gesamtentropie des Systems herangezogen werden, deren Funktional zu maximieren ist. Eine Alternative stellt die Verwendung der freien Energie dar, welche sich aus der *Legendre-Transformation* der inneren Energie als $f = e + Ts$ ergibt, wobei f die freie Energiedichte bezeichnet. Das thermodynamische Gleichgewicht entspricht einem Minimum der freien Energie. Die nachfolgenden Betrachtungen gehen von einer Formulierung bezüglich der freien Energie aus. Zunächst wird die Phasenfeldmethode für den zweiphasigen Sonderfall angegeben. Hierbei findet die abkürzende Notation $\varphi := \varphi_1$ Verwendung. Die Phasenvariable der zweiten Phase ergibt sich aufgrund der Summationsbedingung (3.7) zu $\varphi_2 = 1 - \varphi$. Für diesen Spezialfall ist das zu minimierende freie Energiefunktional durch den Ansatz

$$\mathcal{F}(\varphi, \nabla\varphi) = \int_{\Omega} f^{\text{grad}}(\varphi, \nabla\varphi) + f^{\text{pot}}(\varphi) + f^i(\varphi) \, dV + \int_{\partial\Omega} f^o(\varphi) \, dO \quad (3.13)$$

gegeben. Für die Minimierung der freien Energie ist das notwendige Kriterium $\delta\mathcal{F} = 0$ und damit

$$\begin{aligned} \forall \delta\varphi: \quad \delta\mathcal{F} = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial(f^{\text{grad}} + f^{\text{pot}} + f^i)}{\partial\varphi} - \nabla \cdot \frac{\partial f^{\text{grad}}}{\partial \nabla\varphi} \right) \delta\varphi \, dV \\ + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial f^o}{\partial\varphi} + \frac{\partial f^{\text{grad}}}{\partial \nabla\varphi} \cdot \mathbf{n} \right) \delta\varphi \, dO = 0. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Sind auf einem Teil $\partial\Omega_D \subset \partial\Omega$ des Randes *Dirichlet-Randbedingungen* der Form $\varphi = \varphi^{\text{rb}}$ vorgegeben, gilt dort $\delta\varphi = 0$. Aus dem *Fundamentallemma der Variations-*

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

rechnung ergibt sich im Gleichgewicht damit das Randwertproblem

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega: \quad 0 = \frac{\partial(f^{\text{grad}} + f^{\text{pot}} + f^i)}{\partial\varphi} - \nabla \cdot \frac{\partial f^{\text{grad}}}{\partial \nabla\varphi} \quad (3.15a)$$

$$\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{\text{D}}: \quad 0 = \frac{\partial f^o}{\partial\varphi} + \frac{\partial f^{\text{grad}}}{\partial \nabla\varphi} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.15b)$$

$$\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_{\text{D}}: \quad 0 = \varphi - \varphi^{\text{rb}} \quad (3.15c)$$

Werden zunächst nur Oberflächenterme aufgrund des Phasenfeldes berücksichtigt, d. h. $f^i = f^o = 0$, lässt sich das Funktional (3.13) durch

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} f^{\text{grad}} + f^{\text{pot}} \, dV = \int_{\Omega} \frac{a_1}{2} \nabla\varphi \cdot \nabla\varphi + a_2 \psi(\varphi) \, dV \quad (3.16)$$

modellieren. Hierbei ist ψ ein Potential, das als symmetrische Funktion mit Minima bei $\varphi = 0$ und $\varphi = 1$ sowie einem lokalen Maximum bei $\varphi = 1/2$ gewählt wird. Die Koeffizienten a_1 und a_2 hängen von der Wahl des Potentials ab. Die Breite des diffusen Übergangs ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(\sqrt{a_1/a_2})$ und die Oberflächenspannung der Grenzfläche von $\mathcal{O}(\sqrt{a_1 a_2})$. Das stationäre Gleichgewicht stellt sich ein, wenn das Funktional minimal wird. Gemäß Gleichung (3.15a) ergibt sich mit dem *chemischen Potential*

$$\Phi = \frac{\partial(f^{\text{grad}} + f^{\text{pot}} + f^i)}{\partial\varphi} - \nabla \cdot \frac{\partial f^{\text{grad}}}{\partial \nabla\varphi} \quad (3.17)$$

für das Gleichgewicht in diesem Spezialfall

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega: \quad \Phi = a_2 \partial_{\varphi} \psi - a_1 \nabla^2 \varphi = 0. \quad (3.18)$$

Das chemischen Potential entspricht einer Abweichung der freien Energie von ihrem Minimum und verschwindet im Gleichgewicht. Bei dem Term $a_1 \nabla^2 \varphi$ handelt es sich um eine Diffusion, die auf das Abflachen der Gradienten in φ und eine Minimierung der damit verbundenen Energie zielt. Sie tendiert dazu, den Übergangsbereich aufzuweiten, wohingegen das Potential ψ eine Energiebarriere für die Aufweitung darstellt. Das Profil des Phasenfeldes, welches sich im diffusen Übergangsbereich für das Gleichgewicht ergibt, heißt *Gleichgewichtsprofil* und hängt von der Wahl des Potentials ψ ab. Es zeigt sich, dass nichttriviale Lösungen von $\Phi = 0$ nur für Probleme mit ungekrümmten Oberflächen existieren. Für die Gleichung $\nabla^2 \Phi = 0$ existiert jedoch stets eine Lösung und somit ein Gleichgewicht im Mehrdimensionalen². In diesem Fall entspricht das Gleichgewichtsprofil in Abhängigkeit der vorzeichenbehafteten Distanzfunktion zur Oberfläche gerade demjenigen aus dem eindimensionalen Fall [41]. Die Koeffizienten a_1 und a_2 gehen dabei als Parameter in das Gleichgewichtsprofil mit ein. Sei σ die Oberflächenspannung und ϵ ein Parameter, der die Grenzbereichsbreite bestimmt, dann lassen sich die Koeffizienten durch

$$\begin{aligned} a_1 &= k_1 \sigma \epsilon \\ a_2 &= \frac{k_2 \sigma}{\epsilon} \end{aligned}$$

²Dies entspricht einem Gleichgewicht der Cahn-Hilliard-Gleichung, während für einen Allen-Cahn-Ansatz ohne Modifikationen im Mehrdimensionalen stets das Schrumpfen einer Phase auftritt und das Gleichgewicht für homogene Phasenfelder mit $\varphi = 0$ oder $\varphi = 1$ erreicht wird.

3.1 Phasenfeld im thermodynamische Gleichgewicht

mit den konstanten Faktoren k_1 und k_2 angeben. Es finden sich in der Literatur verschiedene Werte für diese Faktoren. Dies ist auf unterschiedliche Definitionen des Parameters ϵ zurückzuführen, was lediglich zu einem anderen Proportionalitätsfaktor zwischen ϵ und tatsächlicher Breite δ_d des Übergangsbereichs führt. Für diese drei Parameter existieren zwei Zwangsbedingungen, sodass einer frei gewählt werden kann. Die erste Restriktion folgt aus der Forderung, dass für das Gleichgewichtsprofil $\Phi = 0$ gelten muss. Dies führt zu

$$\frac{a_1}{2} \nabla \varphi \cdot \nabla \varphi = a_2 \psi, \quad (3.19)$$

woraus eine Relation zwischen beiden Konstanten k_1 und k_2 resultiert [75]. Die zweite Restriktion folgt aus einer Oberflächenenergiebetrachtung. Es wird gefordert, dass sich die Oberflächenspannung aus den Gradienten des Gleichgewichtsphasenfeldes durch das Integral

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} a_1 \nabla \varphi \cdot \nabla \varphi \, d\eta \quad (3.20)$$

in Grenzflächennormalenrichtung η ergibt (siehe Gleichung (3.10)). Dies liefert entweder für ein bekanntes Gleichgewichtsprofil eine Bestimmungsgleichung für k_1 oder bei vorgegebenem k_1 die Festlegung des Skalierungsfaktors von ϵ im Ansatz des Gleichgewichtsprofils. Für das Gleichgewicht gilt mit den Gleichungen (3.20) und (3.19)

$$\int_{\Omega} \frac{a_1}{2} \nabla \varphi \cdot \nabla \varphi \, dV = \int_{\Omega} a_2 \psi \, dV = \frac{\sigma}{2} \int_{\Gamma} dO, \quad (3.21)$$

sodass das Funktional (3.16) die Oberflächenenergie richtig abbildet. Der Term

$$\frac{k_1 \epsilon}{2} \nabla \varphi \cdot \nabla \varphi + \frac{k_2}{\epsilon} \psi$$

ergibt sich nach der Integration in Oberflächennormalrichtung zu 1 und kann somit als diffuse Approximation der Dirac-Distribution (siehe Gleichung (3.5)) angesehen werden, was zur Verteilung der Oberflächenenergiegedichte σ auf den diffusen Übergang führt. Der Term lässt sich somit ebenfalls als Gewichtsfunktion $w = g_i(\varphi) \|\nabla \varphi\|$ im Sinne von Abschnitt 3.4 interpretieren. Im Folgenden werden zwei gängige Potentiale vorgestellt und die Festlegung der Konstanten k_1 und k_2 ausgeführt.

3.1.2 Gleichgewichtslösung für gängige Potentiale

Es wird zunächst ein quartisches Potential betrachtet, welches durch das Polynom 4. Grades

$$\psi = \varphi^2(1 - \varphi)^2 \quad (3.22)$$

gegeben ist, was auf

$$\partial_{\varphi} \psi = \varphi(4\varphi^2 - 6\varphi + 2) = 2\varphi(1 - \varphi)(1 - 2\varphi) \quad (3.23)$$

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

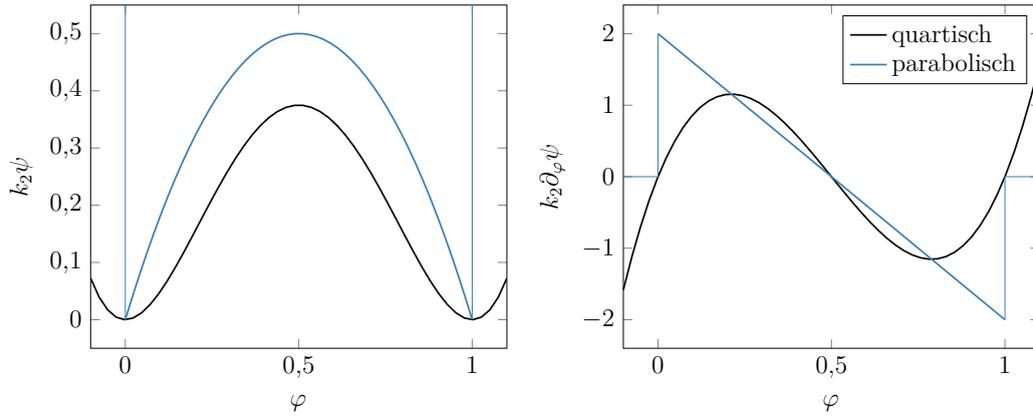


Abbildung 3.3: Gängige Potentiale der freien Energiedichte im Kontext der Phasenfeldmethode und deren Ableitung bezüglich φ .

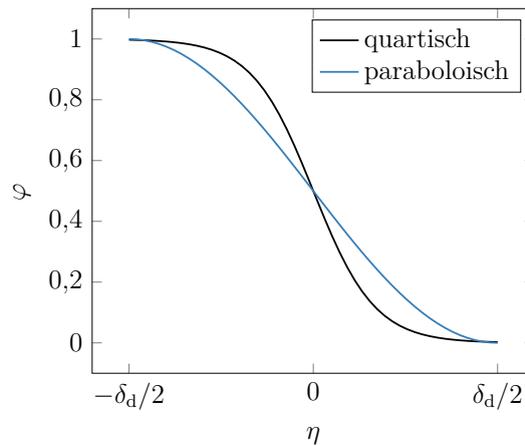


Abbildung 3.4: Gleichgewichtsprofil des Phasenfeldes für das quartische und parabolische Potential.

führt. In der englischsprachigen Literatur ist hierfür die Bezeichnung Well-Potential gängig. Der Ansatz des Gleichgewichtsprofils

$$\varphi(\eta) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(k \frac{\eta}{\epsilon} \right) \right] \quad (3.24)$$

führt zu einer stationären Lösung, wobei η die vorzeichenbehaftete Distanzfunktion zur Oberfläche Γ gemäß Gleichung (3.10) darstellt. Dabei ist k ein Skalierungsfaktor, der sich entweder aus dem gegebenen Wert von k_1 bzw. k_2 ergibt oder beliebig gewählt werden kann und somit k_1 und k_2 festlegt. Aus Gleichung (3.20) folgt mit diesem Ansatz des Gleichgewichtsprofils

$$k_1 = \frac{3}{k} \quad \text{bzw.} \quad a_1 = \frac{3}{k} \sigma \epsilon. \quad (3.25)$$

Für den zweiten Koeffizienten impliziert Gleichung (3.19)

$$k_2 = 2k^2 k_1. \quad (3.26)$$

Die Breite des Übergangsbereichs ist ein Modellparameter, der vorgegeben werden muss und allein durch das Verhältnis ϵ/k bestimmt wird. Es ist daher möglich, den

3.1 Phasenfeld im thermodynamische Gleichgewicht

Skalierungsfaktor beliebig zu wählen und die Breite des Übergangsbereichs lediglich durch den Parameter ϵ einzustellen. Durch die Festlegung des Skalierungsfaktors ergeben sich die Koeffizienten in der Evolutionsgleichung entsprechend der Korrelation (3.25) und (3.26). Alternativ ist entweder k_1 oder k_2 vorgegeben, woraus der Skalierungsfaktor

$$k = \sqrt{\frac{k_2}{2k_1}} \quad \text{mit} \quad k_{2(1)} = \frac{18}{k_{1(2)}}$$

resultiert. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird im Folgenden die Wahl $k = 3/2$ getroffen, was zu den Werten $k_1 = 2$ und $k_2 = 9$ führt. Damit ergibt sich

$$\Phi = \frac{9\sigma}{\epsilon} \varphi(4\varphi^2 - 6\varphi + 2) - 2\sigma\epsilon \nabla^2 \varphi. \quad (3.27)$$

Es ist anzumerken, dass das Gleichgewichtsprofil im Falle des quartischen Potentials einen asymptotischen Übergang zwischen $\varphi = 0$ und $\varphi = 1$ vollzieht. Es lässt sich hier somit keine exakte Breite δ_d des Übergangsbereichs definieren und die Integration in Gleichung (3.20) beschränkt sich dadurch nicht auf ein finites Intervall. Es kann allerdings zweckmäßig sein, das Profil an einer gewissen Stelle abzuschneiden. Seien φ^+ und φ^- der obere und untere Wert, an dem abgeschnitten wird, dann ergibt sich die Breite

$$\delta_d = \frac{\epsilon}{k} \left[\operatorname{arctanh}(2\varphi^+ - 1) - \operatorname{arctanh}(2\varphi^- - 1) \right].$$

Die richtige Abbildung der Oberflächenenergie erfordert in dem Fall die Anpassung der Koeffizienten in der Evolutionsgleichung. Gleichung (3.20) ergibt sich mit der Substitution $\eta(\varphi) = \epsilon/k \operatorname{arctanh}(2\varphi - 1)$ zu

$$1 = k_1 \int_{\varphi^-}^{\varphi^+} [(d_\eta \varphi \circ \eta)(\varphi)]^2 d_\varphi \eta d\varphi,$$

was auf

$$(k_1)^{-1} = -k \left[\frac{2}{3} \left((\varphi^+)^3 - (\varphi^-)^3 \right) - \left((\varphi^+)^2 - (\varphi^-)^2 \right) \right]$$

führt. Ohne Abschneiden sind $\varphi^- = 0$ und $\varphi^+ = 1$. Damit folgt wiederum Gleichung (3.25) und $\delta_d \rightarrow \infty$. Ein weiteres gängiges Potential ist das parabolische Potential (englisch: Obstacle Potential) der Form

$$\psi = \begin{cases} \varphi(1 - \varphi) & -\delta_d/2 < \eta < \delta_d/2 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.28)$$

Es handelt sich um eine quadratische Funktion mit unendlicher Potentialbarriere außerhalb des finiten Übergangsbereichs $-\delta_d/2 < \eta < \delta_d/2$, wobei δ_d dessen Breite ist. Dieses Potential führt zum Gleichgewichtsprofil

$$\varphi(\eta) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 - \sin\left(\frac{\pi\eta}{\delta_d}\right) \right] & -\delta_d/2 < \eta < \delta_d/2 \\ 0 & \eta > \delta_d/2 \\ 1 & \eta < -\delta_d/2 \end{cases}. \quad (3.29)$$

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

Aus Gleichung (3.20) und dem Ansatz $a_1 = \tilde{k}_1 \sigma \delta_d$ ergibt sich mit diesem Gleichgewichtsprofil

$$\tilde{k}_1 = \frac{8}{\pi^2} \quad (3.30)$$

und aus Gleichung (3.19)

$$\tilde{k}_2 = \frac{\pi^2 \tilde{k}_1}{2} = 4. \quad (3.31)$$

Das chemische Potential folgt daraus als

$$\Phi = \frac{4\sigma}{\delta_d}(1 - 2\varphi) - \frac{8\sigma\delta_d}{\pi^2} \nabla^2 \varphi. \quad (3.32)$$

Gängig ist in diesem Fall auch die Darstellung mit dem Parameter ϵ , um eine Vergleichbarkeit mit dem quartischen Potential zu erreichen. Dies resultiert aus der Substitution

$$\epsilon = \frac{4}{\pi^2} \delta_d \quad (3.33)$$

und den Konstanten $k_1 = 2$ bzw. $k_2 = 16/\pi^2$. Es folgt somit

$$\Phi = \frac{16\sigma}{\pi^2 \epsilon}(1 - 2\varphi) - 2\sigma\epsilon \nabla^2 \varphi. \quad (3.34)$$

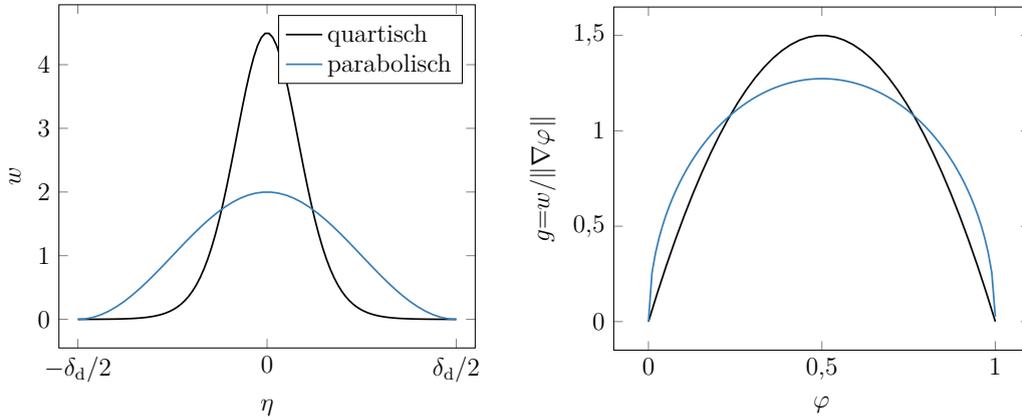


Abbildung 3.5: Diffuse Verteilung der Oberflächenspannung in Grenzflächennormalenrichtung durch den Funktionalansatz (3.16) für das quartische und parabolische Potential. Links: räumliche Verteilung durch $w = k_2\psi/\epsilon + k_1\epsilon\|\nabla\varphi\|^2/2$. Rechts: Variablentransformation auf φ .

Das quartische und das parabolische Potential sowie deren Ableitung nach der Phasenvariablen φ sind in Abbildung 3.3 dargestellt. In beiden Fällen liegen Minima bei $\varphi = 0$ und $\varphi = 1$ vor, sodass eine Änderung der Phasenvariablen hin zu diesen Werten energetisch begünstigt wird. Aus den Potentialtermen ergibt sich folglich ein Beitrag, der eine Schmälerung des diffusen Übergangs in Richtung der Heaviside-Funktion und damit einer singulären Grenzfläche bewirkt. Die Potentiale unterscheiden sich indes vor allem in ihrem Verhalten außerhalb des Intervalls $\mathcal{I} = [0, 1]$. Für das quartische

3.1 Phasenfeld im thermodynamische Gleichgewicht

Potential ist das Verlassen dieses Intervalls grundsätzlich nicht ausgeschlossen, es wird allerdings energetisch bestraft, sodass im Falle eines Überschießens eine Rückstellung hin zu Werten $\varphi \in \mathcal{I}$ erfolgt. Da die Ableitung $\partial_\varphi \psi$ in der nahen Umgebung der Stellen 0 und 1 zu Null tendiert, resultiert der asymptotische Übergang des Gleichgewichtsprofils für das quartische Potential. Im Gegensatz dazu nimmt die Ableitung für das parabolische Potential dort gerade ihre Extrema an, was den ein finiten Übergangsbereich zur Folge hat. Außerhalb des Intervalls \mathcal{I} ergibt sich hierfür eine unendliche freie Energie, sodass das Verlassen dieses Intervalls unbedingt ausgeschlossen ist. In der Praxis führt dies zu einer zusätzlichen Zwangsbedingung

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega, t: \quad 0 \leq \varphi(\mathbf{x}, t) \leq 1, \quad (3.35)$$

die entweder durch Lagrange-Multiplikatoren oder einen geeigneten Lösungsalgorithmus sichergestellt wird, z. B. durch die Projektion mittels Gibbs-Simplex Verfahren [64]. Um die Gleichgewichtsprofile des parabolischen und quartischen Potentials zu vergleichen, wird bei letzterem ein Abschneiden des Profils bei $\eta = \pm 3\epsilon/k$ verwendet, was zur Breite $\delta_d = 6\epsilon/k$ führt. Dies korrespondiert zu

$$\varphi^\pm = \frac{1}{2} [1 \pm \tanh(3)] \quad (3.36)$$

und somit $\varphi^- \approx 0,00247$ bzw. $\varphi^+ \approx 0,99753$. Damit ergibt sich das Gleichgewichtsprofil

$$\varphi(\eta) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{6\eta}{\delta_d}\right) \right]. \quad (3.37)$$

Durch das Abschneiden wird die Oberflächenenergie um den Faktor $3,7 \cdot 10^{-5}$ gemindert, was einen sehr kleinen Fehler einführt. Durch Anpassung der Koeffizienten lässt sich die Abweichung korrigieren, was für $k = 3/2$ und $\epsilon = \delta_d/4$ zu Werten für k_1 und k_2 von 2,000 07 bzw. 9,000 33 führt. Das Gleichgewichtsprofil(3.37) ist neben jenem des parabolischen Potentials in Abbildung 3.4 aufgetragen. Es zeigt sich, dass das tanh-Profil stärker zur Grenzfläche Γ hin gestaucht ist und somit einen schärferen Übergang als das Sinusprofil vollführt.

Abbildung 3.5 zeigt die Verteilung der Oberflächenenergiedichte σ für beide Potentiale im Gleichgewicht. Das quartische Potential konzentriert dabei die Gewichtung stärker in die Umgebung der Grenzfläche Γ als dies beim parabolischen der Fall ist. Die Anteile der Gradientenenergie und des Potentials ψ an der Gewichtung w ist im Gleichgewicht identisch. Beide tragen jeweils zur Hälfte zum Wert der Gewichtsfunktion bei. Das quartische und parabolische Potential führen bezüglich σ zu natürlichen Gewichtsfunktionen, die sich auch in der Auflistung im Anhang B.3 wiederfinden. Dies sind $g_i = \frac{8}{\pi} \sqrt{\varphi(1-\varphi)}$ für den parabolischen bzw. $g_i = 6\varphi(1-\varphi)$ für den quartischen Fall. Soll das Energiefunktional um volumetrische Energiedichten ergänzt werden, liegt es nahe, die Übergänge entsprechend passend zu wählen. Eine konsistente Kombination ergibt sich, sofern die Sprünge in der volumetrischen Energiedichte derart approximiert werden, dass deren Gradient zur selben Gewichtungsfunktion führt, wie sie für die Oberflächenspannung vorliegt (Details siehe Abschnitt 3.2.2).

3.2 Dynamik der Phasenfeldevolution

3.2.1 Phasenfeldevolutionsgleichungen

Für dynamische Probleme lassen sich Evolutionsgleichungen des Phasenfelds der Form

$$\dot{\varphi} = \mathcal{M} \Phi \quad (3.38)$$

angeben, wobei sich der Operator \mathcal{M} je nach Natur der betrachteten Phasenvariable unterscheidet. Repräsentiert φ eine Erhaltungsgröße, z. B. die Konzentration oder die Volumenfraktion von Phasen, zwischen denen keine Umwandlung stattfindet, ergibt sich mit $\mathcal{M}^{\text{CH}} = \nabla \cdot \kappa \nabla$ die *Cahn-Hilliard-Gleichung* [22]

$$\dot{\varphi} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \Phi), \quad (3.39)$$

wobei κ eine Mobilität ist. Für eine räumlich konstante Mobilität κ vereinfacht sich die Cahn-Hilliard-Gleichung zu

$$\dot{\varphi} = \kappa \nabla^2 (a_2 \partial_\varphi \psi - a_1 \nabla^2 \varphi). \quad (3.40)$$

Ist die Phasenvariable φ keine Erhaltungsgröße, wird deren Evolution durch die *Allen-Cahn-Gleichung* [6]

$$\dot{\varphi} = \frac{M}{\epsilon} (a_1 \nabla^2 \varphi - a_2 \partial_\varphi \psi) \quad (3.41)$$

beschrieben, wobei $\mathcal{M}^{\text{AC}} = -M/\epsilon$ die entsprechende Mobilität ist. Aus beiden Gleichungen resultiert das identische Gleichgewichtsprofil der Phasenvariable, welches nur von der Wahl des Potentials ψ abhängt. Da die materielle Zeitableitung der Phasenvariable im Allgemeinen nicht verschwindet, kann sich die Phase eines materiellen Punktes grundsätzlich ändern. Dies geschieht aufgrund molekularer Diffusion, wobei sich die diffusionsbedingte Bewegung der Moleküle statistisch herausmittelt und somit zu keiner makroskopischen Geschwindigkeit führt. Diese Diffusionsprozesse bewirken zweierlei. Zum einen relaxiert die Phasenvariable zu ihrem Gleichgewichtsprofil, wenn dieses z. B. durch das Geschwindigkeitsfeld verzerrt wird. Zum zweiten führen Krümmungen von Grenzflächen im zwei- und dreidimensionalen Fall zu einem Krümmungsterm im Laplace-Operator, der eine Oberflächenminimierung bewirkt. Diese Eigenschaft ist in vielen Fällen eine durchaus erwünschte Dynamik. So können Prozesse, bei denen die Minimierung von Grenzflächen relevant sind, ohne ein Geschwindigkeitsfeld und somit die Lösung der Impulsbilanz abgebildet werden. Es existieren jedoch auch Fälle, in denen dies eine unerwünschte Dynamik darstellt. Wenn beispielsweise ein Festkörper innerhalb eines Fluids zu beschreiben ist, sollte dessen Formänderung ausschließlich aufgrund mechanischer Deformation und nicht durch Diffusion erfolgen. Auf derlei Problemstellungen wird in Abschnitt 3.5 näher eingegangen.

3.2.2 Modellierung von Phasenumwandlungsprozessen

Die bisherige Betrachtung wurde für zwei Phasen im Gleichgewicht vorgenommen, d. h. die freie Energiedichten sind innerhalb beider Phasen identisch und entfallen dadurch

3.2 Dynamik der Phasenfeldevolution

bei der Variation, sodass sie ohne Beschränkung der Allgemeinheit zu Null gesetzt werden können. Befinden sich beide Phasen nicht im Gleichgewicht, ergeben sich jeweils unterschiedliche Energiedichten. Die Dynamik der resultierenden Phasenumwandlung wird von der Allen-Cahn-Gleichung beschrieben, wobei die unterschiedlichen Energiedichten als treibende Potentialdifferenz für Phasenumwandlungsprozesse wirken. Die Modellierung durch einen Cahn-Hilliard-Ansatz ist hingegen nicht sinnvoll, da die Phasenvariable durch die Umwandlung keine Erhaltungsgröße sein kann. Das Energiefunktional außerhalb des Gleichgewichts ist durch

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} \frac{a_1}{2} \nabla \varphi \cdot \nabla \varphi + a_2 \psi(\varphi) + f^i(\varphi) \, dV \quad (3.42)$$

gegeben, wobei die freie Energiedichte f^i von der Phasenvariable abhängt. Darüber hinaus können noch weitere Abhängigkeiten z. B. von der Temperatur vorliegen. Es ist zu beachten, dass f^i eine Volumenenergiedichte repräsentiert, während die anderen beiden Terme Oberflächenenergiedichten abbilden, die auf den diffusen Übergangsbereich „aufgeweitet“ werden und somit außerhalb von Γ^d verschwinden. Die nachfolgende Betrachtung beschränkt sich auf phasenweit konstante Energiedichten, was im zweiphasigen Fall zu $f^i(\varphi = 0) = f^0$ bzw. $f^i(\varphi = 1) = f^1$ führt. Während bei scharfen Grenzflächen ein Sprung der Energiedichte vorliegt, muss dieser im Kontext der Phasenfeldmethode durch eine geeignete Interpolation approximiert werden. Dies motiviert den allgemeinen Ansatz

$$f^i(\varphi) = h(\varphi) f^1 + [1 - h(\varphi)] f^0, \quad (3.43)$$

wobei die Interpolationsfunktion h die Eigenschaften $h(0) = 0$ und $h(1) = 1$ sowie

$$\int_0^1 \partial_{\varphi} h(\varphi) \, d\varphi = 1 \quad (3.44)$$

besitzt [64]. Eine mögliche Interpolation stellt die Verwendung der Phasenvariable direkt dar, was zu $h(\varphi) = \varphi$ führt. Alternativ können geeignete, zum Punkt $(1/2, 1/2)$ symmetrische Funktionen in φ verwendet werden. Hierzu eignen sich z. B. Polynome wie $h(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi)$, wobei ein höherer Polynomgrad in φ entsprechend steilere Gradienten in der Energiedichte f zur Folge hat (vgl. Abbildung 3.6). Im Abschnitt 3.4 wird detailliert auf verschiedene Möglichkeiten der Interpolation eingegangen. Die Berücksichtigung der Energiedichte (3.43) schlägt sich ebenfalls in der Evolutionsgleichung durch einen weiteren Term nieder. Mit dem Energiefunktional (3.42) ergibt sich die Allen-Cahn-Gleichung zu

$$\dot{\varphi} = \frac{M}{\epsilon} \left[a_1 \nabla^2 \varphi - a_2 \partial_{\varphi} \psi - (f^1 - f^0) \partial_{\varphi} h \right]. \quad (3.45)$$

Der Term $(f^1 - f^0) \partial_{\varphi} h$ erzeugt eine translative Verschiebung des Übergangsbereichs. Für $f^1 < f^0$ ergibt sich ein Wachstum der ersten Phase auf Kosten der zweiten Phase, da die Energie der ersten geringer ist. Damit unterscheidet sich dieser Term vom Verhalten des Diffusions- und Potentialterms, welche die Position der Oberfläche erhalten und lediglich eine Aufweitung bzw. Schrumpfung der Breite δ_d zur Folge haben. Anschaulich ist dies in der Punktsymmetrie des Terms der Energiedichte f begründet, der eine Verschiebung energetisch begünstigt, während der Potentialterm ψ achsensymmetrisch ist und somit lediglich das Überschreiten der Potentialminima bestraft (vgl. Abbildung 3.3 gegenüber Abbildung 3.6).

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

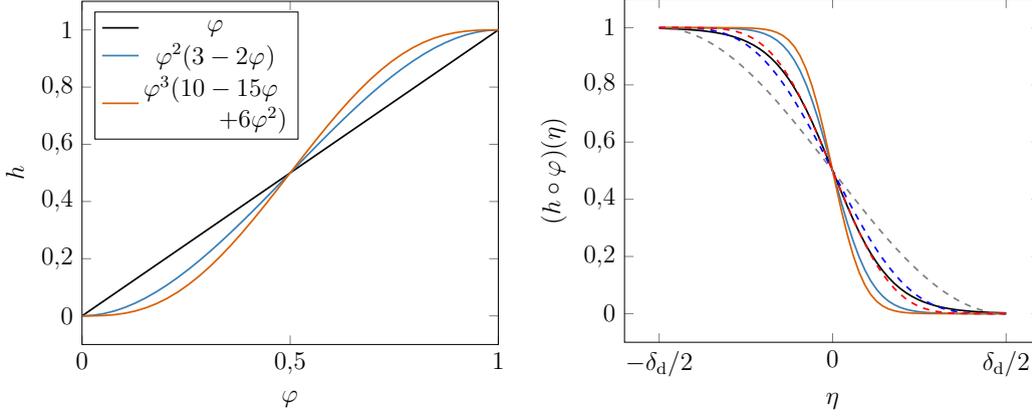


Abbildung 3.6: Interpolation der phaseninherenten Energiedichten mit verschiedenen Funktionen h . Links: Parametrierung bezüglich φ . Rechts: Parametrierung bezüglich η für das sin-Profil (gestrichelt) und tanh-Profil (durchgezogen).

Die Grenzflächenbewegung, welche durch die Potentialdifferenz ($f^1 - f^0$) hervorgerufen wird, erfolgt mit einer Grenzflächengeschwindigkeit v^o in Normalenrichtung. Dabei kann eine Analogie zu konvektivem Transport hergestellt werden, wo sich bei in der Oberflächennormalenkoordinate η konstanter Geschwindigkeit ebenfalls eine rein translative Verschiebung ergibt, während das Profil des Phasenfeldprofils unverändert bleibt. Der entsprechende Konvektionsterm ist

$$v^o \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi = -v^o \|\nabla \varphi\|,$$

wobei sich der Normalenvektor durch $\mathbf{n} = -\nabla \varphi / \|\nabla \varphi\|$ ergibt. Wird eine passende Interpolationsfunktion h so gewählt, dass $\partial_\varphi h \propto \|\nabla \varphi\|$ gilt, lässt sich die Oberflächengeschwindigkeit durch Phasenumwandlung bestimmen. Es lässt sich zeigen, dass für Gleichgewichtsprofile des quartischen und parabolischen Potentials $\|\nabla \varphi\| = 2k/\epsilon \varphi(1-\varphi)$ bzw. $\|\nabla \varphi\| = \pi/\delta_d \sqrt{\varphi(1-\varphi)}$ gilt (siehe Anhang B.3). Aufgrund der Zwangsbedingung aus Gleichung (3.44) ergeben sich die entsprechend konsistenten Interpolationen aus $\partial_\varphi h = 6\varphi(1-\varphi)$ und $\partial_\varphi h = 8/\pi \sqrt{\varphi(1-\varphi)}$. Aus einem Koeffizientenvergleich folgt

$$\partial_\varphi h = 3 \frac{\epsilon}{k} \|\nabla \varphi\|, \quad v^o = -\frac{3}{k} M(f^1 - f^0)$$

für das quartische und

$$\partial_\varphi h = \frac{8\delta_d}{\pi^2} \|\nabla \varphi\| = 2\epsilon \|\nabla \varphi\|, \quad v^o = -2M(f^1 - f^0)$$

für das parabolische Potential. Die korrespondierenden Interpolationsfunktionen h finden sich in Abschnitt 3.4.2, Tabelle 3.1. Sie können als diffuse Approximation der Heaviside-Funktion angesehen werden, während $\partial_\varphi h \|\nabla \varphi\|$ die korrespondierende Näherung der Dirac-Distribution darstellen. Es lässt sich einfach zeigen, dass für diese Wahl der Interpolationsfunktion unter Annahme des Gleichgewichtsprofils $\partial_\varphi h \|\nabla \varphi\| = k_1 \epsilon \|\nabla \varphi\|^2 = 2k_2 \psi / \epsilon$ gilt. Somit sind diese konsistent zur räumlichen Verteilung der Oberflächenspannung im diffusen Übergang. Passt hingegen die Wahl der Interpolationsfunktion h nicht zum Potential ψ , ergibt sich eine Inkonsistenz

3.3 Grundzüge der Erweiterung auf ein Multiphasenmodell

zwischen der Approximation von Heaviside-Funktion und Dirac-Distribution. Auch die Analogie zum konvektiven Transport für die Grenzflächenbewegung lässt sich dann nicht ziehen, da das Verhältnis von $\partial_\varphi h$ und $\|\nabla\varphi\|$ nicht konstant ist.

3.3 Grundzüge der Erweiterung auf ein Multiphasenmodell

Das bisher betrachtete Phasenfeldmodell für den zweiphasigen Sonderfall lässt sich auf eine beliebige Anzahl von Phasen erweitern, wobei sich die Erkenntnisse aus dem zweiphasigen Fall weitgehend übertragen lassen. Das freie Energiefunktional aus Gleichung (3.16) lässt sich auf

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} \sum_{\beta=2}^{N_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{\beta-1} (f_{\alpha\beta}^{\text{grad}} + f_{\alpha\beta}^{\text{pot}}) + \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} f^\alpha h(\varphi_\alpha) \, dV \quad (3.46)$$

verallgemeinern. Für den Potentialbeitrag folgt $f_{\alpha\beta}^{\text{pot}} = a_{2,\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta}$, wobei sich das quartische Potential auf

$$\psi_{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta) = \varphi_\alpha^2 \varphi_\beta^2 \quad (3.47)$$

und das parabolische Potential auf

$$\psi_{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta) = \begin{cases} \varphi_\alpha \varphi_\beta & \mathbf{x} \in \Gamma_{\alpha\beta}^{\text{d}} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.48)$$

verallgemeinern lassen. Die Gradientenenergiedichte $f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}$ kann durch

$$f_{\alpha\beta}^{\text{grad}} = -\frac{a_{1,\alpha\beta}}{2} \nabla\varphi_\alpha \cdot \nabla\varphi_\beta \quad (3.49a)$$

$$f_{\alpha\beta}^{\text{grad}} = \frac{a_{1,\alpha\beta}}{2} \|\varphi_\alpha \nabla\varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla\varphi_\alpha\|^2 \quad (3.49b)$$

nach Steinbach et al. [151] bzw. Steinbach et al. [152] modelliert werden. Für einen Vergleich beider Formulierungen sei z. B. auf [35] verwiesen. Die Koeffizienten

$$a_{1,\alpha\beta} = k_1 \sigma_{\alpha\beta} \epsilon \quad \text{und} \quad a_{2,\alpha\beta} = k_2 \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{\epsilon}$$

ergeben sich für jede Phasenpaarung aus den entsprechenden Oberflächenenergiedichten. Gängig ist dabei die Wahl von $k_1 = 2$. Dies führt zu den Werten $k_2 = 9$ bzw. $k_2 = 16/\pi^2$ für das quartische und parabolische Potential.

Im Gleichgewicht muss $\delta\mathcal{F} = 0$ gelten, woraus nach dem Variationsprinzip

$$\forall \delta\varphi_1, \dots, \delta\varphi_{N_\alpha} : \quad \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \int_{\Omega} \Phi_\alpha \delta\varphi_\alpha \, dV = 0 \quad (3.50)$$

und damit

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega : \quad \Phi_\alpha = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N_\alpha \quad (3.51a)$$

$$\text{unter} \quad \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha = 1 \quad (3.51b)$$

folgt. Das chemische Potential der Phase α ist

$$\Phi_\alpha = f^\alpha \frac{\partial h}{\partial \varphi_\alpha} + \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{N_\alpha} \left[\frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \nabla \varphi_\alpha} + \frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{pot}}}{\partial \varphi_\alpha} \right]. \quad (3.52)$$

Dabei ist zu beachten, dass die einzelnen Summanden verschwinden, sofern nicht $\mathbf{x} \in \Gamma_{\alpha\beta}^d$ gegeben ist, d. h. $\varphi_\beta = 0$ gilt³. Je nach Formulierung von $f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}$ ergibt sich

$$\frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \nabla \varphi_\alpha} = \frac{a_{1,\alpha\beta}}{2} \nabla^2 \varphi_\beta$$

bzw.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{\alpha\beta}^{\text{grad}}}{\partial \nabla \varphi_\alpha} &= \frac{a_{1,\alpha\beta}}{2} (\varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla \varphi_\alpha) \cdot \nabla \varphi_\beta \\ &\quad - \frac{a_{1,\alpha\beta}}{2} \nabla \cdot (\varphi_\beta^2 \nabla \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \varphi_\beta \nabla \varphi_\beta). \end{aligned}$$

Für die Dynamik der Phasenevolution existieren unterschiedliche Multiphasenmodelle, die jeweils mit spezifischen Vor- bzw. Nachteilen einhergehen. Zu erwähnen sind hierbei die Formulierung von Steinbach [150] sowie Nestler [115]. Die folgende Betrachtung beschränkt sich auf letztere, wobei lediglich die Grundzüge skizziert werden. Die Evolutionsgleichung für φ_α nimmt dabei die Form

$$\dot{\varphi}_\alpha = \overline{\mathcal{M}} (\Phi_\alpha + \lambda^{\text{sum}}) \quad (3.53)$$

an, wobei λ^{sum} ein Lagrange-Multiplikator ist, welcher die Erfüllung der Zwangsbedingung (3.7) bewirkt. Der Mobilitätsoperator $\overline{\mathcal{M}}$ wird durch eine geeignete Mittelung der paarweisen Mobilitätskoeffizienten $M_{\alpha\beta}$ gebildet. Der Lagrange-Multiplikator λ^{sum} ist durch

$$\lambda^{\text{sum}} = -\frac{1}{N^a} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \Phi_\alpha \text{H}(\varphi_\alpha) \quad (3.54)$$

gegeben, wobei

$$N^a(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \text{H}(\varphi_\alpha), \quad N^a \in \mathbb{N}_{>0}$$

die Anzahl in einem Punkt vorhandener Phasen mit $\varphi_\alpha > 0$ und H die Heaviside-Funktion ist. Damit ergibt sich λ^{sum} als Mittelwert der chemischen Potentiale aller N^a lokal vorliegenden Phasen. Um die Summationsbedingung jederzeit zu erfüllen, muss $\sum \dot{\varphi}_\alpha = 0$ gelten. Da im Allgemeinen $\sum \overline{\mathcal{M}} \Phi_\alpha \neq 0$ gilt, muss die entsprechende Abweichung, die ansonsten eingeführt würde, ausgeglichen werden. Dabei impliziert diese Wahl des Lagrange-Multiplikators, dass die entsprechende Korrektur auf jede lokal auftretende Phase in gleichem Maße verteilt wird. Für dieses Multiphasenmodell existieren weitere Modifizierungen, um z. B. dessen Verhalten in Tripelpunkten zu verbessern. Für Details sei auf das Papier von Nestler [115] verwiesen. Liegen an

³Für das quartische Potential ist aufgrund des asymptotischen Übergangsbereichs immer $\Gamma_{\alpha\beta}^d = \Omega$, falls das Profil nicht abgeschnitten wird und somit treten in diesem Fall immer alle Terme auf.

3.4 Approximationen im diffusen Übergangsbereich

einer Stelle lediglich zwei Phasen vor, reduziert sich die Gleichung (3.53) lokal wieder auf die des zweiphasigen Falls. Dabei ist $\Phi = 2(\Phi_1 + \lambda^{\text{sum}}) = \Phi_1 - \Phi_2$ und somit folgt aus Gleichung (3.53)

$$\dot{\varphi}_1 = \frac{1}{2}\overline{\mathcal{M}}(\Phi_1 - \Phi_2) = \frac{1}{2}\overline{\mathcal{M}}\Phi,$$

wobei sich der Mobilitätsoperator $\overline{\mathcal{M}} = -2M/\epsilon$ durch Koeffizientenvergleich ergibt, sodass dies nach dem Einsetzen zu $\dot{\varphi}_1 = -M/\epsilon\Phi$ und somit zur zweiphasigen Gleichung (3.41) führt.

3.4 Approximationen im diffusen Übergangsbereich

3.4.1 Interpolation von Größen im diffusen Übergangsbereich

Im Kontext von Methoden mit diffusen Übergang ist es notwendig, bestimmte Materialparameter dort geeignet zu interpolieren. Des Weiteren ist es oft von Interesse, Feldgrößen über den diffusen Übergangsbereich zu mitteln, woraus sich im asymptotischen Übergang $\delta_d \rightarrow 0$ gerade der Wert dieser Feldgröße auf der Grenzfläche ergibt. In diesem Abschnitt werden Möglichkeiten hierzu präsentiert und für verschiedene Profile des Phasenfeldes illustriert. Die betrachteten Profile sind

$$\begin{aligned} \text{Profil P1} \quad \varphi_1 &= \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{6\eta}{\delta_d} \right) \right] \\ \text{Profil P2} \quad \varphi_1 &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{2\eta}{\delta_d} - \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{2\pi\eta}{\delta_d} \right) \right] & -\delta_d/2 < \eta < \delta_d/2 \\ \text{Profil P3} \quad \varphi_1 &= \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right) \right] & -\delta_d/2 < \eta < \delta_d/2. \end{aligned}$$

Die Profile P1 und P3 sind die Gleichgewichtsprofile des quartischen und des parabolischen Potentials, während P2 eine Approximation der Heaviside-Funktion darstellt, die für Level-Set-Methoden verbreitet ist. Die Profile sind in Abbildung 3.7 dargestellt und unterscheiden sich im Wesentlichen darin, wie stark sich der Übergang auf die Umgebung der Grenzfläche Γ konzentriert. Als Beispiel für die Interpolation von Materialparametern werden Phasen mit phasenweit konstanter Massendichte ρ_α betrachtet. In der Literatur ist es gängig zur Interpolation von Materialparametern entweder das arithmetische Mittel der Form

$$\bar{\rho} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha \rho_\alpha \quad (3.55)$$

oder alternativ eine harmonische Mittelung gemäß

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{\varphi_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (3.56)$$

zu verwenden [91]. Beim arithmetischen Mittel gehen die phasenspezifischen Werte ρ_α linear ein, sodass sich unabhängig von deren Verhältnis stets der gleiche räumliche Übergang ergibt. Im Gegensatz dazu tendiert das harmonische Mittel in Richtung

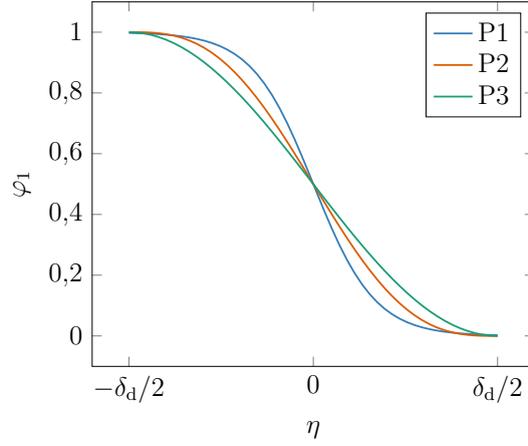


Abbildung 3.7: Visualisierung verschiedener Verläufe des Phasenfeldprofils.

des kleinsten auftretenden Werts. Dies führt insbesondere dazu, dass sich der resultierende Wert an der 0,5-Iso-Oberfläche je nach Verhältnis der phaseninherenten Werte unterscheidet. Dies ist in Abbildung 3.8 für zwei Phasen der Dichte ρ_1 und ρ_2 bei verschiedenen Verhältnissen ρ_2/ρ_1 dargestellt. Für das arithmetische Mittel gilt stets $\bar{\rho}(\eta = 0) = (\rho_1 + \rho_2)/2$, während sich im harmonischen Fall beispielsweise $\bar{\rho}(\eta = 0) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)/3$ bzw. $\bar{\rho}(\eta = 0) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)/5$ für Dichteverhältnisse von 2 und 5 ergeben. Beide Möglichkeiten zur Interpolation gehen im Grenzfall $\delta_d \rightarrow 0$ ineinander über und resultieren dann in einem Sprung von $\rho_2 - \rho_1$ bei $\eta = 0$. Es ist zudem möglich, die diffusen Übergänge stärker in Richtung Γ zu drücken, indem anstelle von φ_α in Gleichung (3.55) und (3.56) eine um $\varphi = 1/2$ antisymmetrische Funktion $h(\varphi_\alpha)$ verwendet wird. Der Effekt einer solchen Interpolation wurde bereits in Abschnitt 3.2.2 anhand von Abbildung 3.6 für den arithmetischen Fall illustriert. In Tabelle 3.1 sind einige gängige Funktionen für h angegeben.

3.4.2 Mittelung von Feldern im diffusen Übergangsbereich

Sei $\phi(\mathbf{x})$ ein räumliches Feld und \mathbf{n} der Normalenvektor an die Grenzfläche am Punkt $\mathbf{x}' \in \Gamma$, dann ist

$$\tilde{\phi}(\eta) = (\phi \circ \mathbf{x}^n)(\eta), \quad \mathbf{x}^n = \mathbf{x}' + \eta \mathbf{n} \quad (3.57)$$

der Verlauf von ϕ in Normalenrichtung über die Koordinate η . Der räumliche Mittelwert von ϕ über den diffusen Übergangsbereich ist allgemein durch

$$\eta\text{-}\bar{\phi}(\mathbf{x}') = \frac{1}{W} \int_{-\delta_d/2}^{\delta_d/2} w(\eta) \tilde{\phi}(\eta) d\eta, \quad \text{mit} \quad W = \int_{-\delta_d/2}^{\delta_d/2} w(\eta) d\eta \quad (3.58)$$

gegeben, wobei w eine Gewichtungsfunktion darstellt. Ein solcher Mittelwert über den diffusen Bereich kann als kontinuierliche Approximation an die Dirac-Distribution verwendet werden, was auf

$$\phi(\mathbf{x}') = \int_{\Omega} \delta_{\Gamma}(\mathbf{x}') \phi(\mathbf{x}) dV \approx \eta\text{-}\bar{\phi}(\mathbf{x}') \quad (3.59)$$

3.4 Approximationen im diffusen Übergangsbereich

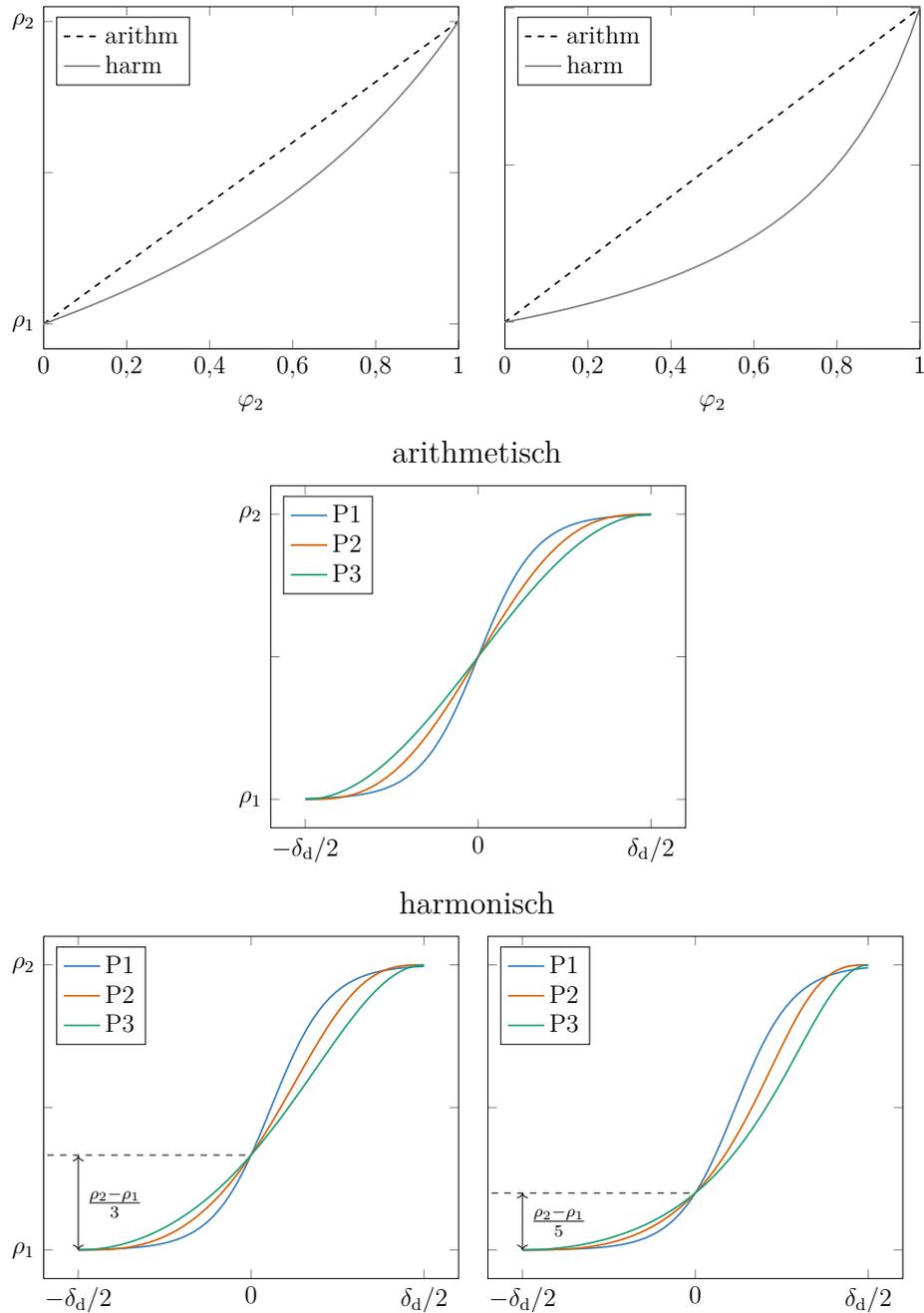


Abbildung 3.8: Harmonische und arithmetische Interpolation zwischen den Werten ρ_1 und ρ_2 für zwei verschiedene Verhältnisse von ρ_2/ρ_1 . Links: $\rho_2/\rho_1 = 2$. Rechts: $\rho_2/\rho_1 = 4$.

3 Diffuser Übergang und Phasenfeldmethode

führt, wobei δ_Γ die Dirac-Distribution auf der singulären Oberfläche bezeichnet. Für den Grenzfall eines verschwindend kleinen Übergangsbereichs ergibt sich für beliebige Gewichtsfunktionen

$$\phi(\mathbf{x}') = \lim_{\delta_d \rightarrow 0} \eta^- \bar{\phi}. \quad (3.60)$$

In der Praxis ist bei Verwendung der Phasenfeldmethode der Abstand η zur Grenzfläche nicht explizit bekannt. Er ergibt sich vielmehr durch das Profil des Phasenfeldes $\varphi(\eta)$. Innerhalb von Γ^d stellt dies eine bijektive Abbildung von η auf φ dar. Um die Mittelwertbildung bezüglich der Phasenvariablen zu parametrieren, erweist sich der Ansatz

$$\eta^- \bar{\phi}(\mathbf{x}') = \frac{1}{\int_0^1 g_i(\varphi) d\varphi} \int_0^1 \tilde{\phi}(\eta) g_i(\varphi) d\varphi, \quad \mathbf{x}' \in \Gamma \quad (3.61)$$

als geeignet. Wird g_i bereits so gewählt, dass $\int_0^1 g_i(\varphi) d\varphi = 1$ gilt, dann folgt durch Substitution des Phasenfeldprofils

$$\eta^- \bar{\phi}(\mathbf{x}') = \int_0^1 \tilde{\phi}(\eta) g_i(\varphi) d\varphi = \int_{-\delta_d/2}^{\delta_d/2} \tilde{\phi}(\eta) g_i(\varphi) d_\eta \varphi d\eta. \quad (3.62)$$

Da der Gradient des Phasenfeldes gerade in die negative Richtung von \mathbf{n} zeigt, gilt

$$d_\eta \varphi = -\nabla \varphi \cdot \mathbf{n} = \|\nabla \varphi\|. \quad (3.63)$$

Damit ergibt sich

$$\eta^- \bar{\phi}(\mathbf{x}') = \int_{-\delta_d/2}^{\delta_d/2} \tilde{\phi}(\eta) g_i(\varphi) \|\nabla \varphi\| d\eta. \quad (3.64)$$

und

$$w(\eta) = \|\nabla \varphi\| (g_i \circ \varphi)(\eta), \quad W = 1. \quad (3.65)$$

Für $g_i(\varphi) = 1$ besteht die räumliche Gewichtung direkt aus dem Gradienten des Phasenfeldes und für die Verwendung symmetrischer Polynome in φ werden Funktionswerte in der näheren Umgebung der Grenzfläche Γ nochmals stärker gewichtet. Einige Beispiele für verschiedene Gewichtsfunktionen und deren räumliche Darstellung für die Profile P1, P2 und P3 finden sich in Anhang B.3. Durch den Mittelwert in der Grenzflächenflächennormalrichtung kann das Integral einer Feldgröße ϕ über die Grenzfläche im Phasenfeldkontext durch

$$\int_\Gamma \phi dO \approx \int_\Gamma \eta^- \bar{\phi} dO = \int_{\Gamma^d} \phi(\mathbf{x}) g_i(\varphi(\mathbf{x})) \|\nabla \varphi(\mathbf{x})\| dV \quad (3.66)$$

approximiert werden, sodass sich ein Volumenintegral ergibt. Dieses kann auch über den diffusen Übergangsbereich hinaus erstreckt werden, da der Integrand dort aufgrund von

$$\forall \mathbf{x} \notin \Gamma^d: \quad g_i(\varphi), \|\nabla \varphi\| = 0 \quad (3.67)$$

verschwindet. Andersherum kann eine Größe, die als Oberflächendichte auf Γ gegeben ist, durch die approximative Dirac-Distribution $g_i \|\nabla \varphi\|$ als volumetrische Dichte

3.5 Bewegung bei materiell konstantem Phasenfeld

auf Γ^d aufgeweitet werden. Die Gewichtsfunktion $g_i(\varphi)$ ist mit einer entsprechenden Interpolationsfunktion $h(\varphi)$ durch

$$g_i(\varphi) = \partial_\varphi h(\varphi) \quad (3.68)$$

verknüpft. Die Interpolationsfunktion $h(\varphi)$ kann als kontinuierliche Approximation der Heaviside-Funktion H_Γ angesehen werden und deren Gradient

$$\nabla h(\varphi) \cdot \mathbf{n} = g_i(\varphi) \|\nabla \varphi\|$$

in Normalenrichtung als kontinuierliche Approximation der Dirac-Distribution δ_Γ . Tabelle 3.1 bietet einen Überblick über verschiedene Approximationen.

$h(\varphi) \approx H_\Gamma$	$g_i(\varphi)$
φ	1
$\varphi^2(3 - 2\varphi)$	$6\varphi(1 - \varphi)$
$\varphi^3(10 - 15\varphi + 6\varphi^2)$	$30\varphi^2(1 - \varphi)^2$
$\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \left[2(2\varphi - 1) \sqrt{\varphi(1 - \varphi)} + \arcsin(2\varphi - 1) \right]$	$\frac{8}{\pi} \sqrt{\varphi(1 - \varphi)}$

Tabelle 3.1: Einige Interpolations- und Gewichtsfunktionen im Kontext der Phasenfeldmodellierung. Die Dirac-Distribution kann durch $\delta_\Gamma \approx g_i(\varphi) \|\nabla \varphi\|$ approximiert werden.

3.5 Bewegung bei materiell konstantem Phasenfeld

3.5.1 Rein konvektive Transportgleichung

In einigen Problemstellungen liegen Phasen vor, die im Verlauf der Zeit erhaltend sind, sodass die Phasenvariable in jedem materiellen Punkt unverändert bleibt. Das von einer Phase eingenommene Volumen bewegt und deformiert sich in diesem Fall lediglich aufgrund eines makroskopischen Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u} , das z. B. aus der Impulsbilanz bestimmt wird. Für jede Phasenvariable ergibt sich eine konvektive Transportgleichung aus der Bedingung, dass die materielle Zeitableitung verschwindet, d. h.

$$\dot{\varphi}_\alpha = \partial_t \varphi_\alpha + \nabla \varphi_\alpha \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.69)$$

In der numerischen Umsetzung ist deren Verwendung jedoch problematisch, zumal im Kontext eines diffusen Übergangs. Die numerische Lösung von (3.69) führt *Diskretisierungsfehler* ein, deren Höhe sowohl von der räumlichen Diskretisierungsschrittweite als auch von der Genauigkeitsordnung des verwendeten Diskretisierungsschemas abhängt (Details siehe Kapitel 4). Dies ist insbesondere bei der rein konvektiven Transportgleichung kritisch. Da in dieser keine natürliche Diffusion auftritt, müssen aus Stabilitätsgründen meist Schemata mit hoher numerischer Diffusion verwendet werden, was eine künstliche Aufweitung des Übergangsbereichs zur Folge hat. Zudem führen die Fehler dazu, dass für divergenzfreie Geschwindigkeitsfelder die volumenerhaltende Eigenschaften der exakten Gleichung verloren geht⁴. Das Hauptproblem

⁴Bei Kompressibilität ist das Volumen einer Phase im Allgemeinen ohnehin nicht erhalten. In diesem Fall verfälscht der numerische Fehler allerdings die Volumenänderung.

besteht darin, dass diese numerischen Fehler kumulativ sind, d. h. sie steigen mit der Zeit immer weiter an.

3.5.2 Bestimmung aus Referenzkonfiguration

Eine Möglichkeit diese Problematik abzumildern bietet eine Bestimmung des aktuellen Phasenfeldes über eine Transformation in die Referenzkonfiguration [36]. Die Phasenvariable $\varphi_\alpha^{\text{init}}(\mathbf{X}) = \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t = 0)$ zum Startzeitpunkt ist über Anfangsbedingungen vorgegeben. Wie in Abschnitt 2.1.1 detailliert dargelegt, erlaubt die Bewegungsfunktion den Wechsel zwischen Momentan- und Anfangskonfiguration. Liegt Kenntnis der inversen Bewegung

$$\boldsymbol{\xi} : (\mathbf{x}, t) \mapsto \mathbf{X} \quad (3.70)$$

vor, kann das Phasenfeld zu einem beliebigen Zeitpunkt durch

$$\varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \varphi_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t), t = 0) = \varphi_\alpha^{\text{init}}(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t)) \quad (3.71)$$

auf einfache Weise bestimmt werden. Ein analoger Ansatz findet sich bei Cottet et al. [31] für eine Methode mit Distanzfunktion sowie bei Dunne und Rannacher [40] für die Indikatorfunktion. Die Problematik verlagert sich hiermit auf die Bestimmung der inversen Bewegung $\boldsymbol{\xi}$, die für jeden räumlichen Punkt \mathbf{x} die Anfangsposition \mathbf{X} desjenigen materiellen Punktes angibt, der sich momentan an der Stelle \mathbf{x} befindet. Die inverse Bewegung gehorcht ebenfalls einer konvektiven Transportgleichung der Form

$$\partial_t \boldsymbol{\xi} + (\nabla \boldsymbol{\xi}) \mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (3.72)$$

Der entscheidende Unterschied zu φ liegt jedoch in der Anfangsbedingung

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t = 0) = \mathbf{x}, \quad (3.73)$$

die eine lineare Funktion darstellt, während in φ steile Gradienten im diffusen Übergangsbereich vorliegen. Aufgrund dieser linearen Anfangsbedingung sind die numerischen Fehler beim Lösen der Transportgleichung (3.72) meist deutlich geringer als bei derjenigen des Phasenfelds (3.69). Insbesondere ist für ein räumlich konstantes Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} die Lösung von (3.72) exakt im Rahmen der Rechengenauigkeit, da die Ableitung einer linearen Funktion durch ein beliebiges Diskretisierungsschema stets exakt ist. Es ist jedoch anzumerken, dass $\boldsymbol{\xi}$ bei großen Geschwindigkeitsgradienten ebenfalls sehr steile Gradienten aufweisen kann, worunter die Genauigkeit der Lösung leidet. Weiterhin muss bei der Zuweisung des Phasenfeldes in Gleichung (3.71) beachtet werden, dass das initiale Phasenfeld in der Regel lediglich in diskretisierter Form vorliegt, was eine räumliche Interpolation der Werte auf die Stelle $\boldsymbol{\xi}$ notwendig macht. Dies führt einen Interpolationsfehler ein, der allerdings zeitlich nicht akkumuliert. Er lässt sich zudem durch eine feinere Auflösung des initialen Phasenfeldes verringern. Falls $\boldsymbol{\xi}$ für einen betrachteten Punkt außerhalb des Rechengebietes liegt, müssen Annahmen über den Wert φ^{init} an dieser Stelle gemacht werden. Dies entspricht der Aufprägung von Randbedingungen in φ , wobei sich sowohl Neumann- als auch Dirichlet-Randbedingungen realisieren lassen [36].

3.5.3 Annäherung durch eine diffusive Evolutionsgleichung

Wird die zeitliche Invarianz der Phasenvariable für einen festen materiellen Punkt angenommen, bleibt im Kontext eines diffusen Übergangs allerdings eine Problematik bestehen. Diese liegt darin, dass durch Geschwindigkeitsgradienten das Profil des Übergangs verzerrt werden kann, sodass auch bei einem anfänglichen Phasenfeld mit Gleichgewichtsprofil dieses über die Zeit nicht erhalten bleibt. Die Verzerrung des Profils führt einen Fehler in der Abbildung von Mittelungen im Übergangsbereich oder Oberflächeneigenschaften, wie z. B. die Oberflächenenergie, ein. Sollen diese korrekt wiedergegeben werden, bedarf es einer Relaxation zum Gleichgewichtsprofil. Dies leisten die Evolutionsgleichungen aus Abschnitt 3.2.1 durch die Berücksichtigung molekularer Diffusion. Bei deren Verwendung muss möglichst vermieden werden, dass eine zusätzliche Dynamik in Form unphysikalischer Deformationen eines Phasengebiets durch die Evolutionsgleichung entsteht. Stattdessen soll lediglich eine Herstellung des Gleichgewichtsprofils erfolgen. Es stellt sich die Frage, welche Evolutionsgleichung zur Annäherung an den rein konvektiven Transport geeignet ist. Zunächst erscheint lediglich die Cahn-Hilliard-Gleichung als sinnvoll, da diese bezüglich der einzelnen Phasenvariablen φ_α erhaltend ist. Es handelt sich dabei allerdings um eine Differentialgleichung vierter Ordnung, was die numerische Lösung aufwendiger macht. Insbesondere ergeben sich bei einem zeitlich expliziten Lösungsverfahren große Restriktionen bezüglich der Stabilität. Die maximal mögliche Zeitschrittweite ist dabei proportional zur vierten Potenz der räumlichen Diskretisierungsschrittweite. Eine Verdopplung der räumlichen Auflösung führt somit zu einer Versechzehnfachung der zeitlichen Auflösung, was mit sehr hohem Rechenaufwand einhergeht. Die Verwendung der Allen-Cahn-Gleichung schwächt diesen Effekt deutlich ab, da diese lediglich eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist. Allerdings besitzt sie keine Erhaltungseigenschaft, sodass das Volumen von Phasen aufgrund der Oberflächenminimierung im Verlauf der Zeit schrumpfen oder anwachsen kann. Im zweiphasigen Fall ist diese Volumenänderung durch

$$\int_{\Omega} \dot{\varphi} \, dV = \frac{a_2 M}{\epsilon} \int_{\Omega} \partial_{\varphi} \psi \, dV - \frac{a_1 M}{\epsilon} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi \cdot \mathbf{n} \, dO \quad (3.74)$$

gegeben, wobei der letzte Term in periodischen Gebieten oder an Fernfeldrändern durch Randbedingungen entfällt. In diesen Fällen resultiert eine globale Volumenänderung ausschließlich aus dem Potentialterm. Mittels eines Lagrange-Multiplikators λ^{vol} in der jeweiligen Allen-Cahn-Gleichung lässt sich allerdings die Bedingung

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varphi \, dV = 0 \quad (3.75)$$

erzwingen. Für Zweiphasenprobleme existieren hierzu verschiedene Formulierungen. Allgemein kann die Volumenerhaltung mit einer beliebigen räumlichen Verteilung $w(\mathbf{x})$ durch den Lagrange-Multiplikator

$$\lambda^{\text{vol}}(\mathbf{x}, t) = \frac{w(\mathbf{x})}{\int_{\Omega} w(\mathbf{x}) \, dV} \int_{\Omega} \frac{\partial f^{\text{pot}}}{\partial \varphi} \, dV. \quad (3.76)$$

erreicht werden. Ursprünglich wurde dieser Ansatz von Rubinstein und Sternberg [136] eingeführt, wobei diese den räumlich konstanten Lagrange-Multiplikator mit $w(\mathbf{x}) = 1$ verwenden, was auf

$$\lambda^{\text{vol}}(t) = \frac{a_2 M}{\epsilon} \frac{1}{\int_{\Omega} dV} \int_{\Omega} \partial_{\varphi} \psi \, dV$$

führt. Eine deutlich bessere Dynamik ergibt sich, wenn w als Approximation an die Dirac-Distribution der Oberfläche gewählt wird, sodass die Korrektur des Volumens nur im diffusen Übergang stattfindet. Der von Brassel und Bretin [19] vorgeschlagene lokale Lagrange-Multiplikator mit $w = \sqrt{\psi}$ führt zu

$$\lambda^{\text{vol}}(\mathbf{x}, t) = \frac{a_2 M \int_{\Omega} \partial_{\varphi} \psi \, dV}{\epsilon \int_{\Omega} \sqrt{\psi} \, dV} \sqrt{\psi}$$

und vermeidet einige Artefakte des globalen Ansatzes [92]. Darüber hinaus sind andere Verteilungen möglich, beispielsweise $w = \psi$ oder $w = g_i \|\nabla \varphi\|$ mit einer der Gewichtsfunktionen aus Tabelle 3.1, wobei die Unterschiede nur darin liegen, wie stark sich die Volumenkorrektur in die Umgebung der Iso-Oberfläche mit $\varphi = 1/2$ konzentrieren. Das grundsätzliche Verhalten ist allerdings ähnlich. Nach Kenntnis des Autors wurden derartige Funktionen bisher jedoch nicht eingesetzt. Zudem ist eine Verallgemeinerung auf die Volumenerhaltung einzelner oder aller Phasen mittels Allen-Cahn-Gleichung für Mehrphasenprobleme möglich (Details siehe [116]). Für Probleme mit Massenerhaltung der Phasen werden sowohl die Cahn-Hilliard-Gleichung, z. B. in [75, 113] als auch die Allen-Cahn-Gleichung, beispielsweise in [99, 52, 155], eingesetzt.

Es verbleibt jedoch für Cahn-Hilliard- und Allen-Cahn-Gleichung die Eigenschaft der Oberflächenminimierung durch Krümmung, die im hier betrachteten Fall eine unerwünschte Dynamik mit sich bringt. Um diesen Effekt zu minimieren, ist die Mobilität in der Evolutionsgleichung so klein als möglich und gerade so groß zu wählen, dass das Gleichgewichtsprofil erhalten bleibt [4]. Insbesondere muss die Mobilität für den Grenzübergang $\delta_d \rightarrow 0$ mindestens proportional mit δ_d ebenfalls zu Null tendieren, sodass sich im Grenzfall aus der Cahn-Hilliard- bzw. Allen-Cahn-Gleichung wiederum der rein konvektive Transport (3.69) ergibt. Ein solcher Ansatz ist beispielsweise bei der Modellierung von Multiphasenströmungen makroskopisch nicht mischbarer Fluide im Phasenfeldkontext gängig (vgl. [75]). Bei der Wahl einer Mobilität besteht somit ein Zielkonflikt zwischen der Wiederherstellung des Gleichgewichtsprofils einerseits und der Vermeidung unerwünschter Dynamik andererseits. Tatsächlich zeigt sich dabei, dass ein optimaler Wert existiert. Zanella et al. [179] nutzen ein Cahn-Hilliard-Ansatz für die Simulation von Rayleigh-Taylor-Instabilitäten. Dabei finden sie eine Mobilität κ , die zu einer Peclét-Zahl $u_c \ell_c / (\sigma \kappa)$ von ca. 1000 führt, bei welcher der kleinste Fehler verglichen zur analytischen Lösung auftritt. Mokbel et al. [113] zeigen ebenfalls für ihr Phasenfeldmodell zur Fluid-Struktur-Interaktion, dass durch eine hinreichend kleine Mobilität die Dynamik der Cahn-Hilliard-Gleichung vernachlässigbar wird, während das Gleichgewichtsprofil aufrechterhalten bleibt.

Eine Alternative zur Wahl einer kleinen Mobilität stellt eine Korrektur des Krümmungseffekts dar [142]. Sun und Beckermann [157] zeigen für die Allen-Cahn-Gleichung, dass durch die Einführung eines geeigneten Terms deren Eigenschaft zur Oberflächenminimierung abgestellt werden kann. Hierzu wurde von Folch et al. [48] der zusätzliche Term

$$-\delta_{\Gamma} \sigma \kappa_{\Gamma} \approx a_1 \|\nabla \varphi\| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} \right)$$

auf das chemische Potential addiert, wobei die Oberflächenkrümmung κ_{Γ} durch $\kappa_{\Gamma} = \nabla \cdot \mathbf{n}$ mit dem Normalenvektor $\mathbf{n} = -\nabla \varphi / \|\nabla \varphi\|$ bestimmt ist. Dies entspricht

gerade dem Krümmungsminimierenden Anteil des Laplace-Operators, der somit ausgeglichen wird. Mit den entsprechenden Modifizierungen für Volumenerhaltung und Krümmungsausgleich beschränkt sich die Allen-Cahn-Dynamik auf die Relaxation zum Gleichgewichtsprofil in Grenzflächennormalenrichtung. Dadurch ist es möglich, diese für den konvektiven Transport der Phasenvariable zu verwenden, da sie damit erhaltend bezüglich sowohl dem Volumen als auch der Form ist. Die materielle Änderung der Phasenvariable ist damit ausschließlich ein Beitrag zur Wiederherstellung des Gleichgewichtsprofils.

3.6 Hohenberg-Halperin-Modell für Zweiphasenströmungen

Zur Modellierung von Zweiphasenströmungen nicht mischbarer, inkompressibler Fluide ist das *Hohenberg-Halperin-Modell* [65] etabliert. Dieses basiert auf einer Phasenfeldmethode zur Grenzflächenverfolgung gekoppelt mit dem Navier-Stokes-System zur Beschreibung der Fluidodynamik. Durch den diffusen Übergang der Phasenfeldmethode ergibt sich eine Mischung der Phasen. Da dies allerdings nur lokal der Fall ist, sind die Fluide makroskopisch nach wie vor nicht mischbar. Für einen Vergleich zu Modellen mit singulärer Grenzfläche sei auf Abschnitt 6.5.1 verwiesen. In der ursprünglichen Variante wird die konvektive Cahn-Hilliard-Gleichung (3.40) genutzt und die Navier-Stokes-Gleichung (2.58) um einen Kapillaritätsterm \mathbf{K} erweitert, der in Abschnitt 3.6.1 behandelt wird. Dies führt zum Differentialgleichungssystem

$$\partial_t \varphi + \nabla \varphi \cdot \mathbf{u} = \kappa \nabla^2 \Phi \quad (3.77a)$$

$$\Phi = (a_2 \partial_\varphi \psi - a_1 \nabla^2 \varphi) \quad (3.77b)$$

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \mathbf{f}^V + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u})] + \mathbf{K}(\varphi) \quad (3.77c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.77d)$$

Es ist möglich, dass sich die Dichte ρ und Viskosität μ der zwei Fluidphasen unterscheiden. In diesem Falle sind deren Effektivwerte in der Navier-Stokes-Gleichung zu verwenden, die sich im inkompressiblen Fall aus einer Interpolation ergeben. Bezüglich der Massendichte impliziert die Verwendung des arithmetischen Mittelwertes gemäß (3.55) die lineare Interpolation der Impulsdichte $\rho \mathbf{u} = \sum_\alpha \varphi_\alpha (\rho \mathbf{u})_\alpha$ sowie die Gleichheit der phaseninherenten Geschwindigkeit $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}$. Dies entspricht der quasi-inkompressiblen Modellierung nach Ding et al. [37]. Im Gegensatz dazu führen die Annahmen $(\rho \mathbf{u})_1 = (\rho \mathbf{u})_2 = (\rho \mathbf{u})$ und $\mathbf{u} = \sum_\alpha \varphi_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ zur harmonischen Mittelung (3.56) der phaseninherenten Dichten, wie sie z. B. im Modell von Liu und Shen [103] zum Einsatz kommt. Im Allgemeinen bezieht sich dabei die Interpolation auf die Massendichte ρ^m bezüglich der Anfangskonfiguration, wobei sich mit der Determinanten J des Deformationsgradienten $\rho(\varphi) = J^{-1} \rho^m(\varphi)$ ergibt⁵. Für die materielle Zeitableitung der Massendichte folgt mit Produkt- und Kettenregel

$$\dot{\rho} = J^{-1} \dot{\rho}^m - \dot{J} J^{-2} \rho^m = \dot{\varphi} \partial_\varphi (J^{-1} \rho^m) - J^{-1} \rho^m \nabla \cdot \mathbf{u}$$

⁵Die effektive Massendichte für Kompressibilität findet sich für ein arithmetisches Mittel in Gleichung (7.16).

und somit wird anstelle der Massenbilanz (2.39) ohne molekulare Diffusion die Bilanzgleichung

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} - \dot{\varphi} \partial_{\varphi} \rho = 0 \quad (3.78)$$

erfüllt. Bei Inkompressibilität, wie im Modell nach dem Gleichungssatz (3.77) angenommen, gilt $J = 1$, $\dot{J} = 0$ und somit

$$\dot{\rho} = \dot{\varphi} \partial_{\varphi} \rho = \kappa \nabla^2 \Phi \partial_{\varphi} \rho. \quad (3.79)$$

Daraus ist ersichtlich, dass das Hohenberg-Halperin-Modell Massentransport im System erlaubt, die Folge der molekularen Diffusion zur Aufrechterhaltung des diffusen Gleichgewichtsübergangs ist. Für die Verwendung des arithmetischen Mittelwerts $\rho = \varphi \rho_1 + (1 - \varphi) \rho_2$ folgt

$$\dot{\rho} - \nabla \cdot [(\rho_1 - \rho_2) \kappa \nabla \Phi] = 0, \quad (3.80)$$

wobei sich in diesem Fall zeigen lässt, dass die jeweilige Masse einer Phase global erhalten wird [37, 1]. Das Geschwindigkeitsfeld im diffusen Übergang ist nach wie vor divergenzfrei. Dieses quasi-inkompressible Modell ist ohne Anpassungen nicht thermodynamisch konsistent, da es die Dissipation nicht korrekt abbildet. Für kleine Dichtekontraste ist die Approximation, die dem quasi-inkompressiblen Modell zugrunde liegt allerdings gerechtfertigt [5]. Eine Erweiterung des Hohenberg-Halperin-Modells für größere Dichtekontraste wurde von Abels et al. [1] vorgeschlagen. Dieses angepasste Modell bildet die Dissipation korrekt ab und ist damit thermodynamisch konsistent. Es nutzt ein arithmetisches Mittel für die Dichte und berücksichtigt den zusätzlichen Term

$$\nabla \cdot [\mathbf{u} \otimes \partial_{\varphi}(\rho) \kappa \nabla \Phi] \quad (3.81)$$

auf der linken Seite der Navier-Stokes-Gleichung (3.77c) im Gleichungssatz. Für das arithmetische Mittel ergibt sich $\partial_{\varphi}(\rho) = \rho_1 - \rho_2$, sofern $\varphi = \varphi_1$ verwendet wird. Dieser Term bildet den Impulsaustausch durch die molekulare Diffusion der Phasen und den damit verbundenen Massetransport ab. Der Einfluss dieses zusätzlichen Terms wird anhand eines Vergleichsproblems in der Arbeit von Aland und Voigt [5] gezeigt. Zu erwähnen ist zudem das Modell von Guo et al. [57] für große Dichtekontraste. Dieses geht ebenfalls von einem massengemittelten Geschwindigkeitsfeld aus, wobei in der Cahn-Hilliard-Gleichung zusätzlich der Druck auftritt, während die Gleichung $\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{\varphi} \partial_{\varphi} \rho$ anstelle von (3.77d) tritt⁶. Dadurch ergibt sich eine stärkere Kopplung des Differentialgleichungssystems.

Die Mobilität κ in der Cahn-Hilliard Gleichung ist so zu wählen, dass

$$\kappa \propto (\delta_d)^{\tilde{p}} \quad (3.82)$$

gilt, wobei \tilde{p} zwischen 1 und 2 liegen muss [75]. Dies spiegelt wider, dass sie einerseits hinreichend groß sein muss, um das Gleichgewichtsprofil wiederherzustellen, welches sich ansonsten durch Geschwindigkeitsgradienten verzerren kann. Andererseits sollte die Mobilität möglichst klein sein, da die Cahn-Hilliard-Dynamik der Oberflächenminimierung unerwünscht ist. Diese erfolgt stattdessen über den konvektiven Term mit

⁶Dies entspricht einer leichten Inkompressibilität, wobei $J = 1$ aber $\dot{J} \neq 0$ angenommen wird, d. h. $\rho = \rho^m$ bei $\nabla \cdot \mathbf{u} \neq 0$.

dem Geschwindigkeitsfeld. Der Kapillaritätsterm in der Impulsgleichung induziert einen entsprechenden Geschwindigkeitsbeitrag, wobei dessen Impuls korrekt abgebildet wird. Folglich verschwindet aufgrund von Gleichung (3.82) die Mobilität für $\delta_d \rightarrow 0$ und es ergibt sich im Grenzübergang eine rein konvektive Transportgleichung. Im Übergang zur scharfen Grenzfläche verschwindet auch der zusätzliche Term (3.81) des erweiterten Modells, da keine molekulare Diffusion mehr auftritt.

Das Hohenberg-Halperin-Modell (3.77) kann auch auf die Benutzung mit der Allen-Cahn-Gleichung angepasst werden. Diese ersetzt in dem Fall die Cahn-Hilliard-Gleichung und muss noch durch eine Volumenerhaltung ergänzt werden, da diese nicht wie beim Cahn-Hilliard-Fall intrinsisch erfüllt wird. Dies ist z. B. mit dem Lagrange-Multiplikator gemäß Gleichung (3.76) möglich. Die Allen-Cahn-Gleichung bietet hier den Vorteil, dass die Ordnung der Differentialgleichung auf zwei reduziert wird. Für explizite Zeitintegration ergeben sich dadurch weitaus größere mögliche Zeitschrittweiten aufgrund eines weniger restriktiven Stabilitätskriteriums. Eine tiefergehende Betrachtung findet sich im Papier von Gal and Medjo [52].

3.6.1 Modellierung des Kapillaritätsterms

Bislang wurde der Kapillaritätsterm \mathbf{K} noch nicht spezifiziert. Er berücksichtigt Effekte der Krümmungsminimierung durch Oberflächenspannungen in der Grenzfläche zwischen zwei Fluiden. Im Kontext der Phasenfeldmethode existieren verschiedene Formulierungen für den Kapillaritätsterm in der Literatur [91]. In einigen lässt sich dieser mit einem kapillaren Oberflächenspannungstensor Θ abbilden. Gängige Darstellungen sind dabei die Tensoren

$$\Theta^1 = a_1 \nabla \varphi \otimes \nabla \varphi = a_1 \|\nabla \varphi\|^2 (\mathbf{n}^{\text{ff}} \otimes \mathbf{n}^{\text{ff}}), \quad (3.83a)$$

$$\Theta^2 = a_1 \nabla \varphi \otimes \nabla \varphi - a_1 \|\nabla \varphi\|^2 \mathbf{1} = a_1 \|\nabla \varphi\|^2 (\mathbf{n}^{\text{ff}} \otimes \mathbf{n}^{\text{ff}} - \mathbf{1}), \quad (3.83b)$$

$$\Theta^3 = a_1 \nabla \varphi \otimes \nabla \varphi + (\varphi \Phi - a_2 \psi - a_1 \|\nabla \varphi\|^2) \mathbf{1}, \quad (3.83c)$$

wobei der Normalenvektor \mathbf{n}^{ff} der Fluid-Fluid-Grenzfläche durch

$$\mathbf{n}^{\text{ff}} = -\frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} \quad (3.84)$$

gegeben ist. Es ist ersichtlich, dass sich alle drei Darstellungen nur in ihrem sphärischen Anteil unterscheiden. Bei inkompressiblen Fluiden hat der sphärische Anteil keine Auswirkungen auf die Lösung, da die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes als kinematische Zwangsbedingung erfüllt wird. Die Unterschiede im sphärischen Anteil werden durch den Druck wiederum kompensiert. Die drei Darstellungen führen zu einem zusätzlichen chemischen Druck $p^c = -\text{sp}(\Theta)/3$. Die unterschiedlichen chemischen Drücke lassen sich durch

$$p^{c,1} = p^{c,2} - a_1 \|\nabla \varphi\|^2 = p^{c,3} - a_1 \|\nabla \varphi\|^2 - a_2 \psi + \varphi \Phi \quad (3.85)$$

ineinander umrechnen. Meist ist im inkompressiblen Fall der tatsächliche Wert p^t des Drucks irrelevant. Bei Bedarf lässt er sich durch

$$p^t = p + p^c \quad (3.86)$$

berechnen, wobei p den aus der Poisson-Gleichung als Lagrange-Multiplikator bestimmten Druck bezeichnet. Es ist anzumerken, dass der Oberflächenspannungstensor und der Kapillaritätsterm außerhalb des diffusen Übergangs verschwindet. Die Spannungsformulierung mittels Θ^1 führt zu einer Projektion in Normalenrichtung, d. h. $\Theta^1 \mathbf{n}^{\text{ff}} = \|\Theta^1\| \mathbf{n}^{\text{ff}}$. Im Gegensatz dazu nimmt Θ^2 eine Projektion tangential zur Oberfläche vor, d. h. $\Theta^2 \mathbf{n}^{\text{ff}} = \mathbf{0}$.

Mit der Identität $(\nabla \nabla \varphi) \nabla \varphi = \frac{1}{2} \nabla (\|\nabla \varphi\|^2)$ folgt für die entsprechenden Oberflächenspannungstensoren der Kapillaritätsterm

$$\mathbf{K}^1 = -\nabla \cdot \Theta^1 = -a_1 \nabla^2 \varphi \nabla \varphi - \frac{a_1}{2} \nabla (\|\nabla \varphi\|^2), \quad (3.87a)$$

$$\mathbf{K}^2 = -\nabla \cdot \Theta^2 = -a_1 \nabla^2 \varphi \nabla \varphi + \frac{a_1}{2} \nabla (\|\nabla \varphi\|^2), \quad (3.87b)$$

$$\mathbf{K}^3 = -\nabla \cdot \Theta^3 = -\varphi \nabla \Phi. \quad (3.87c)$$

Für \mathbf{K}^3 ist die Darstellung über den Spannungstensor nicht gebräuchlich, stattdessen wird direkt $-\varphi \nabla \Phi$ verwendet. Für diese Formulierung ist darum die Bezeichnung *Potentialform* gängig, während \mathbf{K}^1 und \mathbf{K}^2 als *Spannungsform* bezeichnet werden. Zwar sind alle Formulierungen im inkompressiblen Fall analytisch identisch, es ergeben sich jedoch durch die numerische Diskretisierung Unterschiede. Es zeigt sich, dass die Potentialform für Probleme, die dem Gleichgewicht entgegenstreben günstig ist, da parasitäre Strömungen unabhängig von der Wahl der Diskretisierung dadurch verhindert werden. Die Spannungsform hat dagegen Vorteile in dynamischen Problemstellungen, da sie die Impulserhaltung besser gewährleistet. [74]

Eine weitere Darstellung, welche die Verwendung des tatsächlichen Drucks in der NSGL erlaubt, findet sich bei Kim [90] und wurde in ähnlicher Form bereits in [105] vorgeschlagen. Diese basiert auf der Darstellung der Oberflächenspannung aus dem Modell mit singulärer Oberfläche Γ_{ff} . Dieser Ansatz führt zur Darstellung des Oberflächenterms

$$\mathbf{K}_\Gamma = -\sigma \kappa_\Gamma \delta_\Gamma \mathbf{n}^{\text{ff}} \quad (3.88)$$

in der NSGL, wobei κ_Γ die Gesamtkrümmung⁷ Oberfläche darstellt, die durch

$$\kappa_\Gamma = \nabla \cdot (\mathbf{n}^{\text{ff}}) \quad (3.89)$$

gegeben ist [157]. Dies ergibt im Phasenfeldkontext

$$\mathbf{K}^4 = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} \right) \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} \delta_\Gamma \approx -a_1 \|\nabla \varphi\| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} \right) \nabla \varphi, \quad (3.90)$$

wobei die Dirac-Distribution durch den Gradiententerm $\delta_\Gamma \approx k_1 \epsilon \|\nabla \varphi\|^2$ approximiert wird.

3.6.2 Benetzungsrandbedingung

Zur Lösung des Differentialgleichungssystem (3.77) sind Randbedingungen vorzugeben. Dadurch lässt sich z. B. an Wänden das Benetzungsverhalten modellieren,

⁷Diese entspricht im Dreidimensionalen gerade zweimal der mittleren Krümmung.

3.6 Hohenberg-Halperin-Modell für Zweiphasenströmungen

das sich an Kontaktlinien einstellt. Diese ergeben sich durch den Ansatz des Energiefunktionals (3.13) im Fluidgebiet Ω_f . Dabei kann die Energiedichte f° aus einer Interpolation der phaseninherenten Werte gemäß

$$f^\circ = h^{\text{ff}}(\varphi)\sigma_{1s} + [1 - h^{\text{ff}}(\varphi)]\sigma_{2s}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\text{fs}} \quad (3.91)$$

modelliert werden, wobei σ_{1s} bzw. σ_{2s} die Oberflächenenergiedichten zwischen dem jeweiligen Fluid und dem Festkörper bezeichnet. Hierbei bezieht sich die Phasenvariable φ auf das erste Fluid. Die Interpolationsfunktion h^{ff} interpoliert die Oberflächenenergien im diffusen Fluid-Fluid-Übergangsbereich. Auf dem Rand des Fluidgebiets ergibt sich dadurch die Randbedingung gemäß Gleichung (3.15b). Sei \mathbf{n}^{fs} der nach außen zeigende Normalenvektor auf Γ_{fs} , dann folgt

$$a_1 \nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = (\sigma_{2s} - \sigma_{1s}) \partial_\varphi h^{\text{ff}}(\varphi), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\text{fs}} \quad (3.92)$$

als Randbedingung für die Phasenvariable. Aus der Forderung, dass diese volumenerhaltend sei, folgt zudem die Randbedingung für das chemische Potential

$$\nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\text{fs}}. \quad (3.93)$$

Aus der Randbedingung (3.92) ergibt sich ein *Kontaktwinkel* gemäß der Young-Gleichung. Sie lässt sich umschreiben zu

$$\nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = \frac{1}{k_1 \epsilon} \cos \theta_1^{\text{w}} \partial_\varphi h^{\text{ff}}, \quad (3.94)$$

wobei

$$\cos \theta_1^{\text{w}} = \frac{\sigma_{2s} - \sigma_{1s}}{\sigma} \quad (3.95)$$

der Cosinus des Kontaktwinkels zwischen Fluid 1 und der Wand bezeichnet. Im Sonderfall eines rechten Winkels verschwindet der Fluss. Für andere Kontaktwinkel und sofern nicht $h^{\text{ff}} = \varphi$ gewählt wird, ist die Benetzungsrandbedingung (3.92) nichtlinear. Für die Wahl der zum quartischen Potential konsistenten Interpolation $h^{\text{ff}} = \varphi^2(3 - 2\varphi)$ ergibt sich $\partial_\varphi h^{\text{ff}} = 6\varphi(1 - \varphi) = k_1 \epsilon \|\nabla \varphi\|$ und damit

$$\nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = \cos \theta_1^{\text{w}} \|\nabla \varphi\|. \quad (3.96)$$

Mit der Definition des Normalenvektors der Fluid-Fluid-Grenzfläche \mathbf{n}^{ff} gemäß Gleichung (3.84) folgt daraus $-\cos \theta_1^{\text{w}} = \mathbf{n}^{\text{ff}} \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}}$ (siehe Abbildung 6.2).

3.6.3 Entdimensionalisiertes Modell

Das Differentialgleichungssystem (3.77) des Hohenberg-Halperin-Modells lässt sich entdimensionalisieren, indem sich alle dimensionsbehafteten Größen ϕ mit der korrespondierenden dimensionslosen Größe ϕ^* und einem charakteristischen Wert ϕ_c als $\phi = \phi^* \phi_c$ ausdrücken lassen. Im Folgenden bezeichnet $\nabla^* = \partial(\cdot)/\partial \mathbf{x}^*$ den Gradienten bezüglich der entdimensionalisierten Koordinaten \mathbf{x}^* . Werden die Volumenkräfte auf die Gravitation g in Richtung \mathbf{e}_g beschränkt, d. h. $\rho \mathbf{f}^{\text{V}} = \rho g \mathbf{e}_g$, folgt für die NSGL

$$\begin{aligned} \frac{\rho_c u_c}{t_c} \rho^* \partial_{t^*} \mathbf{u}^* + \frac{\rho_c u_c^2}{l_c} \rho^* (\nabla^* \mathbf{u}^*) \mathbf{u}^* &= -\frac{p_c}{l_c} \nabla^* p^* + \rho_c g \mathbf{e}_g \\ &+ \frac{\mu_c u_c}{l_c^2} \nabla^* \cdot \left[\mu^* \left(\nabla^* \mathbf{u}^* + (\nabla^*)^\top \mathbf{u}^* \right) \right] + \frac{\sigma}{l_c^2} k_1 \epsilon^* \nabla^* \cdot (\nabla^* \varphi \otimes \nabla^* \varphi), \end{aligned}$$

wobei eine Multiplikation mit $l_c/(\rho_c u_c^2)$ zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{St} \rho^* \partial_{t^*} \mathbf{u}^* + \rho^* (\nabla^* \mathbf{u}^*) \mathbf{u}^* &= -Eu \nabla^* p^* + \frac{1}{Fr^2} \rho^* \mathbf{e}_g \\ &+ \frac{1}{Re} \nabla^* \cdot \left[\mu^* \left(\nabla^* \mathbf{u}^* + (\nabla^* \mathbf{u}^*)^\top \right) \right] + \frac{1}{We} k_1 \epsilon^* \nabla^* \cdot (\nabla^* \varphi \otimes \nabla^* \varphi) \end{aligned} \quad (3.97)$$

führt. Dabei bezeichnet l_c die charakteristische Länge des betrachteten Systems. Die entdimensionalisierte Cahn-Hilliard-Gleichung ist

$$\Phi^* = \frac{k_2}{\epsilon^*} \partial_\varphi \psi - k_1 \epsilon^* \nabla^* \cdot \nabla^* \varphi \quad (3.98a)$$

$$\frac{1}{St} \partial_{t^*} \varphi + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \varphi = \frac{\kappa \sigma}{u_c l_c^2} \nabla^* \cdot \nabla^* \Phi^*. \quad (3.98b)$$

Relevante dimensionslose Kennzahlen für das Modell sind die Strouhal-Zahl St , Euler-Zahl Eu , Reynolds-Zahl Re , Froude-Zahl Fr , Weber-Zahl We , Kapillaritätszahl Ca , und die Bond-Zahl Bo . Diese sind gegeben durch

$$\begin{aligned} St &= \frac{l_c}{u_c t_c}, & Eu &= \frac{p_c}{\rho_c u_c^2}, & Re &= \frac{\rho_c l_c u_c}{\mu_c}, & Fr &= \frac{u_c}{\sqrt{g l_c}}, \\ We &= \frac{\rho l_c u_c^2}{\sigma}, & Ca &= \frac{\mu_c u_c}{\sigma} = \frac{We}{Re}, & Bo &= \frac{\rho_c g l_c^2}{\sigma} = \frac{We}{Fr^2}. \end{aligned}$$

Aus der dimensionslosen Cahn-Hilliard Gleichung zeigt sich, dass aufgrund von

$$\frac{\kappa \sigma}{u_c l_c^2} = \frac{1}{Ca} \frac{\kappa \mu_c}{l_c^2}$$

die diffuse Längenskala des Hohenberg-Halperin-Modells gerade $\sqrt{\kappa \mu_c}$ entspricht. Der normierte Übergangsbreitenparameter $\epsilon^* = \epsilon/l_c$ wird oft als Cahn-Zahl bezeichnet. Diese ist ein Maß für das Verhältnis von diffuser Übergangsbreite zur charakteristischen Längenskala des Problems. Für das erweiterte Modell nach [1] ergibt sich zusätzlich der Term

$$\frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_c} \frac{\kappa \sigma}{u_c l_c^2} \nabla^* \cdot [\mathbf{u}^* \otimes \nabla^* \Phi^*]$$

auf der linken Seite von Gleichung (3.97). Durch eine Größenordnungsanalyse des Vorfaktors $(\rho_1 - \rho_2) \kappa \sigma / (\rho_c u_c l_c^2)$ kann somit abgeschätzt werden, ob der Term vernachlässigbar ist und sich somit die Verwendung des vereinfachten Modells nach [37] rechtfertigen lässt.

4 Numerische Diskretisierung mittels finiten Differenzen

Die in dieser Arbeit genutzten Kontinuumsmodelle führen zu einem *Randwertproblem* (RWP) bezüglich räumlicher Koordinaten und ein *Anfangswertproblem* (AWP) in der Zeit. Es ergibt sich ein System bestimmender partieller Differentialgleichungen und entsprechender Rand- und Anfangsbedingungen, dessen Lösung nur für wenige Spezialfälle in geschlossener Form angegeben werden kann. Es bedarf daher numerischer Verfahren, um eine approximative Lösung zu gewinnen. Hierfür existieren einige etablierte Verfahren, z. B. die *Methode finiter Elemente* (FEM), die *finite Volumenmethode* (FVM) und die *finite Differenzenmethode* (FDM). Diese Methoden haben gemein, dass die Lösungsfunktionen in Raum und Zeit diskretisiert werden, d. h. dass die Lösungsfunktionen nur an diskreten Stützstellen vorliegen. Die kontinuierliche Lösungsfunktion wird lokal durch Funktionsansätze approximiert, in die wiederum die Werte an den Stützstellen eingehen. Die stückweise Approximation des räumlichen Lösungsverlaufs kann z. B. durch Polynome erfolgen, wobei der Polynomgrad die Anzahl der lokal benötigten Stützstellen vorgibt. Die Diskretisierungsverfahren überführen das RWP in ein System algebraischer Gleichungen, durch dessen Lösung die Funktionswerte an den Stützstellen gewonnen wird. Dabei arbeitet die FEM mit der schwachen Form des RWP (siehe z. B. Anhang B.2, Gleichung (B.8)). Das darin auftretende Integral wird in räumlichen Teilbereichen, den sogenannten Elementen, betrachtet. Dies führt im algebraischen Gleichungssystem zu einem Beitrag für die Koeffizienten derjenigen Stützstellen, die sich in einem Element befinden. Die FVM geht von den integralen Bilanzgleichungen für Teilvolumina des Rechengebietes aus. Die auftretenden Volumen- und Oberflächenintegrale sind numerisch zu approximieren. Zur Ausführung der Integrale werden die Funktionswerte, die z. B. an den Mittelpunkten der Teilvolumina vorliegen, auf die notwendigen Hilfspunkte für die Integration interpoliert. Dies lässt sich wiederum durch Integration über Hilfskontrollvolumina erreichen. Bei der FDM wird die lokale Form der Bilanzgleichungen mit Hilfe von *Differenzenschemata* zur Approximation der partiellen Ableitungen diskretisiert. Diese ergeben sich aus der analytischen Ableitung von Funktionsansätzen, durch die die Lösung lokal approximiert wird, z. B. Polynome, die durch eine bestimmte Menge an Stützstellen verlaufen.

In dieser Arbeit findet die FDM Anwendung. Es werden zudem rein kartesische Gitter für die räumliche Diskretisierung verwendet, d. h. die Position der Stützstellen ist über ein Rechteckgitter bestimmt, welches das Berechnungsgebiet vollständig überdeckt. Die Stützstellen liegen dann entweder an den Knoten oder den Zellmittelpunkten des Gitters. Für diesen Spezialfall führen FDM und FVM zum gleichen System algebraischer Gleichungen, sofern die Differenzenschemata der FDM und die Interpolations- sowie Integrationsverfahren der FVM entsprechend gewählt sind. Dieser Abschnitt behandelt die Grundlagen für die in der Arbeit verwendeten Diskretisierungsschemata mit kartesischem Gitter.

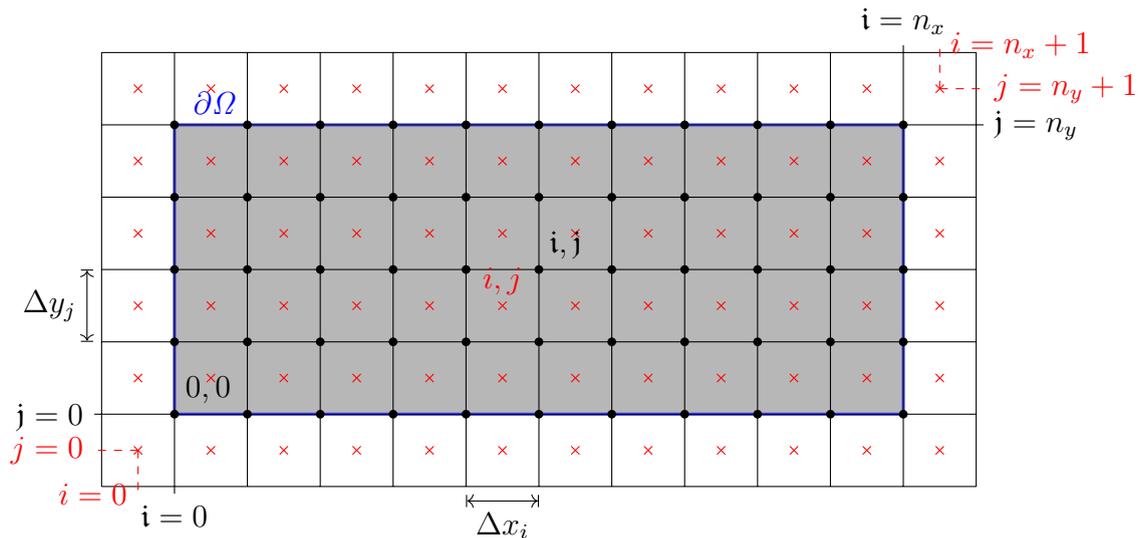


Abbildung 4.1: Kartesisches Gitter: Gitterknoten (Punkte) sind mit i, j (fraktal) indiziert, Zellmittelpunkte (Kreuze) mit i, j . Das Rechengebiet Ω ist grau unterlegt, der Rand $\partial\Omega$ ist blau durchgezogen.

4.1 Konstruktion von Diskretisierungsschemata

Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen (DGLen) mittels finiter Differenzenmethode erfordert die Approximation der auftretenden Differentialoperatoren mit Differenzenquotienten, die lediglich von den Funktionswerten der Lösungsfunktion ϕ an bestimmten Stützstellen in Zeit und Raum abhängen. Dadurch erfolgt eine Diskretisierung der DGL, was zu einer Differenzgleichung für jede Stützstelle und somit zu einem algebraischen Gleichungssystem führt. Für die numerische Approximation der Ableitungen existieren verschiedene Differenzenschemata. Diese lassen sich z. B. durch die analytische Ableitung von Interpolationsfunktionen der festgelegten Stützstellen gewinnen. Exemplarisch wird zunächst von einer Lösungsfunktion $\phi(x)$ ausgegangen, die an $n_x + 1$ Stellen x_i mit dem Funktionswert $\phi_i = \phi(x_i)$ diskretisiert wird. Der Verlauf von ϕ lässt sich für einen Teilbereich $\mathcal{I} = [x_p, x_q]$ mit $q > p$ durch das *Lagrange-Polynom*

$$P^n(x) = \sum_{i=p}^q L_i(x) \phi_i, \quad (4.1a)$$

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=p \\ j \neq i}}^q \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (4.1b)$$

vom Grad $n = q - p$ approximieren. Damit ist es möglich, alle Ableitungen bis zur n -ten durch

$$\left. \frac{d^m \phi}{dx^m} \right|_i \approx \left. \frac{d^m P^n}{dx^m} \right|_i \quad x_i \in \mathcal{I}, \quad m \leq n \quad (4.2)$$

zu approximieren. Je nachdem, welches Intervall für die Polynominterpolation herangezogen wird, ergibt sich ein anderes Differenzenschema. Oftmals wird die tatsächliche

4.1 Konstruktion von Diskretisierungsschemata

Ableitung dann am besten angenähert, wenn das Intervall \mathcal{I} möglichst zentral um die Stützstelle x_i gewählt wird [143, Kapitel 3.1.6]. Die Genauigkeitsordnung des Differenzenschemas erhöht sich mit dem Polynomgrad von P^n . Eine größere Genauigkeit des Schemas erfordert damit eine höhere Anzahl an Stützstellen innerhalb von \mathcal{I} . Der Fehler, den die numerische Ableitung einführt, lässt sich durch eine Taylorreihenentwicklung der Lösungsfunktion ermitteln¹. Das Einsetzen der Taylorreihe mit den Entwicklungspunkten x_p, x_{p+1}, \dots, x_q in das Differenzenschema erlaubt die Darstellung des numerischen Fehlers mittels des Restgliedes. Für hinreichend kleine Diskretisierungsschrittweiten $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ bestimmt der führende Term des Restgliedes den Fehler. Wird vereinfachend von äquidistanten Gittern mit konstanter Schrittweite Δx ausgegangen, folgt

$$e^{\text{num}} = \left. \frac{d^m \phi}{dx^m} \right|_i - \left. \frac{d^m P^n}{dx^m} \right|_i = a_1^r \Delta x^p + a_2^r \Delta x^{p+1} + \dots \quad (4.3)$$

Dabei sind die a^r durch die Taylor-Koeffizienten gegeben und p heißt *Konsistenzordnung* des Differenzenschemas. Eine größere Konsistenzordnung führt zu einer schnelleren Reduktion des Diskretisierungsfehlers bei Verringerung der Schrittweite Δx . Die Konsistenz eines Schemas bedeutet, dass es im Grenzfall $\Delta x \rightarrow 0$ in die tatsächliche Ableitung übergeht, d. h. dass der lokale numerische Fehler e^{num} dann verschwindet. Die mittels Polynominterpolation gewonnenen Schemata sind stets konsistent. Einige einfache Differenzenschemata für die erste Ableitung sind Vorwärts-, Rückwärts- und Zentraldifferenz

$$\mathfrak{d}_x^v(\phi)|_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad (4.4a)$$

$$\mathfrak{d}_x^r(\phi)|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad (4.4b)$$

$$\mathfrak{d}_x^z(\phi)|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad (4.4c)$$

wobei die approximierte Ableitung nach x durch den Operator $\mathfrak{d}_x(\cdot)$ gekennzeichnet wird. Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen sind erster Ordnung genau, d. h. es ist $p = 1$. Bei der Approximation mittels *Zentraldifferenzen* ergibt sich für den Fehlerterm erster Ordnung der Proportionalitätsfaktor $(\Delta x_{i+1}^2 - \Delta x_i^2)(x_{i+1} - x_{i-1})$. Für den Fall äquidistanter Stützstellen verschwindet dieser und es folgt damit eine Genauigkeit zweiter Ordnung der Zentraldifferenzen. Da in dieser Arbeit äquidistante Gitter angenommen werden, beschränken sich alle nachfolgenden Betrachtungen auf diesen Spezialfall. Für die zweite Ableitung kann die Zentralapproximation zweiter Ordnung

$$\mathfrak{d}_{xx}^z \phi|_i = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (4.5)$$

verwendet werden. Mit den vorgestellten Differenzenschemata lassen sich die partiellen Ableitungen aller Raumrichtungen approximieren. Im allgemeinen Fall ist die Lösungsfunktion der hier betrachteten partiellen Differentialgleichungen eine zeitabhängige Feldgröße, d. h. es ist $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$. Es wird in dieser Arbeit ein rechteckiges Rechengebiet Ω angenommen, das in Abbildung 4.1 exemplarisch für den zweidimensionalen Fall dargestellt ist. Zur räumlichen Diskretisierung dient ein Gitter, wodurch

¹Dabei wird angenommen, dass die Lösungsfunktion im Lösungsintervall unendlich oft differenzierbar ist und die Taylor-Reihe dort konvergiert.

Ω in die kleineren Teilgebiete der Gitterzellen aufgeteilt wird. Die Stützstellen des Lösungsfeldes können entweder auf den Zellmittelpunkten angenommen werden oder auf den Gitterknoten, also den Schnittpunkten der Gitterlinien. Im Folgenden werden Zellmittelpunkte mit dem Tupel $\{i, j, k\}$ indiziert und die Knoten mit $\{i, j, \mathfrak{k}\}$. Es gilt dabei der Zusammenhang

$$\{i, j, \mathfrak{k}\} = \{i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2\}, \quad (4.6)$$

d. h. der Knotenindex bezieht sich auf den in jede Koordinatenrichtung jeweils hinteren Knoten der Zelle. Die Diskretisierungsschrittweite ist innerhalb jeder Richtung konstant und durch die Gitterweiten Δx , Δy und Δz gegeben. Die Position der Stützpunkte ist mit

$$\mathbf{x}_{i,j,k} = [(i - 1/2)\Delta x, (j - 1/2)\Delta y, (k - 1/2)\Delta z]^\top \quad (4.7a)$$

$$\mathbf{x}_{i,j,\mathfrak{k}} = [i\Delta x, j\Delta y, \mathfrak{k}\Delta z]^\top \quad (4.7b)$$

für Zellmittelpunkte und Knoten bestimmt. Die Funktionswerte des Lösungsfeldes an den Stützpunkten zum Zeitpunkt t^n werden mit

$$\phi_{i,j,\mathfrak{k}}^n := \phi(\mathbf{x}_{i,j,\mathfrak{k}}, t^n)$$

$$\phi_{i,j,k}^n := \phi(\mathbf{x}_{i,j,k}, t^n)$$

notiert. Die Werte an Knoten und Zellmittelpunkten können wiederum durch Interpolation ineinander überführt werden. Die lineare Interpolation zweiter Ordnung in x -Richtung liefert z. B. durch

$$\phi_{i,j,k} = \phi_{i+1/2,j,k} \approx \frac{1}{2} (\phi_{i+1,j,k} + \phi_{i,j,k}) \quad (4.8)$$

den Wert am rechten Flächenmittelpunkt. Analog kann sukzessive die Interpolation in y - und z -Richtung erfolgen. Entsprechend ergibt sich so der Wert an einem Knoten als arithmetischer Mittelwert der Mittelpunkte aller Zellen, die an den Knoten angrenzen. Umgekehrt gehen für den Zellmittelpunkt die Funktionswerte an den Knoten ein, die die Zelleckpunkte bilden. Im dreidimensionalen Fall sind dies je acht Stützstellen, die für äquidistante Gitter jeweils mit dem Gewichtungsfaktor $1/8$ eingehen. Die stationäre partielle Differentialgleichung

$$f(\mathbf{x}, \phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi, \dots) = 0 \quad (4.9)$$

wird durch Anwendung des Diskretisierungsoperators \mathcal{D} zu

$$\mathfrak{f}_{i,j,\mathfrak{k}} = \mathcal{D}f(\mathbf{x}_{i,j,\mathfrak{k}}, \dots) = 0, \quad \mathbf{x}_{i,j,\mathfrak{k}} \in \Omega, \quad (4.10)$$

wobei \mathcal{D} jede räumliche partielle Ableitung durch eine konsistente Differenzenapproximation ersetzt. Aufgrund der Randbedingungen sind entweder die Funktionswerte von ϕ an den Randknoten direkt oder deren Gradienten in Normalenrichtung vorgegeben. Für die detaillierte Betrachtung der Randbedingungen sei auf den Anhang A.1 verwiesen. In der Zeit liegt anders als im Raum ein Anfangswertproblem vor. Zu dessen Lösung bedarf es eines geeigneten Zeitintegrationsverfahrens. Die Lösungsfunktion ϕ soll an den Stützstellen t^n , $\mathbf{n} \in \mathbb{N}$ bestimmt werden, wobei $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}, t = 0)$ durch

4.2 Kriterien für numerische Stabilität der Transportgleichung

Anfangsbedingungen gegeben ist. Nach bereits vollzogener räumlicher Diskretisierung ergibt sich die instationäre semidiskrete Differentialgleichung

$$\frac{\partial \phi_{i,j,t}}{\partial t} = \mathbf{f}_{i,j,t}(t, \phi, \mathcal{D}\nabla\phi, \mathcal{D}\nabla^2\phi, \dots). \quad (4.11)$$

Die Knotenindizes werden nachfolgend aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mehr explizit ausgeschrieben. Durch zeitliche Diskretisierung folgt

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \mathfrak{V}(t^{n+1}, t^n, \dots, t^{n-m}, \mathbf{f}^{n+1}, \mathbf{f}^n, \dots, \mathbf{f}^{n-m}), \quad (4.12)$$

wobei \mathfrak{V} die *Inkrementfunktion* des numerischen Verfahrens ist. Entfällt die Abhängigkeit der Zeitebene $n + 1$, liegt ein *explizites* Verfahren vor, da die Inkrementfunktion \mathfrak{V} direkt bestimmt werden kann. Ansonsten ist das Zeitintegrationsverfahren *implizit* und die Fixpunktgleichung (4.12) muss zur Bestimmung von ϕ^{n+1} gelöst werden. Für räumliche Felder ergibt sich somit in jedem Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem² (LGS), wohingegen das Inkrement für explizite Verfahren direkt berechnet werden kann. Der Spezialfall expliziter Verfahren mit $m = 0$ führt zu sogenannten *Einschrittverfahren*, womit

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \mathfrak{V}^E(t^n, \mathbf{f}^n) \quad (4.13)$$

folgt. Das einfachste Einschrittverfahren ist das *Eulersche Polygonzugverfahren*

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \mathbf{f}^n, \quad (4.14)$$

das ein Konvergenzverhalten erster Ordnung in der Zeit aufweist. Ein weiteres, prominentes Beispiel für Einschrittverfahren ist das *Runge-Kutta-Verfahren* 4. Ordnung mit

$$\mathfrak{V}^{\text{RK}} = \frac{1}{6} (\mathfrak{K}_1 + 2\mathfrak{K}_2 + 2\mathfrak{K}_3 + \mathfrak{K}_4), \quad (4.15a)$$

$$\mathfrak{K}_1 = \mathbf{f}(t^n, \phi^n) = \mathbf{f}^n \quad (4.15b)$$

$$\mathfrak{K}_2 = \mathbf{f}(t^n + \Delta t/2, \phi^n + \Delta t/2 \mathfrak{K}_1) \quad (4.15c)$$

$$\mathfrak{K}_3 = \mathbf{f}(t^n + \Delta t/2, \phi^n + \Delta t/2 \mathfrak{K}_2) \quad (4.15d)$$

$$\mathfrak{K}_4 = \mathbf{f}(t^n + \Delta t, \phi^n + \Delta t \mathfrak{K}_3). \quad (4.15e)$$

Hierbei ist \mathfrak{K}_1 eine Approximation von $\partial_t \phi^n$ und $\mathfrak{K}_4 \approx \partial_t \phi^{n+1/2}$. Die Ableitung $\partial_t \phi^{n+1/2}$ wird durch \mathfrak{K}_2 und \mathfrak{K}_3 angenähert. Die Näherungen für die Zeitableitungen an den verschiedenen Zwischenschritten werden dabei immer durch ein *Prädiktorschritt* mittels des Eulerschen Polygonzugverfahrens vorgenommen. Das Runge-Kutta-Verfahren gehört zur Klasse der *Prädiktor-Korrektor-Verfahren*.

4.2 Kriterien für numerische Stabilität der Transportgleichung

Die Lösung dynamischer Probleme mittels eines numerischen Verfahrens führt nicht notwendigerweise zu sinnvollen Ergebnissen, selbst wenn die Diskretisierungsschemata konsistent sind. Eine unpassende Wahl der numerischen Diskretisierung kann

²Nichtlineare Systeme können z. B. mit dem *Newton-Verfahren* wiederum auf die Lösung linearer Gleichungssysteme zurückgeführt werden.

neben dem eingeführten Diskretisierungsfehler auch numerische Instabilitäten zur Folge haben. In diesem Fall führt der Grenzübergang der räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsschrittweiten gegen Null nicht zur Konvergenz des Verfahrens, d. h. der globale Diskretisierungsfehler verschwindet im Grenzfall nicht. Die Instabilitäten sind meist durch unphysikalische Oszillationen gekennzeichnet, die sich zeitlich aufschwingen. Um dieses zu vermeiden, wird für ein numerisches Verfahren neben der Konsistenz auch die *Stabilität* gefordert. Diese ist gegeben, wenn Fehler in der Lösung zeitlich beschränkt bleiben und nicht unendlich anwachsen. Entsprechend müssen Lösungen des Systems an Differenzgleichungen zu jeder Zeit beschränkte Funktionen sein und somit muss deren L_2 -Norm ebenfalls beschränkt sein. Es existieren mehrere Kriterien für die Stabilität von Differenzenverfahren. Hierunter fallen die *von-Neumann-Stabilitätsbedingung* [27], die *Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung* (CFL-Bedingung) [33] und die Bedingung nicht negativer Koeffizienten von Friedrichs [50]. Während die ersten beiden im Allgemeinen notwendige Bedingungen für Stabilität darstellen, ist Letztere hinreichend [161]. In [97] wurde gezeigt, dass die von-Neumann-Bedingung auch hinreichend für Stabilität ist, sofern die Matrix, welche den Lösungsvektor zum Zeitpunkt \mathbf{n} auf denjenigen von $\mathbf{n} + 1$ abbildet, symmetrisch ist. Darüber hinaus konnte durch Hahn [59] für einige Fälle die Äquivalenz aller drei Kriterien gezeigt werden, in denen diese Stabilitätsbedingungen sowohl notwendig als auch hinreichend für Stabilität sind. Dies ist u. a. gegeben, wenn für die rein konvektive Transportgleichung der Gradient im Raum \mathbb{R}^d durch ein Differenzenschema approximiert wird, das $2d + 1$ Stützstellen verwendet. In der nachfolgenden Stabilitätsbetrachtung ist dies der Fall. Diese wird exemplarisch anhand der generischen Transportgleichung

$$\partial_t \phi = \mathcal{T} \partial_{xx} \phi - u \partial_x \phi + \alpha \phi \quad (4.16)$$

durchgeführt. Die Verallgemeinerung auf den räumlich dreidimensionalen Fall ist problemlos möglich. Der erste Term der rechten Seite beschreibt eine Diffusion mit dem Diffusionsparameter \mathcal{T} , der zweite Term einen konvektiven Transport mit der Geschwindigkeit $u > 0$ und der dritte ein Quellterm, der linear in ϕ ist. Für den Gradienten wird das γ -Schema

$$\partial_x \phi|_i = (1 - \gamma) \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + \gamma \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \quad (4.17)$$

betrachtet, das eine Mischung von Rückwärts- und Zentraldifferenzen darstellt. Diese ergeben sich entsprechend für die Fälle $\gamma = 1$ und $\gamma = 0$. Die zweite Ableitung wird mit dem Zentralschema (4.5) approximiert und die Zeitintegration erfolgt über das Eulersche Polygonzugverfahren. Diese Diskretisierung führt mit der *Courant-Zahl*

$$c := \frac{\Delta t u}{\Delta x} \quad (4.18)$$

und der *Diffusionszahl*

$$D := \frac{\mathcal{T} \Delta t}{\Delta x^2} \quad (4.19)$$

zur diskretisierten Gleichung

$$\phi_i^{n+1} = \left[D + (\gamma - 1) \frac{c}{2} \right] \phi_{i+1}^n + [1 - 2D - \gamma c + \Delta t \alpha] \phi_i^n + \left[D + (\gamma + 1) \frac{c}{2} \right] \phi_{i-1}^n. \quad (4.20)$$

4.2 Kriterien für numerische Stabilität der Transportgleichung

Die Bedingung von Friedrichs [50] fordert, dass die Koeffizienten von ϕ_{i+1} , ϕ_i und ϕ_{i-1} positiv sind. Aus dem Koeffizient von ϕ_{i+1}^n ergibt sich die Restriktion

$$Pe^z := \frac{u\Delta x}{\mathcal{T}} \leq \frac{2}{(1-\gamma)}. \quad (4.21)$$

Im Spezialfall von Zentralknoten heißt dies, dass die Zell-Péclet-Zahl Pe^z , d. h. das Verhältnis von Konvektion zu Diffusion auf Zellebene, kleiner als 2 sein muss. Dies stellt eine Restriktion bezüglich der räumlichen Diskretisierungsweite dar. Für reine Rückwärtsdifferenzen ist diese Bedingung unbedingt erfüllt. Da es sich um ein hinreichendes Kriterium für Stabilität handelt, führt eine Verletzung nicht zwangsläufig zu instabilen Lösungen. Liegt die Zell-Péclet-Zahl nicht zu stark über dem kritischen Wert, können sich bei einem Funktionsverlauf mit moderaten Gradienten dennoch stabile Lösungen ergeben, da Oszillationen v. a. durch zeitliche Änderungen an Stellen mit steilen Gradienten oder Sprüngen in der Lösungsfunktion entstehen [47, Seite 79]. Für reine Zentralknoten ($\gamma = 0$) folgen aus der weniger restriktiven von-Neumann-Analyse die Bedingungen $c^2 \leq 2c/Pe^z \leq 1$ [62, Gl. (11)]. Hiermit lässt sich die Abschätzung nach oben $c \leq 1$ und damit $Pe^z \leq 2/c \leq 2$ vornehmen, was wiederum auf die Zell-Péclet-Bedingung aus dem Kriterium nicht negativer Koeffizienten führt. Zwar erlaubt das von-Neumann-Kriterium für Zentralknoten auch Werte von $Pe^z > 2$ wodurch sich stabile Lösungen ergeben, die jedoch auf unphysikalische Oszillationen führen können. In solchen Fällen wächst die Amplitude der Oszillation nicht über die Zeit an, sodass die Lösung stabil aber dennoch unphysikalisch ist (siehe z. B. [82, Kapitel 2.5.7]). Stabile und oszillationsfreie Lösungen sind indes generell nur durch Einhaltung des Kriteriums (4.21) zu garantieren [56, 62]. Es zeigt sich darüber hinaus, dass für rein konvektiven Transport, also $\mathcal{T} = 0$, das Zentralschema unbedingt instabil ist. Aus dem Koeffizienten des ϕ_i -Terms resultiert aus der Forderung, dass dieser nicht negativ sei, die Restriktion

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{u\gamma + 2\frac{\mathcal{T}}{\Delta x} - \Delta x\alpha} \quad (4.22)$$

bezüglich des Zeitschritts. Dieses Kriterium entspricht dem Ergebnis der CFL-Bedingung [33] und stellt somit eine notwendige Bedingung für Stabilität dar. Sie besagt, dass Δt hinreichend klein sein muss, um die Lösungsinformation innerhalb eines Zeitschritts nicht über mehr als eine Zelle hinweg zu transportieren. Die maximale Geschwindigkeit u^{ges} , mit der die Lösungsinformation transportiert werden kann, setzt sich aus Konvektions- und Diffusionsgeschwindigkeit sowie dem Quellterm zusammen. Für Zentralknoten entfällt die Konvektionsgeschwindigkeit aus dem Zeitschrittkriterium, da diese in dem Fall in die zusätzliche Péclet-Zahl-Bedingung einfließt. Wird in der Transportgleichung zusätzlich ein nichtlinearer Term in ϕ berücksichtigt, kann eine Linearisierung durchgeführt werden, was zu einem zusätzlichen Beitrag in α führt. In diesem Fall ist die CFL-Bedingung nicht mehr ein hinreichendes, sondern lediglich ein notwendiges Kriterium für Stabilität. Im dreidimensionalen Fall muss das Zell-Péclet-Kriterium (4.21) in jeder Richtung erfüllt sein und die CFL-Bedingung ist

$$\Delta t < \left(\sum_{d=1}^3 \frac{u_d^{\text{ges}}}{\Delta x_d} \right)^{-1}, \quad (4.23)$$

wobei der Index d den Beitrag der x -, y - und z -Richtung kennzeichnet. Zur Veranschau-

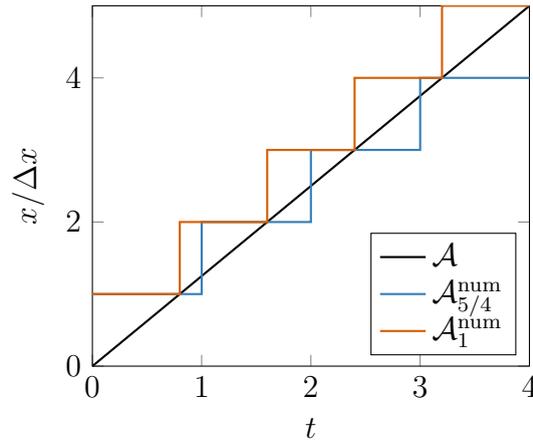


Abbildung 4.2: Zeitliche Entwicklung des Abhängigkeitsbereichs für die rein konvektive Transportgleichung mit konstanter Geschwindigkeit. Analytischer und numerischer Fall mit expliziter Zeitintegration für $CFL = 1$ (stabil, da $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{A}_1^{\text{num}}$) und $CFL = 5/4$ (instabil, da $\mathcal{A} \not\subseteq \mathcal{A}_{5/4}^{\text{num}}$).

lichung der Ursache für Instabilitäten ist nachfolgend noch eine tiefere Betrachtung der CFL-Bedingung gegeben. Diese ist allgemein über den *Abhängigkeitsbereich* \mathcal{A} der Lösung definiert. Sei $\phi^0(\mathbf{x})$ die bekannte Anfangsbedingung für die Lösungsfunktion, dann ist der Abhängigkeitsbereich für einen festen räumlichen Punkt $\hat{\mathbf{x}}$ durch

$$\mathcal{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \phi^0(\mathbf{x}) \text{ beeinflusst die Lösung in } (\hat{\mathbf{x}}, t)\}$$

gegeben. Analog ist der *numerische Abhängigkeitsbereich* \mathcal{A}^{num} eines Verfahrens

$$\mathcal{A}^{\text{num}}(\hat{\mathbf{x}}, t) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \phi^0(\mathbf{x}) \text{ beeinflusst die numerische Lösung in } (\hat{\mathbf{x}}, t)\}.$$

Die CFL-Bedingung besagt, dass der Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung im numerischen Abhängigkeitsbereich enthalten sein muss, d. h.

$$\forall \mathbf{n} \in \mathbb{N}_{>0}, \mathbf{x}_{i,j,k} \in \Omega : \quad \mathcal{A}(\mathbf{x}_{i,j,k}, t^n) \subseteq \mathcal{A}^{\text{num}}(\mathbf{x}_{i,j,k}, t^n). \quad (4.24)$$

Ist dies nicht der Fall, existieren Punkte, die die Lösung in einer Stützstelle tatsächlich beeinflussen, deren Beitrag aber bei der numerischen Lösung unberücksichtigt bleibt, da sie nicht mehr im numerischen Abhängigkeitsbereich liegen. Dies ist immer dann der Fall, wenn die analytische Ausbreitungsgeschwindigkeit u^{ges} einer Lösungsinformation größer ist als die numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit u^{num} . Die CFL-Bedingung kann daher allgemein als

$$CFL := \frac{u^{\text{ges}}}{u^{\text{num}}} \leq 1 \quad (4.25)$$

angegeben werden, wobei CFL die *Courant-Friedrich-Lewy-Zahl* darstellt. Die numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit muss folglich immer größer als die physikalische sein. Dies entspricht wiederum dem Ergebnis des Kriteriums positiver Koeffizienten gemäß Gleichung (4.23) mit den entsprechenden Diskretisierungsschemata. Beispielhaft sind die Abhängigkeitsbereiche für die rein konvektive Transportgleichung und zwei CFL-Zahlen in Abbildung 4.2 dargestellt. Die numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit hängt von der Wahl des numerischen Verfahrens ab. Für das explizite Euler-Verfahren

und Rückwärtsdifferenzen folgt $u^{\text{num}} = \Delta x / \Delta t$. Für das Runge-Kutta-Verfahren ist u^{num} durch die Berücksichtigung des Zwischenschritts bei $t^{n+1/2}$ doppelt so hoch. Bei impliziten Verfahren zeigt sich eine unbedingte Stabilität, da der numerische Abhängigkeitsbereich sich über das ganze Rechengebiet Ω erstreckt. In diesem Fall ergibt sich für jeden Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem, sodass die Lösung eines Knotens von denjenigen aller anderer Knoten abhängt und sich eine lokale Lösungsänderung direkt auf alle Punkte im Gebiet auswirken kann. Kommen bei einem numerischen Verfahren konsistente Differenzenschemata zum Einsatz und ist die Stabilität gegeben, dann konvergiert das Differenzenverfahren mit steigender Auflösung gegen die exakte Lösung. Die *Konvergenzordnung* entspricht dann der kleinsten Konsistenzordnung \mathbf{p} aller verwendeter Diskretisierungsschemata. Aus Stabilität und Konsistenz folgt somit die Konvergenz des Verfahrens.

4.3 Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term

Der Diskretisierung konvektiver Terme wird im Folgenden eine detailliertere Betrachtung gewidmet, da dort einige Besonderheiten auftreten. Exemplarisch erfolgt hier nur die Berücksichtigung einer Raumdimension. Es zeigt sich, wie bereits angemerkt, dass für Differentialgleichungen ohne physikalische Diffusion, wie z. B. Gleichung (3.69), das Zentralsdifferenzschema immer zu Instabilitäten führt. Abhilfe schafft die Verwendung der *Aufwinddifferenzen*

$$\mathfrak{d}_x \phi|_i = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} \phi_i - \phi_{i-1} & u \geq 0 \\ \phi_{i+1} - \phi_i & u < 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

zur Diskretisierung. Dabei handelt es sich bei positiven Geschwindigkeiten um ein Rückwärtsschema und bei negativen um ein Vorwärtsschema. Der konvektive Term weist hyperbolischen Charakter auf, d. h. eine Lösungsänderung wirkt sich lediglich stromabwärts aus, sodass der Abhängigkeitsbereich \mathcal{A} eines Punktes sich selbst für $t \rightarrow \infty$ nicht über das Gesamtgebiet Ω erstreckt. Es ist naheliegend diesem Umstand auch in dem Diskretisierungsschema Rechnung zu tragen, indem mehr Stützstellen stromaufwärts als stromabwärts eingehen [56]. Das Problem der Aufwinddifferenzen ist jedoch ihre geringe Genauigkeit, da sie lediglich eine Konsistenzordnung von $\mathbf{p} = 1$ aufweisen. Aufgrund der Proportionalität des numerischen Fehlerterms zur zweiten Ableitung $\partial_{xx}\phi$, wirkt er sich auf die Lösung wie eine erhöhte Diffusion aus. Dies ist die sogenannte *numerischen Diffusion*. Im mehrdimensionalen Fall wird ein solcher Fehler auch quer zur Geschwindigkeitsrichtung eingeführt, was ihn besonders problematisch macht. Die extrem hohe numerische Diffusion des Aufwindschemas (4.26) beeinträchtigt die Lösungsqualität sehr stark. Als Beispiel für das schlechte Konvergenzverhalten des Aufwindschemas sei auf Ferziger und Perić [47, Abbildung 4.6] verwiesen. Um die Genauigkeit bei der Approximation des konvektiven Terms zu verbessern, existieren hierfür Diskretisierungsschemata, die einerseits stabil sind und andererseits möglichst eine hohe Genauigkeitsordnung aufweisen sollen. Bei der numerischen Lösung erweist es sich oftmals als zielführend, den konvektiven Term in die *Erhaltungssform* $\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})$ zu überführen, was in vielen Fällen zu besseren numerischen Ergebnissen führt [56]. Diese Darstellung ist mit $\nabla \phi \cdot \mathbf{u}$ identisch, sofern

4 Numerische Diskretisierung mittels finiten Differenzen

entweder das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei ist, oder die Feldgröße ϕ als $\phi = \rho\tilde{\phi}$ geschrieben werden kann, wobei dann die Gleichheit aus dem Zusammenhang (2.40) folgt. Dies motiviert die Darstellung der räumlich diskretisierten Transportgleichung gemäß

$$\partial_t\phi = -\frac{1}{\Delta x}(\mathfrak{g}_{i+1/2}^{\text{konv}} - \mathfrak{g}_{i-1/2}^{\text{konv}}) + \frac{1}{\Delta x}(\mathfrak{g}_{i+1/2}^{\text{diff}} - \mathfrak{g}_{i-1/2}^{\text{diff}}) \quad (4.27)$$

mit den Flüssen

$$\mathfrak{g}_{i+1/2}^{\text{konv}} = u_{i+1/2}\phi_{i+1/2} \quad (4.28a)$$

$$\mathfrak{g}_{i+1/2}^{\text{diff}} = \mathcal{T}_{i+1/2}\mathfrak{D}_x\phi|_{i+1/2}. \quad (4.28b)$$

Die Erhaltungsform entspricht dem Ergebnis der finiten Volumenmethode bei Verwendung zellzentrierter Gitter und der Mittelpunktsregel zur numerischen Bestimmung des Oberflächenintegrals. Diese führt nach Division durch das Zellvolumen zur selben Gleichung. Die numerische Approximation verlagert sich nunmehr auf den Wert $\phi_{i+1/2}$, der durch eine geeignete Interpolation bestimmt werden muss. Dabei gilt für Aufwind- und Zentralschema

$$\phi_{i+1/2} \approx \begin{cases} \phi_i & u \geq 0 \\ \phi_{i+1} & u < 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

bzw.

$$\phi_{i+1/2} \approx \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i). \quad (4.30)$$

Die Erhaltungsform und die ursprüngliche *Gradientenform* der Gleichung unterscheiden sich darin, dass der rechte und linke Fluss für eine Zelle in Erhaltungsform mit $u_{i\pm 1/2}$ gebildet wird, während sie sich für die Gradientenform jeweils mit u_i ergeben. Die Erhaltungsform führt somit dazu, dass der Fluss aus einer Zelle heraus, dem in die Nachbarzelle hinein entspricht, was für die Gradientenform nicht gilt. Alle Diskretisierungsschemata lassen sich bezüglich beider Formen darstellen. Es wird nachfolgend der Fall mit verschwindender Diffusion $\mathcal{T} = 0$ betrachtet, was mit Verwendung des Eulerschen Polygonzugverfahrens zu

$$\phi_i^{\text{n+1}} = \phi_i^{\text{n}} + (c\phi)|_{i+1/2} - (c\phi)|_{i-1/2} \quad (4.31a)$$

$$\phi_i^{\text{n+1}} = \phi_i^{\text{n}} + c_i(\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) \quad (4.31b)$$

in Erhaltungs- bzw. Gradientenform führt. Dabei ist $c = u\Delta t/\Delta x$ die Courant-Zahl. Es wird nachfolgend von $u \geq 0$ ausgegangen. Um den Fall $u < 0$ abzubilden, müssen lediglich die Indizes permutiert werden. Dies lässt sich auf einfache Weise erreichen, indem in der Gleichung zur Bestimmung des Flusses $\mathfrak{g}_{i+1/2}$ das Wertetupel $\{\phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}\}$ durch $\{\phi_{i+2}, \phi_{i+1}, \phi_i\}$ ersetzt wird. Die Approximation von $\phi_{i+1/2}$ ist abhängig vom räumlichen Diskretisierungsschema und lässt sich allgemein mit

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{2}\mathfrak{B}(\mathfrak{r})[\phi_{i+1} - \phi_i] \quad (4.32)$$

angeben, wobei \mathfrak{r} eine normierte Variable bezeichnet, die von ϕ , ϕ_{i-1} und ϕ_{i+1} abhängt. Die Funktion \mathfrak{B} heißt *Flussbegrenzung*, sofern $0 \leq \mathfrak{B} \leq 1$ gilt. Ihre Bedeutung wird bei der Betrachtung der Grenzfälle klar. Es ergibt sich für $\mathfrak{B} = 0$ das Aufwindschema

4.3 Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term

$\mathfrak{B}(\tau_i^S)$	$\mathfrak{B}(\tau_i^N)$	Courant-Zahl unabhängig	Courant-Zahl abhängig	Ordnung p
0	0	Aufwind 1. Ordnung		1
1	1	Zentral	Lax-Wendroff [96]	2
τ	$\frac{\tau}{1-\tau}$	Aufwind 2. Ordnung	Beam-Warming [12]	2
$\frac{1+\tau}{2}$	$\frac{1}{2(1-\tau)}$		Fromm [51]	2
$\frac{2+\tau}{3}$	$\frac{\tau-2}{3(\tau-1)}$	Aufwind 3. Ordnung		3
$\frac{3+\tau}{4}$	$\frac{2\tau-3}{4(\tau-1)}$	QUICK [100]		3

Tabelle 4.1: Überblick über klassische lineare Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term in der Darstellung bezüglich Flussbegrenzer (Sweby- und NVD-Darstellung).

und für $\mathfrak{B} = 1$ das Zentralschema. Die Flussbegrenzung erlaubt somit das lokale Umschalten zwischen Aufwind- und Zentralschema. Es ist darüber hinaus möglich, die Interpolation abhängig von der lokalen Courant-Zahl zu gestalten, was auf

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1 - c_{i+1/2}}{2} \mathfrak{B}(\tau) [\phi_{i+1} - \phi_i] \quad (4.33)$$

führt. Diese Variante verbessert die numerische Approximation bei kleinen lokalen Courant-Zahlen erheblich [89]. In diesem Fall führt $\mathfrak{B} = 1$ zum Lax-Wendroff-Verfahren [96]. Es erweist sich als zweckmäßig, die Flussbegrenzung nicht global konstant zu wählen, sondern als Funktion der Lösungsvariable in den benachbarten Stützstellen. Dies erlaubt es, bei flachen Lösungsverläufen stärker in Richtung der Zentraldifferenzen und damit einer Genauigkeit 2. Ordnung zu tendieren, während bei steilen Gradienten die Aufwinddifferenzen überwiegen, um Oszillationen zu verhindern und die Stabilität zu gewährleisten. Zur Darstellung des Flussbegrenzers ist die Normierung

$$\tau^N(\phi) = \frac{\phi - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}} \quad (4.34)$$

gemäß dem sogenannten *normierten Variablen Diagramm* (NVD) sinnvoll. Alternativ findet sich in der Literatur die Normierung nach Sweby [158]

$$\tau^S(\phi) = \frac{\phi - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi}, \quad (4.35)$$

wobei sich beide durch

$$\tau^S = \frac{\tau^N}{1 - \tau^N} \quad \text{und} \quad \tau^N = \frac{\tau^S}{1 + \tau^S} \quad (4.36)$$

ineinander überführen lassen. Im Folgenden finden die Abkürzungen $\tau_i = \tau(\phi_i)$ und $\tau_{i+1/2} = \tau(\phi_{i+1/2})$ Anwendung. Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über die Darstellung der Flussbegrenzung für einige lineare Diskretisierungsschemata, wobei sich die Linearität auf den Verlauf im NVD bezieht (vgl. Abbildung 4.3 oben).

Sweby: $\mathfrak{B}(\mathbf{r}_i^S)$	NVD: $\mathfrak{B}(\mathbf{r}_i^N)$	Schema
$\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r} }{1 + \mathbf{r}}$	$\max(0, 2\mathbf{r})$	van Leer [169]
$\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}^2}{1 + \mathbf{r}^2}$	$\frac{\mathbf{r}}{1 - 2\mathbf{r}(\mathbf{r} - 1)}$	van Albada 1 [167]
$\frac{2\mathbf{r}}{1 + \mathbf{r}^2}$	$\frac{2\mathbf{r}(\mathbf{r} - 1)}{1 - 2\mathbf{r}(\mathbf{r} - 1)}$	van Albada 2
$\frac{3\mathbf{r}(1 + \mathbf{r})}{2(1 + \mathbf{r} + \mathbf{r}^2)}$	$\frac{3\mathbf{r}}{2(1 - \mathbf{r} + \mathbf{r}^2)}$	OSPRES [175]

Tabelle 4.2: Überblick über Flussbegrenzer \mathfrak{B} für TVD-Schemata zur Diskretisierung des konvektiven Terms. Die Darstellung von \mathfrak{B} ist mit der normierten Variable nach Sweby sowie bezüglich des NVD gegeben.

Neben den bereits in Abschnitt 4.2 eingeführten Stabilitätskriterien, kann für die quellenfreie Transportgleichung alternativ die zeitlich fallende Monotonie der betragsmäßigen räumlichen Gesamtänderung in ϕ , d. h.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \|\nabla \phi\| dV \leq 0 \quad (4.37)$$

herangezogen werden. Dies ist die *TVD-Bedingung* (englisch: total variation diminishing) nach Harten [60], die ein hinreichendes Kriterium für Stabilität liefert und darüber hinaus auch unphysikalische Oszillationen ausschließt. Die Konstruktion von Flussbegrenzungen, die die Erfüllung der TVD-Bedingung gewährleisten, führt auf *TVD-Schemata*. Die TVD-Bedingung für rein konvektiven Transport wird erfüllt, sofern

$$\begin{cases} 0 \leq \mathfrak{B} \leq \min(2\mathbf{r}^S, 2) & \mathbf{r}^S \geq 0 \\ \mathfrak{B} = 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.38a)$$

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{i+1/2}^N \leq \mathbf{r}_{i+1/2}^N \leq \min(2\mathbf{r}_i^N, 1) & 0 \leq \mathbf{r}_i^N \leq 1 \\ \mathbf{r}_{i+1/2}^N = \mathbf{r}_i^N & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.38b)$$

in der Sweby- bzw. NVD-Darstellung gilt. Aus Gleichung (4.32) folgt nach entsprechender Normierung

$$\mathbf{r}_{i+1/2}^N = \mathbf{r}_i^N + \frac{1}{2} \mathfrak{B}(\mathbf{r}) [1 - \mathbf{r}_i^N]. \quad (4.39)$$

Dies ermöglicht die Darstellung des gesuchten Wertes $\mathbf{r}_{i+1/2}^N$ in Abhängigkeit vom bekannten \mathbf{r}_i^N für verschiedene Schemata, was in Abbildung 4.3 dargestellt ist. Es existieren mehrere TVD-Schemata, die durch eine entsprechende Flussbegrenzungsfunktion charakterisiert sind. Sie besitzen formal eine Konsistenzordnung von zwei und vermeiden dennoch Instabilitäten. Eine Auflistung findet sich in Tabelle 4.2.

Eine hierzu ähnliche Klasse bilden die *NVD-Schemata*, die anhand von \mathbf{r}_i^N eine Fallunterscheidung vornehmen. Es kommen dabei Zentralknoten zum Einsatz, wenn diese im TVD-Bereich sind, also $\mathbf{r}_i^N > 1/3$, ansonsten finden Aufwindknoten

4.3 Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term

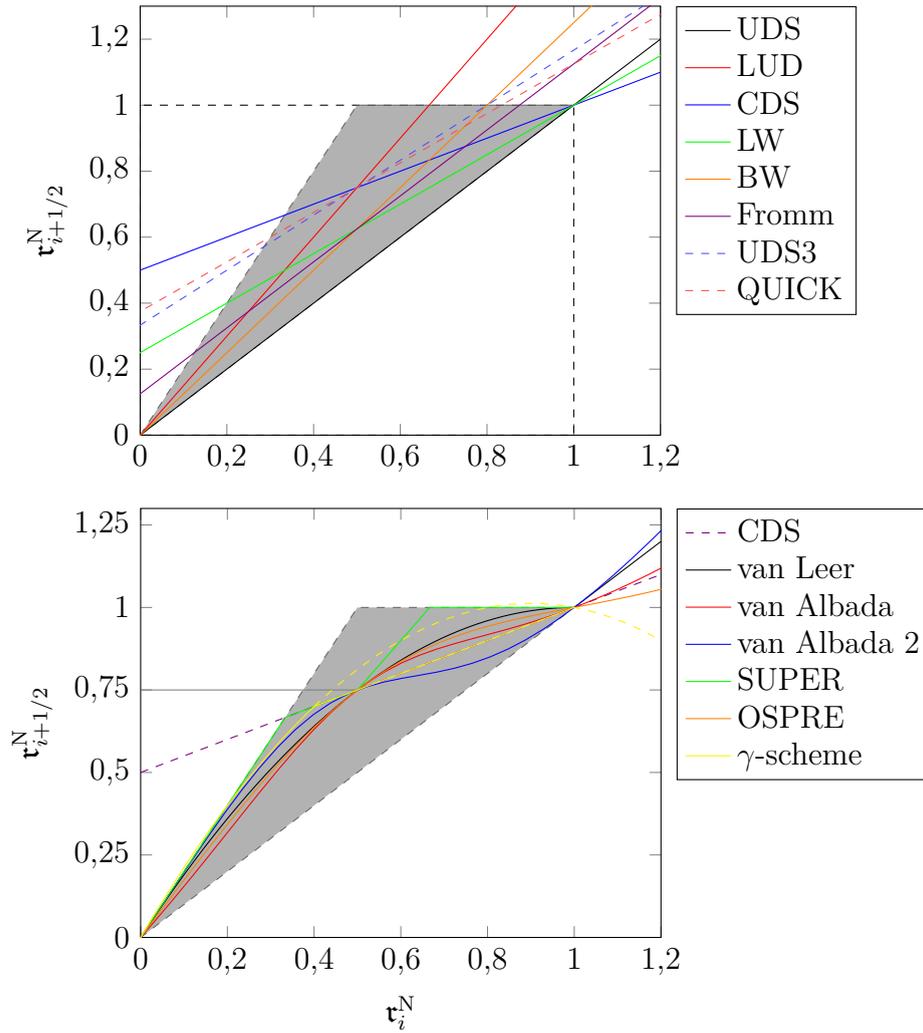


Abbildung 4.3: Numerische Schemata im normierten Variablen Diagramm (NVD). Die TVD-Bedingung ist grau unterlegt. Oben: lineare Schemata, LW und BW jeweils mit $c = 0,5$. Unten: TVD-Schemata und γ -Schema mit $\beta = 0,4$. Abkürzungen: UDS/LUD/UDS3, Aufwindschema 1./2./3. Ordnung; CDS, Zentralschema; LW, Lax-Wendroff; BW, Beam-Warming.

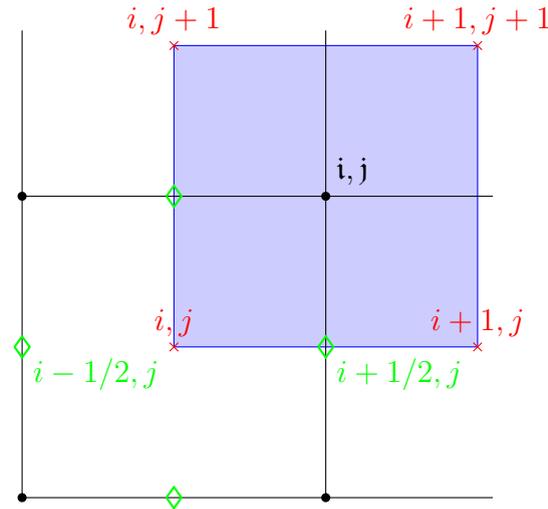


Abbildung 4.4: Numerisches Gitter mit dem entsprechenden dualen Gitter (blau) der Knoten. Rote Kreuze: Zellmittelpunkte. Schwarze Punkte: Knoten. Grüne Rauten: Flächenmittelpunkte.

Verwendung. Ein erwähnenswertes Schema in diesem Kontext ist das adaptive γ -Schema nach Jasak et al. [76]. Dieses verwendet im wesentlichen Gleichung (4.17), wobei der Parameter γ durch

$$\gamma_i = \begin{cases} 1 - \tau_i^N / \beta & 0 \leq \tau_i^N \leq \beta \\ 0 & \beta \leq \tau_i^N \leq 1 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.40)$$

adaptiv eingestellt wird und sich der Übergang zwischen Aufwind und Zentralschema kontinuierlich vollzieht. Dieser Übergang ist über eine Parabel im NVD gegeben, der bei $\tau_i^N = \beta$ vollends in Zentralfindifferenzen einschwenkt (siehe gelbe Kurve in Abbildung 4.3). Je kleiner der Parameter β gewählt wird, desto früher tendiert das Schema zu Zentralfindifferenzen. Es empfiehlt sich, $\beta \in [1/10, 1/2]$ zu setzen. Das γ -Schema ist allerdings nur für $\beta \geq 1/3$ garantiert im TVD-Bereich. Es ist anzumerken, dass das Kriterium (4.38) unnötig streng ist, da es die lokale Courant-Zahl nicht mitberücksichtigt. Tatsächlich ist die TVD-Bedingung bereits für

$$-\frac{2}{1-c} \leq \frac{1}{\tau_i^S} \mathfrak{B}(\tau_i^S) - \mathfrak{B}(\tau_{i-1}^S) \leq \frac{2}{c} \quad (4.41)$$

erfüllt, wobei sich für die Grenzfälle $c = 1$ und $c = 0$ wiederum Gleichung (4.38) ergibt. Dieser größere Spielraum wird in einigen TVD-Schemata ausgenutzt. Für einen Überblick und eine tiefgreifende Analyse sei auf das Papier von Kemm [89] verwiesen.

Bemerkung: Die vorgestellten Diskretisierungsschemata wurden alle bezüglich den Zellmittelpunkten als Stützstellen eingeführt. Die Flüsse $\mathfrak{g}_{i\pm 1/2, j, k}$ liegen im mehrdimensionalen Fall somit auf den Flächenmittelpunkten der Zelle $\{i, j, k\}$. Die Bilanzierung der Flüsse in y - und z -Richtung erfolgt analog mit $\mathfrak{g}_{i, j\pm 1/2, k}$ und $\mathfrak{g}_{i, j, k\pm 1/2}$. Liegen die Stützstellen auf den Gitterknoten, sind die Indizes entsprechend durch $\{i, j, \mathfrak{k}\}$ zu ersetzen. Die Flüsse liegen dann auf den Flächenmittelpunkten des *dualen Gitters*

4.3 Diskretisierungsschemata für den konvektiven Term

vor, dessen Zellmittelpunkte durch die Knoten des primären Gitters festgelegt sind. Dies entspricht einer knotenzentrierten Diskretisierung in der FVM. Die Behandlung aller innerer Stützstellen ist für Knoten und Zellmittelpunkte identisch. Lediglich am Gebietsrand müssen die Randbedingungen auf unterschiedliche Weise aufgebracht werden (Details siehe Anhang A.1). Die verschiedenen Stützstellen des Gitters mit entsprechender Indizierung sind exemplarisch für den zweidimensionalen Fall in Abbildung 4.4 dargestellt. Es ist anzumerken, dass die Flächenmittelpunkte $\{i + 1/2, j\}$ des primären und $\{\mathbf{i}, j - 1/2\}$ des dualen Gitters nur im zweidimensionalen Spezialfall identisch sind. Im Dreidimensionalen gilt hingegen $\{i + 1/2, j, k\} = \{\mathbf{i}, j - 1/2, \mathbf{k} - 1/2\}$.

Teil II

Modellierung der Fluid-Festkörper-Interaktion

5 Einphasenströmungen mit eingetauchten Starrkörpern

Dieses Kapitel widmet sich der Modellierung von Bewegungen starrer Körper in der Strömung eines einphasigen Fluids. Es ist dabei zwischen freier und erzwungener Bewegung zu unterscheiden. Im ersten Fall sind die Starrkörper frei in der Strömung des Fluids und deren Bewegung ergibt sich aus der Interaktion mit dem strömenden Fluid. Im zweiten Fall ist die Bewegung der Starrkörper vollständig oder teilweise vorgegeben. Beispielsweise ist an eine Turbine zu denken, deren Rotor derart fixiert ist, dass keine Translation stattfinden kann, während die Rotation nach wie vor frei ist und sich aus der Interaktion mit der Strömung ergibt. Es kann jedoch auch die gesamte Starrkörperbewegung vorgegeben sein. Dies ist bei reinen Umströmungsproblemen der Fall, z. B. bei einem umströmten Zylinder, was zu einer Kármánschen Wirbelstraße führt. Bei sogenannten Partikelströmungen befinden sich mehrere Festkörperpartikel, die als Starrkörper modelliert werden können, in der Strömung. Dabei liegt nicht nur Fluid-Solid-Interaktion vor, sondern es kommt zudem zur Interaktion zwischen den Partikeln. Dies erfordert zusätzlich eine Modellierung des Partikelkontakts.

Das Kapitel gliedert sich wie folgt. Zunächst wird in Abschnitt 5.1 ein Überblick über existierende Methoden zur Behandlung von Fluid-Starrkörper-Interaktion und Partikelströmungen mit einphasigem Fluid gegeben. Die im Rahmen der Arbeit entwickelte Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete [129] wird in Abschnitt 5.2 präsentiert. Diese basiert auf den Arbeiten von Patankar [121] und Sharma et al. [145], wobei deren Modell auf die Verwendung im Kontext der Multiphasenfeldmethode angepasst wird (siehe Abschnitt 5.2.1 und 5.2.2). Ergänzend kommt ein Modell zur Behandlung von Solid-Solid-Interaktion zum Einsatz. Für sphärische Körper existieren Partikel-Partikel-Kontaktmodelle, die direkt verwendet werden können und in Abschnitt 5.2.3 dargestellt sind. Ein Vorgehen zur Handhabung beliebiger Geometrien im Phasenfeldkontext wird in der Arbeit eingeführt und für den Kontakt zwischen sphärischen Körpern und beliebigen, festen Randstrukturen implementiert. Dieses findet sich in Abschnitt 5.2.4. Ein Überblick zur Umsetzung des Gesamtmodells ist in 5.2.5 gegeben. Dessen Validierung erfolgt in 5.3. Abschließend wird die Durchführung numerischer Experimente für verschiedene Anwendungen mithilfe des eingeführten Modells in 5.4 gezeigt.

5.1 Überblick über existierende Ansätze

Zur Simulation von Partikelströmungen und der Starrkörperbewegung in Fluiden existiert eine Vielzahl von Methoden. Hierüber wird nachfolgend ein Überblick gegeben. Es sei auch auf das Papier von Maxey [110] verwiesen, in dem sich ein Literaturüberblick hierzu findet. Zunächst werden an der Stelle noch einige Gleichungen der Starrkörperbewegung in Fluiden eingeführt, die von den vorgestellten Methoden verwendet werden. Das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}_p des Starrkörpers ist als

$$\mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}_p(t) + \boldsymbol{\omega}_p(t) \times [\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)] \quad (5.1)$$

gegeben, wobei \mathbf{U}_p die Schwerpunktgeschwindigkeit, $\boldsymbol{\omega}_p$ die Winkelgeschwindigkeit und \mathbf{x}_p der Massenmittelpunkt des Körpers ist. Diese Größen lassen sich aus der Lösung der *Newtonschen Bewegungsgleichungen* bestimmen. Auf starre Körper in einem Fluid wirken neben Volumenkräften, die sich in der folgenden Betrachtung auf die Gravitation g beschränken, die Oberflächenkräfte des Fluids. Dies führt für den p -ten Körper, der das Volumen Ω_p ausfüllt, zu den Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\mathbf{p}_p}{dt} = m_p \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = m_p \mathbf{g} - \int_{\partial\Omega_p} \boldsymbol{\sigma}^f \mathbf{n}_p \, dO, \quad (5.2a)$$

$$\frac{d\mathbf{l}_p}{dt} = \mathbf{J}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} + \boldsymbol{\omega}_p \times (\mathbf{J}_p \boldsymbol{\omega}_p) = - \int_{\partial\Omega_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \times \boldsymbol{\sigma}^f \mathbf{n}_p \, dO, \quad (5.2b)$$

wobei \mathbf{p}_p den Impuls, m_p die Masse, $\boldsymbol{\sigma}^f$ die Fluidspannungen, \mathbf{n}_p den auswärtsgerichteten Normalenvektor des Körpers, \mathbf{l}_p den Drehimpuls und \mathbf{J}_p den Massenträgheitstensor des Körpers bezeichnet. Es ist anzumerken, dass der Term $\boldsymbol{\omega}_p \times (\mathbf{J}_p \boldsymbol{\omega}_p)$ in Gleichung (5.2b) für Sonderfälle verschwindet, in denen Partikel entweder sphärisch sind oder eine zweidimensionale Betrachtung möglich ist.

5.1.1 Methoden mit körperangepassten Gittern

Zur Simulation der Starrkörper-Fluid-Interaktion ist ein naheliegender Ansatz die Verwendung körperangepasster Gitter, was z. B. in [68, 46] Anwendung findet. Hierbei erfolgt im Fluidgebiet die Lösung des Navier-Stokes-Systems und für Starrkörper die der Newtonschen Bewegungsgleichungen (5.2), wobei sich die Kräfte aus einem Oberflächenintegral der Fluidspannung ergeben. An der Grenzfläche müssen zudem Haft- und Impermeabilitätsbedingung als Übergangsbedingungen erfüllt werden. Dies erfordert Stützstellen auf der Grenzfläche und damit ein entsprechend auf die Körpergeometrie angepasstes Gitter, das durch die Bewegung der Körper auch zeitlich variiert. Dadurch ist in jedem Zeitschritt eine Gitterneuerzeugung notwendig, die mit entsprechendem Aufwand einhergeht. Zudem müssen die Lösungsfelder auf das neue Gitter interpoliert werden, wodurch zusätzliche Interpolationsfehler auftreten.

Zur Vermeidung der Gitterneuerzeugung lassen sich Gitterverschiebungsalgorithmen nutzen, wobei Gitterknoten eine beliebige Bewegung vollziehen können, sodass eine automatische Anpassung des Gitters im Fluidbereich auf die Körpergeometrie erfolgt. Im Festkörper wird üblicherweise eine Lagrange-Konfiguration verwendet, wobei im Rahmen einer Modellierung als Starrkörper nur die Oberfläche zu diskretisieren

ist. Ein solches Vorgehen führt zu *gemischten Lagrange-Euler-Methoden* (englisch: Arbitrary Lagrange-Euler, ALE), die auf Hughes et al. [70] zurück gehen. Die Verschiebung der Gitterknoten im Fluidgebiet ist so zu bewerkstelligen, dass einerseits Knoten des Gitters mit der Körperoberfläche übereinstimmen und andererseits eine Verzerrung des Gitters möglichst gering gehalten wird. Dies führt im Fluid zu einer Zwischenkonfiguration, in der das Navier-Stokes-System zu lösen ist. Hierzu muss dieses in die Zwischenkonfiguration transformiert werden [94]. Im Kontext der Modellierung von Festphasen als starre Körper findet sich diese Methode z. B. bei Johnson et al. [79, 78] und Hu et al. [69], die sich in der Art des Gitterverschiebungsalgorithmus voneinander unterscheiden. ALE-Methoden vermeiden die räumliche Nachverfolgung der Starrkörperoberfläche und weisen eine hohe Genauigkeit auf. Gleichzeitig sind sie durch die Notwendigkeit eines Gitterverschiebungsalgorithmus aufwendig. Zudem ist bei großen Verzerrungen des Gitters dennoch eine teure Gitterneuerzeugung und entsprechende Interpolation notwendig [113]. Dies ist immer dann der Fall, wenn eine Verzerrung nicht durch Knotenverschiebungen des Gitters kompensiert werden kann, was z. B. bei rotierenden Körpern sehr häufig auftritt.

5.1.2 Methoden fiktiver Gebiete

Methoden fiktiver Gebiete erlauben es, die Anpassung der Gitter zu vermeiden. Sie sind dadurch gekennzeichnet, dass Starrkörper durch ein fiktives Fluid repräsentiert werden und die Navier-Stokes-Lösung auf das gesamte Rechengebiet ausgedehnt wird. Die Berücksichtigung der Starrkörper erfolgt über eine zusätzliche Kraftdichte in dem fiktiven Fluid, die eine Starrkörperbewegung erzwingt. Die verschiedenen Methoden unterscheiden sich hauptsächlich darin, wie sie die Kraftdichte bestimmen und die Nachverfolgung des Starrkörpergebietes bewerkstelligen.

Immersed-Boundary-Methode

Zu erwähnen ist zunächst die *Immersed-Boundary-Methode* (IB-Methode), die auf Peskin [123] zurückgeht, der sie zur Modellierung der Umströmung elastischer Membranen eingeführt hat. Sie ist neben der Anwendung auf Starrkörperprobleme auch für die Fluid-Struktur-Interaktion mit elastischen Festkörpern in Gebrauch, z. B. in [17]. Im Kontext starrer Körper kommt sie unter anderem bei Uhlmann [164] sowie Yu und Shao [177] zur Anwendung. Die IB-Methode nutzt materielle Punkte \mathbf{X}_m auf der Starrkörperoberfläche, die verfolgt werden. Die zusätzliche Kräfteverteilung \mathbf{f}^K in der NSGL wird an diesen punktuell aufgeprägt. Sie ergibt sich somit zu

$$\mathbf{f}^K = \sum_m \rho(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}^{\text{fg}})\delta(\mathbf{x}_m), \quad \mathbf{x}_m = \chi(\mathbf{X}_m, t),$$

wobei \mathbf{u}^{fg} die Geschwindigkeit des fiktiven Fluids ist und sich das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}_p aus Gleichung (5.1) ergibt. Die Bestimmung der Oberflächenkräfte des Starrkörpers sowie das Aufbringen der Kräfteverteilung erfolgt an den verfolgten materiellen Punkten mit Hilfe von räumlich ausgedehnten Gewichtsfunktionen, die Approximationen der punktwisen Dirac-Distribution darstellen [164]. Diese vermitteln zwischen der Position der materiellen Punkte und den Stützpunkten des numerischen Gitters für die Feldlösung der NSGL, welche im Allgemeinen nicht zusammenfallen. Die Wahl dieser approximativen Dirac-Distribution $\delta(\mathbf{x}_m)$ beeinflusst

die Qualität der Lösung dabei stark [110]. Die IB-Methode erfordert die Speicherung und Nachverfolgung der Momentanposition \mathbf{x}_m der materiellen Punkte auf der Körperoberfläche.

Methoden des direkten Krafteintrags

Anstelle von nur punktwise aufgebracht Kräften existieren Methoden, die eine stetig verteilte Volumenkraftdichte verwenden und damit im Gegensatz zur IB-Methode allein in einer Eulerscher Konfiguration arbeiten. Dabei handelt es sich um *Methoden des direkten Krafteintrags* (englisch: direct forcing), die z. B. in [84, 170, 53, 73, 14, 178, 83] verwendet werden. Auch diese Methoden basieren auf der Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen (5.2) für den Starrkörper, wobei die hydrodynamischen Kräfte nicht mehr über ein approximiertes Oberflächenintegral, sondern vielmehr über das Volumenintegral der Starrkörpervolumenkraftdichte \mathbf{f}^K bestimmt werden. Diese Kraftdichte ist bei expliziter Zeitintegration bereits aus dem vorigen Zeitschritt bekannt und muss ansonsten mittels zusätzlicher innerer Iterationen bestimmt werden. Das Starrkörpergeschwindigkeitsfeld, welches mit der Winkel- und Schwerpunktgeschwindigkeit des Körpers bekannt ist, wird in einem Projektionsschritt im Starrkörpergebiet aufgeprägt. Da das Gitter i. A. nicht mit der Fluid-Solid-Grenzfläche übereinstimmt, erfolgt eine Interpolation mit den Volumenfraktionen von Fluid und Körper [14, 178, 83]. Anstelle einer Nachverfolgung der Starrkörper über materielle Punkte der Oberfläche, wie bei IB-Methoden, erfolgt dies über Indikatorfunktionen. Diese lassen sich z. B. wie in [83] mit der Fluidvolumenmethode [63] approximieren, womit sich für Zellen, welche durch die Grenzfläche $\partial\Omega_p$ geschnitten werden, eine Volumenfraktion ergibt. Alternativ wird die Volumenfraktion durch diffuse Indikatorfunktionen z. B. im Kontext von Level-Set-Methoden bestimmt. Im Sonderfall rein sphärischer Partikel vereinfacht sich das Vorgehen enorm, da die Grenzfläche auf einfache Weise parametrisiert ist. Der diffuse Übergang kann dann direkt über die Radialkoordinate vorgegeben werden [178], die der Distanzfunktion von Level-Set-Methoden entspricht.

Methoden mit Lagrange-Multiplikatorfeldern

Methoden mit Lagrange-Multiplikatorfeldern (englisch: Distributed Lagrange Multiplier, DLM) gehen auf Glowinski [54] zurück. Das Navier-Stokes-System wird auf das gesamte Gebiet ausgedehnt und mit den Newtonschen Bewegungsgleichungen (5.2) für die Starrkörper in einer monolithischen schwachen Formulierung kombiniert. Die Einführung eines Lagrange-Multiplikatorfelds im Starrkörpergebiet Ω_p erzwingt dort eine Starrkörperbewegung gemäß Gleichung (5.1). Hierzu wird das Lagrange-Multiplikatorfeld mit der Geschwindigkeit in (5.1) im Sinne des Innenprodukts multipliziert, über das Starrkörpergebiet integriert und in der schwachen Form ergänzt. Die Lösung des resultierenden Problems erfolgt mittels der Methode finiter Elemente, wobei das Gitter nicht an die Körpergeometrie angepasst werden muss. Für die Zeitintegration kommt ein Fractional-Step-Schema zum Einsatz, wobei mit der Methode der konjugierten Gradienten von Uzawa [165] die Felder für Geschwindigkeit und Lagrange-Multiplikator simultan gelöst werden. Dieses Modell kommt z. B. in [120]

zur 3D-Simulation einer Partikelströmungen mit etwa 1200 sphärischen Partikeln und mit Anpassungen in [119] für elliptische Körper zum Einsatz. Problemstellungen, bei denen die Massendichte der Partikel und des Fluids identisch sind, können durch die ursprüngliche DLM-Methode [54] nicht abgebildet werden. Mit der Formulierung aus Glowinski et al. [55] ist dies allerdings durch Berücksichtigung einer zusätzlichen Zwangsbedingung möglich. Dong et al. [38] passen die DLM-Methode zur Verwendung mit der Spektralelementmethode an, wobei der Lagrange-Multiplikator durch ein Verfahren mit zusätzlicher Kostenfunktion (englisch: Penalty Term) bestimmt wird. Eine Spannungsformulierung der DLM-Methode findet sich bei Patankar et al. [122]. Dabei wird analog zum Druck in inkompressiblen Strömungen ein Spannungstensor eingeführt, der sicherstellt, dass die *Starrkörperbedingung* erfüllt wird, d. h. dass der symmetrische Geschwindigkeitsgradient in Ω_p verschwindet, was einer Starrkörperbewegung entspricht. Dabei lassen sich die eingeführten Spannungen als symmetrischer Gradient eines vektorwertigen Lagrange-Multiplikators ansehen. Dieser Ansatz spannt einen Bogen zu den Methoden des direkten Krafteintrags, da sich die Starrkörpervolumenkraftdichte als Divergenz der Lagrange-Multiplikator-Spannungen ergibt.

Die oben genannten Varianten der DLM-Methode basieren alle auf einer gekoppelten Lösung von Geschwindigkeits- und Lagrange-Multiplikatorfeld. Die von Patankar [121] vorgeschlagene Anpassung der Formulierung aus [122] vermeidet diese iterative Lösung durch Verwendung einer Projektionsmethode, was zu einer deutlichen Reduzierung der Rechenzeit führt. Diese Methode hat große Ähnlichkeit zu Methoden des direkten Krafteintrags, insbesondere der von Kajishima et al. [84], wobei sich beide hauptsächlich darin unterscheiden, das erstere auf eine implizite und zweite auf eine explizite Kopplung der Fluid- und Starrkörperbewegung führt. Die von Patankar [121] vorgeschlagene DLM-Methode wurde in dem Papier lediglich für eine zweidimensionale Problemstellung mit sphärischen Partikeln untersucht. Sharma et al. [145] validieren diese Methode tiefergehend und führen eine Erweiterung für den dreidimensionalen Fall und nicht sphärische Körper ein. Sie findet darüber hinaus bei Apte et al. [8] für die direkte numerische Simulation turbulenter Partikelströmungen Anwendung, wobei sie durch eine Zeitintegration mittels Mehrschrittverfahren erweitert wurde.

Die Formulierung der Lagrange-Multiplikatorfeldmethode aus [121, 145] unterscheidet sich von Methoden des direkten Krafteintrags nur in dem Punkt, dass die Schwerpunkts- und Winkelgeschwindigkeit starrer Körper nicht mehr aus den Newtonschen Bewegungsgleichungen, sondern jeweils aus der Integration eines vorläufigen Geschwindigkeitsfeldes gewonnen wird. Dieses ergibt sich aus der Lösung des Navier-Stokes-Systems für einen Zeitschritt, wobei zunächst die Starrkörpervolumenkraftdichte unberücksichtigt bleibt. Das resultierende Geschwindigkeitsfeld zum neuen Zeitpunkt erfüllt die Impulsbilanz auch im Starrkörperbereich, wenn das fiktive Fluid, das den Starrkörper repräsentiert, die gleiche Massendichte aufweist. Somit kann der Impuls und Drehimpuls zum neuen Zeitpunkt durch Integration des vorläufigen Feldes bestimmt und die sich ergebende Starrkörperbewegung projiziert werden.

Die DLM-Methode aus [121, 145] findet in der vorliegenden Arbeit Anwendung, wobei sie auf die Verwendung im Kontext der Multiphasenfeldmethode angepasst

wird. Eine detaillierte Beschreibung der Methode und die Anpassungen auf den Phasenfeldkontext findet sich in Abschnitt 5.2.1 und 5.2.2.

Verfahren basierend auf der Lattice-Boltzmann-Methode

Die bisher vorgestellten Methoden zur Abbildung von Partikelströmungen basieren auf der Beschreibung der Fluidströmung durch die Navier-Stokes-Theorie. Alternativ kann hierfür die Lattice-Boltzmann-Methode Verwendung finden. Für Details hierzu sei auf die Literatur verwiesen, z. B. [93]. Die Kombination der Immersed-Boundary-Methode mit Lattice-Boltzmann-Verfahren zur Abbildung von Partikelströmungen findet sich z. B. in [134]. Auch im Kontext der Phasenfeldmethode existieren Modelle basierend auf der Lattice-Boltzmann-Methode. In [159, 135] wird die Erstarrung von als Starrkörper modellierten Kristallen in einer Flüssigkeit mit einem derartigen Ansatz simuliert. Hierbei wird das Starrkörpergeschwindigkeitsfeld über eine diskrete externe Kraft in der Lattice-Boltzmann-Gleichung aufgeprägt, die sich wiederum über eine mittels Phasenfeld diffus parametrisierte Kraftdichte bestimmt. Diese Kraftdichte ergibt sich analog zu den Methoden des direkten Kräfteintrags, wobei die Starrkörperbewegung mit den Newtonschen Bewegungsgleichungen bestimmt wird. Die Arbeiten von [159, 135] beschränken sich dabei allerdings auf eine zweidimensionale Betrachtung.

5.2 Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete

Zur Modellierung der Interaktion von Einphasenströmungen mit der Bewegung starrer Körper wird die Methode räumlich verteilter Lagrange-Multiplikatoren (DLM) gemäß [121, 145] auf die Verwendung im Kontext der Multiphasenfeldmethode angepasst. Dies führt zu einer *Phasenfeld-DLM-Methode*, die einige Vorteile gegenüber der ursprünglichen Variante aufweist. Die Verwendung des Phasenfeldes ermöglicht die Nachverfolgung und Repräsentation starrer Körper in der Strömung und erlaubt gleichzeitig die Geometrieparametrierung beliebiger Festkörperstrukturen im Gebiet, mit denen die Partikelströmung interagiert. Dies wird in Abschnitt 5.4.4 gezeigt. Zudem können gleichzeitig stattfindende Phasenumwandlungsprozesse durch die Phasenfeldmethode mit abgebildet werden. Hierbei ist z. B. an das Wachstum von Schneekristallen zu denken, die sich in einer Luftströmung bewegen [159]. In der vorliegenden Arbeit wird in Abschnitt 5.4.5 ein Simulationsbeispiel mit Phasentransformation einer Berandungsstruktur der Partikelströmung gezeigt. Außerdem erlaubt diese Herangehensweise eine Erweiterung zur Modellierung von Mehrphasenströmungen, die starre Körper enthalten. Dabei dient die Phasenfeldmethode zusätzlich der Beschreibung der Fluid-Fluid-Grenzflächen. Diese Erweiterung wird in Kapitel 6 durchgeführt und gezeigt.

5.2.1 Methode räumlich verteilter Lagrange-Multiplikatoren

Im Folgenden wird die Methode räumlich verteilter Lagrange-Multiplikatoren [121, 145], auf der die Phasenfeld-DLM-Methode aufbaut, vorgestellt. Es werden N_p Starrkörper in der Strömung eines Fluids betrachtet. Sei Ω_p das Gebiet des p -ten Starrkörpers, dann ist das gesamte Starrkörpergebiet durch

$$\Omega_K = \bigcup_{p=1}^{N_p} \Omega_p \quad (5.3)$$

gegeben. Die DLM-Methode für eine Fluidphase basiert auf dem Gleichungssatz

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = -\nabla p + \rho \mathbf{f}^V + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u})] + \mathbf{f}^K \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (5.4a)$$

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad \mathbf{x} \in \Omega_f \quad (5.4b)$$

$$\mathbf{0} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u}) \quad \mathbf{x} \in \Omega_K. \quad (5.4c)$$

Das Navier-Stokes-System wird in Ω_K um die Starrkörperbedingung (5.4c) und eine entsprechende Volumenkraftdichte \mathbf{f}^K , die diese erzwingt, ergänzt. Durch das Verschwinden des symmetrischen Geschwindigkeitsgradienten bleiben die Körper unverzerrt, sodass nur Rotation und Translation auftritt. Im Gebiet der Starrkörper ist die Kontinuitätsgleichung überflüssig, da sie durch die Starrkörperbedingung automatisch erfüllt wird. Es bietet sich aus Sicht der algorithmischen Umsetzung jedoch an, diese dennoch auch in Ω_K mit zu berücksichtigen. Analog zum Druck, der als Lagrange-Multiplikator die Erfüllung der kinematische Zwangsbedingung aus der Kontinuitätsgleichung sicherstellt, ergibt sich in den Starrkörpern der gesamte Spannungstensor als Lagrange-Multiplikator $\mathbf{\Lambda}$. Die viskosen Spannungen verschwinden im Starrkörpergebiet aufgrund von $\text{sym}(\nabla \mathbf{u}) = \mathbf{0}$. Die Volumenkraftdichte in Ω_K ergibt sich damit zu $\mathbf{f}^K = \nabla \cdot \mathbf{\Lambda}$ und verschwindet im Fluidgebiet Ω_f . Es lässt sich zeigen, dass der Spannungstensor $\mathbf{\Lambda}$ durch einen vektoriellen Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}$ als $\mathbf{\Lambda} = \text{sym}(\nabla \boldsymbol{\lambda})$ ausgedrückt werden kann [122]. Für $\boldsymbol{\lambda}$ ergibt sich dadurch anschaulich eine Interpretation als Geschwindigkeitskorrektur, welche die Fluidgeschwindigkeit aus dem Navier-Stokes-System in Ω_p so anpasst, dass die Starrkörperbedingung dort erfüllt ist.

Das Gleichungssystem (5.4) kann durch gekoppelte Lösung von Impulsgleichung und der Starrkörperbedingung erfüllt werden. Eine weniger aufwendige Methode wurde von Patankar [121] vorgeschlagen. Diese basiert auf einer Projektionsmethode bestehend aus mehreren Schritten. Zunächst wird in jedem Zeitschritt unter Vernachlässigung von \mathbf{f}^K das Navier-Stokes-System gelöst, wobei alle Starrkörper durch fiktive Fluidphasen repräsentiert werden. Die Lösung erfolgt dabei im Sinne einer Mehrphasenströmung, d. h. im Phasenfeldkontext kommt eine Mittelung der phasenspezifischen Materialeigenschaften wie Dichte und Viskosität zum Einsatz, z. B. in Form von Gleichung (3.55) oder (3.56). Das Navier-Stokes-System führt in Ω_f bereits zur Lösung des neuen Zeitschritts, während sich in Ω_K ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld $\tilde{\mathbf{u}}$ ergibt. Dieses vollführt keine Starrkörperbewegung, erfüllt jedoch die Impulsbilanz bereits. Dadurch kann für jeden Körper der Impuls \mathbf{p} und Drehimpuls \mathbf{l} des neuen Zeitschritts aus einer Integration mittels $\tilde{\mathbf{u}}$ gewonnen werden.

Für den p -ten Körper ergibt sich

$$\mathbf{p}_p := m_p \mathbf{U}_p = \int_{\Omega_p} \rho \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (5.5a)$$

$$\mathbf{l}_p := \mathbf{J}_p \boldsymbol{\omega}_p = \int_{\Omega_p} \rho \mathbf{r}_p \times \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (5.5b)$$

mit der Masse m_p , der Schwerpunktschwindigkeit \mathbf{U}_p , der Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega}_p$, und dem Tensor des Massenträgheitsmoments

$$\mathbf{J}_p = \int_{\Omega_p} \rho (\mathbf{r}_p \cdot \mathbf{r}_p) \mathbf{1} - \rho \mathbf{r}_p \otimes \mathbf{r}_p \, dV. \quad (5.6)$$

Dabei ist $\mathbf{r}_p = \mathbf{x} - \mathbf{x}_p$ der Relativvektor zwischen einem räumlichen Punkt und dem Massenmittelpunkt \mathbf{x}_p des Körpers. Im Sonderfall sphärischer Starrkörper ist die Massenträgheit durch $1/2 m R^2 \mathbf{1}$ im Zweidimensionalen und $2/5 m R^2 \mathbf{1}$ im Dreidimensionalen gegeben, wobei R den Radius bezeichnet. Aus den Gleichungen (5.5) können die Schwerpunktschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit jedes Körpers bestimmt werden. Daraus ergibt sich das Starrkörpergeschwindigkeitsfeld des p -ten Körpers zu

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{U}_p + \boldsymbol{\omega}_p \times \mathbf{r}_p, \quad \mathbf{x} \in \Omega_p, \quad (5.7)$$

was die Starrkörperbedingung und die Impulsbilanz erfüllt. Dadurch liegt die Lösung des neuen Zeitschritts im gesamten Gebiet vor. Die Volumenkraftdichte ergibt sich aus

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}^K \, dt = \rho \mathbf{u}_p - \rho \tilde{\mathbf{u}}$$

mit expliziter Zeitintegration zu

$$\mathbf{f}^K = \begin{cases} \rho \frac{\mathbf{u}_p - \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} & \mathbf{x} \in \Omega_p \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (5.8)$$

5.2.2 Anpassungen auf die Multiphasenfeldmethode

Die Vorgehensweise zur Lösung in der DLM-Methode erfordert Kenntnis über das von jedem Starrkörper eingenommene Volumen Ω_p , das während der Simulation nachverfolgt werden muss. Die implizite Grenzflächennachverfolgung wird durch die Phasenfeldmethode ermöglicht. Der darin auftretende diffuse Übergang zwischen Fluid- und Starrkörperphase erfordert Anpassungen an das DLM-Modell. Sei ρ_p die Dichte und φ_p die Phasenvariable des p -ten Körpers, dann ergibt sich durch die Ausdehnung der Volumenintegrale, z. B. in den Gleichungen (5.5) und (5.6), auf das gesamte Rechengebiet Ω mit Hilfe der Phasenvariable für die extensiven Eigenschaften des Körpers

$$\mathbf{U}_p = \frac{1}{m_p} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (5.9a)$$

$$m_p = \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p \, dV, \quad (5.9b)$$

$$\boldsymbol{\omega}_p = (\mathbf{J}_p)^{-1} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p \mathbf{r}_p \times \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (5.9c)$$

$$\mathbf{J}_p = \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p [(\mathbf{r}_p \cdot \mathbf{r}_p) \mathbf{1} - \mathbf{r}_p \otimes \mathbf{r}_p] \, dV. \quad (5.9d)$$

5.2 Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete

Es ist anzumerken, dass sich bei gekrümmten Oberflächen $\partial\Omega_p$ die Volumenintegrale im Vergleich zu den korrespondierenden Größen bei der Darstellung mittels singulären Oberfläche unterscheiden. Sie werden bei diffuser Repräsentation überschätzt, sofern die Fläche konvex ist, und unterschätzt, falls sie konkav ist. Dies lässt sich beispielhaft an sphärischen Partikeln verdeutlichen. In diesem Fall ist z. B. die Masse durch

$$m_p = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{R+\delta_d/2} \rho_p \varphi_p(r) r^2 \sin(\theta) dr d\psi d\theta$$

mit der Breite δ_d des diffusen Übergangs gegeben. Auch wenn das Phasenfeldprofil symmetrisch um die Iso-Oberfläche $\partial\Omega_p(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega : \varphi_p = 1/2\}$ ist, kommt es durch die Nichtlinearität in der Radialkoordinate r zu einer Überschätzung, da weiter außerhalb liegende Werte höher gewichtet werden. Da dieser Effekt jedoch bei der Integration von Masse und Impuls auftritt, heben sich die Fehler bei der Bestimmung der Schwerpunktschwindigkeit als $\mathbf{U}_p = (m_p)^{-1} \mathbf{p}_p$ wiederum auf. Gleiches gilt für den Drehimpuls und das Trägheitsmoment. Ohne Phasenumwandlungsprozesse ist die Masse jedes Körpers konstant und kann einmalig bestimmt und abgespeichert werden. Es ist allerdings wichtig, dass die Masse wie gezeigt durch Integration der Dichte des Körpers mit multiplizierter Phasenvariable bestimmt und nicht diejenige der scharfen Repräsentation herangezogen wird.

Im diffusen Übergangsbereich muss eine Homogenisierung der Geschwindigkeiten vorgenommen werden. Eine Möglichkeit liegt im arithmetischen Mittelwert der Impulsdichten gemäß $\rho \mathbf{u} = \rho_p \varphi_p \mathbf{u}_p + \rho_f \varphi^f \tilde{\mathbf{u}}$ wie in [105]. Verbreiteter ist ein volumetrischer Mittelwert der Geschwindigkeiten

$$\mathbf{u}_p^{\text{av}} = \varphi_p \mathbf{u}_p + \varphi^f \tilde{\mathbf{u}}. \quad (5.10)$$

Diese Interpolation der Geschwindigkeit findet sich bei einigen Autoren [14, 178, 8, 83], wobei die Volumenfraktionen nicht aus der Phasenfeldmethode, sondern aus anderen Approximationen herrührt, wie z. B. die Aufteilung von Gitterzellen durch Tangentialflächen [83], wodurch das Fluidvolumen der Zelle approximiert werden kann. Die Projektion dieser Geschwindigkeit führt allerdings einen Fehler im Impuls des Gebietes $\Omega_{\varphi_p > 0} = \{\mathbf{x} \in \Omega : \varphi_p > 0\}$ ein, der mit höherer Breite δ_d des Übergangs zunimmt. Dieser Fehler ist durch

$$\Delta \mathbf{p}_p = \int_\Omega \rho \varphi_p \mathbf{u}_p^{\text{av}} dV - \int_\Omega \rho \varphi_p \tilde{\mathbf{u}} dV = \int_\Omega \rho \varphi_p \mathbf{u}_p^{\text{diff}} dV \quad (5.11)$$

mit der Geschwindigkeitsänderung durch die Starrkörperprojektion

$$\mathbf{u}_p^{\text{diff}} = \mathbf{u}_p^{\text{av}} - \tilde{\mathbf{u}} = \varphi_p (\mathbf{u}_p - \tilde{\mathbf{u}}) \quad (5.12)$$

gegeben. Der durch die Projektion eingeführte Impulsfehler $\Delta \mathbf{p}_p$ lässt sich durch Integration bestimmen und a posteriori korrigieren, wobei die Korrektur mit einer bestimmten räumlichen Verteilung $h^{\text{kor}}(\varphi_p)$ aufgebracht werden kann. Dies entspricht der Einführung eines Lagrange-Multiplikators, der die Erhaltung des Gesamtimpulses durch die Projektion gewährleistet. Zu dessen Bestimmung ist eine Geschwindigkeitskorrektur $\mathbf{u}_p^{\text{kor}} = \mathbf{c} h^{\text{kor}}(\varphi_p)$ derart gesucht, dass mit dem konstanten Vektor \mathbf{c}

$$\Delta \mathbf{p}_p = \int_\Omega \rho \varphi_p \mathbf{u}_p^{\text{kor}} dV = \mathbf{c} \int_\Omega \rho \varphi_p h^{\text{kor}} dV \quad (5.13)$$

gilt. Damit ergibt sich $\mathbf{c} = (\tilde{m}_p)^{-1} \Delta \mathbf{p}_p$ und die Projektion

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}} + \sum_{p=1}^{N_p} \varphi_p \left[(\mathbf{u}_p - \tilde{\mathbf{u}}) - \frac{1}{\tilde{m}_p} \Delta \mathbf{p}_p \right], \quad (5.14a)$$

$$\tilde{m}_p = \int_{\Omega} \rho \varphi_p h^{\text{kor}} \, dV \quad (5.14b)$$

mit der herunter interpolierten Masse \tilde{m}_p . Für die Wahl der räumlichen Verteilung $h^{\text{kor}}(\varphi_p)$ ergeben sich mehrere Möglichkeiten. Beispielsweise führt die Verwendung der Heaviside-Funktion H zu $h^{\text{kor}}(\varphi_p) = H(\varphi_p)$ und damit einer homogenen Korrekturgeschwindigkeit, die räumlich konstant über $\Omega_{\varphi_p > 0}$ aufgebracht wird. Diese Wahl ist in der ursprünglichen Publikation [129] des Autors vorgeschlagen. Des Weiteren ist mit $h^{\text{kor}}(\varphi_p) = \varphi_p$ auch eine Gewichtung mit der Phasenvariable möglich, sodass sich die Geschwindigkeitskorrektur stärker auf den Starrkörper konzentriert. Die Verwendung einer stärkeren Stauchung hin zur 0,5-Iso-Oberfläche bietet

$$h^{\text{kor}}(\varphi_p) = \varphi_p^3 (10 - 15\varphi_p + 6\varphi_p^2), \quad (5.15)$$

was eine diffuse Approximation der Indikatorfunktion darstellt (siehe Tabelle 3.1). Diese hat sich als zweckmäßig erwiesen und findet im weiteren Verlauf der Arbeit in den Fällen Anwendung, in denen eine Impulskorrektur vorgenommen wird. Im Rahmen der Arbeit durchgeführte Untersuchungen legen einen geringfügigen Einfluss der Verteilungsfunktion nahe. Insbesondere ergibt sich für jede Wahl von $h^{\text{kor}}(\varphi_p)$ eine Projektion, die den Gesamtimpuls unabhängig von der Breite δ_d des diffusen Übergangs erhält, d. h.

$$\mathbf{p}(\Omega) = \int_{\Omega} \rho \tilde{\mathbf{u}} \, dV = \int_{\Omega} \rho \mathbf{u}^{n+1} \, dV. \quad (5.16)$$

Für die im Kontext diffuser Methoden gängige arithmetische Geschwindigkeitsmitteilung trifft dies nur im Grenzübergang zur singulären Oberfläche, also für $\delta_d \rightarrow 0$, zu. Die Impulskorrektur nimmt für geringe Übergangsbreiten sehr kleine Werte an, und insbesondere gilt

$$\lim_{\delta_d \rightarrow 0} \Delta \mathbf{p}_p = \mathbf{0}.$$

Es bleibt noch die Frage der Phasenevolution zu klären. In Abschnitt 3.5 werden Möglichkeiten des erhaltenden Transports vorgestellt. Da im Fall von Starrkörpern neben dem Volumen auch die Form erhalten werden muss, kommt lediglich die Bestimmung aus der Referenzkonfiguration oder die Allen-Cahn-Gleichung mit den Anpassungen für Volumenerhaltung und Vermeidung der Krümmungsminimierung in Frage. Letztere führt zu

$$\partial_t \varphi_p + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi_p = \frac{M}{\epsilon} \left[a_1 \nabla^2 \varphi_p - a_1 \|\nabla \varphi_p\| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi_p}{\|\nabla \varphi_p\|} \right) - a_2 \partial_{\varphi_p} \psi(\varphi_p) \right] + \lambda^{\text{vol}}, \quad (5.17)$$

wobei λ^{vol} durch Gleichung (3.76) gegeben ist. Für die Bestimmung aus der Referenzkonfiguration kann ausgenutzt werden, dass die Bewegungsfunktion bei Starrkörperbewegung einfach zu bestimmen ist. In diesem Fall ist der Deformationsgradient

5.2 Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete

über den gesamten Starrkörper räumlich konstant und besitzt lediglich einen Rotationsanteil, d. h. es gilt $\forall \mathbf{x} \in \Omega_p$: $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}_p(t)$. Die inverse Bewegung ergibt sich damit zu

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{X}_p + \mathbf{R}_p^{-1}(t) [\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)], \quad (5.18)$$

wobei \mathbf{X}_p den Schwerpunkt des Körpers in der Anfangskonfiguration bezeichnet. Im zweidimensionalen Fall kann für den p -ten Körper der gesamte Rotationswinkel θ_p durch Integration der z -Komponente $\omega_p = \boldsymbol{\omega}_p \cdot \mathbf{e}_z$ seiner Winkelgeschwindigkeit bestimmt werden, womit der Rotationstensor \mathbf{R}_p durch

$$\theta_p = \int_0^t \omega_p \, d\tilde{t} \quad (5.19a)$$

$$\mathbf{R}_p^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \theta_p & \sin \theta_p \\ -\sin \theta_p & \cos \theta_p \end{bmatrix} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (5.19b)$$

gegeben ist. Im Dreidimensionalen kann die Darstellung des Rotationstensors über die *Euler-Rodrigues-Gleichung*

$$\mathbf{R}_p = [1 - \cos(\theta_p)] \mathbf{a}_p \otimes \mathbf{a}_p + \cos(\theta_p) \mathbf{1} + \sin(\theta_p) \boldsymbol{\epsilon}[\mathbf{a}_p] \quad (5.20)$$

genutzt werden, wobei \mathbf{a}_p ein Einheitsvektor ist, der die Drehachse angibt, und $\boldsymbol{\epsilon}$ den Permutationstensor darstellt. Für Details hierzu sei auf Brannon [18, Kapitel 5] verwiesen. Drehachse und Drehwinkel lassen sich über die Differentialgleichung

$$\boldsymbol{\omega}_p = \dot{\theta}_p \mathbf{a}_p + \cos(\theta_p) [1 - \cos(\theta_p)] \dot{\mathbf{a}}_p \times \mathbf{a}_p + \sin(\theta_p) \dot{\mathbf{a}}_p \quad (5.21)$$

unter der Bedingung $\|\mathbf{a}_p\| = 1$, durch Zeitintegration und z. B. einem Newton-Verfahren bestimmen. Der inverse Rotationstensor ist aufgrund seiner orthogonalen Eigenschaft als $\mathbf{R}_p^{-1} = \mathbf{R}_p^\top$ gegeben. Die Phasenvariable des Körpers kann dann mit

$$\varphi_p(\mathbf{x}, t) = \varphi_p^{\text{init}} \left(\mathbf{X}_p + \mathbf{R}_p^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \right) \quad (5.22)$$

aus den Anfangsbedingungen gesetzt werden.

Werden sphärische Körper betrachtet, vereinfacht sich die Bestimmung des Phasenfeldes erheblich, da die Geometrie einfach zu parametrieren ist, indem der Radius R_p und der Mittelpunkt \mathbf{x}_p des sphärischen Partikels genutzt wird. Die Koordinate η in Oberflächennormalenrichtung ist somit durch $\eta = \|\mathbf{r}_p\| - R_p$ gegeben. Es ist damit möglich, direkt ein Gleichgewichtsprofil des Phasenfeldes aus Abschnitt 3.4.1 vorzuschreiben. Ein analoges Vorgehen wird bei Yuki et al. [178] vorgeschlagen, wobei am tanh-Gleichgewichtsprofil noch die Modifikation

$$\varphi_p = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{6\eta}{\iota \delta_d} \right) \right] \quad (5.23)$$

$$\iota = \lambda \left[\frac{1}{6} (1 - \lambda^2) + 1 \right] \quad (5.24)$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^3 |n_i| \quad (5.25)$$

mit der richtungsabhängigen Breite $\iota \delta_d$ vorgenommen wird. Dabei sind n_i die Komponenten des nach außen gerichteten Normalenvektors.

5.2.3 Handhabung von Partikel-Partikel-Interaktion

In Partikelströmungen kann es zu Kollisionen zwischen Partikeln untereinander oder mit der Randgeometrie kommen. Die Wahrscheinlichkeit für solch einen Festkörperkontakt hängt vom Fluid und den Strömungsbedingungen ab. In einem schmalen Spalt zwischen zwei festen Oberflächen tritt aufgrund des Schmierfilmeffektes eine Drucksteigerung auf, die einer Annäherung der Partikel entgegenwirkt [54]. Die Stärke des Druckanstiegs hängt hierbei einerseits von der dynamischen Viskosität ab, andererseits steigt er mit kleiner werdendem Abstand der Grenzflächen stark an. In einer auf der Navier-Stokes-Gleichung basierenden Kontinuumstheorie, in der ein Reißen des Films nicht möglich ist, wird der Druck mit verschwindendem Abstand singular [53]. In der Realität kann insbesondere bei Flüssigkeiten eine hohe Viskosität dazu führen, dass der Fluidfilm zwischen zwei Partikeloberflächen nicht verschwindet und somit ein Festkörperkontakt gänzlich vermieden wird. Einige Autoren verwenden darum kein explizites Kontaktmodell und gehen stattdessen davon aus, dass der Schmierfilmeffekt jeden Kontakt verhindert [69]. Dies ist jedoch nicht gewährleistet, da z. B. hohe Annäherungsgeschwindigkeiten tatsächlich zu einem Reißen des Fluidfilms und somit zu Kontakt führen können. Des Weiteren kann in numerischen Simulationen der Spalt zwischen den festen Oberflächen meist nicht hinreichend gut aufgelöst werden, um den Schmierfilmeffekt richtig abzubilden [109, 73]. Dadurch sind die Druckkräfte des Films in der Praxis nur teilweise berücksichtigt. Sogenannte beinahe Kontaktmodelle berücksichtigen dies, indem diese Kräfte modelliert und explizit hinzugefügt werden (siehe z. B. [170]). Hierbei ist jedoch Vorsicht geboten, da ein Teil der Kräfte bereits aufgelöst ist und dieser dann fälschlicherweise doppelt einfließt. Dies lässt sich z. B. mit dem Ansatz von Gallier et al. [53] vermeiden, wobei nur der nicht aufgelöste Teil modelliert wird.

Darüber hinaus existieren Modelle für tatsächlichen Festkörperkontakt. Ein Beispiel ist die Modellierung als „weicher“ Kontakt wie bei Izard et al. [73], wobei sich die Festkörper überlappen können, was zu einer Rückstellkraft führt, die abhängig von der Überlappungsdistanz zusätzlich aufgebracht wird. Die Modelle in [78, 79] gehen von „hartem“ Kontakt aus. Sie basieren auf den Stoßgleichungen für starre Körper, entsprechend derer die Geschwindigkeit der Partikel korrigiert wird, wobei der Effekt des Fluidfilms im Spalt unberücksichtigt bleibt.

Im Folgenden wird ein Überblick über gängige Kontaktmodelle für Partikelströmungen gegeben. Zunächst ist das beinahe Kontaktmodell von Glowinski et al. [54] zu nennen. Dieses führt für den p -ten Partikel die zusätzliche Kollisionskraft

$$\mathbf{F}_p = -c_s \sum_{\substack{q=1, \\ q \neq p}}^{N_p} \left(\frac{d_{pq} - d_{\text{krit}}}{d_{\text{krit}}} \right)^2 H(d_{\text{krit}} - d_{pq}) \mathbf{n}_p \quad (5.26)$$

ein, wobei H die Heaviside-Funktion, c_s einen Skalierungsfaktor, d_{pq} den Abstand zwischen den Körperoberflächen und d_{krit} eine kritische Distanz darstellt, ab der die Kraft aktiv wird. Letztere ist von der Größenordnung der Diskretisierungsschrittweite zu wählen. Diese Kraft soll ein Überlappen zweier Partikel verhindern. Der Abstand d_{pq} ist bei sphärischen Partikeln durch

$$d_{pq} = \|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q\| - R_p - R_q \quad (5.27)$$

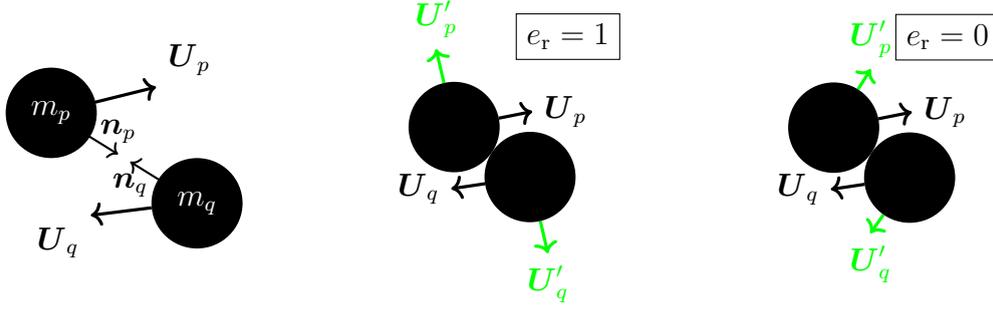


Abbildung 5.1: Skizze des Partikel-Partikel-Kontakts und die Geschwindigkeitskorrektur der Stoßgleichungen nach dem Modell aus [78] für elastische und inelastische Stöße.

mit den entsprechenden Radien R_p und R_q gegeben. Der konstante Skalierungsfaktor c_s ist problemspezifisch. Glowinski et al. [54] nutzen $c_s = mg/\mathfrak{h}^2$ mit der mittleren Diskretisierungsschrittweite \mathfrak{h} und der Masse m . Diese Wahl ist nur sinnvoll, wenn die Gravitation als charakteristische Beschleunigung des Problems gegeben ist und alle Partikel die gleiche Masse aufweisen. Problematisch ist, dass der Skalierungsfaktor nicht allgemein gewählt werden kann, die Lösung des Problems allerdings sehr stark beeinflusst [69, 8].

Izard et al. [73] verwenden zur Abbildung der Druckkräfte im Fluidfilm die experimentell bestimmte Kraft

$$\mathbf{F}_p = -6\pi\mu \sum_{\substack{q=1, \\ q \neq p}}^{N_p} \frac{(\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_q) \cdot \mathbf{n}_p}{d_{pq} + \epsilon_t} \left(\frac{R_p R_q}{R_p + R_q} \right)^2 \mathbb{H}(d_{\text{krit}} - d_{pq}) \mathbf{n}_p, \quad (5.28)$$

wobei $\epsilon_t \gtrsim 0$ eine Singularität der Kraft für verschwindenden Abstand verhindert und $d_{\text{krit}} = (R_p + R_q)/4$ gewählt wird. Zusätzlich findet dort ein Modell für „weichen“ Kontakt Anwendung, das eine zusätzliche Abstoßungskraft im Falle von Überlappung aufbringt.

Das Kontaktmodell von Johnson und Tezduyar [78] verwendet die Stoßgleichungen für starre Körper, um eine angepasste Geschwindigkeit \mathbf{U}'_p nach dem Stoß zu bestimmen. Diese basieren auf der Impulserhaltung

$$m_p \mathbf{U}'_p + m_q \mathbf{U}'_q = m_p \mathbf{U}_p + m_q \mathbf{U}_q \quad (5.29)$$

und der Annahme, dass die Relativgeschwindigkeit in Normalenrichtung mit dem Restitutionskoeffizient $e_r \in [0, 1]$ skaliert wird, d. h.

$$(\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_q) \cdot \mathbf{n}_p = e_r (\mathbf{U}'_p - \mathbf{U}'_q) \cdot \mathbf{n}_p. \quad (5.30)$$

Für elastische Stöße ist $e_r = 1$ und die Relativgeschwindigkeit in Normalenrichtung bleibt betragsmäßig erhalten, für inelastische Stöße ist $e_r = 0$ und sie dissipiert. Dies

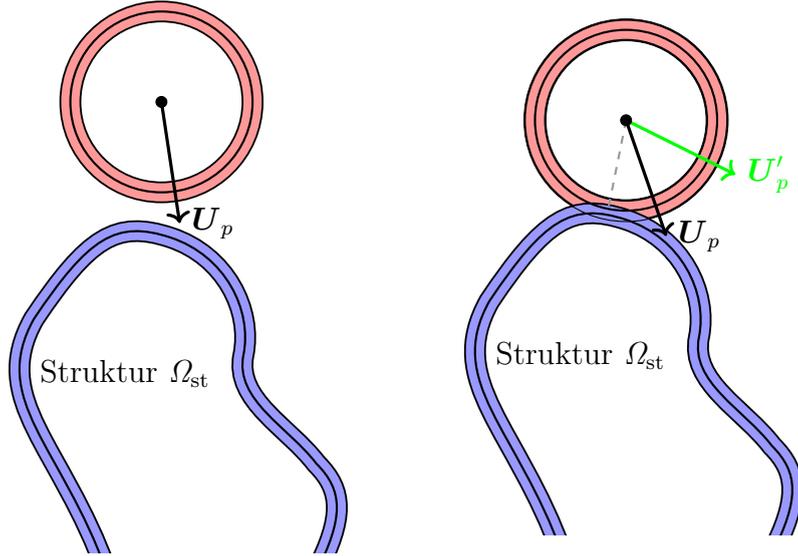


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung der Kollision zwischen einer Randstruktur und Starrkörperpartikeln. Links: Es liegt kein Kontakt vor. Rechts: Das Kontaktkriterium ist erfüllt und die Partikelgeschwindigkeit wird korrigiert.

führt zu den Stoßgleichungen

$$\mathbf{U}'_p = \mathbf{U}_p + (1 + e_r) \frac{m_q (\mathbf{U}_q - \mathbf{U}_p) \cdot \mathbf{n}_p}{m_p + m_q} \mathbf{n}_p \quad (5.31a)$$

$$\mathbf{U}'_q = \mathbf{U}_q + (1 + e_r) \frac{m_p (\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_q) \cdot \mathbf{n}_p}{m_p + m_q} \mathbf{n}_p. \quad (5.31b)$$

Abbildung 5.1 zeigt eine Skizze der Größen des Partikel-Partikel-Kontakts. Für Stöße mit festen Wänden ist $m_q \rightarrow \infty$ und $\mathbf{U}_q = \mathbf{0}$ zu wählen, was auf

$$\mathbf{U}'_p = \mathbf{U}_p - (1 + e_r) \mathbf{U}_p \cdot \mathbf{n}_p \mathbf{n}_p \quad (5.32)$$

führt.

5.2.4 Partikel-Solid-Kontakte im Phasenfeldkontext

Der Kontakt zwischen sphärischen Partikeln lässt sich auf recht einfache Weise handhaben. Die minimale Distanz der Oberflächen ergibt sich durch den Abstand der Massenmittelpunkte abzüglich beider Radien. Somit kann sehr einfach bestimmt werden, ob Kontakt vorliegt und wo sich der korrespondierende Kontaktpunkt befindet. Dadurch liegen bereits alle notwendigen Informationen zur Anwendung eines der beschriebenen Kontaktmodelle vor. Werden Reibungskräfte während des Kontakts vernachlässigt, ergeben sich zudem keinerlei zusätzliche Rotationsänderungen. Für den Partikel-Partikel-Kontakt wird in der vorliegenden Arbeit auf dieses Vorgehen zurückgegriffen. Auch der Kontakt zwischen Partikeln und der planaren Oberfläche des Rechengebiets lässt sich auf diese Weise handhaben.

Die Berücksichtigung beliebiger Festkörperstrukturen erfordert allerdings ein anderes Vorgehen zur Kontaktbestimmung. Im Rahmen dieser Arbeit wurde hierzu ein

5.2 Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete

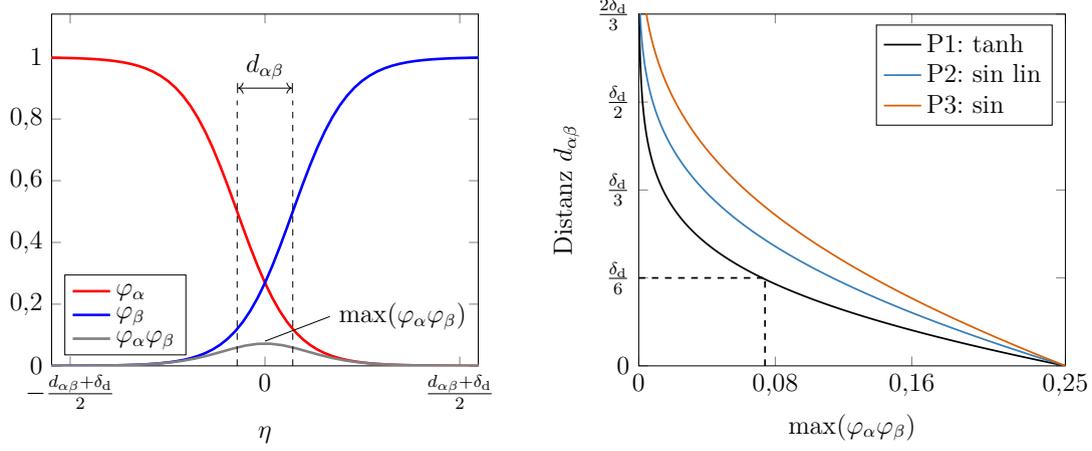


Abbildung 5.3: Das Produkt der Phasenvariablen φ_α und φ_β als Indikator für den Abstand zwischen Oberflächen. Links: Schematische Darstellung der Phasenfeldprofile und deren Produkt für die Distanz $d_{\alpha\beta} = \delta_d/6$. Rechts: Oberflächenabstand über den Maximalwert $\max(\varphi_\alpha \varphi_\beta)$ für die drei Profile aus Kapitel 3.4.1.

Ansatz im Kontext der Phasenfeldmethode eingeführt (siehe [129]). Hierzu wird die Oberfläche einer Phase α mit der Iso-Oberfläche $\Gamma_{\alpha\beta}$ gemäß Gleichung (3.8) identifiziert. Ein Kontakt zweier Phasen α und β liegt genau dann vor, wenn ein Punkt (\mathbf{x}, t) mit $\varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1/2 \wedge \varphi_\beta(\mathbf{x}, t) = 1/2$ existiert und somit $\varphi_\alpha \varphi_\beta = 1/4$ gilt. Überlappen sich die Übergangsbereiche zweier Körper, so ist das Produkt der Phasenvariablen $\varphi_\alpha \varphi_\beta$ ein Indikator für den Abstand $d_{\alpha\beta}$ der zwei Oberflächen (siehe Abbildung 5.3). Dieser kann aus dem Produkt eindeutig bestimmt werden, wenn angenommen wird, dass keine Überlappung der Körper stattfindet.

Dies wird für das Kollisionsmodell ausgenutzt. Es sei eine Partikelströmung mit N_p sphärischen Partikeln gegeben, wobei eine zusätzliche Randgeometrie in Form einer Festkörperstruktur repräsentiert durch die Phasenvariable φ_{st} vorliegt, wie in Abbildung 5.2 gezeigt. Das Kriterium für die Kollision des p -ten Partikels mit der Struktur ist damit

$$\exists \mathbf{x} \quad \text{mit} \quad \varphi_p(\mathbf{x}, t) \varphi_{st}(\mathbf{x}, t) \geq 1/4 - c_t \quad \wedge \quad \mathbf{U}_p(t) \cdot \mathbf{n}_p > 0, \quad (5.33)$$

wobei $\mathbf{n}_p = \mathbf{r}_p / \|\mathbf{r}_p\|$ gilt. Existiert ein solcher Punkt, ergibt sich die korrigierte Geschwindigkeit des Partikels

$$\mathbf{U}'_p = \mathbf{U}_p - 4\varphi_p \varphi_{st} (1 + e_r) (\mathbf{U}_p \cdot \mathbf{n}_p) \mathbf{n}_p. \quad (5.34)$$

Die Korrektur wird gemäß dem Modell von Johnson und Tezduyar [78] nach Gleichung (5.32) vorgenommen. Analog kann aber auch mit anderen Kontaktmodellen vorgegangen werden. Der Algorithmus für die Kollision ergibt sich damit für das räumlich diskretisierte Problem wie folgt:

Für jeden Körper p und jede Stützstelle $\mathbf{x}_{i,j,k}$ erfolgt

1. die Prüfung des Kriteriums (5.33),
2. die Bestimmung der korrigierten Geschwindigkeit \mathbf{U}'_p gemäß Gleichung (5.34), wenn das Kriterium erfüllt ist und

3. das Setzen der neuen Geschwindigkeit $\mathbf{U}_p = \mathbf{U}'_p$,

bevor die nächste Stützstelle betrachtet wird. Für die Toleranz $c_t > 0$ ist ein möglichst kleiner Wert zu setzen. Im Nachfolgenden kommt ein Wert $c_t = 1/20$ zur Anwendung. Diese Toleranz berücksichtigt, dass durch die numerische Umsetzung der Kontaktpunkt nicht auf dem Gitter liegt und somit nicht exakt getroffen wird. Dem trägt auch der Faktor $4\varphi_p\varphi_{st}$ Rechnung, der die Geschwindigkeitskorrektur gewichtet. Je weiter die Grenzflächen noch voneinander entfernt sind, desto geringer fällt die Korrektur aus. Liegt bereits Überlappung vor, dann ist $\varphi_p\varphi_{st} > 1/4$ und die Korrektur fällt größer aus. Es ist anzumerken, dass Letzteres nur im Falle einer nicht erzwungenen Summationsbedingung gilt, wenn das Phasenfeld der sphärischen Partikel direkt gesetzt wird. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich dieser Fall berücksichtigt. Das zweite Kriterium in (5.33) dient dazu eine doppelte Korrektur zu vermeiden, wenn z. B. zwei benachbarte Stützstellen Werte $\varphi_p\varphi_{st} \geq 1/4 - c_t$ aufweisen. Eine Geschwindigkeitskorrektur ist nur dann erforderlich, wenn der Partikel sich ansonsten noch weiter an die Struktur annähern würde.

Das vorliegende Modell erlaubt die Berücksichtigung von Interaktion der Partikelströmung mit beliebig komplexen Randgeometrien. Nach Kenntnis des Autors existieren keine Arbeiten, die ähnliche Problemstellungen adressieren. Der präsentierte Ansatz kann zudem erweitert werden, um Kontakt zwischen zwei beliebig geformten Körpern abzubilden.

5.2.5 Numerische Umsetzung und Algorithmus

Im Folgenden wird ein Überblick über die Umsetzung der Phasenfeld-DLM-Methode gegeben. Zur räumlichen Diskretisierung dient ein erhaltendes Verfahren finiter Differenzen auf äquidistanten kartesischen Gittern, was dadurch mit einer finiten Volumenformulierung zusammenfällt. Für die Zeitintegration kommt das Euler-sche Polygonzugverfahren zum Einsatz, was zeitlich erster Ordnung genau ist. Das Navier-Stokes-System wird mit einer Projektionsmethode nach Chorin gelöst, wobei eine versetzte Gitteranordnung Verwendung findet. Die entsprechenden Diskretisierungsschemata sind in Anhang A.2 näher dargelegt. Die Lösung des LGS aus der Poisson-Gleichung für den Druck erfolgt durch die Methode konjugierter Gradienten mit Vorkonditionierung auf einem vierfach gröberem Gitter mittels Gauß-Seidel-Verfahren. Zur Gewährleistung numerischer Stabilität wird eine adaptive Einstellung der Zeitschrittweite nach dem CFL-Kriterium vorgenommen. Die Diskretisierung des konvektiven Terms erfolgt mit dem γ -Schema, wobei der Gewichtungparameter zwischen Zentral- und Aufwindifferenzen adaptiv nach dem Zell-Peclét-Zahlkriterium eingestellt wird. Details hierzu finden sich in Anhang A.3. Sofern nicht anderes angegeben, ist für die entsprechende Simulation der zeitliche Maximalwert von $\max_t(\gamma) = 0$, sodass reine Zentralfdifferenzen vorliegen. Für die Approximation der Massendichte sowie der dynamischen Viskosität im diffusen Übergang kommt nachfolgend das arithmetische Mittel der phaseninherenten Werte zum Einsatz.

Zu Beginn jedes Zeitschritts $t = t_n$ sind die Größen \mathbf{x}_p^n , \mathbf{U}_p^n , $\boldsymbol{\omega}_p^n$, \mathbf{u}^n , p^n , und φ_α^n bekannt. Der Algorithmus gliedert sich in die nachfolgenden Schritte:

5.2 Phasenfeldformulierung der Methode fiktiver Gebiete

1. Explizite Lösung der Navier-Stokes-Gleichung ohne den Druckgradient

$$\mathbf{u}^{**} = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u} \right) \right] + \mathbf{f}^V - \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right]^n,$$

mit $\rho = \rho(\varphi_\alpha)$ und $\mu = \mu(\varphi_\alpha)$ z. B. nach Gleichung (3.55).

2. Lösung der Poisson-Gleichung für den Druck

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^{**}.$$

3. Projektion des Geschwindigkeitsfelds gemäß

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{**} - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1}$$

und Setzen von $\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}$ für $\mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f=1}$.

4. Berechnung der Schwerpunkts- und Winkelgeschwindigkeit des p -ten Körpers gemäß

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_p^{n+1} &= \frac{1}{\tilde{m}_p} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p^n \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \\ \boldsymbol{\omega}_p^{n+1} &= \mathbf{J}_p^{-1} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p^n \mathbf{r}_p \times \tilde{\mathbf{u}} \, dV. \end{aligned}$$

5. Berechnung der mittleren Geschwindigkeitskorrektur für alle $p = 1, \dots, N_p$

$$\mathbf{u}_p^{\text{av}} = \varphi^f \tilde{\mathbf{u}} + \varphi_p \mathbf{u}_p \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f < 1}.$$

6. Bestimmen des eingeführten Impulsfehlers

$$\Delta \mathbf{p}_p = \int_{\Omega} \rho \varphi_p \mathbf{u}_p^{\text{av}} \, dV - \int_{\Omega} \rho \varphi_p \tilde{\mathbf{u}} \, dV.$$

7. Bestimmung des neuen Geschwindigkeitsfeldes gemäß Gleichung (5.14)

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}} + \sum_{p=1}^{N_p} \varphi_p \left[(\mathbf{u}_p - \tilde{\mathbf{u}}) - \frac{1}{\tilde{m}_p} \Delta \mathbf{p}_p \right] \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f < 1}.$$

8. Prüfen nach Kollisionen und entsprechende Anpassung der Geschwindigkeit bei Partikelkontakt (Details siehe Abschnitt 5.2.3 und 5.2.4).

9. Zeitintegration des Schwerpunktes aller Körper mit der Trapezregel

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \frac{1}{2} \left(\mathbf{U}_p^n + \mathbf{U}_p^{n+1} \right) \Delta t.$$

10. Bestimmung des neuen Phasenfeldes φ_α^{n+1} z. B. gemäß Gleichung (5.22) oder durch direktes Setzen für sphärische Partikel.

5.3 Verifikation und Validierung der Fluid-Solid-Interaktion

Um die Güte der Ergebnisse der vorgestellten Simulationsmethode bewerten zu können, wird in diesem Abschnitt eine Verifikation und Validierung vorgenommen. Im vorliegenden Kontext befasst sich die Verifikation mit der Quantifizierung numerischer Fehler, die angeben, wie gut die zugrundeliegenden Modellgleichungen gelöst werden. Insbesondere ist das Konvergenzverhalten der numerischen und algorithmischen Umsetzung von Interesse, d. h. die Frage ob und mit welcher Genauigkeitsordnung Konvergenz vorliegt. Die Validierung adressiert die Bestimmung von Modellfehlern, was zum Beispiel durch den Vergleich mit Experimenten oder anderen Simulationsverfahren anhand bestimmter Anwendungsfälle ermöglicht wird. Beides ist Gegenstand des nachfolgenden Abschnitts. Zunächst erfolgt die Verifikation der vorliegenden Methode anhand einer Konvergenzstudie in Raum und Zeit und sodann eine Validierung anhand des Vergleichs mit experimentellen Daten sowie empirischen Korrelationen.

5.3.1 Sphärischer Partikel im freien Fall

Als erster Verifikations- und Validierungsfall wird eine unter Gravitation fallende Sphäre in einem Fluid betrachtet. Der sphärische Partikel wird unter Gravitation beschleunigt und erreicht eine Endgeschwindigkeit, bei der sich Gravitationskraft und Strömungswiderstand im Gleichgewicht befinden. Letzterer spaltet sich dabei in einen Druck- und Reibungsanteil auf. Charakteristische Kenngrößen des Problems sind die Archimedes-Zahl

$$Ar = \frac{8\rho_f(\rho_p - \rho_f)R_p^3g}{\mu^2} \quad (5.35)$$

basierend auf dem Durchmesser des Partikels und das Dichteverhältnis ρ_p/ρ_f . Basierend auf der sich ergebenden Endgeschwindigkeit U_e des freien Falls im Gleichgewicht lässt sich die Reynolds-Zahl $Re_e = 2R_p\rho_f U_e/\mu$ definieren. Die initiale Beschleunigung des Partikels ist analytisch durch

$$\frac{d\mathbf{U}_p(t=0)}{dt} = \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p + \rho_f/2} \mathbf{g} \quad (5.36)$$

bestimmt. Zudem ergibt sich aus dem Kräftegleichgewicht zwischen Strömungswiderstand und Gravitation im freien Fall der Zusammenhang

$$Re_e^2 = \frac{4}{3c_w} Ar \quad (5.37)$$

mit dem Widerstandskoeffizienten c_w . Im folgenden Abschnitt wird die charakteristische Zeitskala $t_c = \sqrt{R/g}$ und das entsprechende dimensionslose Zeitmaß $t^* = t\sqrt{g/R}$ verwendet, wobei der Partikelradius abkürzend als $R = R_p$ notiert ist.

Konvergenzstudie

Zunächst erfolgt eine Konvergenzuntersuchung der vorliegenden Methode im Zweidimensionalen. Hierfür wird ein sphärischer Partikel betrachtet, der aus einer Höhe

5.3 Verifikation und Validierung der Fluid-Solid-Interaktion

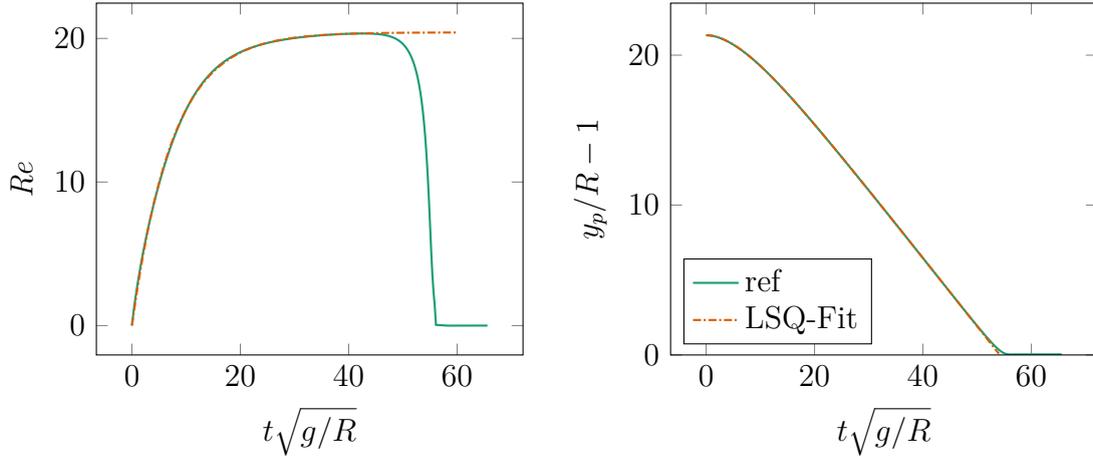


Abbildung 5.4: Hochaufgelöste Referenzlösung eines fallenden sphärischen Partikels mit zugehöriger Approximation mittels Methode kleinster Fehlerquadrate (LSQ-Fit). Links: Zeitverlauf der Reynolds-Zahl des fallenden Partikels. Rechts: Normierter Abstand $y_p/R - 1$ zwischen Wand und Partikeloberfläche.

	Zellen	Zeitschritte	$R/\Delta x$	$\delta_d/\Delta x$	R/δ_d
Referenz	2400×1200	119 046	90,0	8,0	11,25
fein	400×200	10 000	15,0	2,5	6,0
mittel	300×150	7500	11,25	2,5	4,5
grob	240×120	6000	9,0	2,5	3,6

Tabelle 5.1: Auflösung der verschiedenen Simulationen zur Konvergenzstudie für einen fallenden Partikel. Anzahl der Gitterzellen in x - und y -Richtung, Anzahl der Zeitschritte, sowie Verhältnisse zwischen Partikelradius R , räumlicher Diskretisierungsschrittweite Δx und Breite δ_d des diffusen Übergangs.

von $21R$ fällt, wobei $Ar = 800$ und $\rho_p/\rho_f = 1,2$ gewählt sind. Breite und Höhe des Rechengebiets betragen $L_x = 0,075^{-1}R \approx 13R$ und $L_y = 2L_x$. Am unteren Gebietsrand gelten Haftbedingungen und das Kollisionsmodell nach Gleichung (5.32) basierend auf inelastischen Stößen ($e_r = 0$) findet Anwendung. Ansonsten sind Fernfeldrandbedingungen aufgeprägt, d. h. die Normalgeschwindigkeit sowie der tangentielle Geschwindigkeitsgradient verschwinden dort. Die Simulationen werden auf drei unterschiedlich feinen Gittern (fein, mittel, grob) durchgeführt. Dabei kommt die Projektionsmethode ohne Impulskorrektur und das Vorschreiben des sinusförmigen Phasenfeldprofils gemäß Gleichung (3.29) zum Einsatz. Die Breite des diffusen Übergangs skaliert linear mit der numerischen Auflösung und die Zeitschrittweite ist äquidistant. Als Referenzlösung dient eine extrem gut aufgelöste Simulation, die bezogen auf das ansonsten feinste Gitter eine ca. halb so kleine Übergangsbreite δ_d und eine achtfach kleinere Diskretisierungsschrittweite im Raum aufweist. Für die Referenzsimulation wird eine dynamische Zeitschrittweite verwendet (siehe Anhang A.3), was zu einer im Mittel zwölffach höheren Zeitauflösung führt. Details sind Tabelle 5.1 zu entnehmen.

In Abbildung 5.4 finden sich für die Referenzlösung die Zeitentwicklungen des Abstands zwischen unterer Wand und Partikel sowie der Reynolds-Zahl als Maß für die Partikelgeschwindigkeit. Die Geschwindigkeit des Partikels im freien Fall gehorcht

einer Exponentialfunktion gemäß

$$Re(t^*) = Re_e [1 - \exp(-\tau^* t^*)], \quad (5.38)$$

wobei Re_e die Reynolds-Zahl basierend auf der Gleichgewichtsgeschwindigkeit U_e ist. Mittels der *Methode kleinster Fehlerquadrate* (englisch: Least Squares, LSQ), wird mit dem Ansatz (5.38) eine Approximation an die Simulationsdaten gewonnen. Es zeigt sich dabei eine sehr gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen. Gleiches gilt für alle anderen durchgeführten Simulationen. Entsprechend wird Re_e nachfolgend immer mittels LSQ-Ansatz bestimmt. Zudem ist zu beobachten, dass der Partikel in Wandnähe abbremst und nach dem Wandkontakt zum Liegen kommt, ohne dass Penetration der Wand durch den Partikel auftritt. Dies zeigt die Funktionsfähigkeit des Kollisionsmodells.

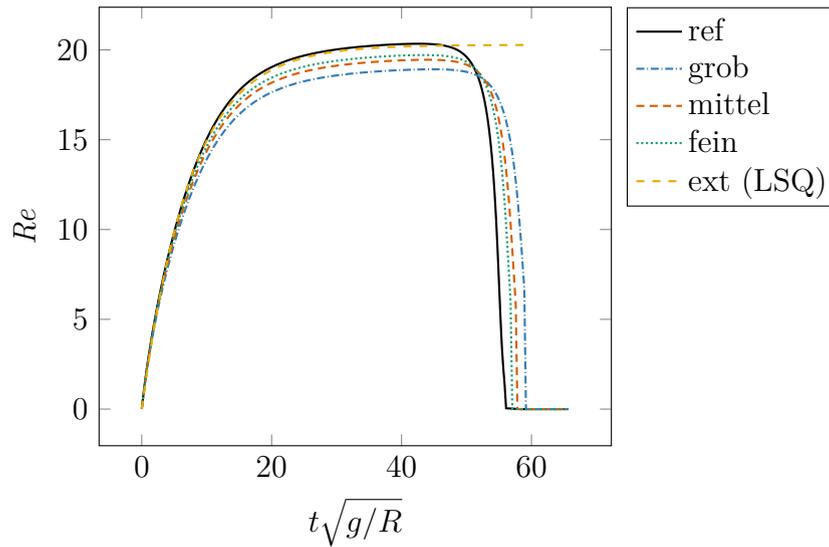


Abbildung 5.5: Zeitliche Entwicklung der Partikel-Reynolds-Zahl. Vergleich zwischen den unterschiedlich aufgelösten Simulationen mit der Referenzlösung und dem LSQ-fit basierend auf der mittels RE extrapolierten Endgeschwindigkeit (ext).

	Re_e	e^{rel}	GCI	τ^*
grob	18,937	7,2579 %	8,8741 %	0,133 82
mittel	19,483	4,5840 %	5,1177 %	0,134 58
fein	19,749	3,2813 %	3,3677 %	0,135 84
extrapoliert	20,281	0,6758 %	-	-
Referenz	20,419	-	-	0,133 73

Tabelle 5.2: Ergebnisse der Simulationen und Richardson-Extrapolation (RE). Angaben für die verschiedenen Gitter (grob, mittel, fein), Referenzlösung und extrapolierte Werte der RE. Der relative Fehler e^{rel} bezieht sich auf die Abweichung zur Referenzlösung, der GCI ergibt sich aus der Abschätzung mittels RE. Sowohl e^{rel} als auch GCI beziehen sich auf die Werte von Re_e .

Die *Richardson-Extrapolation* (RE) dient dazu, Diskretisierungsfehler abzuschätzen sowie eine extrapolierte Lösung basierend auf den Ergebnissen der drei unterschiedlich aufgelösten Simulationen zu gewinnen. Details bezüglich der Methode sind in

Anhang A.4 aufgeführt. Die Verfeinerungsfaktoren dabei sind $5/4$ vom groben auf das mittlere und $4/3$ vom mittleren auf das feine Gitter. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse findet sich in Abbildung 5.5 sowie in Tabelle 5.2. Die Anwendung der RE auf Re_e ergibt eine Abschätzung der Konvergenzordnung von 1,815. Dies ist plausibel, da eine Kombination aus Diskretisierungsschemata erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Raum Verwendung finden. Dabei ist anzumerken, dass die automatische Adaption des γ -Schemas bei den vorliegenden Simulationen durchweg $\max_t(\gamma) = 0$ liefert und somit reine Zentralkdifferenzen beim konvektiven Term vorliegen. Es zeigt sich, dass der extrapolierte Wert als Abschätzung der gitterunabhängigen Lösung aus der RE sehr gut mit der Referenzlösung übereinstimmt. Die Fehlerabschätzung mittels des sogenannten Grid Convergence Index GCI nach Roache [133] (Sicherheitsfaktor 1,25) liefert eine gute Abschätzung des tatsächlichen Diskretisierungsfehlers und ist zudem konservativ. Bezüglich τ^* wird keine RE vorgenommen, da der Wert nicht unabhängig von Re_e ist und somit zu der korrespondierenden Endgeschwindigkeit passen muss. Die Anwendung der RE ist in diesem Kontext daher nicht sinnvoll, insbesondere ergibt sich erwartungsgemäß für τ^* keine Konvergenz gemäß Gleichung (A.45). Abschließend lässt sich für den vorliegenden Verifikationsfall eine Konvergenz der Simulationen mittels Phasenfeld-DLM-Methode feststellen.

Einfluss der Impulskorrektur

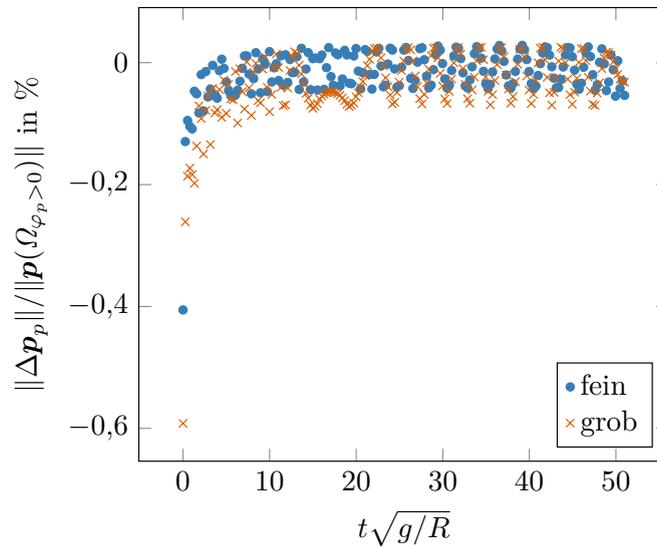


Abbildung 5.6: Durch die rein arithmetische Starrkörperprojektion eingeführter Impulsfehler zu ausgewählten Zeitpunkten für das grobe und feine Gitter.

Für das grobe und feine Gitter aus Tabelle 5.2 ist in Abbildung 5.6 der durch die arithmetische Starrkörperprojektion mit der Geschwindigkeit \mathbf{u}_p^{av} eingeführte Impulsfehler $\Delta \mathbf{p}_p$ zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Dieser ist normiert mit dem Gesamtimpuls

$$\mathbf{p}_p(\Omega_{\varphi_p > 0}) = \int_{\Omega_{\varphi_p > 0}} \rho \tilde{\mathbf{u}} \, dV,$$

welcher sich vor der Projektion aus der Impulsbilanz ergibt. Es zeigt sich, dass dieser Fehler für verschiedene Zeitschritte fluktuiert, wobei sich für das feine Gitter und dem entsprechend kleineren diffusen Übergang auch geringere Impulsabweichungen ergeben. Dies entspricht den Erwartungen. Für das grobe Gitter liegen die Abweichungen anfangs bei bis zu 0,6 % und im Bereich des Fallens im Gleichgewicht bei bis zu 0,07 %. Für das feine Gitter sind die maximalen Abweichungen jeweils um etwa einen Faktor von 1,75 kleiner. Tendenziell wird der Impuls durch die Projektion zumeist gemindert. Zwar sind die inkrementell eingeführten Abweichungen im Promillebereich und damit sehr klein, dennoch führt dies zu einem signifikanten Einfluss auf die Lösung. Durch die Impulskorrektur nach Gleichung (5.14) ergibt sich nach der Starrkörperprojektion der identische Impuls, der mit dem vorläufigen Geschwindigkeitsfeld $\tilde{\mathbf{u}}$ und damit der Impulsbilanz vorhergesagt wird. Dies gilt unabhängig von δ_d oder der Wahl des Übergangsprofils. Für die nachfolgend gezeigten Simulationen findet aus diesem Grund die Starrkörperprojektion mit der Impulskorrektur Anwendung, um die Genauigkeit der Ergebnisse zu erhöhen.

Validierung

Nachfolgend wird die Validierung für das dreidimensionale Problem einer fallenden Kugel vorgenommen. Hierzu liegen experimentelle Messungen von Cate et al. [160], sowie Simulationsergebnisse von Apte et al. [8] für eine fallende Kugel in einem Behälter vor. Für freien Fall existieren einige empirische Korrelationen, mit denen sich die Gleichgewichtsgeschwindigkeit bzw. die entsprechende Reynolds-Zahl Re_e bestimmen lässt. Die empirische Schiller-Naumann-Korrelation [137] liefert für eine frei fallende Kugel

$$c_w = \frac{24}{Re_e} (1 + 0,15 Re_e^{0,687}) \quad (5.39)$$

und somit aufgrund von Gleichung (5.37)

$$Re_e = \frac{Ar}{18 + 2,7 Re_e^{0,687}}, \quad (5.40)$$

wodurch eine implizite Bestimmungsgleichung von Re_e in Fixpunktform vorliegt. Weitere empirische Korrelationen existieren von Brown und Lawler [20], die im Bereich kleiner Reynolds-Zahlen

$$Re_e = \frac{Ar(22,5 + \tilde{d}^{2,046})}{0,258\tilde{d}^{4,046} + 2,81\tilde{d}^{3,046} + 18,0\tilde{d}^{2,046}}, \quad (5.41a)$$

$$\tilde{d} = Ar^{1/3} \quad (5.41b)$$

sind sowie von Abraham [2] die Korrelation

$$Re_e = \frac{\sqrt{9,06^2/18 Re_e Ar}}{\sqrt{Re_e + 9,06}}. \quad (5.42)$$

Zur Validierung der vorgestellten Phasenfeldfeld-DLM-Methode dienen Simulationen mit einer Auflösung von $100 \times 160 \times 100$, wobei das Rechengebiet die Abmaße

5.3 Verifikation und Validierung der Fluid-Solid-Interaktion

$13,33 \times 21,33 \times 13,33$ bezogen auf den Partikelradius hat. Die Kugel wird aus der Höhe $16R$ ohne Initialgeschwindigkeit fallen gelassen. Für die Simulation im Behälter werden an allen Rändern Haft- und Impermeabilitätsbedingung vorgegeben. Die Breite des diffusen Übergangs ist als $\delta_d = 2,5\Delta x$ gewählt, wobei das sinusförmigen Phasenfeldprofil gemäß Gleichung (3.29) vorgeschrieben wird. Zudem findet die Impulskorrektur nach Gleichung (5.14) statt, welche die im obigen Abschnitt gezeigten Impulsabweichungen durch die Starrkörperprojektion vermeidet.

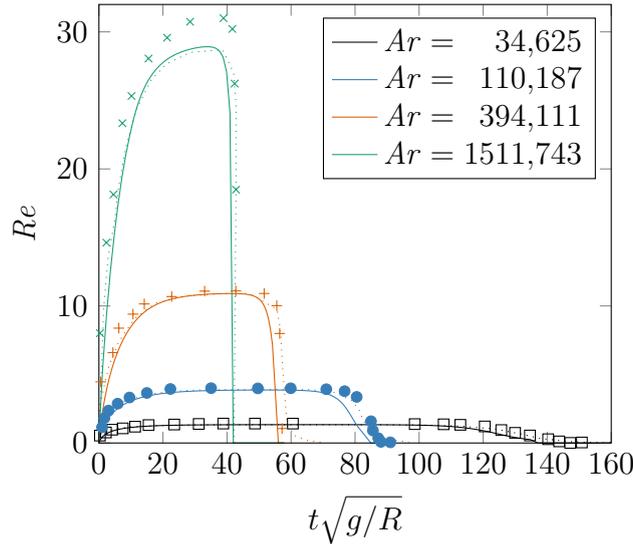


Abbildung 5.7: Ergebnisse für eine fallende Kugeln in einem geschlossenen Behälter bei unterschiedlichen Archimedes-Zahlen. Gezeigt ist die Reynolds-Zahl als Maß für die Fallgeschwindigkeit über die Zeit. Es erfolgt ein Vergleich der vorliegenden Phasenfeld-DLM-Methode (durchgezogen) mit Simulationsergebnissen aus [8] (gepunktet) und experimentellen Messungen aus [160] (Symbole), wobei sich eine gute Übereinstimmung ergibt.

Abbildung 5.7 zeigt für die fallende Kugel in einem Behälter den Zeitverlauf der Reynolds-Zahl des Partikels für vier unterschiedliche Archimedes-Zahlen, wobei ein Vergleich mit den Literaturwerten erfolgt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der DLM-Formulierung von [8], die bei gleicher numerischer Auflösung erfolgen. Tendenziell liegen die Werte der Gleichgewichtsgeschwindigkeit für die Phasenfeld-DLM Methode etwas höher (siehe Tabelle 5.3), sodass sie noch etwas näher an den experimentellen Werten aus [160] liegen. Bezüglich diesen sind die relativen Abweichungen 5,9 %, 3,4 %, 1,7 % und 4,3 % aufsteigend nach der Archimedes-Zahl. Die größte Abweichung ergibt sich somit bei der geringsten Archimedes-Zahl 34,6 gefolgt von der Abweichung bei der Höchsten (1512). Insgesamt lässt sich eine gute Übereinstimmung feststellen.

Eine zweite Simulationsstudie wird für den freien Fall des Partikels durchgeführt. Hierfür werden Fernfeldrandbedingungen vorgegeben, d. h. Impermeabilität und verschwindende transversale Geschwindigkeitsgradienten. In x - und z -Richtung wird die Gebietsgröße auf den 20-fachen Radius erhöht, um den Einfluss des Fernfeldrandes stärker zu reduzieren. Die Auflösung der Simulationen sind $180 \times 192 \times 180$. Bezogen auf den freien Fall zeigt sich, dass dort erwartungsgemäß höhere Fallgeschwindigkeiten erzielt werden als für das Fallen im Behälter, was aus Tabelle 5.3 ersichtlich ist. Im Vergleich zu den Korrelationen tendiert die Simulation zu einer Unterschätzung, die

Fallen in geschlossenem Behälter

	Apte [8]	Cate [160]	P-DLM
$Ar = 34,625$	1,33	1,42	1,34
$Ar = 110,187$	3,91	4,00	3,87
$Ar = 394,111$	10,89	11,10	10,91
$Ar = 1511,743$	28,70	30,22	28,92

Freier Fall

	S-N [137]	B-L [20]	Abraham [2]	P-DLM
$Ar = 34,625$	1,59	1,64	1,49	1,50
$Ar = 110,187$	4,34	4,34	4,09	4,08
$Ar = 394,111$	11,99	11,62	11,57	11,19
$Ar = 1511,743$	32,02	33,18	31,88	29,90

Tabelle 5.3: Reynolds-Zahl Re_e basierend auf der Gleichgewichtsgeschwindigkeit bei verschiedenen Archimedes-Zahlen. Für den Fall in einem geschlossenem Behälter erfolgt der Vergleich der Phasenfeld-DLM Methode (P-DLM) mit Apte et al. [8] und Experimenten von Cate et al. [160]. Für freien Fall werden empirische Korrelationen mit Ergebnissen der P-DLM verglichen.

mit höherer Archimedes-Zahl steigt. Die Simulation stimmt mit der nächstgelegenen Korrelation [2] für $Ar = 34,6$ und $Ar = 110,2$ sehr gut überein, während sich für die höheren Archimedes-Zahlen entsprechende Abweichungen von 3,2 % und 6,2 % ergeben. Es ist anzumerken, dass durch die Wahl größerer Berechnungsgebiete und entsprechend geringeren Einfluss der Fernfeldränder genauere Ergebnisse erzielt werden können, wobei die Endgeschwindigkeiten mit der Größe des Rechengebietes etwas ansteigen wird. Vor diesem Hintergrund ergibt sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Insbesondere bewegen sich die Abweichungen der Simulation in dem Rahmen, in dem die verschiedenen Korrelationen untereinander abweichen. Insgesamt lässt sich im Blick auf die betrachteten Validierungsfällen sagen, dass die vorgeschlagene Methode im Stande ist, die Partikelbewegung quantitativ abzubilden.

5.3.2 Validierung bei vorgegebener Bewegung

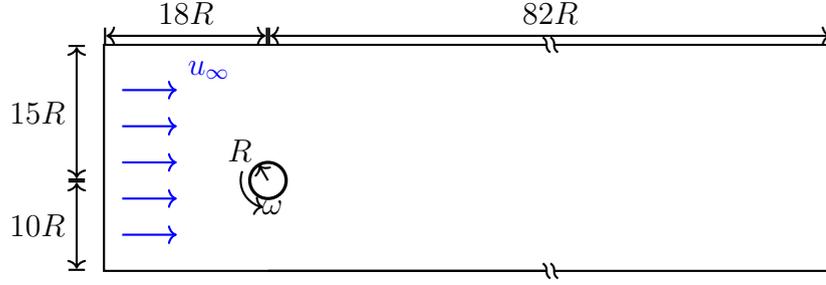


Abbildung 5.8: Schematische Darstellung des Simulationsaufbaus der Zylinderumströmung. Der Zylinder ist im Maßstab um den Faktor 2 vergrößert dargestellt.

Als Validierungsfall der Starrkörperprojektion bei vorgegebener Bewegung dient die laminare Strömung um einen Zylinder mit Radius R , welcher mit einer vorgegebenen Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega}_p = \omega \mathbf{e}_z$ rotiert. Die Anströmung erfolgt mit der Geschwindigkeit u_∞ . Weitere Details der Simulationsanordnung sind Abbildung 5.8 zu entnehmen. Die Simulation erfolgt zweidimensional, wobei am linken Rand des Rechengebietes die konstante Geschwindigkeit $\mathbf{u}(x=0, y, t) = u_\infty \mathbf{e}_x$ vorgegeben wird. Der rechte Fernfeldrand befindet sich in einer Entfernung von $80R$ bezogen auf den Zylinder. Am oberen und unteren Rand gilt

$$\forall (x, y=0, t), (x, y=25R, t): \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_y = 0 \quad \wedge \quad (\mathbf{L}\mathbf{e}_y) \cdot \mathbf{e}_x = 0.$$

Die Parameter sind so gewählt, dass sich die Reynolds-Zahl $Re = 2R\rho u_\infty/\mu = 200$ ergibt. Es werden Simulationen bei verschiedenen entdimensionalisierten Rotationsgeschwindigkeiten $\tilde{\gamma} := \omega R/u_\infty$ im Bereich zwischen 0 und 3 durchgeführt. Die Diskretisierung des Gebietes erfolgt mit 2400×600 Zellen. Die Breite des diffusen Übergangs ist so gewählt, dass $\delta_d/\Delta x = 2,5$ gilt.

Bei der vorliegenden Strömung kommt es für einen nicht rotierenden Zylinder, also $\tilde{\gamma} = 0$, zu Instabilitäten im Nachlauf. Diese verursachen einen periodischen Strömungsabriss und die Formation einer Kármánschen Wirbelstraße stromabwärts. Eine Rotation des Zylinders führt zu einer Asymmetrie in der Strömung, aus der eine im zeitlichen Mittel nicht verschwindende Auftriebskraft resultiert. Dies ist der sogenannte Magnus-Effekt. Basierend auf der Frequenz f , in der die Strömungsseparation auftritt, lässt sich die Strouhal-Zahl $St = 2Rf/u_\infty$ definieren. Weitere relevante Größen des Problems sind der Auftriebskoeffizient c_a und der Strömungswiderstandsbeiwert c_w . Diese ergeben sich aus der Oberflächenkraft

$$\mathbf{F}_p = \int_{\partial\Omega_p} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, dO \quad (5.43)$$

durch die Normierung

$$c_a = \frac{\mathbf{F}_p \cdot \mathbf{e}_y}{\rho_p R (u_\infty)^2} \quad (5.44a)$$

$$c_w = -\frac{\mathbf{F}_p \cdot \mathbf{e}_x}{\rho_p R (u_\infty)^2}. \quad (5.44b)$$

5 Einphasenströmungen mit eingetauchten Starrkörpern

Im Kontext der Phasenfeld-DLM-Methode kann \mathbf{F}_p über

$$\mathbf{F}_p = \int_{\Omega} \mathbf{f}^K dV \approx \int_{\Omega} \frac{\varphi_p \rho_p}{\Delta t} (\mathbf{u}_p - \tilde{\mathbf{u}}) dV \quad (5.45)$$

gemäß Gleichung (5.8) bestimmt werden, wenn eine verschwindende Bewegung erzwungen wird. Im Folgenden seien mit \bar{c}_a und \bar{c}_w die zeitlichen Mittelwerte von Auftriebs- und Widerstandsbeiwert im eingeschwungenen Bereich bezeichnet.

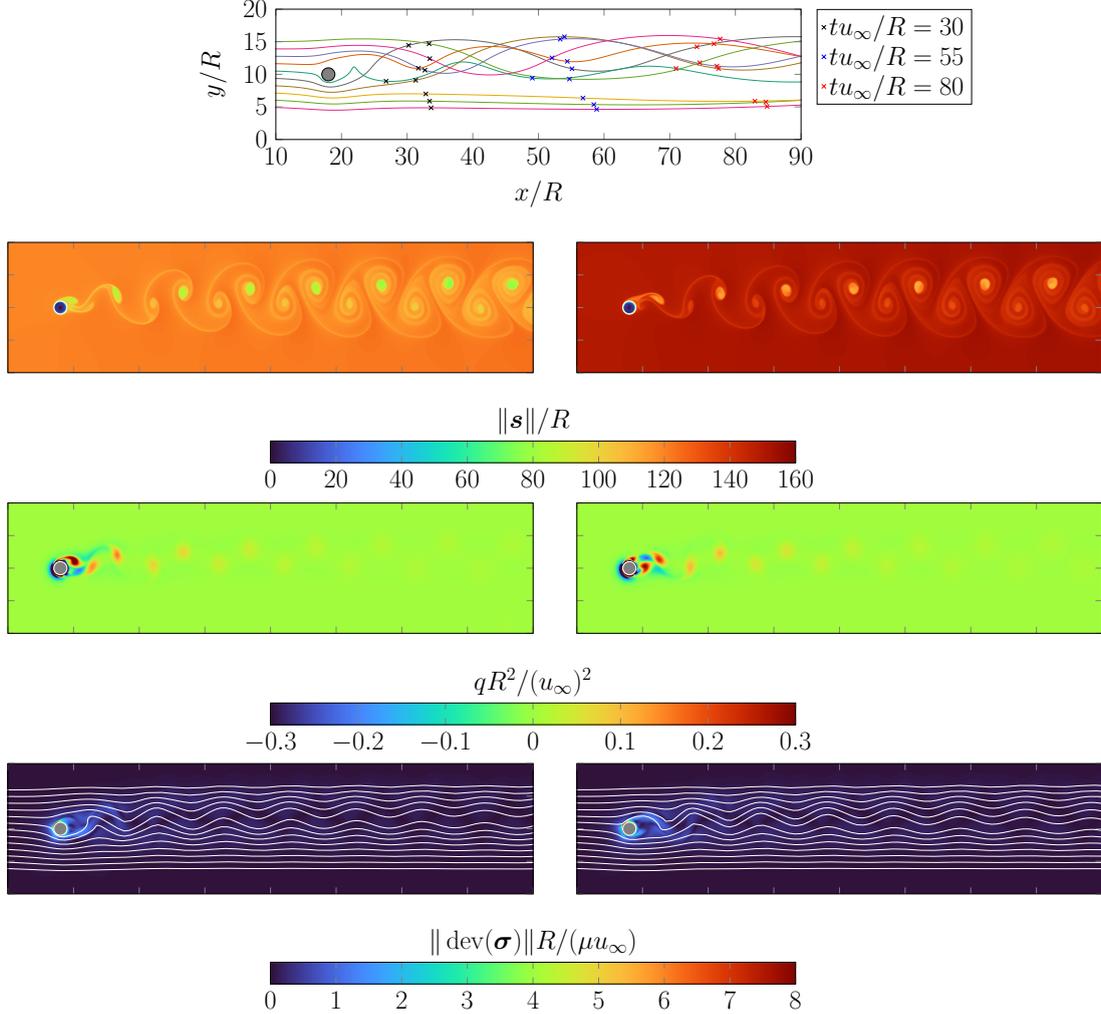


Abbildung 5.9: Visualisierung der Zylinderumströmung für $\tilde{\gamma} = 1$ und einen Ausschnitt des Simulationsgebietes. Von oben nach unten: Bahnlinien und Position der entsprechenden materiellen Punkte zu verschiedenen Zeiten. Betrag des Verschiebungsfeldes \mathbf{s} . Negativwerte der zweiten Grundinvariante $q := -\text{sp}(\mathbf{L}\mathbf{L})$. Frobenius-Norm der deviatorischen Spannungen $\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})$ und Stromlinien. Alle Größen sind entsprechend normiert. Die linke bzw. rechte Spalte zeigen die Strömung zu den Zeiten $tu_\infty/R = 98$ und $tu_\infty/R = 124$.

Abbildung 5.9 visualisiert die Strömung für den Fall $\tilde{\gamma} = 1$. Es zeigen sich darin deutlich die entstehenden Wirbelstrukturen im Nachlauf, was am Verschiebungsfeld und an den Negativwerten der zweiten Grundinvariante $q := -\text{sp}(\mathbf{L}\mathbf{L})$ des Geschwindigkeitsgradienten zu erkennen ist. Letzterer dient zur Detektion von Wirbeln nach dem sogenannten Q-Kriterium [77], wobei für $q > 0$ ein Wirbel vorliegt. Zudem ist

5.3 Verifikation und Validierung der Fluid-Solid-Interaktion

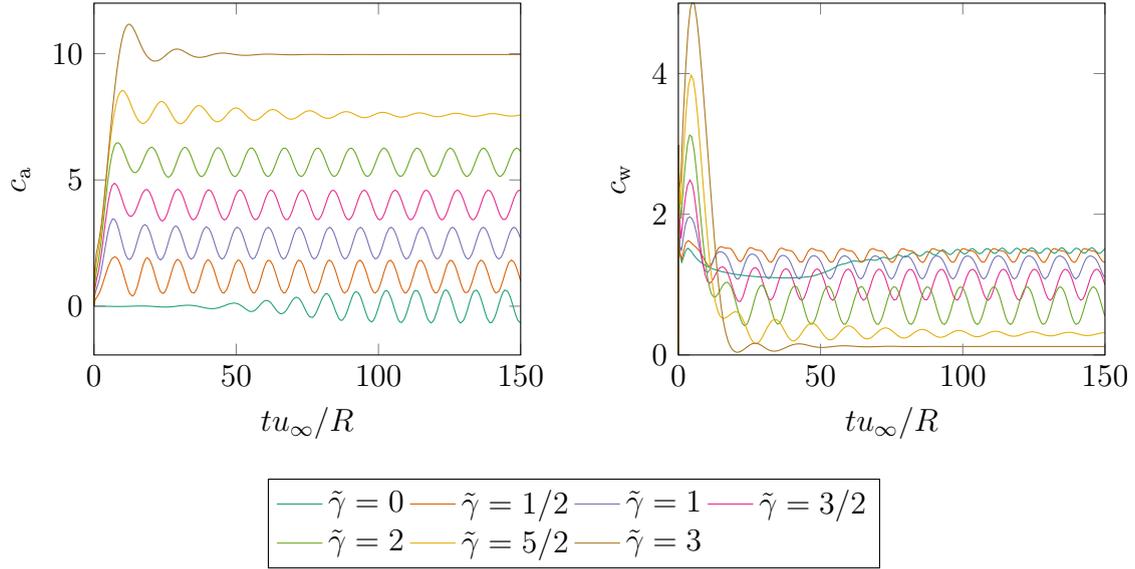


Abbildung 5.10: Entwicklung der Kräfte auf den Zylinder über die Zeit für verschiedene Rotationsgeschwindigkeiten $\tilde{\gamma}$. Links: Auftriebsbeiwert c_a . Rechts: Widerstandsbeiwert c_w .

$\tilde{\gamma}$	Phasenfeld-DLM			Mittal und Kumar [112]		
	St	\bar{c}_a	\bar{c}_w	St	\bar{c}_a	\bar{c}_w
0	0,195	0,000	1,330	0,193	0,000	1,316
1	0,192	2,549	1,295	0,192	2,532	1,088
2	0,176	5,625	0,701	-	5,358	0,298
3	-	10,070	0,228	-	10,316	0,043

Tabelle 5.4: Vergleich von zeitlich gemitteltem Auftriebs- und Widerstandsbeiwert sowie der Strouhal-Zahl St mit Ergebnissen von Mittal und Kumar [112].

die Asymmetrie, welche durch die Rotation des Zylinders eingeführt wird, ersichtlich. Die resultierenden Kräfte, die auf den Zylinder wirken, sind in Abbildung 5.10 über die Zeit aufgetragen. Diese sind durch den Auftriebsbeiwert c_a und Widerstandsbeiwert c_w gegeben. Eine größere Rotationsgeschwindigkeit führt einerseits zu einer Reduktion des Strömungswiderstands und andererseits zu einem höheren Auftrieb. Es existiert eine kritische Rotationsgeschwindigkeit $\tilde{\gamma}_k$, bei deren Überschreiten die Wirbelstrukturen über die Zeit gedämpft werden und eine stationäre Lösung existiert. Nach Experimenten von Coutanceau und Ménéard [34] liegt dieser Wert bei $\tilde{\gamma}_k \approx 2$. Mittal und Kumar [112] geben basierend auf Simulationsstudien einen Wert von $\tilde{\gamma}_k \approx 1,91$ an. Die vorliegenden Ergebnisse zeigen bei $\tilde{\gamma} = 2$ eine anhaltende Wirbelablösung, während für $\tilde{\gamma} = 2,5$ und insbesondere $\tilde{\gamma} = 3$ eine Dämpfung und somit stationäre Lösung vorliegt. Dies ist in guter Übereinstimmung mit der Literatur.

Ein quantitativer Vergleich mit Mittal und Kumar [112] im Bezug auf Strömungswiderstand, Auftrieb und Strouhal-Zahl findet sich in Tabelle 5.4. Es ergibt sich dabei eine sehr gute Übereinstimmung. Die größten Unterschiede treten für $\tilde{\gamma} = 2$ auf. Dies ist hauptsächlich damit zu begründen, dass dieser Wert bei Mittal und Kumar [112] den kritischen Wert bereits überschreitet, während die Phasenfeld-DLM

5 Einphasenströmungen mit eingetauchten Starrkörpern

	P-DLM	[112]	[178]	[61]	[180]
St	0,195	0,193	0,198	0,197	0,202
\bar{c}_w	1,330	1,316	-	1,357	1,399

Tabelle 5.5: Vergleich der Phasenfeld-DLM-Methode (P-DLM) mit der Literatur für den Fall $\tilde{\gamma} = 0$. Strouhal-Zahl und Widerstandsbeiwert.

$\tilde{\gamma}_k > 2$ vorhersagt. Für den Fall ohne Zylinderrotation, d. h. $\tilde{\gamma} = 0$, existieren weitere Vergleichswerte in der Literatur, die aus Simulationen mit verschiedenen Methoden gewonnen wurden. Dies umfasst Ergebnisse von Simulationen mittels Spektralelementemethode von Henderson [61], mit der Methode des direkten Kräfteintrags von Yuki et al. [178] sowie mit der Methode finiter Differenzen auf körperangepassten Gittern [180]. Die entsprechenden Ergebnisse für St und \bar{c}_w sind, so vorhanden, in Tabelle 5.5 aufgelistet. Die hier vorgeschlagene Phasenfeld-DLM-Methode liegt dabei in Mitten des Spektrums von Literaturwerten. Damit lässt sich für diesen Validierungsfall insgesamt ein gutes Abschneiden der Phasenfeld-DLM-Methode beobachten.

5.4 Anwendung in numerischen Experimenten

Nachfolgend werden verschiedene Anwendungen des Modells für die Interaktion einer einphasigen Strömung mit starren Körpern gezeigt. Die durchgeführten Simulationsbeispiele sind derart gewählt, dass sie bestimmte Fähigkeiten und Eigenschaften der genutzten Phasenfeld-DLM-Methode sowie Potentiale für Erweiterungen verdeutlichen. Dies umfasst die Berücksichtigung nicht sphärischer Körper, die Abbildung von komplexen Kontaktsituationen zwischen einer Vielzahl an sphärischen Partikeln sowie mit beliebig geformten Berandungsstrukturen. Darunter findet sich unter anderem die Simulationen einer Strömung mit 196 Partikeln durch eine dreidimensionale Schaumstruktur in Abschnitt 5.4.4. Zudem können, wie in den Beispielen aus Abschnitt 5.4.5 gezeigt, evolvierende Phasen sowohl im Bezug auf Randstrukturen als auch auf die Festkörperpartikel berücksichtigt werden. Diese Anwendungen verdeutlichen das Potential der vorliegenden Methode zur Kopplung mit Phasentransformationsprozessen. Des Weiteren zeigen die gewählten Simulationsbeispiele mögliche Anwendungsbereiche der entwickelten Methode auf, darunter die Simulation von Wirbelbetten oder der Partikeleinfüllung für die Herstellung von Hybridschäumen.

5.4.1 Umströmung eines rotierenden Kreuzes

Als Beispiel für die Betrachtung nichtsphärischer Körper wird nachfolgend die Umströmung eines Kreuzes betrachtet, das frei rotierbar gelagert ist. Der Simulationsaufbau ist vergleichbar mit dem aus Abschnitt 5.3.2. Die Einströmung am linken Rand erfolgt mit der Reynolds-Zahl $Re = 2R\rho u_\infty/\mu = 200$, wobei sich der Radius auf die konvexe Einhüllende des Kreuzes bezieht. Es wird eine Anfangswinkelgeschwindigkeit des Kreuzes vorgegeben, die zu $\tilde{\gamma}(t=0) = \omega R/u_\infty = 1$ führt. Die Lagerung wird durch die Vorgabe von $\mathbf{U}_p = \mathbf{0}$ realisiert, während sich die Winkelgeschwindigkeit aus der Strömung nach Gleichung (5.9) ergibt. Die Zeitentwicklung des Phasenfeldes erfolgt mit der Abbildung aus der Anfangskonfiguration gemäß Gleichung (5.22) und (5.19). Abbildung 5.11 zeigt die Ergebnisse der Simulation. Dargestellt ist einerseits die Zeitentwicklung des Orientierungswinkels θ_p und der Winkelgeschwindigkeit ω und andererseits das Geschwindigkeitsfeld zu zwei Zeitpunkten.

Das umströmte Kreuz vollführt eine oszillierende Rotation um den Winkel $\theta_p = \pi/2$. Die Winkelgeschwindigkeit erfährt jeweils eine Dämpfung bis eine Richtungsumkehr der Rotation erfolgt. Dies kommt durch das Drehmoment zustande, welches durch Druckunterschiede zwischen oberem und unterem Arm des Kreuzes induziert wird, da die Arme gegenüber der Anströmung jeweils unterschiedlich orientiert sind. Im Nachlauf des Kreuzes bilden sich für derartige Strömungen charakteristische Wirbelschleppen aus. Die vorliegende Simulation zeigt die Fähigkeit der eingeführten Phasenfeld-DLM-Methode auch beliebig geformte Körper berücksichtigen zu können.

5 Einphasenströmungen mit eingetauchten Starrkörpern

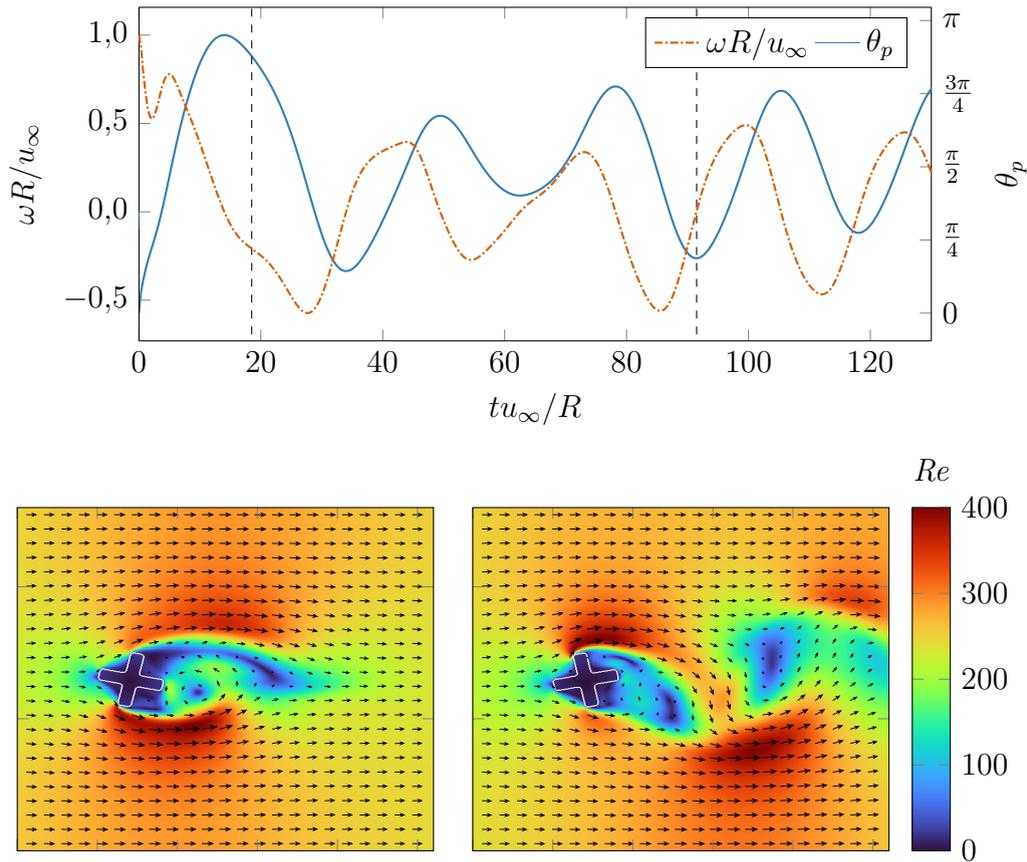


Abbildung 5.11: Umströmung eines frei rotierbaren Kreuzes. Oben: Zeitentwicklung des Orientierungswinkels und der Winkelgeschwindigkeit. Unten: Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes zu den Zeitpunkten $tu_\infty/R = 18,5$ und $tu_\infty/R = 91,5$ für einen Ausschnitt in der Umgebung des Kreuzes. Die Reynolds-Zahl ist basierend auf dem Betrag des Geschwindigkeitsfeldes und dem Durchmesser der Einhüllenden gegeben.

5.4.2 Partikelkontakt bei fallenden Sphären

Das hier gezeigte numerische Experiment dient dazu, die Funktion des Kollisionsmodells zu zeigen, wobei simultaner Kontakt zwischen mehreren Starrkörperpartikeln sowie mit Randstrukturen berücksichtigt ist. Letzteres erfolgt durch das Modell aus Abschnitt 5.2.4, wobei elastische Stöße mit $e_r = 1$ angenommen werden. Der Simulationsaufbau beinhaltet sechs unterschiedlich große Partikel, die unter Gravitation auf zwei trichterförmig zulaufende Ebenen fallen. Die Partikel weisen den mittleren Radius \bar{R} auf. Basierend auf dem mittleren Durchmesser ist die Archimedes-Zahl $Ar = 1900$. Mit der Schiller-Naumann-Korrelation ergibt sich daraus die Abschätzung $Re_e = 37,55$ für die Reynolds-Zahl des freien Falls im Gleichgewicht. Das Dichteverhältnis ist $\rho_p/\rho_f = 1,5$ und die Diskretisierung erfolgt mit 400×400 Zellen. Abbildung 5.12 zeigt die Anfangsgeometrie sowie das Geschwindigkeitsfeld zu unterschiedliche Zeitpunkten. Die Partikel fallen nach unten, wobei sich in deren Nachlauf zwei Wirbel in den jeweils oberen Ecken ausbilden. Der linke Nachlaufwirbel ist dabei im Bezug auf die räumlichen Ausmaße und Zirkulationsgeschwindigkeit ausgeprägter. Es zeigt sich, dass nach der Kollision von Partikeln mit der Wand diese weiter in Richtung des unteren Endes des Kegelstumpfes rollen, ohne dass

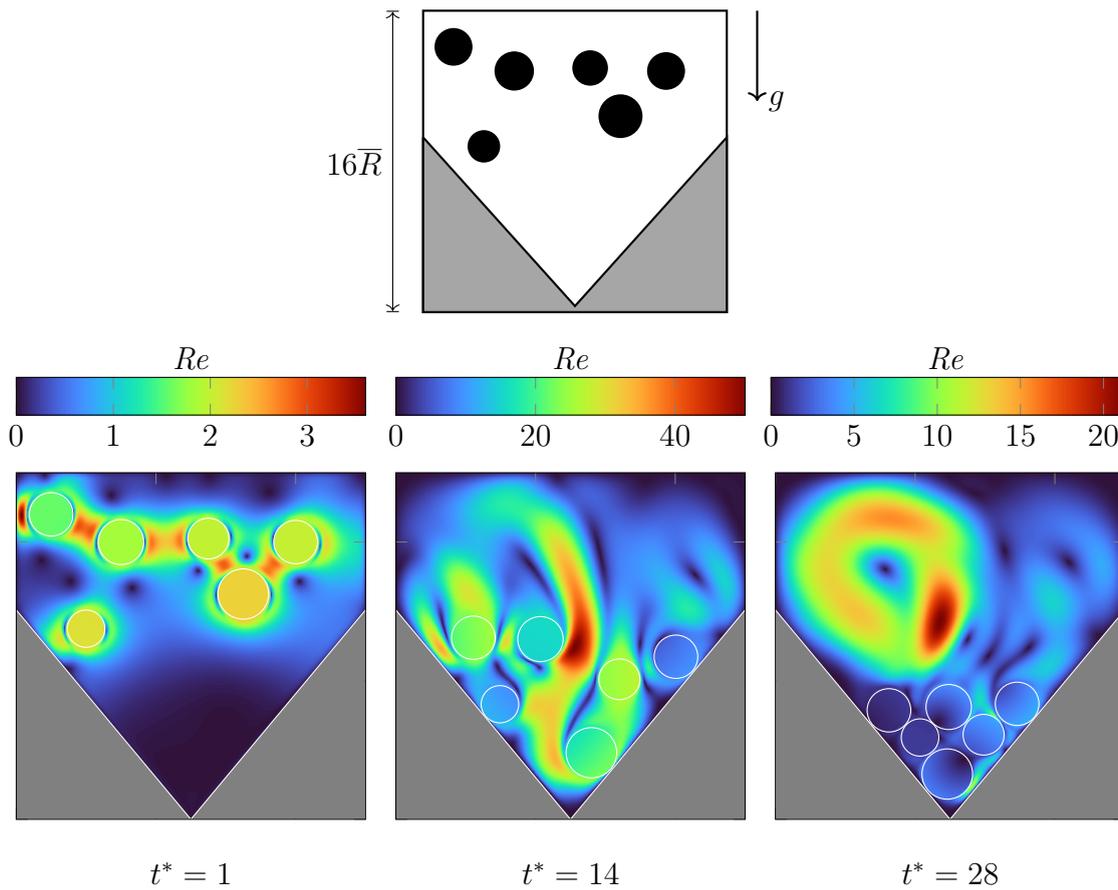


Abbildung 5.12: Simulation sphärischer Partikel, die auf schräge Wände fallen. Oben: Skizze der Anfangskonfiguration. Unten: Partikelposition und lokale Reynolds-Zahl basierend auf dem Betrag des Geschwindigkeitsfeldes zu verschiedenen Zeitpunkten $t^* = t\sqrt{g/\bar{R}}$.

dabei unphysikalische Überlappungseffekte mit der Wand auftreten. Im Verlauf der Zeit setzen sich alle Partikel im unteren Teil des Kegels ab, wobei sowohl Kontakt zwischen den Partikeln untereinander als auch mit Wänden auftritt. Dabei kommt es zudem zu mehreren simultan auftretenden Kontaktpunkten für einige Partikel. Dies zeigt, dass die Kombination der eingesetzten Kollisionsmodelle in der Lage ist, derartig komplexe Kontaktsituationen überlappungsfrei abzubilden.

5.4.3 Simulation eines Wirbelbetts

In diesem Abschnitt erfolgt die Anwendung des Modells für ein System mit hoher Anzahl von Partikeln. Hierzu wird ein Wirbelbett betrachtet, bei dem 504 identische Partikel in einem abgeschlossenen Behälter mit festen Wänden unter Gravitational einfluss freigesetzt werden. Es liegt ein ähnlicher Simulationsaufbau wie in den Arbeiten [54, 174] vor. Die Partikel befinden sich anfangs im oberen Teil des Behälters und nehmen 35,5% des Gesamtvolumens ein. Die Materialparameter sind derart gewählt, dass sich $Ar = 800$ bezogen auf den Partikeldurchmesser und $\rho_p/\rho_f = 1,5$ ergibt. Es werden weitgehend inelastische Stöße mit $e_r = 0,1$ angenommen. Das numerische Gitter umfasst 900×1000 Zellen. Abbildung 5.13 zeigt für $t^* = 108$ das

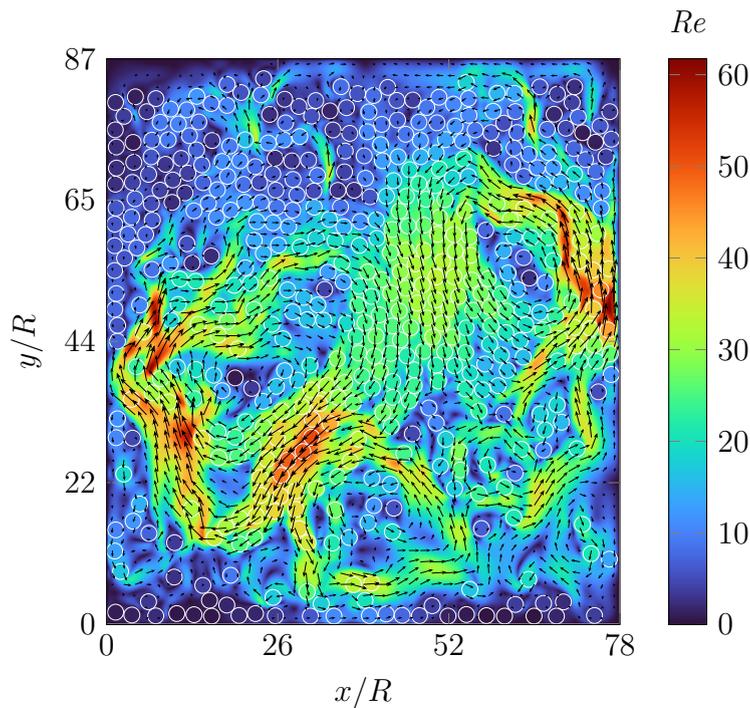


Abbildung 5.13: Wirbelbett mit identischen, sphärischen Partikeln unter Gravitation zum Zeitpunkt $t^* = t\sqrt{g/R} = 108$. Abgebildet ist das Geschwindigkeitsfeld und basierend auf dessen Betrag die Reynolds-Zahl Re [129].

resultierende Geschwindigkeitsfeld. Darüber hinaus findet sich in Abbildung 5.14 die Position und Geschwindigkeit der Partikel zu verschiedenen Zeitpunkten. In der resultierenden Strömung des Wirbelbettes bilden sich Lücken in der Partikelformation, durch die eine Rückströmung an Fluid nach oben stattfindet, welches durch fallende Partikel verdrängt wird. Es entstehen Rayleigh-Taylor-Instabilitäten, die zur Ausbildung von Wirbelstrukturen führen. Diese Strukturen bewirken eine Durchmischung der Partikel. Partikel am rechten und linken Rand erfahren zeitweise einen Auftrieb, während solche in der Gebietsmitte stetig nach unten fallen. Letztendlich setzen sich alle Partikel am Boden des Behälters. Im Verlauf der Simulation kommt es zu zahlreichen Partikelkontakten. Es zeigt sich, dass das vorliegende Modell in der Lage ist, derartige Systeme mit vielen Partikeln und starker Interaktion durch Stöße abzubilden.

5.4.4 Interaktion von Partikelströmungen mit einer Schaumstruktur

Nachfolgend wird die Partikeleinfüllung in eine Schaumstruktur betrachtet. Dies ist zum Beispiel für die Herstellung sogenannter Hybridschäume von Interesse, bei denen Polymere wie expandiertes Polystyrol in einen Metallschaum eingebracht werden. Dies erfolgt über die Einfüllung eines Granulats in den Schaum, das dort im Fall von Polystyrol mit Hilfe von Wasserdampf expandiert wird. Die Mikrostruktur des resultierenden Verbundwerkstoffes, insbesondere Anzahl und Größe verbleibender Poren, bestimmt sich maßgeblich durch die Partikelverteilung als Resultat des Einfüllvorgangs. Die Fähigkeit des vorliegenden Modells, derartige Prozesse abzubilden

5.4 Anwendung in numerischen Experimenten

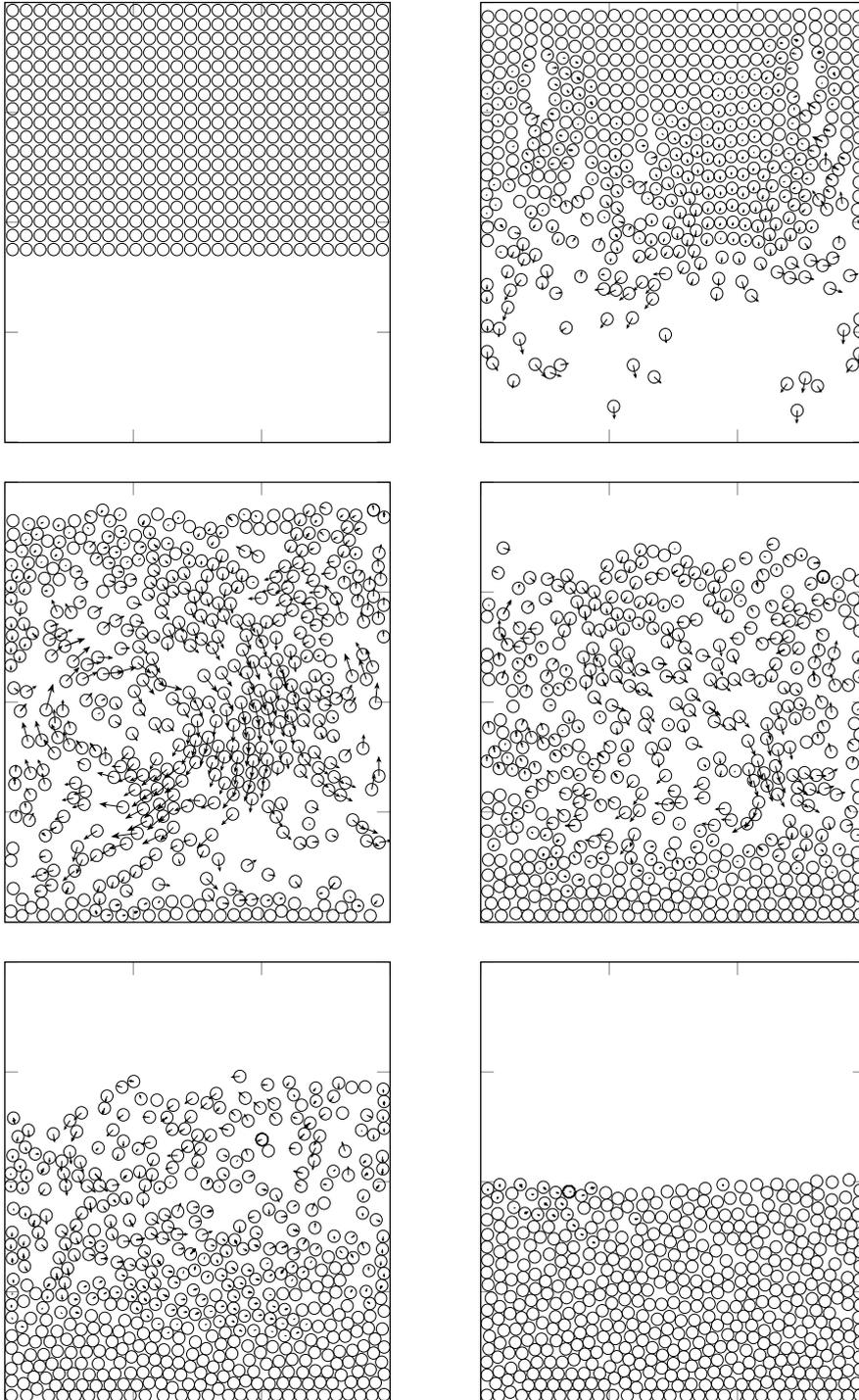


Abbildung 5.14: Simulation des Wirbelbetts zu verschiedenen Zeitpunkten $t^* \in \{0, 72, 127, 180, 235, 346\}$. Dargestellt sind die Partikel mit deren entsprechender Schwerpunktsgeschwindigkeit [129].

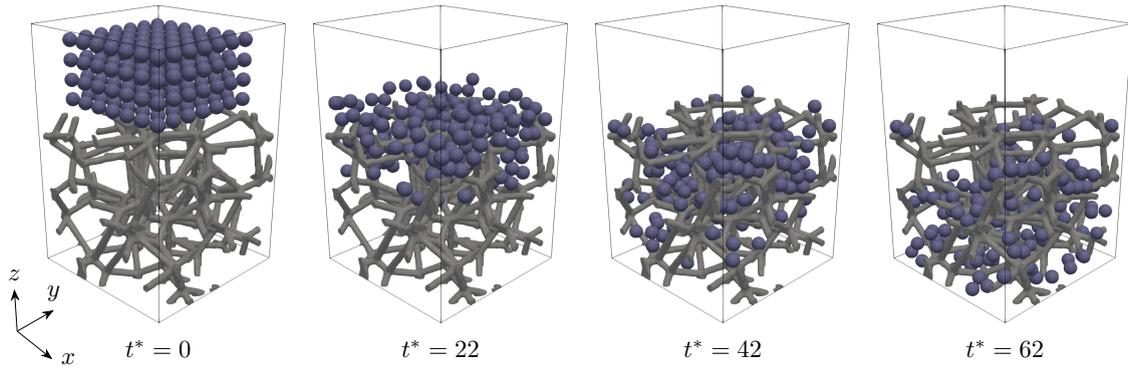


Abbildung 5.15: Simulation der Partikeleinfüllung in eine Schaumstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten $t^* = t\sqrt{g/R}$.

wird nachfolgend demonstriert. Eine Anzahl von 196 sphärischer Partikel fällt unter Gravitation in eine Schaumstruktur. Dabei ist die Archimedes-Zahl $Ar = 800$, das Dichteverhältnis $\rho_p/\rho_f = 1,5$ und die Kollisionszahl $e_r = 1$. Bei der Schaumstruktur handelt es sich um einen Voronoi-Schaum mit der mittleren Porengröße $4R$, der mit Hilfe des Algorithmus aus [127, 9] erzeugt wird. Das Berechnungsgebiet ist als Behälter mit den Maßen $24 \times 24 \times 36$ bezogen auf den Partikelradius modelliert, an dessen Rändern jeweils feste Wände vorliegen. Die Diskretisierung erfolgt mit $144 \times 144 \times 216$ Zellen. Die Breite des diffusen Übergangs ist $2,6\Delta x$ für die Partikel und $3\Delta x$ für die Struktur. Das Erreichen der Simulationsendzeit $t^* = 62$ nimmt dabei die Berechnung von 3600 Zeitschritten in Anspruch.

Abbildung 5.15 zeigt die Simulationsergebnisse zu ausgewählten Zeitpunkten. Die Zeit, die ein Partikel benötigt, um am unteren Gebietsrand anzukommen, hängt stark von Stößen ab, die er erfährt und somit von der Gesamtgeometrie. Zudem können abhängig von der Geometrie Partikel in der Struktur hängen bleiben. Es zeigt sich, dass das vorliegende Modell in der Lage ist, Partikelströmungen in komplexen, dreidimensionalen Randstrukturen abzubilden. Die Phasenfeldmethode erlaubt dabei die Verwendung eines kartesischen Gitters unabhängig von der Berandungsstruktur. Somit ist die Rechenzeit nur durch die Anzahl an stattfindenden Kollisionen von der Geometrie abhängig, während die Diskretisierung unverändert bleibt. Im vorliegenden Beispiel beträgt die Simulationsdauer ca. 8 Stunden auf einem Kern eines Intel Xeon E5-2620 Prozessors mit einer Grundtaktfrequenz von 2,1 GHz. Dabei teilt sie sich zu 65 % für die Lösung des Navier-Stokes-Systems und zu 34 % für die Starrkörperprojektion sowie das Kollisionsmodell auf. Die restliche Rechenzeit wird z. B. für das Schreiben der Felder etc. benötigt. Abschließend ist anzumerken, dass zur Abbildung des Herstellungsprozesses von Hybridschäumen eine höhere Anzahl an Partikeln als im vorliegenden Beispiel berücksichtigt werden muss, um eine vollständige Füllung zu erreichen. Für den vorliegenden Fall wäre zudem eine Modellierung der Starrkörper allein ohne die Fluidströmung ausreichend. Wenn allerdings ein Prozess mit Einblasen der Partikel erfolgt, ist die Berücksichtigung der kompletten Partikelströmung von Nöten, wie sie durch das vorliegende Modell ermöglicht wird.

5.4.5 Evolvierende Berandungsstrukturen

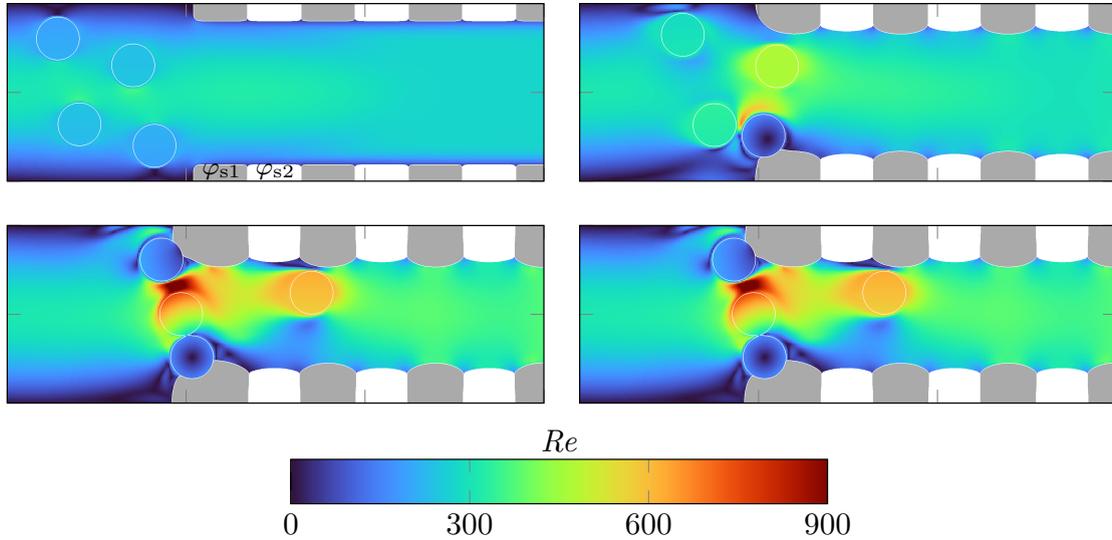


Abbildung 5.16: Partikelströmung durch einen Kanal mit lamellarem Wachstum an den Wänden. Lokale Reynolds-Zahl $Re = \rho \|\mathbf{u}\| H / \mu$ basierend auf dem Betrag des Geschwindigkeitsfelds zu verschiedenen Zeitpunkten [129].

Die letzten Simulationsbeispiele widmen sich den Partikelströmungen mit evolvierenden Geometrien. Die Phasenfeldmethode erlaubt dabei grundsätzlich, dass sowohl etwaige Berandungsstrukturen als auch Starrkörper selbst einer Phasenumwandlung unterworfen sind, siehe z. B. [159]. Letzteres tritt beispielsweise bei der Bildung von Schneeflocken auf.

Das erste Beispiel berücksichtigt die Durchströmung eines Kanals, an dessen Wänden lamellares Wachstum zweier Phasen stattfindet. Ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil ist für die Einströmung vorgegeben, wobei die Reynolds-Zahl bezogen auf die Kanalhöhe $Re = 200$ vorliegt. Für die auftretenden Phasen werden konstante freie Energien angenommen, die zu den Oberflächengeschwindigkeiten $v_{s1f}^o = 0,3 u_\infty$, $v_{s2f}^o = 0,24 u_\infty$ und $v_{s12}^o = 0,06 u_\infty$ im Sinne von Abschnitt 3.2.2 führen. Dabei ist u_∞ die mittlere Einströmgeschwindigkeit, v_{s1f}^o und v_{s2f}^o die Oberflächengeschwindigkeit zwischen Fluid und dem jeweiligen Solid sowie v_{s12}^o diejenige der beiden Solidphasen. Die Oberflächenspannung aller Phasenpaarungen sind identisch und führen zu einer Weber-Zahl $We = \rho u_\infty^2 H / \sigma = 100$ mit der initialen Kanalhöhe H . Zwischen dem Fluid und den Starrkörperpartikeln existiert kein Dichtekontrast. In die Strömung werden vier sphärische Partikel mit Radius $R = H/8$ platziert und der Restitutionskoeffizient ist $e_r = 0$. Für die Phasenfeldevolution kommt das parabolische Potential (3.48) zum Einsatz. Die Handhabung in Tripelpunktregionen zwischen Fluid und den beiden Solidphasen der Berandung erfolgt gemäß des Multiphasenfeldmodells, das in Abschnitt 3.3 skizziert ist.

Die Ergebnisse der Simulation zu verschiedenen Zeitpunkten ist in Abbildung 5.16 gegeben. Die Partikel werden in der Strömung transportiert, kollidieren mit den wachsenden Solidphasen und bewegen sich noch eine Zeit lang tangential dazu weiter. Die Bewegung von Partikeln mit Solidkontakt klingt jedoch ab und verschwindet, woraufhin die Solidphasen um den Starrkörperpartikel zu wachsen beginnt.

Es ist anzumerken, dass das vorliegende Modell qualitativer Natur ist. Die Oberflächengeschwindigkeit der Berandungsstrukturen spiegelt sich noch nicht in den Randbedingungen im Sinne einer Verdrängungsgeschwindigkeit wider, sodass die Impulserhaltung nicht gewährleistet ist. Dies würde durch die vollständige Berücksichtigung des Navier-Stokes-Systems entsprechend Abschnitt B.1 geleistet, wohingegen in der vorliegenden Simulation die Vernachlässigung des Randbedingungsterms erfolgt. Zudem wird die Phasenumwandlung von Starrkörperpartikeln unterbunden, indem die entsprechenden Phasen fest vorgegeben sind. Dadurch wird die Tripellinienendynamik zwischen Partikel, Fluid und Solid in der Multiphasenfeldformulierung verfälscht. Dennoch zeigt das Simulationsbeispiel die Möglichkeit, grundsätzlich Phasenumwandlungsphänomene, wie Kristall- oder Kornwachstum, im vorliegenden Modell mit zu berücksichtigen.

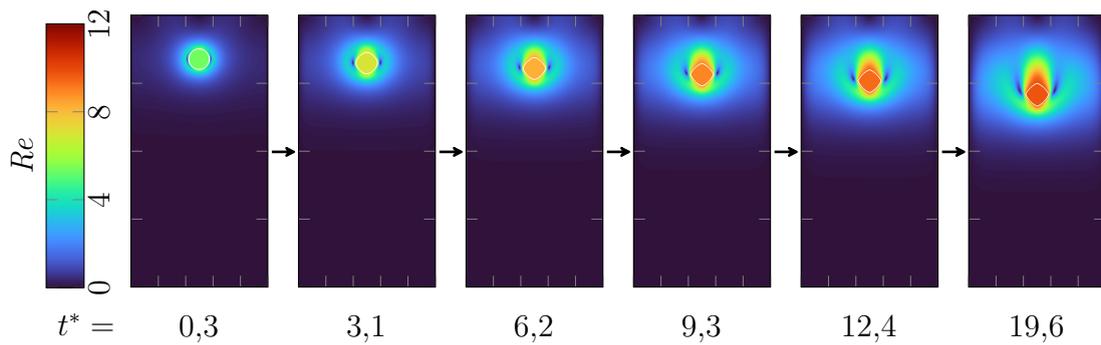


Abbildung 5.17: Fallender Festkörperpartikel mit Phasenevolution unter kubisch anisotroper Oberflächenenergie. Feld der Reynolds-Zahl basierend auf dem Betrag des Geschwindigkeitsfeldes sowie Partikelkontur zu verschiedenen Zeitpunkten.

Im letzten Anwendungsfall erfolgt die Evolution eines Festkörperpartikels während der Bewegung. Dabei wird eine kubische Anisotropie bezüglich der Gradientenenergie und für die Mobilität in der Allen-Cahn-Gleichung verwendet. Für die entsprechenden Darstellungen der Terme sei auf [115] verwiesen. Ein anfangs sphärischer Partikel mit Radius R wird in einem Behälter mit festen Wänden fallen gelassen. Dabei ist die Archimedes-Zahl 800 und das Dichteverhältnis $\rho_p/\rho_f = 1,2$. Die Phasenevolution wird mit der volumenerhaltenden Allen-Cahn-Gleichung modelliert, wobei sich der entsprechende Lagrange-Multiplikator gemäß Gleichung (3.76) berechnet. Die Wahl der Oberflächenspannung und Mobilität erfolgt derart, dass sich die Peclét-Zahl 164 ergibt. Dabei ist die charakteristische Geschwindigkeit $u_c = \sqrt{gR}$ gewählt und die entsprechende Peclét-Zahl der Allen-Cahn-Gleichung

$$Pe = \frac{2\sqrt{RgR}}{\sigma M}.$$

Die Simulation erfolgt mit 800×1600 Zellen und einer Breite $8\Delta x$ des diffusen Übergangs. Abbildung 5.17 zeigt Ergebnisse zu verschiedenen Zeitpunkten. Die anfänglich sphärische Form des Partikels wandelt sich während des Falles mit der Zeit zu einer quadratischen Form, wobei die Seiten nach wie vor konvex nach außen gekrümmt sind. Dies ist die zu erwartende Gleichgewichtsform der vorliegenden kubischen Anisotropie. Die Simulation zeigt, dass die Phasenfeld-DLM-Methode geeignet ist, Formänderungen der Partikel abzubilden. Darüber hinaus kann die Annahme der

5.4 Anwendung in numerischen Experimenten

Volumenerhaltung des Festkörperpartikels fallen gelassen werden, um auch Phasenumwandlungsprozesse, z. B. ein Wachstum des Partikels, betrachten zu können. Um dann im Falle von Dichtekontrasten zwischen den umwandelnden Phasen nach wie vor die Massen- sowie Impulsbilanz zu erfüllen, bedarf es zusätzlicher Anpassungen in den entsprechenden Gleichungen. Dies kann z. B. im zweiphasigen Sonderfall durch die Erweiterungen gemäß Sun und Beckermann [156] erfolgen. Abschließend kann festgehalten werden, dass die Phasenfeld-DLM-Methode grundsätzlich Erweiterbarkeit für die Berücksichtigung von Phasenumwandlungsprozessen bietet, was für andere Arten der Oberflächenparametrierung nicht möglich ist.

6 Erweiterung zur Kopplung von Mehrphasenströmungen mit Starrkörperbewegung

In diesem Kapitel erfolgt die Erweiterung der Phasenfeld-DLM-Methode aus Abschnitt 5.2 zur Modellierung von Starrkörperbewegung in Mehrphasenströmungen [126]. Es werden lediglich zwei Fluidphasen berücksichtigt, wobei eine Erweiterung für mehr als zwei Fluide möglich ist und ebenfalls skizziert wird. Die Abbildung der Zweiphasenströmung erfolgt mit dem Hohenberg-Halperin-Modell [65], das in Abschnitt 3.6 diskutiert ist. Die Einführung einer Normierung ermöglicht es, die Phasenfeld-DLM-Methode zunächst ohne Anpassungen zu verwenden, um a posteriori die Evolution der Fluidphasen unter einer gegebenen Änderung der Starrkörperphasen zu bestimmen. Dies führt zu einem Multiphasenfeldmodell für das Gesamtproblem, das in einer rein Eulerschen Konfiguration formuliert ist. Die Berücksichtigung des Benetzungsverhaltens von Festkörpern erfolgt über eine diffuse Formulierung der Benetzungsrandbedingung (3.92) gemäß dem allgemeinen Vorgehen zum Aufbringen von Randbedingungen bei diffusen Übergängen von Li et al. [102]. Die diffuse Benetzungsrandbedingung wurde bereits bei Aland et al. [3] und Gua et al. [57] für Festkörper mit vorgeschriebener Bewegung umgesetzt.

Ein Literaturüberblick von Methoden zur Simulation der Interaktion von Zweiphasenströmungen mit Starrkörpern wird in Abschnitt 6.1 gegeben. Die mathematische Formulierung des eingeführten Modells sowie dessen algorithmische Umsetzung findet sich in Abschnitt 6.2. Numerische Experimente zur Validierung und Anwendung des Modells sind in Abschnitt 6.3 und 6.4 aufgeführt. Abschließend widmet sich Abschnitt 6.5 der Viskositätsinterpolation in diffusen Übergängen, die zur Behandlung der Zweiphasenströmung notwendig ist, wobei ein Sprungbedingungsansatz hierfür eingeführt wird.

6.1 Existierende Modelle für Zweiphasenströmungen mit starren Körpern

Methoden mit diffusem Übergang im Kontext der Interaktion von Starrkörpern mit Zweiphasenströmungen finden sich z. B. in Malvandi et al. [106] und Calderer et al. [23]. Beide Ansätze basieren auf der Level-Set-Methode für die Grenzflächenverfolgung und der Immersed-Boundary-Methode zur Abbildung der Starrkörper. Aland et al. [4] verwenden die Phasenfeldmethode sowohl zur Nachverfolgung der Fluid-Fluid- als auch der Fluid-Solid-Grenzfläche. Diese ist allerdings nicht im Sinne einer Multiphasenfeldmethode umgesetzt, sondern es werden unabhängige Ordnungsparameter eingeführt, die insbesondere nicht der Summationsbedingung gehorchen, sodass der Ansatz für eine Kombination mit der Phasenfeld-DLM-Methode ungeeignet ist. Zudem verwendet deren Methode eine sehr rudimentäre Abbildung der Starrkörperbewegung, die jegliche Rotation unberücksichtigt lässt und die weder referenziert noch in dem Papier [4] validiert wird, sodass keine Aussage über die Genauigkeit gemacht werden kann. Die Methoden in [106, 23, 4] geben implizit einen Kontaktwinkel von 90° der Fluid-Fluid-Grenzfläche auf die Starrkörperoberfläche vor und sind nicht in der Lage, andere Benetzungsszenarien abzubilden.

Darüber hinaus existieren Ansätze basierend auf der Phasenfeldmethode, die beliebige Benetzungssituation abbilden können. Joshi und Jaiman [81] verwenden die Allen-Cahn-Gleichung für das Fluid-Fluid-Subproblem, während eine ALE-Methode für die Partikel-Fluid-Interaktion zum Einsatz kommt. Bei Choi und Anderson [28] findet sich ein auf der Cahn-Hilliard-Gleichung basiertes Modell mit einem ALE-Schema, das mittels der erweiterten Methode finiter Elemente (XFEM) gelöst wird. Li et al. [101] nutzen ein ternäres Cahn-Hilliard-Modell für die Solidphase und beide Fluidphasen. Dabei müssen die Starrkörper jedoch dennoch mit Lagrangschen Oberflächenelementen lokalisiert werden. Alle diese Ansätze arbeiten nicht ausschließlich in Eulerscher Konfiguration und benötigen somit aufwendige numerische Algorithmen.

6.2 Multiphasenfeld-Ansatz der Fluid- und Starrkörperrepräsentation

In dieser Arbeit wird das Problem der Interaktion von Starrkörpern mit einer Zweiphasenströmung im Kontext einer Multiphasenfeldmethode modelliert [126]. Diese arbeitet ausschließlich in der Euler-Konfiguration und erlaubt die Verwendung eines einzigen zeitunabhängigen Gitters, welches nicht an die Geometrie von Phasengrenzflächen angepasst werden muss. Sowohl die Parametrierung der einzelnen Fluidgebiete als auch jene der Starrkörper erfolgt mit entsprechenden Phasenvariablen. Gleichzeitig erlaubt das Modell die Abbildung unterschiedlicher Benetzungseigenschaften. Die Idee besteht darin, die Phasenfeld-DLM-Methode [129] aus Abschnitt 5.2 für die Starrkörper-Fluid-Interaktion mit dem Hohenberg-Halperin-Modell [65] für die Zweiphasenströmung zu koppeln. Letzteres ist im Grundlagenkapitel 3.6 detailliert eingeführt. Zur Kombination dieser beiden Modelle wird durch eine geeignete Normierung zunächst eine Entkopplung des Starrkörper-Fluid-Subproblems erreicht,

was mit der Phasenfeld-DLM-Methode gelöst werden kann. Die Zeitentwicklung des Fluidphasenfeldes erfolgt a posteriori mit der Cahn-Hilliard-Gleichung, wobei der Einfluss von gegebenen Festkörperoberflächen auf die Fluid-Fluid-Grenzfläche mit einer diffusen Benetzungsrandbedingung berücksichtigt wird. Diese kann mit dem allgemeinen Vorgehen von Li et al. [102] für Randbedingungen auf diffusen Rändern hergeleitet werden. Für Festkörper mit vorgeschriebener Bewegung bzw. unbewegliche Körper findet sich die Umsetzung der diffusen Benetzungsrandbedingung in einem Hohenberg-Halperin-Modell bereits bei Aland et al. [3], wobei eine konstante Dichten angenommen wird. Guo et al. [57] erweitern das Modell aus [3] durch Berücksichtigung von phasenweiser variabler Dichte mit hohen Kontrasten. In der vorliegenden Arbeit wird die diffuse Benetzungsrandbedingung auf der normierten Phasenvariable aufgebracht. Die Rücknormierung erlaubt dabei die Verwendung der Randbedingung für beliebige Starrkörperbewegungen und die Kopplung mit der Phasenfeld-DLM-Methode.

6.2.1 Modellformulierung

Im Folgenden werden Problemstellungen betrachtet, in denen N^f Fluide, N_p starre Körper und feste Berandungsstrukturen auftreten. Eine exemplarische Skizze findet sich in Abbildung 6.1. Die Berandungsstrukturen können durch eine einzelne Phasenvariable abgebildet werden, sodass die gesamte Anzahl an Solidphasen durch $N^s = N_p + 1$ und das Solidgebiet durch

$$\Omega_s = \Omega_K \cup \Omega_{st}, \quad \Omega_K = \bigcup_{p=1}^{N_p} \Omega_p \quad (6.1)$$

gegeben ist. Seien φ_a^f , $a = 1, \dots, N^f$ die Phasenvariablen der Fluide und φ_b^s , $b = 1, \dots, N^s$ die der Festkörper, dann ist die gesamte Fluid- bzw. Solidphase durch

$$\varphi^f = \sum_{a=1}^{N^f} \varphi_a^f \quad \text{bzw.} \quad \varphi^s = \sum_{b=1}^{N^s} \varphi_b^s \quad (6.2)$$

gegeben.

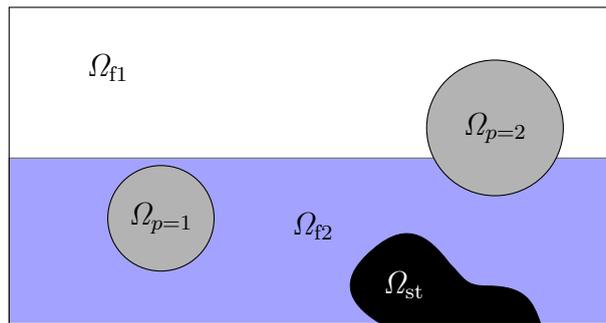


Abbildung 6.1: Skizze der auftretenden Teilgebiete im Gesamtgebiet Ω für mehrphasige Partikelströmungen. Für das Fluid gilt $\Omega_f = \Omega_{f1} \cup \Omega_{f2}$, für die Starrkörper $\Omega_K = \bigcup_{p=1}^{N_p} \Omega_p$ und für das gesamte Solidgebiet $\Omega_s = \Omega_K \cup \Omega_{st}$.

Die Phasenvariable φ_α kann als lokale Volumenfraktion der Phase α angesehen werden. Daraus folgt die Summationsbedingung

$$\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha = \varphi^f + \varphi^s = 1 \quad (6.3)$$

mit $N_\alpha = N^f + N^s$. Es lässt sich eine Aufteilung in Subprobleme für die Fluid- und Festkörperphasen erreichen, indem die Normierung

$$\tilde{\varphi}_a^f(\mathbf{x}, t) := \frac{\varphi_a^f}{\varphi^f}, \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f > 0}(t), \quad (6.4a)$$

$$\tilde{\varphi}_b^s(\mathbf{x}, t) := \frac{\varphi_b^s}{\varphi^s}, \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^s > 0}(t) \quad (6.4b)$$

genutzt wird. Die resultierenden normierten Phasenvariablen repräsentieren nicht mehr den lokalen Anteil der Phase am Gesamtvolumen, sondern denjenigen am Fluid- bzw. Festkörpervolumen. Das Subproblem des Fluids kann in den normierten Variablen als separates Multiphasenproblem angesehen werden, bei dem insbesondere die Summationsbedingung

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f > 0}: \quad \sum_{\alpha=1}^{N^f} \tilde{\varphi}_\alpha^f = 1 \quad (6.5)$$

Gültigkeit hat. Gleiches gilt natürlich für das Festkörperproblem, wobei im Folgenden nur das Fluidproblem betrachtet wird, da für die Festphasen Analoges folgt. Die zeitliche Entwicklung einer Fluidphase ist mittels Kettenregel als

$$\partial_t \varphi_a^f = \varphi^f \partial_t \tilde{\varphi}_a^f + \tilde{\varphi}_a^f \partial_t \varphi^f \quad (6.6)$$

gegeben, wobei aufgrund der Summationsbedingung (6.3)

$$\partial_t \varphi^f = -\partial_t \varphi^s = -\sum_{p=1}^{N_p} \partial_t \varphi_p \quad (6.7)$$

gilt. Dabei wird zudem ausgenutzt, dass die Festphase der Randgeometrie φ_{st} keine zeitliche Änderung vollführt. Somit ist es möglich, unter einer vorgegebenen Änderung der Festkörperphase die Zeitentwicklung der Fluidphasen zu bestimmen, wenn für die normierten Variablen $\tilde{\varphi}_a^f$ Evolutionsgleichungen angesetzt werden.

Die nachfolgende Betrachtung beschränkt sich auf zwei Fluidphasen, wobei eine Erweiterung prinzipiell möglich ist. Im Zweiphasenfall genügt die Berücksichtigung eines Ordnungsparameters, wobei die verkürzte Notation $\tilde{\varphi} := \tilde{\varphi}_1^f$ Anwendung findet. Die Zeitableitungen beider Fluidphasen sind dann durch

$$\partial_t \varphi_1^f = (1 - \varphi^s) \partial_t \tilde{\varphi} - \tilde{\varphi} \partial_t \varphi^s \quad (6.8a)$$

$$\partial_t \varphi_2^f = -(1 - \varphi^s) \partial_t \tilde{\varphi} - (1 - \tilde{\varphi}) \partial_t \varphi^s. \quad (6.8b)$$

gegeben. Die Verwendung des Cahn-Hilliard-Ansatzes für die normierte Phasenvariable führt zu

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{\varphi} &= -\mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\varphi} + \kappa \nabla^2 \Phi(\tilde{\varphi}), \\ \Phi(\tilde{\varphi}) &= a_2 \partial_{\tilde{\varphi}} \psi(\tilde{\varphi}) - a_1 \nabla^2 \tilde{\varphi}. \end{aligned}$$

6.2 Multiphasenfeld-Ansatz der Fluid- und Starrkörperrepräsentation

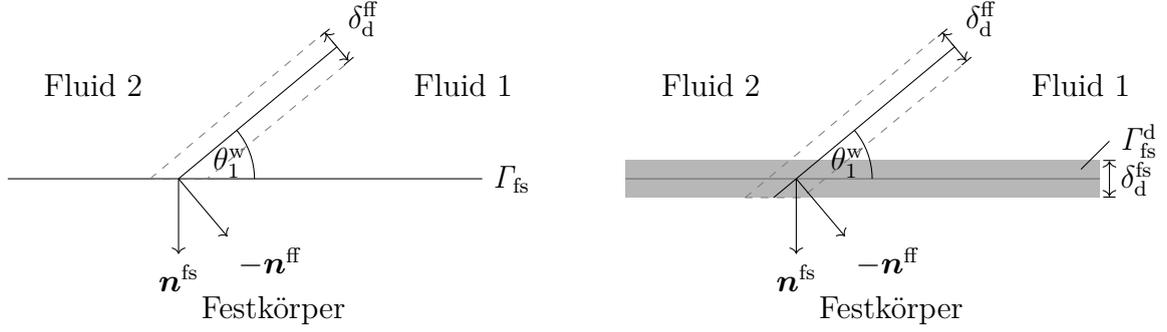


Abbildung 6.2: Kontaktwinkel an der Tripellinie zweier Fluidphasen mit Festkörpern. Links: Repräsentation mit singularer Oberfläche Γ_{fs} . Rechts: Diffuser Fluid-Solid-Übergang Γ_{fs}^d .

Zusammen mit der zeitlichen Änderung $\partial_t \varphi^s$ der Solidphase, die aus der Bewegung von Starrkörpern vorgegeben ist, kann somit mittels Gleichung (6.8) die Evolution aller Phasen bestimmt werden.

Gegenüber dem klassischen Hohenberg-Halperin-Modell, das in Abschnitt 3.6 ausführlich vorgestellt wird, ergibt sich ein Unterschied durch die diffuse Repräsentation des Fluidgebietsrandes. An diesem Gebietsrand ist der Einfluss von Festkörperoberflächen auf die Zweiphasenströmung im Sinne der Benetzbarkeit zu berücksichtigen. Im Kontext singularer Fluid-Festkörper-Grenzflächen eignen sich die Randbedingungen (3.93) und (3.92) zur Abbildung des Oberflächenbenetzungsverhaltens. Derartige Randbedingungen müssen in der vorliegenden Modellierung jedoch für die diffuse Grenzfläche des Fluid-Festkörper-Übergangs aufgebracht werden. Dies lässt sich durch die allgemeine Vorgehensweise nach Li et al. [102] erreichen, womit Randbedingungen über diffusen Übergängen aufgeprägt werden können. Die Anwendung dieses Ansatzes im Bezug auf Benetzungsrandbedingungen findet sich bereits bei Aland et al. [3]. Mit der Indikatorfunktion I der Gesamtfluidphasen und der korrespondierenden Dirac-Distribution δ^{fs} lässt sich das Randwertproblem in $\tilde{\varphi}$ zu

$$I \Phi = a_2 I \partial_{\tilde{\varphi}} \psi - a_1 \nabla \cdot (I \nabla \varphi) - \delta^{fs} (\sigma_{2s} - \sigma_{1s}) \partial_{\tilde{\varphi}} h^{ff}(\tilde{\varphi}) \quad (6.9a)$$

$$I \partial_t \tilde{\varphi} = -I \mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\varphi} + \kappa \nabla \cdot (I \nabla \Phi) \quad (6.9b)$$

umschreiben. Die Herleitung hierfür ist in Anhang B.2 gegeben. Wie in Abbildung 6.2 gezeigt, ist der singuläre Übergang durch einen Diffusen zu ersetzen, was zu einer approximativen Repräsentation des Randwertproblems führt, wobei die Indikatorfunktion mit $I \approx h^{fs}(\varphi^f)$ und die Dirac-Distribution mit $\delta^{fs} = \|\nabla I\| \approx \partial_{\varphi^f} h^{fs}(\varphi^f) \|\nabla \varphi^f\|$ angenähert wird. Damit ergibt sich die Evolution der normierten Phasenvariable unter Berücksichtigung der Benetzungsrandbedingung zu

$$h^{fs} \Phi = a_2 h^{fs} \partial_{\tilde{\varphi}} \psi - a_1 \nabla \cdot (h^{fs} \nabla \tilde{\varphi}) - \partial_{\varphi^f} h^{fs} \|\nabla \varphi^f\| (\sigma_{2s} - \sigma_{1s}) \partial_{\tilde{\varphi}} h^{ff}(\tilde{\varphi}) \quad (6.10a)$$

$$h^{fs} \partial_t \tilde{\varphi} = -h^{fs} \mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\varphi} + \kappa \nabla \cdot (h^{fs} \nabla \Phi). \quad (6.10b)$$

Es ist dabei anzumerken, dass sich das Gleichungssystem (6.10) im reinen Fluidgebiet $\Omega_{\varphi^f=1}$ zum klassischen Cahn-Hilliard-System (3.40) reduziert, da

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f=1}: \quad h^{fs} = 1, \quad \|\nabla \varphi^f\| = 0, \quad \tilde{\varphi} = \varphi_1^f. \quad (6.11)$$

Die Interpolationsfunktion h^{fs} des Fluid-Solid-Übergangs kann unabhängig von h^{ff} des Fluid-Fluid-Übergangs gewählt werden.

Das gesamte Gleichungssystem für die Interaktion von Zweiphasenströmungen mit Starrkörperdynamik ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^{\text{f}} > 0} \cup \Omega_{\varphi_p > 0} : \\ \rho \partial_t \mathbf{u} = -\rho(\nabla \mathbf{u})\mathbf{u} - \nabla p + \rho \mathbf{f}^{\text{V}} + \mathbf{f}^{\text{K}} \\ + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u})] + \varphi^{\text{f}} \mathbf{K}(\tilde{\varphi}) \end{aligned} \quad (6.12a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.12b)$$

$$\varphi_p = \varphi_p^{\text{init}} (\mathbf{X}_p + \mathbf{R}_p^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)) \quad (6.12c)$$

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^{\text{f}} > 0} : \\ h^{\text{fs}} \Phi = a_2 h^{\text{fs}} \partial_\varphi \psi - a_1 \nabla \cdot (h^{\text{fs}} \nabla \tilde{\varphi}) \\ - \partial_{\varphi^{\text{f}}} h^{\text{fs}} \|\nabla \varphi^{\text{f}}\| (\sigma_{2\text{s}} - \sigma_{1\text{s}}) \partial_{\tilde{\varphi}} h^{\text{ff}}(\tilde{\varphi}) \end{aligned} \quad (6.12d)$$

$$h^{\text{fs}} \partial_t \tilde{\varphi} = -h^{\text{fs}} \mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\varphi} + \kappa \nabla \cdot (h^{\text{fs}} \nabla \Phi). \quad (6.12e)$$

Der Kapillaritätsterm \mathbf{K} ist durch eine der Formulierungen aus Gleichung (3.87) oder (3.90) zu bestimmen, während die Dichte $\rho = \rho(\varphi_1, \dots, \varphi_{N_\alpha}, \rho_1, \dots, \rho_{N_\alpha})$ und Viskosität $\mu = \mu(\varphi_1, \dots, \varphi_{N_\alpha}, \mu_1, \dots, \mu_{N_\alpha})$ durch die Mittelungen (3.55) oder (3.56) berechnet werden. Falls nicht anders angegeben, findet die Potentialform des Kapillaritätsterms (\mathbf{K}^3) und der arithmetische Mittelwert für Dichte- und Viskositätsinterpolation Anwendung. Die Starrkörperkraftdichte ist

$$\mathbf{f}^{\text{K}} = \begin{cases} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{f}_p^{\text{K}}(\varphi_p, \mathbf{u}_p, \tilde{\mathbf{u}}) & \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi_p > 0} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.13)$$

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{U}_p + \boldsymbol{\omega}_p \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (6.14)$$

$$\mathbf{U}_p = \frac{1}{m_p} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (6.15)$$

$$\boldsymbol{\omega}_p = \mathbf{J}_p^{-1} \int_{\Omega} \rho_p \varphi_p \mathbf{r}_p \times \tilde{\mathbf{u}} \, dV, \quad (6.16)$$

wobei diese mit der Projektion z. B. gemäß Gleichung (5.14) aufgebracht wird. Die Phasenvariable der Starrkörper kann durch die Abbildung auf die Anfangskonfiguration gemäß Gleichung (5.22) bestimmt werden. Bei sphärischen Partikeln wird hingegen das Gleichgewichtsprofil direkt gesetzt, wobei nachfolgend

$$\varphi_p(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \eta < \delta_{\text{d}}^{\text{fs}}/2 \\ 0 & \eta > \delta_{\text{d}}^{\text{fs}}/2, \\ \frac{1}{2} \left[1 - \sin\left(\frac{\pi \eta}{\delta_{\text{d}}^{\text{fs}}}\right) \right] & \text{sonst} \end{cases}, \quad (6.17a)$$

$$\eta(t) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)\| - R_p \quad (6.17b)$$

verwendet wird. Für Probleme mit einer zusätzlichen Festkörperstruktur erfolgt zusätzlich eine Anpassung des Navier-Stokes-Systems gemäß dem Vorgehen in Anhang B.1 im entsprechenden diffusen Übergang. Zudem muss bei der Mittelung von Dichte und Viskosität die Phasenvariable der Festkörperstruktur unberücksichtigt bleiben.

6.2.2 Numerische Umsetzung und Algorithmus

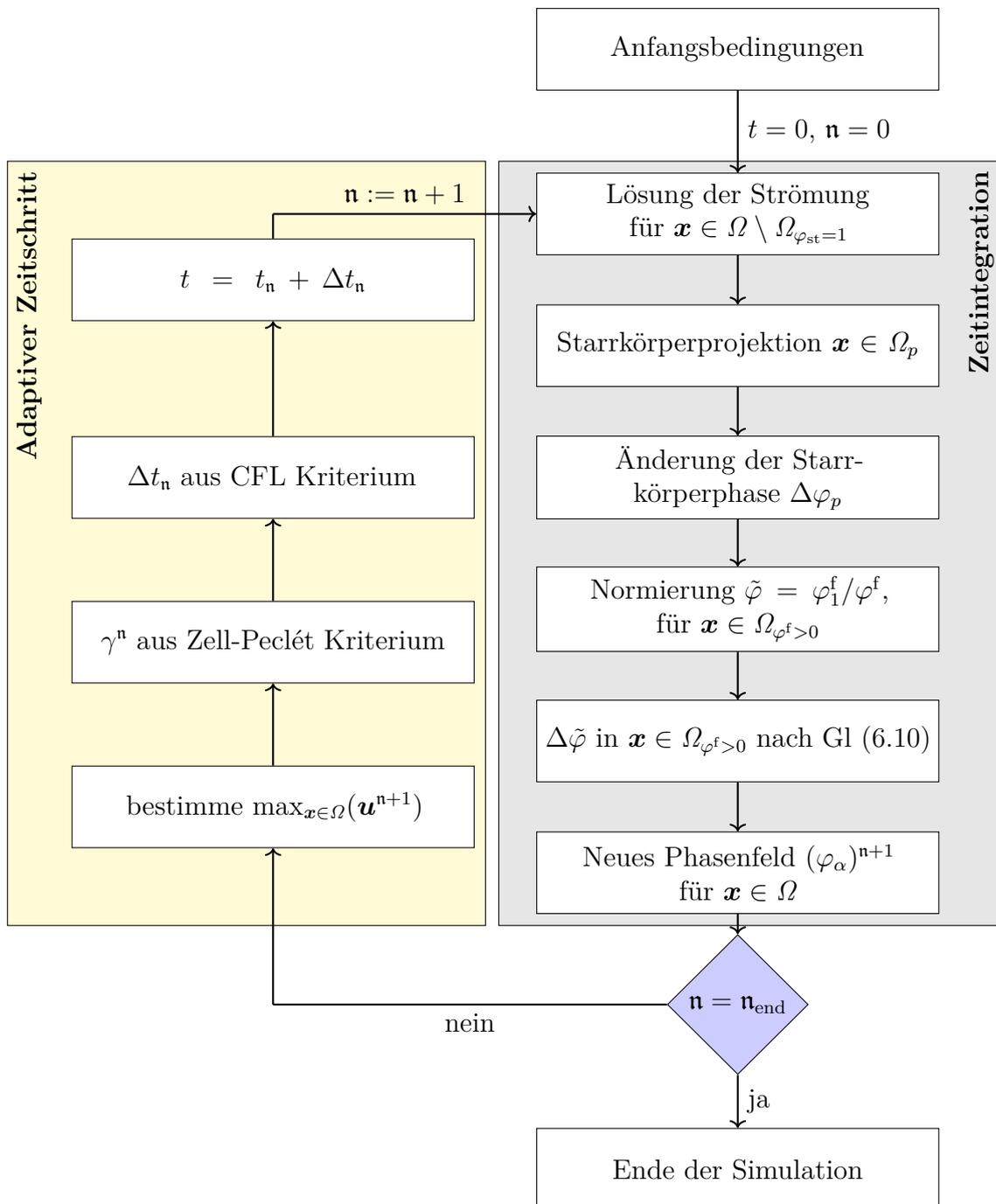


Abbildung 6.3: Übersicht über den Lösungsalgorithmus zur Lösung des Gleichungssatzes (6.12) mit expliziter Zeitintegration und adaptiver Einstellung des Konvektionsparameters γ sowie der Zeitschrittweite (siehe Anhang A.3).

Die Diskretisierung erfolgt analog zum Modell mit einphasigen Partikelströmungen, wie in Abschnitt 5.2.5 dargelegt. Zusätzlich muss der Konvektionsterm für die normierte Phasenvariable $\tilde{\varphi}$ approximiert werden, was durch das TVD-Schema mit OSPRE Flussbegrenzer [175] umgesetzt ist. Zudem ist die normierte Phasenvariable lediglich im Gebiet $\Omega_{\varphi^f > 0}$ definiert und weist für $\varphi^f \rightarrow 0$ eine Singularität auf. Bei

der numerischen Umsetzung ist dennoch die Kenntnis von $\tilde{\varphi}$ an Stützstellen mit verschwindender Fluidphase notwendig. Dies ist einerseits der Fall, wenn der Wert zur Approximation räumlicher Ableitungen in Nachbarstützstellen mit $\varphi^f > 0$ benötigt wird. Andererseits kann eine Stützstelle mit $(\varphi^f)^n = 0$ zum Zeitpunkt t_n im nächsten Zeitschritt t_{n+1} Werte mit $(\varphi^f)^{n+1} > 0$ aufweisen. In dem Fall ist unbestimmt, wie sich die Fluidphase auf φ_1^f und φ_2^f aufteilt. Es schafft Abhilfe, die Extrapolation der Werte von $\tilde{\varphi}$ aus $\Omega_{\varphi^f > 0}$ in das Gebiet $\Omega_{\varphi^f = 0}$ vorzunehmen. Hierfür kommt eine lineare Extrapolation zum Einsatz, wobei eine Limitierung auf den Wertebereich $[0, 1]$ erfolgt. Diese ist

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = \min \left[\max \left[2\tilde{\varphi}(\mathbf{x} - c\mathbf{n}^{\text{fs}}) - \tilde{\varphi}(\mathbf{x} - 2c\mathbf{n}^{\text{fs}}), 0 \right], 1 \right], \quad \mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f = 0} \quad (6.18)$$

mit dem auswärts gerichteten Normalenvektor \mathbf{n}^{fs} des Fluidgebiets. Der Skalierungsfaktor c wird von der Größenordnung der mittleren Diskretisierungsschrittweite h gewählt. Die benötigten Werte $\tilde{\varphi}(\mathbf{x} - c\mathbf{n}^{\text{fs}})$ und $\tilde{\varphi}(\mathbf{x} - 2c\mathbf{n}^{\text{fs}})$ werden wiederum durch lineare Interpolation von den Stützstellen des Gitters bestimmt. Die Extrapolation kommt in dieser Arbeit an Stellen zum Einsatz, an denen $\varphi^f < 1/20$ gilt.

Abbildung 6.3 zeigt ein Flussdiagramm des Lösungsablaufs. Darüber hinaus ist ein Überblick über den Lösungsalgorithmus im Folgenden gegeben. Details zur Lösung der Phasenfeld-DLM-Methode sind dem Abschnitt 5.2.5 zu entnehmen. Zu Beginn eines Zeitschritts t_n sind die Größen \mathbf{x}_p^n , \mathbf{U}_p^n , $\boldsymbol{\omega}_p^n$, \mathbf{u}^n , p^n , und φ_α^n bekannt.

1. Lösung des Navier-Stokes Systems (6.12)a,b mit einer Projektionsmethode nach Chorin gemäß 1.-3. in Abschnitt 5.2.5.
2. Durchführung der Starrkörperprojektion gemäß 4.-7. in Abschnitt 5.2.5, was zur Geschwindigkeit \mathbf{u}^{n+1} des neuen Zeitschritts führt.
3. Kollisionsalgorithmus und Zeitintegration der Massenmittelpunkte zu \mathbf{x}_p^{n+1} .
4. Bestimmung der normierten Phasenvariable zum Zeitpunkt t_n mittels

$$(\tilde{\varphi})^n = \left(\frac{\varphi_1^f}{\varphi^f} \right)^n \quad \text{für} \quad (\varphi^f)^n > 1/20.$$

5. Extrapolation von $\tilde{\varphi}$ nach $\Omega_{\varphi^f < 1/20}$ mittels Gleichung (6.18).
6. Bestimmen von $\Delta\tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^n$ durch explizite Zeitintegration von Gleichungen (6.12)d,e für $\mathbf{x} \in \Omega_{\varphi^f > 0}$.
7. Für alle Punkte $\mathbf{x} \in \Omega$

- a) Änderung des Festkörperphasenfeldes

$$\Delta\varphi^s = \sum_{p=1}^{N_p} \varphi_p \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_p^{n+1} \right) - (\varphi_p)^n,$$

wobei sich $\varphi_p \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_p^{n+1} \right)$ aus der Starrkörperbewegung ergibt.

- b) Bestimmung des neuen Phasenfeldes

$$\begin{aligned} (\varphi_1^f)^{n+1} &= (1 - \varphi^s)^{n+1} \Delta\tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}^{n+1} \Delta\varphi^s + (\varphi_1^f)^n \\ (\varphi_2^f)^{n+1} &= -(1 - \varphi^s)^{n+1} \Delta\tilde{\varphi} - (1 - \tilde{\varphi}^{n+1}) \Delta\varphi^s + (\varphi_2^f)^n. \end{aligned}$$

6.3 Validierung und Verifikation

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Validierung des Modells für mehrphasige Partikelströmungen. Die Validierung der Starrkörperprojektion erfolgt dabei bereits in Abschnitt 5.3 des vorhergehenden Kapitels für Probleme, in denen eine einzige Fluidphase involviert ist. Hier werden zwei weitere Aspekte beleuchtet, die für Probleme mit zwei auftretenden Fluiden relevant sind. Dies umfasst zunächst die Aufprägung der Benetzungsrandbedingungen über einen diffusen Fluid-Solid-Übergang, wobei für stationäre Probleme ein vorgegebener Kontaktwinkel zu reproduzieren ist. Sodann wird die Eigenschaft der vorgeschlagenen Methode validiert, die Dynamik sowohl der Festkörper als auch der Fluidgrenzfläche abbilden kann.

6.3.1 Statische Benetzungsrandbedingung

Zunächst erfolgt die Validierung der statischen Benetzungsrandbedingung, die über einen diffusen Fluid-Solid-Übergang aufgebracht wird. Zu diesem Zweck wird die Benetzung einer planaren Oberfläche durch einen Tropfen betrachtet, wie in Abbildung 6.4 dargestellt.

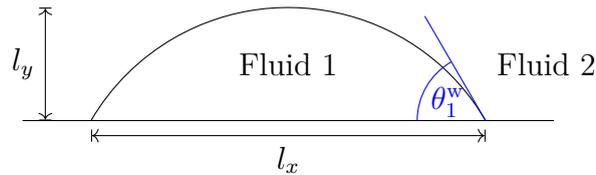


Abbildung 6.4: Benetzung einer planaren Oberfläche durch einen Tropfen von Fluid 1. Die Bestimmung des Kontaktwinkels erfolgt über $\tan(\theta_1^w/2) = 2l_y/l_x$.

Im Fall des stationären Gleichgewichts existiert eine analytische Lösung für die Parametrierung der Tropfenoberfläche. Die Form des Tropfens ist durch die Minimierung der Oberflächenenergie unter gleichzeitiger Volumenerhaltung bestimmt. Dieses erreicht das Segment einer Sphäre, deren Mittelpunkt und Radius sich derart ergeben, dass sich einerseits der theoretische Kontaktwinkel θ_1^w an der Tripellinie einstellt und andererseits ein festes Volumen eingenommen wird (siehe [126, Anhang C]). Für den zweidimensionalen Fall ergibt sich für den Kontaktwinkel der analytischen Lösung

$$\tan\left(\frac{\theta_1^w}{2}\right) = \frac{2l_y}{l_x}$$

wobei l_x die Breite der benetzten Oberfläche und l_y die Höhe des Tropfens ist. Das Volumen $V(\Omega_{f1})$ des Tropfens ist durch

$$V(\Omega_{f1}) = l_x^2 \frac{\theta_1^w - \sin(\theta_1^w) \cos(\theta_1^w)}{4 \sin^2(\theta_1^w)}$$

gegeben. Für die nachfolgenden Simulationen wird initial ein Tropfen mit Radius R auf eine Wand mit diffusem Solid-Fluid-Übergang der Breite δ_d^{fs} unter dem Kontaktwinkel 90° platziert, d. h. als Halbkreis. Die Lösung des Gleichungssystems (6.12) erfolgt

ohne die Berücksichtigung von Starrkörpern in einem Gebiet mit den Abmaßen $4R \times 1.6R$ bis sich ein Gleichgewichtszustand einstellt. Die Simulationen sind für Gleichgewichtskontaktwinkel $\theta_1^w \in \{60^\circ, 90^\circ, 120^\circ\}$ durchgeführt.

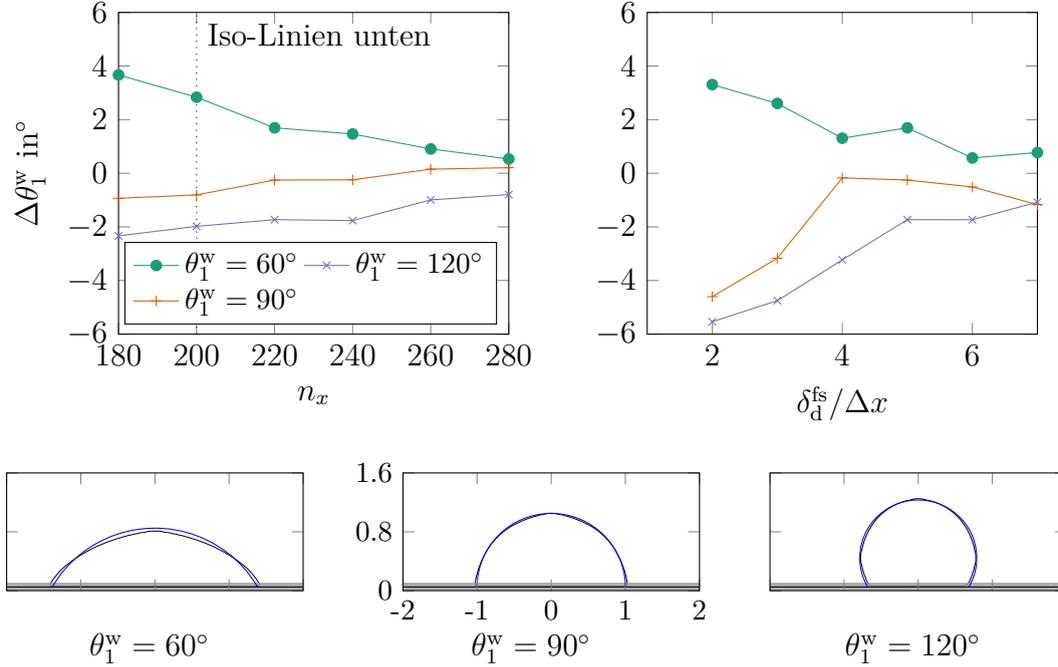


Abbildung 6.5: Ergebnisse der Tropfenbenetzung. Oben: Abweichung $\Delta\theta_1^w$ zum theoretischen Kontaktwinkel. Konvergenz mit Verfeinerung des Gitters und entsprechend reduzierten Übergangsbreiten $\delta_d^{fs} = 5\Delta x$ und $\delta_d^{ff} = 6\Delta x$ (links). Einfluss der Breite δ_d^{fs} des Fluid-Solid-Übergangs bei fester Auflösung mit 220×88 Zellen (rechts). Unten: Form des Tropfens verglichen mit der Theorie (blau) für die Auflösung 200×80 . Der diffuse Fluid-Solid-Übergang ist dabei grau markiert.

Zunächst erfolgt eine Konvergenzstudie, wobei die räumliche Auflösung $n_x \times n_y$ zwischen 180×72 und 280×112 variiert wird. Die Breite der diffusen Übergänge ist dabei als $\delta_d^{fs} = 5\Delta x$ und $\delta_d^{ff} = 6\Delta x$ gewählt und wird folglich mit steigender Auflösung verringert. Die Ergebnisse finden sich in Abbildung 6.5. Es zeigt sich dabei eine monotone Konvergenz in Richtung des theoretischen Kontaktwinkels. Dabei sind die Abweichung im Fall von $\theta_1^w = 90^\circ$ geringer als für die anderen Kontaktwinkel. Für Auflösungen $n_x \geq 260$ liegen die Abweichungen des Kontaktwinkels in allen drei Fällen innerhalb des Bereichs $\pm 1^\circ$. Des Weiteren sind in Abbildung 6.5 unten die Tropfenformen zwischen Theorie und Simulation (Auflösung $n_x = 200$) dargestellt.

Um den Einfluss der Übergangsbreite δ_d^{fs} zu untersuchen, wird diese variiert, wobei die Auflösung 220×88 und $\delta_d^{ff} = 6\Delta x$ gewählt ist. Für sehr geringe Breiten ergibt sich jeweils eine hohe Abweichung zum theoretischen Kontaktwinkel. Dies ist darin begründet, dass die Approximation der Dirac-Distribution unzulänglich aufgelöst ist, sodass die Randbedingung nicht sauber aufgebracht werden kann. Für $\delta_d^{fs} > 4$ zeigt sich jedoch eine zufriedenstellende Abweichung im Bereich $\pm 2^\circ$. Abschließend lässt sich eine gute Übereinstimmung des statischen Benetzungsverhaltens feststellen, sofern die Auflösung hinreichend fein und eine passende Breite der Übergangsbereiche gewählt ist.

6.3.2 Grenzflächendynamik mit Starrkörperbewegung

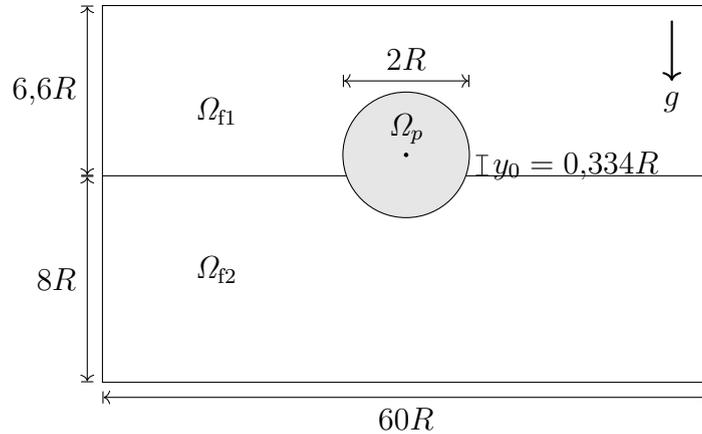


Abbildung 6.6: Skizze des betrachteten Simulationsbeispiels: Oszillierende Bewegung eines Festkörperpartikels auf einer Fluidgrenzfläche.

Im folgenden Abschnitt erfolgt ein Abgleich mit experimentellen und analytischen Daten für die abklingende Oszillationsbewegung eines auf einem schwereren Fluid schwimmenden Partikels. Hierzu wird ein sphärischer Partikel aus einer Höhe y_0 über der Fluidgrenzfläche unter Gravitation fallen gelassen. Dies verursacht eine Wellenbewegung auf der Grenzfläche, die mit dem Partikel interagiert. Die oszillierende Bewegung, die hierdurch hervorgerufen wird, erfährt eine Dämpfung und klingt daher mit der Zeit ab. Für ein derartiges Problem existieren experimentelle Daten von Itō [72]. Darüber hinaus liegen analytische Ergebnisse einer vereinfachten Theorie des linearisierten Problems mit vernachlässigbarer Viskosität von Maskell und Ursell [108] vor. Der betrachtete Simulationsaufbau ist in Abbildung 6.6 skizziert. Die Simulationsparameter sind entsprechend der Arbeiten [81, 23] gewählt. Diese sind $\rho_{f1} = 1,2 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_{f2} = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_s = 500 \text{ kg m}^{-3}$, $\mu_{f1} = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $\mu_{f2} = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $g = 9,81 \text{ m s}^{-2}$ und $R = 0,0762 \text{ m}$. Zudem führt die Wahl der Oberflächenspannung $\sigma = 1,8 \cdot 10^{-6} \text{ kg s}^{-2}$ zu vernachlässigbaren Kapillaritätskräften. Ein theoretischer Kontaktwinkel von 90° wird an der Partikeloberfläche vorgeschrieben. Die charakteristische Zeit des Problems ist $t_c = \sqrt{R/g}$ und die Simulation wird für $0 \leq t^* \leq 20$ mit der dimensionslosen Zeit $t^* = t/t_c$ durchgeführt. Die Durchführung der Simulationen erfolgt mit zwei unterschiedlichen Auflösungen. Ein grobes Gitter mit 2560×280 Zellen führt zu $R/\Delta x = 23$. Dabei werden 8000 Zeitschritte mit der Mobilität $\kappa = 0,07493 \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$ berechnet. Mit dem Verfeinerungsfaktor 1,5 ergibt sich die höher aufgelöste Simulation. Entsprechend finden dort 3840×420 Zellen, 12000 Zeitschritte und die Mobilität $\kappa = 0,03468 \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$ Verwendung. Die Breiten der diffusen Übergänge sind jeweils zu $\delta_d^{\text{ff}} = 8\Delta x$ und $\delta_d^{\text{fs}} = 5\Delta x$ gewählt.

Zur Quantifizierung der Abweichung dienen drei verschiedene Fehlermaße. Dies sind die L_2 -Norm e_{L_2} der Abweichungen über das gesamte Zeitintervall sowie die Unterschiede in der Amplitude e_a und Periodendauer e_T gemittelt über alle auftretenden Extrema. Die Fehlermaße sind jeweils als Relativwert definiert und in Tabelle 6.1 aufgeführt. Es zeigt sich, dass die Amplitude im Bereich zwischen den theoretischen und experimentellen Ergebnissen liegt. Die Periodendauer wird durch die Simulationen überschätzt, wobei die Abweichung für die besser aufgelöste Simulation geringer ist. Insgesamt ergibt sich eine gute Übereinstimmung, zumal sich die Abweichungen der

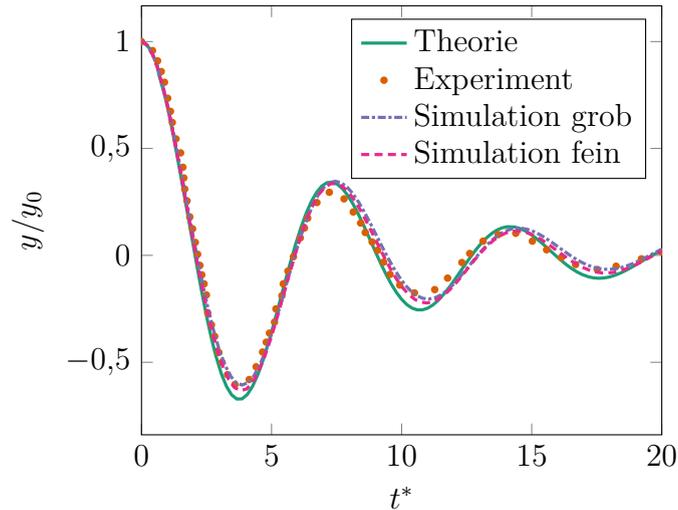


Abbildung 6.7: Normierte Mittelpunktskoordinate des Partikels über die Zeit. Simulationsergebnisse auf grobem und feinem Gitter verglichen mit analytischen Ergebnissen aus Maskell und Ursell [108] sowie experimentellen Daten von Itō [72].

Simulationsergebnisse in der gleichen Größenordnung bewegen wie die Unterschiede zwischen Experiment und Theorie. Die vorgeschlagene Methodik ist somit in der Lage, die Dynamik zweiphasiger Partikelströmungen zufriedenstellend abzubilden.

	grobes Gitter		feines Gitter		Theorie vs. Experiment
	Theorie	Experiment	Theorie	Experiment	
e_{L_2} in %	13,98	12,07	9,65	11,36	13,81
e_a in %	3,21	-2,13	2,46	-2,88	5,34
e_T in %	-7,76	-9,39	-6,52	-8,15	1,63

Tabelle 6.1: Abweichungen über das Intervall $0 \leq t^* \leq 20$ zwischen den Simulationen auf grobem bzw. feinem Gitter mit der Theorie von [108] und Experimenten von [72]. Zusätzlich ist die Abweichungen zwischen Theorie und Experiment aufgeführt. Als Fehlermaß dienen e_a und e_T als mittlere Abweichung in Amplitude und Periodendauer sowie e_{L_2} als L_2 -Norm in den einzelnen Datenpunkten von Abbildung 6.7.

6.4 Anwendung in numerischen Experimenten

Im folgenden Abschnitt werden einige Anwendungen des Modells in numerischen Experimenten gezeigt. Diese illustrieren die Fähigkeit der eingeführten Methode, verschiedene zweiphasige Partikelströmungen abzubilden. Die Anwendungen umfassen Fälle, in denen die Handhabung unterschiedlicher Oberflächenbenetzbarkeiten der Partikel, die Interaktion mehrerer Partikel in Zweiphasenströmungen sowie die Berücksichtigung von Berandungsstrukturen relevant sind.

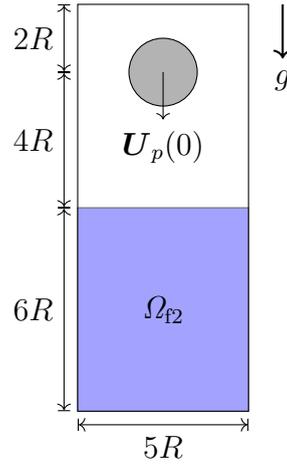


Abbildung 6.8: Skizze der Anfangsbedingungen für die Simulation des Partikelauflaufs auf eine Fluidgrenzfläche.

6.4.1 Partikelauflauf auf eine Fluidgrenzfläche

Nachfolgend wird der Aufprall eines unter Gravitation fallenden sphärischen Partikels auf eine Fluidgrenzfläche betrachtet. Die Anfangsbedingungen und geometrischen Abmaße sind Abbildung 6.8 zu entnehmen. Am unteren Rand befindet sich eine feste Wand, an der die Haftbedingung gilt, während ansonsten lediglich Impermeabilität sowie ein senkrechter Kontaktwinkel zu den Rändern angenommen wird. Es wird zudem $R = 0,1 \text{ m}$, $\rho_p = 20 \text{ kg m}^{-3}$ und $g = 4,69 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-2}$ gewählt. Die Materialparameter und daraus resultierende charakteristische Kennzahlen sind in Tabelle 6.2 aufgeführt. Diese sind die Archimedes-Zahl $Ar = 8\rho_f(\rho_p - \rho_f)R^3g/\mu^2$, Bond-Zahl $Bo = 4\rho R^2g/\sigma$, Reynolds-Zahl $Re = 2\rho R U_e/\mu$, Weber-Zahl $We = 2\rho R U_e^2/\sigma$ und Kapillaritätszahl $Ca = \mu U_e/\sigma$. Dabei dient der Partikeldurchmesser als charakteristische Länge und die Gleichgewichtsgeschwindigkeit U_e des freien Falls im jeweiligen Fluid wird gemäß der Schiller-Naumann-Korrelation (5.40) a priori abgeschätzt. Diese dient bezogen auf Fluid 1 auch als Startgeschwindigkeit $\mathbf{U}_p(t=0) = -U_{e,1}\mathbf{e}_y$. Die Simulationen werden für drei unterschiedliche Kontaktwinkel von 60° , 90° und 120° durchgeführt. Die räumliche Auflösung erfolgt mit 200×480 Zellen und die Mobilität ist $\kappa = 0,0018 \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$. Die Breiten der diffusen Übergänge sind $\delta_d^{\text{ff}} = 8\Delta x$ und $\delta_d^{\text{fs}} = 5\Delta x$.

	ρ in $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	μ in $\frac{\text{kg}}{\text{m s}}$	σ in $\frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$	Ar	Re	Bo	Ca	We
Fluid 1	1	$1,8 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-7}$	2200	41,6	0,3752	0,1346	5,5994
Fluid 2	15	$9,0 \cdot 10^{-5}$		347	10,9	5,6274	0,0588	0,6409

Tabelle 6.2: Simulationsparameter und korrespondierende dimensionslose Kennzahlen bezogen auf beide Fluide.

Die Ergebnisse der Partikelbewegung sind in Abbildung 6.9 dargestellt. Darüber hinaus findet sich das Geschwindigkeitsfeld sowie die auftretenden Grenzflächen bei unterschiedlicher Benetzbarkeit für verschiedene Zeiten in Abbildung 6.10. Nach der Arbeit von Lee und Kim [98] wird das Aufprallverhalten des Partikels durch den Kontaktwinkel θ_1^w sowie die dimensionslose Zahl $\iota := (\rho_f/\rho_p)^2 We Bo^{3/2}$ bestimmt, wobei ι_2 bezogen auf die jeweilige Größe von Fluid 2 ausschlaggebend ist. Für den

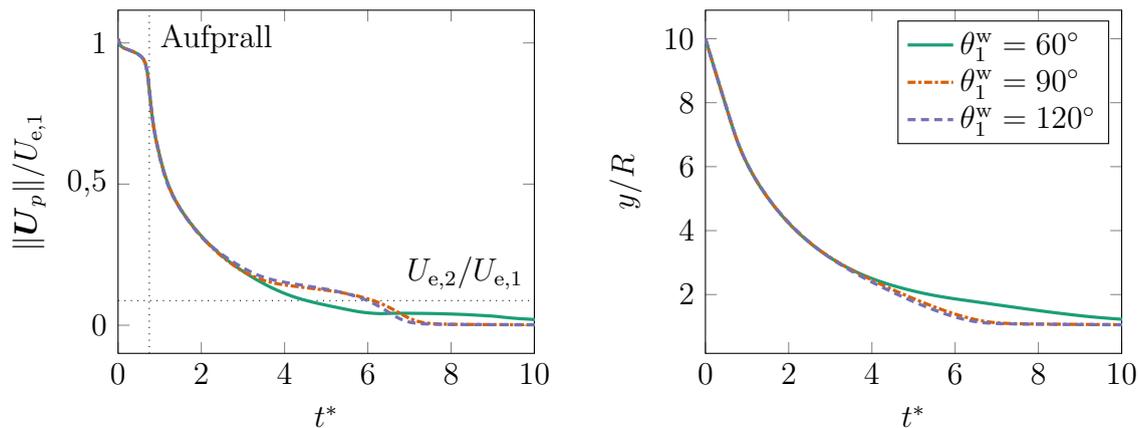


Abbildung 6.9: Zeitverläufe der Partikelgeschwindigkeit (links) und y -Koordinate (rechts) mit der normierten Zeit $t^* = t\sqrt{g/R}$.

vorliegenden Fall ist $t_2 \approx 15$. Ein derartiger Wert führt gemäß Lee und Kim [98] selbst für einen Kontaktwinkel von $\theta_1^w = 60^\circ$ zu einem Absinken des Partikels nach dem Aufprall. Dies zeigt sich ebenfalls in den durchgeführten Simulationen. Kurz vor dem Aufprall reduziert sich die Geschwindigkeit des Partikels moderat, während sie danach rapide abnimmt. Die Geschwindigkeit nähert sich sodann dem Gleichgewichtswert $U_{e,2}$, bevor der Partikel durch den Wandeinfluss gebremst wird und schließlich mit dem Kontakt zum Liegen kommt. Bis zum Aufprall sind die Zeitverläufe für alle Kontaktwinkel erwartungsgemäß identisch. Danach ergeben sich für 90° und 120° lediglich leicht unterschiedliche Verläufe, wobei sich im letzteren Fall ein etwas schnelleres Absinken ergibt. Dem entgegen zeigt sich für 60° eine deutlich geringere Geschwindigkeit. Diese ist auf einen Film von Fluid 1 zurückzuführen, der an der Oberseite des Partikels auch nach dem Eintauchen haften bleibt und einen Tropfeneinschluss bildet. Dieser bringt einen zusätzlichen Auftrieb mit sich und bremst somit das Absinken verglichen zu den beiden anderen Fällen. Dieser Effekt lässt sich deutlich anhand der Iso-Linien in Abbildung 6.10 erkennen. Für ähnliche Parametersätze ist ein solcher Effekt auch in der Literatur dokumentiert [101].

Zusätzlich zu den zweidimensionalen Simulationen ist in Abbildung 6.11 die Momentankonfiguration einer 3D-Simulation zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Hierfür erfolgt die Diskretisierung in z -Richtung ebenfalls mit 200 Zellen und ein Kontaktwinkel von 90° wird angenommen. Die qualitativen Effekte sind identisch zum zweidimensionalen Fall. Dieses Beispiel zeigt die Anwendbarkeit des vorgestellten Modells auch für den dreidimensionalen Raum.

6.4.2 Mehrpartikelsysteme in Zweiphasenströmungen

Der nachfolgende Abschnitt demonstriert die Fähigkeit des Modells, Festkörperinteraktion in Zweiphasenströmungen abzubilden. Hierfür erfolgt zunächst die Betrachtung eines Aufbaus mit zwei Starrkörperpartikeln und einer festen Berandungsstruktur, wie in Abbildung 6.12 abgebildet. Materialparameter sowie Diskretisierung sind hierbei identisch zum Simulationsbeispiel aus Abschnitt 6.4.1. Zusätzlich findet ein Festkörperkontaktmodell mit dem Restitutionskoeffizienten $e_r = 1$ Verwendung, d. h. es liegen rein elastische Stöße vor. Alle Kontaktwinkel sind durch 90° vorgegeben.

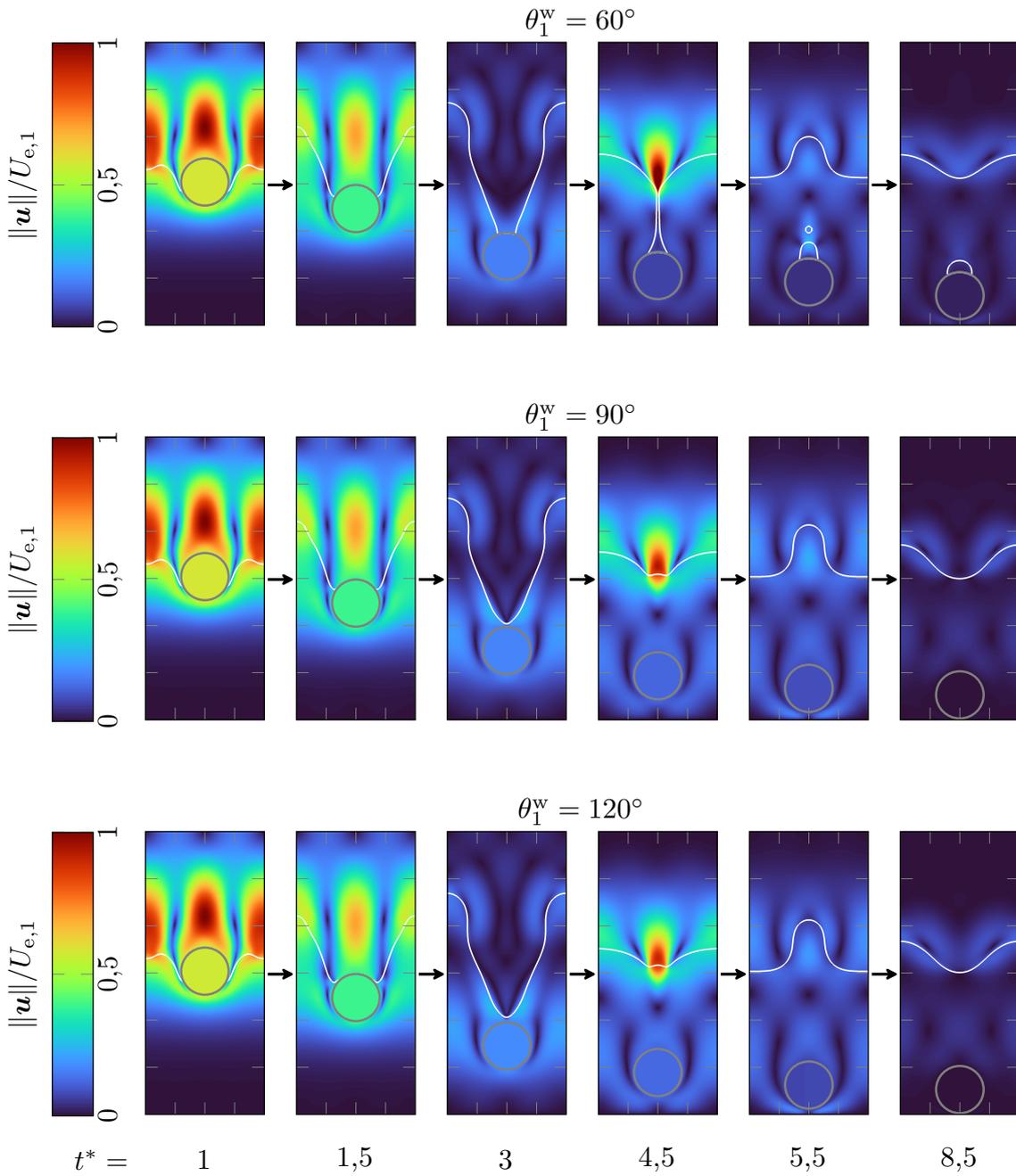


Abbildung 6.10: Feldinformationen zu ausgewählten Zeitpunkten. Betrag des Geschwindigkeitsfelds normiert auf die Gleichgewichtsgeschwindigkeit $U_{e,1}$ sowie die 0,5-Iso-Linien von φ_1^f (weiß) und φ_p (grau).

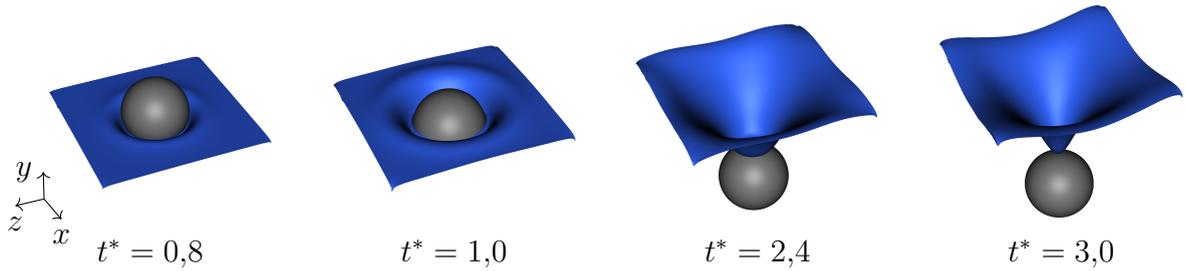


Abbildung 6.11: Dreidimensionale Simulation des Partikelaufralls auf eine freie Oberfläche mit $\theta_1^w = 90^\circ$. Iso-Oberflächen mit $\varphi_1^f = 0,5$ (blau) und $\varphi_p = 0,5$ (grau).

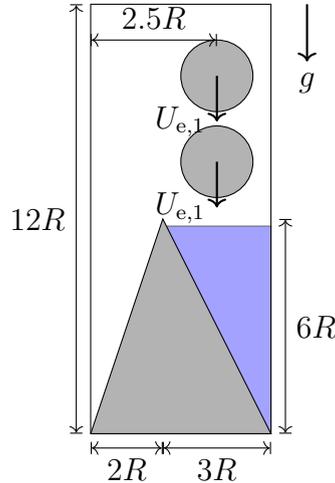


Abbildung 6.12: Anfangskonfiguration für die Simulation zweier Partikel in einer Zweiphasenströmung mit Berandungsstruktur (graues Dreieck). Die Anfangsgeschwindigkeiten der Partikel sind $\mathbf{U}_1(0) = \mathbf{U}_2(0) = U_{e,1}$.

Nach dem Aufprall des unteren Partikels auf die Fluidgrenzfläche wird dieser signifikant abgebremst und es kommt dadurch zu Annäherung und Kontakt beider Partikel. Der Stoß des unteren Partikels mit der Dreiecksstruktur hat sodann eine Abstoßbewegung nach rechts zur Folge. Bezogen auf die Fluide führt der Partikelaufrall zu einem Überschwappen des schwereren Fluids und somit zur Tropfenablösung am linken Rand zwischen Partikel und Struktur. Dieser Tropfen erfährt einen Impuls nach links oben und trifft im weiteren Verlauf auf den linken Gebietsrand, wo sich die durch den senkrechten Kontaktwinkel vorgegebene Halbkreisform ergibt. Durch Gravitationseffekte bewegt sich der Tropfen schließlich Richtung unterem Rand. Am rechten Gebietsrand hat die Verdrängung eine aufsteigende Wassersäule zur Folge. Die dort vorliegenden, hohen Geschwindigkeiten in y -Richtung verringern sich mit der Zeit durch Gravitationseffekte, bis sich eine Richtungsumkehr der Geschwindigkeit und somit eine Rückströmung des schwereren Fluids ergibt.

Das vorliegende Simulationsbeispiel verdeutlicht die Fähigkeit des verwendeten Modells, Festkörperstöße mit gleichzeitiger Kontaktliniendynamik abzubilden, wobei der Festkörperkontakt auch morphologische Änderungen, wie Tropfenablösungen hervorrufen kann.

Abschließend wird ein Simulationsbeispiel gewählt, bei dem eine größere Partikelan-

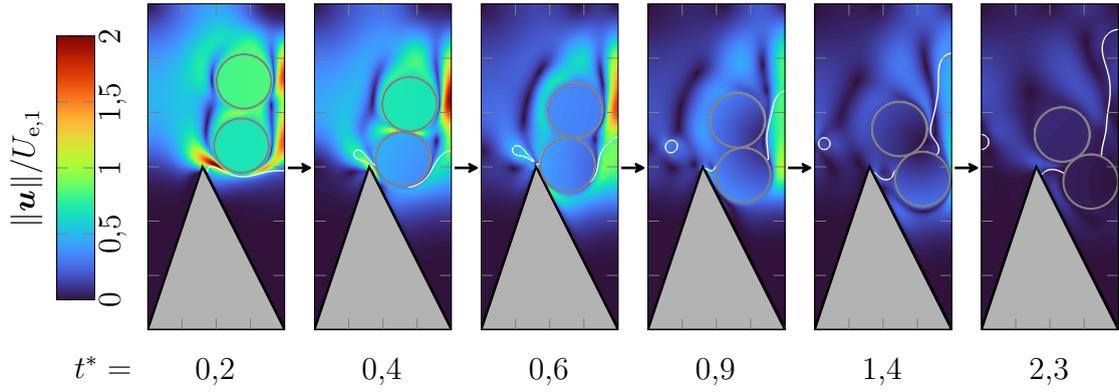


Abbildung 6.13: Simulation zweier Partikel in einer Zweiphasenströmung mit Berandungsstruktur zu unterschiedlichen Zeitpunkten mit $t^* = t\sqrt{g/R}$. Betrag des Geschwindigkeitsfeldes und 0,5-Iso-Linien von φ_1^f (weiß), φ_p (grau) sowie φ_{st} (schwarz).

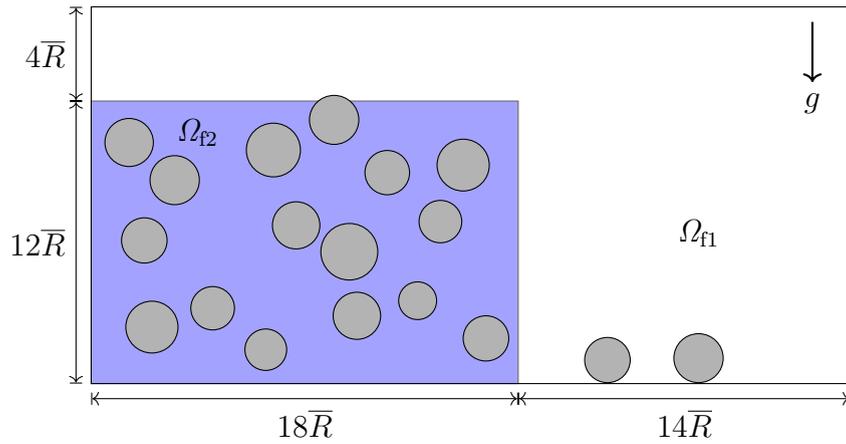


Abbildung 6.14: Anfangskonfiguration für die Simulation des Dammbrechproblems.

zahl vorliegt und die Annahme konstanter Radien entfällt. Analog zu einem Dammbrech wird anfänglich die Barriere zwischen beiden Fluidbereichen entfernt, wodurch die Säule des schweren Fluid 2 einzustürzen beginnt. Dabei befinden sich, wie in Abbildung 6.14 dargestellt, Starrkörperpartikel mit der Massendichte $\rho_p = 20 \text{ kg m}^{-3}$ in den Fluiden. Die Materialparameter der Fluide sowie relevante Kennzahlen des Problems sind analog zum obigen Beispiel Tabelle 6.2 zu entnehmen, wobei von $g = 4,69 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-2}$ sowie dem mittleren Partikelradius als charakteristische Länge ausgegangen wird.

Für die Radien der betrachteten Partikel gilt $0,8\bar{R} \leq R_p \leq 1,2\bar{R}$, wobei \bar{R} der Erwartungswert des Radius aller Partikel ist. Alle Gebietsränder werden als feste Wände betrachtet, an denen Impermeabilität, die Haftbedingung und ein senkrechter Benetzungswinkel vorliegt. Bezüglich der Partikel wird ebenfalls $\theta_1^w = 90^\circ$ angenommen und der Festkörperkontakt ist durch inelastische Stöße mit $e_r = 0$ modelliert. Die Mobilität ist $\kappa = 0,005 \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$ und es wird ein Zeitintervall $t^* \in [0, 10]$ betrachtet, das mit 50 000 Zeitschritten diskretisiert ist. Die räumliche Auflösung erfolgt mit 1280×640 Zellen. Die adaptive Steuerung des γ -Schemas für den Konvektionsterm in der Navier-Stokes-Gleichung liefert über die Gesamtsimulation hinweg den Maximalwert $\gamma = 0,95$ und somit tendiert die Diskretisierung des Konvektionsterms in Richtung des Aufwindschemas 1. Ordnung. Die Rechenzeit der Simulation be-

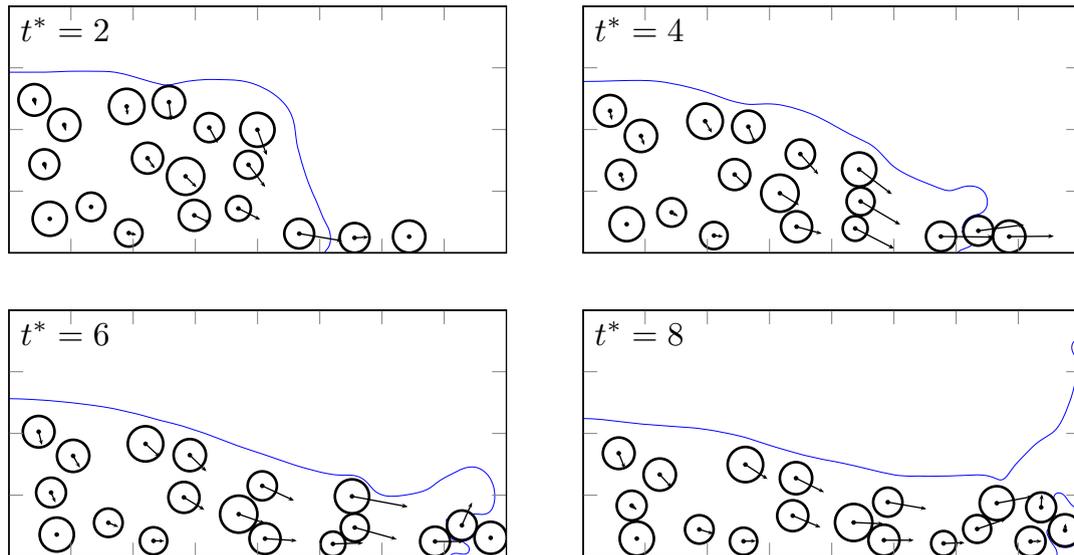


Abbildung 6.15: Fluidgrenzfläche sowie die Partikel mit entsprechender Schwerpunktschwindigkeit zu verschiedenen Zeitpunkten.

trägt ca. 6 Stunden auf einem Kern eines Intel Xeon E5-2620 Prozessors mit einer Grundtaktfrequenz von 2,1 GHz. Diese Zeit wird zu 75 % von der Lösung des Navier-Stokes-Systems in Anspruch genommen, wobei die Lösung der Poisson-Gleichung für den Druck dominierend ist. Auf die Starrkörperprojektion sowie das Kollisionsmodell entfällt 20 % und auf die Normierungsprozedur des Phasenfeldes und die Cahn-Hilliard-Gleichung 4 %. Die restliche Zeit enthält z. B. das Schreiben der Felder etc.¹.

Abbildung 6.15 zeigt die Fluidgrenzfläche sowie die Partikel nebst deren Schwerpunktschwindigkeit zu verschiedenen Zeitpunkten. Die Strömung des dichteren Fluids 2 in Richtung des rechten Gebietsrandes transportiert Partikel mit sich. Währenddessen kommt es zu Partikelkontakt und entsprechenden Stößen. Die Welle bestehend aus den Partikeln im Fluid 2 trifft mit der Zeit auf die rechte Wand, wo sie tangential in y -Richtung abgelenkt wird. In der Umgebung der rechten, unteren Ecke verbleibt ein Einschluss des leichteren Fluids, der durch die Partikelverteilung nicht nach oben entweichen kann. Das vorliegende Beispiel zeigt, dass auch Systeme von Zweiphasenströmungen mit vielen Partikeln erfolgreich modelliert und simuliert werden können.

¹Die Unterschiede zum analogen Beispiel aus [126] ergeben sich durch Optimierungen des Codes sowie die Verwendung einer größeren Zeitschrittweite durch einen höheren Sicherheitsfaktor in der dynamischen Bestimmung. Letzteres wirkt sich auch geringfügig auf die Ergebnisse aus.

6.5 Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang

Für Modelle mit diffusen Übergängen zwischen Phasen, wie beispielsweise die Phasenfeldmethode, wird die Modellgenauigkeit einerseits von der Breite des diffusen Übergangs und andererseits durch die dort verwendeten Approximationen für Größen der Mischung z. B. in Form von Interpolationsschemata bestimmt. Da die Übergangsbreite durch die numerische Auflösung und der damit verbundenen Rechenzeit in der Praxis limitiert ist, erscheint es daher wünschenswert, möglichst gute Approximationen zu verwenden, sodass auch bei breiten Übergängen noch eine hohe Genauigkeit erzielt wird. Ziel dieses Abschnittes ist es, die Approximation viskoser Spannungen für Zweiphasenströmungen zu untersuchen und eine günstige Methode hierfür bereitzustellen. Die Publikation der nachfolgend dargestellten Inhalte erfolgte durch den Autor in [128]. Von der dadurch erzielten Verbesserung in der Genauigkeit des Hohenberg-Halperin-Modells mit Viskositätskontrast profitiert entsprechend u. a. auch die in diesem Kapitel vorgestellte Methode zur Simulation mehrphasiger Partikelströmungen. Zunächst erfolgt ein Kurzüberblick über die Repräsentation des Mehrphasenproblems mittels singulärer Grenzflächen sowie über die dort auftretenden Sprungbedingungen. Dies ist von Interesse, da Modelle mit diffusem Übergang bei verschwindender Breite $\delta_d \rightarrow 0$ asymptotisch in diese Repräsentation übergehen müssen und somit auch die Sprungbedingungen zu erfüllen haben. Die bisher gezeigten Ergebnisse beruhen auf einer Approximation der viskosen Spannungen basierend auf einer linearen Viskositätsinterpolation im Phasenübergang gemäß dem arithmetischen Mittel. Dies ist die verbreitetste Approximation und findet sich unter anderem in [57, 179, 81, 80, 113, 28, 37, 90]. Wie bereits in Abschnitt 3.4.1 beschrieben, kann auch der harmonische Mittelwert herangezogen werden. Im Bezug auf die Viskosität wird dies beispielsweise bei [103, 176] verwendet. Nachfolgend werden die Annahmen, welche zu den entsprechenden Interpolationen führen, dargestellt und deren Implikationen für Sprünge der Felder im Übergangsbereich zwischen Phasen diskutiert. Darüber hinaus erfolgt die Einführung eines Sprungbedingungsansatzes als Approximation im diffusen Übergang bezüglich der viskosen Spannung. Derartige Sprungbedingungsansätze werden bei Nicoli et al. [117] für Skalarfelder wie Temperatur oder elektrische Ladung verwendet. Darüberhinaus führen Schneider et al. [141, 140, 139] Sprungbedingungsansätze bezüglich elastischer Spannungen im Kontext der Festkörpermechanik ein. Die Übertragung dieser Methode auf Zweiphasenströmungen ist in diesem Abschnitt dargestellt. Es zeigt sich, dass mit dem Sprungbedingungsansatz eine konsistente Approximation vorliegt, die mechanische Sprungbedingungen punktweise im gesamten diffusen Übergang erfüllt und bezüglich der Genauigkeit im Allgemeinen der arithmetischen und harmonischen Viskositätsinterpolation überlegen ist. In den Grenzfällen, dass Geschwindigkeitsgradienten ausschließlich entweder tangential (I) oder normal (II) zur Grenzfläche vorliegen, stimmt der Sprungbedingungsansatz mit einer arithmetischen (I) bzw. harmonischen (II) Interpolation überein, die im entsprechenden Grenzfall dem jeweils anderen deutlich überlegen ist. Dies wird anhand von Anwendungsfällen gezeigt.

6.5.1 Repräsentation mittels singulärer Grenzflächen

Im Rahmen der klassischen Kontinuumsmodellierung setzen sich Feldgrößen stückweise aus sogenannten phaseninherenten Feldern zusammen. Beispielsweise gilt für das Geschwindigkeitsfeld bei Zweiphasenproblemen mit $N_\alpha = 2$ die Definition

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^2 I_\alpha \mathbf{u}_\alpha = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ \mathbf{u}_2(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Omega_2, \end{cases} \quad (6.19)$$

wobei \mathbf{u}_1 und \mathbf{u}_2 die entsprechende phaseninherente Geschwindigkeit der Phase $\alpha = 1$ und $\alpha = 2$ ist. Partielle Differentialgleichungen sind bezüglich der phaseninherenten Größen im jeweiligen Teilgebiet definiert. Zusätzlich sind auf der singulären Grenzfläche Γ_{12} , die gemäß Gleichung (3.2) definiert ist, Übergangsbedingungen zu erfüllen. Bezogen auf das inkompressible Navier-Stokes-System sind die Impulsgleichung (2.58) und Kontinuitätsgleichung (2.56) im jeweiligen Teilgebiet Ω_α unter den Übergangsbedingungen

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{12}:$$

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket = \mathbf{0}, \quad (6.20a)$$

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n} = -\sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n}, \quad (6.20b)$$

zu lösen [7], wobei $\llbracket (\cdot) \rrbracket := (\cdot)_1 - (\cdot)_2$ den Sprung von Feldgrößen, σ die Oberflächenspannung, κ_Γ die Gesamtkrümmung und \mathbf{n} den Oberflächennormalenvektor, der vom Gebiet Ω_1 nach außen gerichtet ist, bezeichnet. Für inkompressible, Newtonische Fluide folgt aus der konstitutiven Gleichung (2.57) entsprechend $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n} = -\llbracket p \rrbracket \mathbf{n} + \llbracket \boldsymbol{\sigma}^\vee \rrbracket \mathbf{n}$. Die Übergangsbedingungen (6.20) ergeben sich aus den Bilanzgleichungen für Masse und Impuls über singuläre Flächen [147, Gl. (1.3.5-4) und (2.1.6-7)]. Dabei liegen die Annahmen zugrunde, dass die Phasengrenze Γ_{12} durch eine *materielle singuläre Fläche* gegeben ist, mit der keine Masse assoziiert ist, und dass eine konstante Oberflächenspannung σ über Γ_{12} vorliegt. Die Kontinuität im Geschwindigkeitsfeld gemäß (6.20a) impliziert sowohl Impermeabilität als auch die Haftbedingung an der Oberfläche. Für beliebige Tensorfelder können Diskontinuitäten allgemein in einen Tangential- sowie Normalanteil additiv zerlegt werden [163]. Verschwindet der Normalanteil, liegt eine *transversale Diskontinuität* vor, während für *longitudinale Diskontinuitäten* der Tangentialanteil Null ist. Die Kontinuität des Geschwindigkeitsfelds (6.20a) impliziert eine longitudinale Diskontinuität des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} . Für alle Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}$, also Vektoren die $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = 0$ für $\mathbf{x} \in \Gamma_{12}(t)$ erfüllen, gilt somit

$$\llbracket \mathbf{L} \rrbracket \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}. \quad (6.21)$$

Folglich lässt sich die Sprungbedingung des Geschwindigkeitsgradienten über

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{12}: \quad \llbracket \mathbf{L} \rrbracket = \mathbf{d} \otimes \mathbf{n} \quad (6.22)$$

formulieren (vgl. [49, Theorem 2.2]). Dabei bezeichnet $\mathbf{d} := \llbracket \mathbf{L} \rrbracket \mathbf{n}$ den entsprechenden Sprungvektor. Dies entspricht der Hadamardschen Kompatibilitätsbedingung erster Ordnung auf einer materiellen singulären Fläche (siehe [71, Gleichung (2.2.9)]). Gleichung (6.22) ist dabei die Darstellung dieser Bedingung bezüglich des Geschwindigkeitsgradienten [49]. Für Sprünge des Verschiebungsgradienten findet sich eine analoge

6.5 Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang

Gleichung, die im Kontext der Festkörpermechanik gängig ist [140], wobei sich lediglich der entsprechende Sprungvektor unterscheidet. Die Hadamard-Bedingung (6.22) stellt ein notwendiges Kriterium zur Erfüllung von (6.20a) dar.

Das Randwertproblem in der Modellierung mittels singulärer Grenzflächen lässt sich in eine *Gesamtgebietsformulierung* überführen [95]. Mit Hilfe der Indikatorfunktion (3.3) kann eine beliebige Feldgröße ϕ in einem Zweiphasenproblem durch $\phi = I_1\phi_1 + I_2\phi_2$ im Gesamtgebiet Ω ausgedrückt werden, sodass z. B. die stückweise Definition der Geschwindigkeit (6.19) identisch zur Darstellung $\mathbf{u} = I_1\mathbf{u}_1 + I_2\mathbf{u}_2$ ist. Es ist anzumerken, dass die Indikatorfunktion Die Eigenschaft der Idempotenz $I_\alpha I_\alpha = I_\alpha$ und der Biorthogonalität $\forall \alpha \neq \beta: I_\alpha I_\beta = 0$ besitzt. Für multiplikative Größen wie die Impulsdichte folgt somit

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} I_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \quad \text{mit} \quad \rho = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} I_\alpha \rho_\alpha \quad \text{und} \quad \mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} I_\alpha \mathbf{u}_\alpha. \quad (6.23)$$

Die Kontinuitätsgleichung auf diesem Geschwindigkeitsfeld ergibt

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot (I_1 \mathbf{u}_1 + I_2 \mathbf{u}_2) = I_1 \nabla \cdot \mathbf{u}_1 + I_2 \nabla \cdot \mathbf{u}_2 + \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \cdot \mathbf{n} \delta_\Gamma \quad (6.24)$$

wobei $\nabla I_1 = -\delta_\Gamma \mathbf{n} = -\nabla I_2$ ausgenutzt wurde. Diese Gleichung lässt sich in die schwache Form bringen, wobei die Identitäten (3.4) und (3.5) genutzt werden können. Aus dem Hauptlemma der Variationsrechnung folgt daraus, dass $\forall \mathbf{x} \in \Omega_1: \nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0$, $\forall \mathbf{x} \in \Omega_2: \nabla \cdot \mathbf{u}_2 = 0$ und $\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{12}: \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \cdot \mathbf{n} = 0$ unabhängig voneinander erfüllt werden müssen, sodass die Gesamtgebietsformulierung äquivalent ist zur Darstellung mittels der Feldgleichung im jeweiligen Gebiet der Phase α und entsprechenden Übergangsbedingungen. Analog kann auch die Impulsbilanz in die Gesamtgebietsformulierung

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{K} + \rho \mathbf{f}^V + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{K} = \nabla \cdot (\sigma \mathbf{P}_\tau \delta_\Gamma) = -\sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n} \delta_\Gamma \quad (6.25)$$

überführt werden, sofern der Gesamtspannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma}^t = \boldsymbol{\sigma}_\Gamma \delta_\Gamma + \boldsymbol{\sigma} = \sigma \mathbf{P}_\tau \delta_\Gamma + \sum_{\alpha=1}^2 \boldsymbol{\sigma}_\alpha I_\alpha \quad (6.26)$$

nach Lowengrub and Truskinovsky [105] angesetzt wird. Dabei ist $\boldsymbol{\sigma}$ der volumetrische Anteil der Spannungen und $\boldsymbol{\sigma}_\Gamma = \sigma \mathbf{P}_\tau$ der Oberflächenspannungstensor, wobei $\mathbf{P}_\tau = \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ den Projektor tangential zur Grenzfläche bezeichnet. Der Oberflächenspannungstensor $\boldsymbol{\sigma}_\Gamma$ wird somit über die Dirac-Distribution in die Gesamtspannungen integriert. Die Divergenz von $\boldsymbol{\sigma}^t$ ergibt

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^t = \sigma (\mathbf{P}_\tau (\nabla \delta_\Gamma) + \delta_\Gamma \nabla \cdot \mathbf{P}_\tau) + \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \nabla I_1 + \sum_{\alpha=1}^2 \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\alpha I_\alpha \quad (6.27)$$

$$= -(\sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n} + \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n}) \delta_\Gamma + \sum_{\alpha=1}^2 I_\alpha (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\alpha) \quad (6.28)$$

wobei $\nabla \cdot \mathbf{P}_\tau = -2(\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} = -\kappa_\Gamma \mathbf{n}$ und $\mathbf{P}_\tau (\nabla \delta_\Gamma) = \mathbf{0}$ ausgenutzt wurden. Letzteres ergibt sich, da der Gradient der Dirac-Distribution δ_Γ in Tangentialrichtung per Definition verschwindet. Damit ergibt sich aus Gleichung (6.25)

$$\sum_{\alpha=1}^2 I_\alpha \rho_\alpha \dot{\mathbf{u}}_\alpha = -(\sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n} + \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n}) \delta_\Gamma + \sum_{\alpha=1}^2 I_\alpha (\rho_\alpha \mathbf{f}^V + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\alpha). \quad (6.29)$$

Die Terme auf der singulären Oberfläche führen zur Sprungimpulsbilanz (6.20b), während die Volumenterme proportional zu I_α die Impulsbilanz im jeweiligen Phasengebiet ergeben. Diese Gesamtgebietsformulierung bildet den Ausgangspunkt für diffuse Modelle, wobei die Indikatorfunktion I_α gemäß Abschnitt 3.4.1 z. B. durch φ_α approximiert wird. Dabei gehen allerdings die Eigenschaften der Idempotenz und Biorthogonalität verloren, d. h. im diffusen Übergang gilt $\varphi_\alpha \varphi_\alpha \neq \varphi_\alpha$. Bezüglich der Oberflächenspannungen kann die Dirac-Distribution in der Gleichung (6.26) durch z. B. $\delta_\Gamma \approx k_1 \epsilon \|\varphi_1\|^2$ approximiert werden, was auf die Spannungsformulierung (3.83b) und somit Gleichung (3.87b) für den Kapillaritätsterm führt. Wird im Kapillaritätsterm $\sigma \kappa_\Gamma \mathbf{n} \delta_\Gamma$ der Gleichung (6.25) direkt die Approximation von δ_Γ durchgeführt, ergibt sich das Modell gemäß Gleichung (3.90).

6.5.2 Diffuse Approximation

Im Kontext diffuser Übergänge sind alle phaseninherenten Größen im Gebiet $\Omega_{\varphi_\alpha > 0}$ definiert. Während für scharfe Übergänge zweier Phasen beide entsprechenden phaseninherenten Größen nur auf der singulären Grenzfläche simultan vorliegen, existieren diese bei diffusen Übergängen im gesamten volumetrischen Bereich $\Gamma_{\alpha\beta}^d = \Omega_{\varphi_\alpha > 0} \cap \Omega_{\varphi_\beta > 0}$. Es lassen sich somit „Sprünge“ $\llbracket (\cdot) \rrbracket := (\cdot)_1 - (\cdot)_2$ als punktweise Differenz der phaseninherenten Felder im diffusen Übergangsbereich ansehen. Da die Krümmungseffekte aus Gleichung (6.20b) bei Hohenberg-Halperin-Modellen z. B. nach Gleichungssystem (3.77) durch einen Kapillaritätsterm in der Impulsgleichung abgebildet werden, muss die Diskontinuität in viskosen Spannungen transversal sein (Details siehe [128, Anhang B]), d. h.

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}^v \rrbracket \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (6.30)$$

Zudem sind, wie in Abschnitt 3.6 dargelegt, die phaseninherenten Geschwindigkeitsfelder identisch, sodass die Betrachtung eines einzigen Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u} hinreichend ist, und aufgrund der Quasi-Inkompressibilität fallen dadurch auch die phaseninherenten Drücke zusammen. Bezüglich nicht identischer Felder lassen sich Mischungsgrößen definieren, die durch $\bar{(\cdot)}$ gekennzeichnet sind. Für diese müssen Approximationen im diffusen Übergang gemäß

$$\bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{L}}(\mathbf{L}_1, \dots, \mathbf{L}_{N_\alpha}), \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v(\boldsymbol{\sigma}_1^v, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{N_\alpha}^v) \quad (6.31)$$

vorgegeben werden. Da ein einziges Geschwindigkeitsfeld vorliegt, gilt $\bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L} = \nabla \mathbf{u}$ und die entsprechende Approximation kann zur Bestimmung der phaseninherenten Größe dienen. Die konstitutive Gleichung in Form des Newtonschen Materialgesetzes (2.54) gilt für jede Phase und lässt sich jeweils phaseninherent angeben. Darüber hinaus lässt sich eine Mischungsviskosität $\bar{\boldsymbol{\nu}}$ einführen, mit der ein zusätzliches Konstitutivgesetz für die Größen der Mischung formuliert werden kann, sodass

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = 2\bar{\boldsymbol{\nu}}[\bar{\mathbf{D}}] \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma}_\alpha^v = 2\mu_\alpha \mathbf{D}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N_\alpha \quad (6.32)$$

gilt. Eine Möglichkeit zur Gewinnung von Approximationen im diffusen Übergang stellen Homogenisierungsmethoden durch gemittelte Felder dar, was auch im Kontext viskoser Spannungen möglich ist [87]. Mit den Annahmen von Voigt [171] bzw. Reuss [130] ergeben sich entsprechend die Interpolationen mit arithmetischem und

harmonischem Mittel. Es lässt sich zeigen, dass diese theoretische Schranken bezüglich der Dissipation $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v \cdot \bar{\mathbf{D}}$ der Mischung sind [87]. Nachfolgend werden die Approximationen mit arithmetischer und harmonischer Interpolation sowie gemäß des Sprungbedingungsansatzes diskutiert, wobei von einem Zweiphasenproblem ausgegangen wird, d. h. $N_\alpha = 2$. Diese Approximationen basieren auf einer linearen Interpolation zur Darstellung der Ausdrücke für die Mischungsgrößen in Gleichung (6.31), was auf

$$\bar{\mathbf{L}} = \varphi_1 \mathbf{L}_1 + \varphi_2 \mathbf{L}_2 \quad \text{und} \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \varphi_1 \boldsymbol{\sigma}_1^v + \varphi_2 \boldsymbol{\sigma}_2^v \quad (6.33)$$

führt. Zur Berechnung der viskosen Spannung $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v$ der Mischung ist die Kenntnis von $\boldsymbol{\sigma}_1^v$, $\boldsymbol{\sigma}_2^v$, \mathbf{L}_1 , \mathbf{L}_2 und $\bar{\mathbf{L}}$ notwendig. Neben den Ausdrücken für die Mischungsgrößen (6.33) liefern die phaseninherenten Konstitutivgleichungen $\boldsymbol{\sigma}_\alpha^v = 2\mu_\alpha \text{sym}(\mathbf{L}_\alpha)$ sowie die Definition $\bar{\mathbf{L}} = \nabla \mathbf{u}$ weitere Bestimmungsgleichungen. Dies führt zu einem unterbestimmten System an Gleichungen, das mit der Hinzunahme weiterer Annahmen geschlossen werden muss. Abhängig von diesen Annahmen ergeben sich die unterschiedlichen Approximationen für die viskose Spannung $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v$, die dann in der Navier-Stokes-Gleichung zu verwenden ist.

Arithmetisches Mittel aus eine Voigt-Ansatz

Die Annahme einer Homogenisierung nach Voigt [171] ist die Gleichheit der phaseninherenten Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2$. Mit der linearen Interpolation (6.33) zur Bestimmung der Mischungsgrößen und der Summationsbedingung $\varphi_1 + \varphi_2 = 1$ folgt somit

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{12}^d: \quad \bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 \quad \wedge \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \varphi_1 \boldsymbol{\sigma}_1^v + \varphi_2 \boldsymbol{\sigma}_2^v. \quad (6.34)$$

Dies führt mit Gleichung (6.32) zu

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = 2\bar{\mu}\bar{\mathbf{D}} = 2(\varphi_1\mu_1 + \varphi_2\mu_2)\bar{\mathbf{D}}$$

und somit zur arithmetischen Mittelung der Viskosität

$$\bar{\mu} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha \mu_\alpha. \quad (6.35)$$

Dies ergibt die Voigt-Schranke, welche eine obere Grenze für die tatsächliche Viskosität der Mischung dar stellt. Die Gleichheit phaseninherenter Geschwindigkeitsgradienten führt lokal zu einer longitudinalen Diskontinuität und entsprechend einem verschwindenden Sprung der Tangentialkomponenten von \mathbf{L} , impliziert jedoch auch $\llbracket \mathbf{L} \rrbracket \mathbf{n} = \mathbf{d} = \mathbf{0}$, was im allgemeinen unzutreffend ist. Es ergibt sich

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{12}^d: \quad \llbracket \mathbf{L} \rrbracket \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}, \quad \llbracket \boldsymbol{\sigma}^v \rrbracket \mathbf{n} \neq \mathbf{0},$$

sodass die Hadamard-Bedingung (6.22) punktweise erfüllt wird, die Impulsbilanz (6.20b) der Grenzfläche jedoch nicht.

Harmonisches Mittel aus eine Reuss-Ansatz

Die Homogenisierung nach Reuss [130] geht von der Annahme $\boldsymbol{\sigma}_1^v = \boldsymbol{\sigma}_2^v$ aus, woraus mit Gleichung (6.33) und der Summationsbedingung

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Gamma_{12}^d: \quad \bar{\mathbf{L}} = \varphi_1 \mathbf{L}_1 + \varphi_2 \mathbf{L}_2 \quad \wedge \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \boldsymbol{\sigma}_1^v = \boldsymbol{\sigma}_2^v \quad (6.36)$$

folgt. Daraus ergibt sich

$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{2\bar{\mu}} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \left(\frac{\varphi_1}{2\mu_1} + \frac{\varphi_2}{2\mu_2} \right) \bar{\boldsymbol{\sigma}}^v$$

aus Gleichung (6.32) eine harmonische Mittelung der Viskosität

$$\bar{\mu} = \left(\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{\varphi_\alpha}{\mu_\alpha} \right)^{-1}. \quad (6.37)$$

Dies entspricht der Reuss-Schranke und somit einer unteren Grenze für die tatsächliche Viskosität der Mischung. Es ergibt sich

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Gamma_{12}^d: \quad \llbracket \mathbf{L} \rrbracket \boldsymbol{\tau} \neq \mathbf{0}, \quad \llbracket \boldsymbol{\sigma}^v \rrbracket \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

und damit ist die Impulsbilanz (6.20b) im Übergang lokal stets erfüllt, die Hadamard-Bedingung (6.22) allerdings nicht.

Sprungbedingungsansatz

Die Idee des Sprungbedingungsansatzes besteht in der Konstruktion einer Approximation der viskosen Spannungen, die für jeden Punkt des diffusen Übergangs die Gültigkeit von Gleichung (6.22) und (6.20b) gewährleistet. Die Impulsbilanz auf der Grenzfläche und die Hadamard-Bedingung werden folglich punktweise erfüllt. Zu diesem Zweck dient das Gleichungssystem

$$\bar{\mathbf{L}} = \varphi_1 \mathbf{L}_1 + \varphi_2 \mathbf{L}_2, \quad (6.38a)$$

$$\llbracket \mathbf{L} \rrbracket = \mathbf{d} \otimes \mathbf{n}, \quad (6.38b)$$

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}^v \rrbracket \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (6.38c)$$

das für jeden Punkt $\boldsymbol{x} \in \Gamma_{12}^d$ bezüglich dem unbekanntem Sprungvektor \mathbf{d} und den phaseninherenten Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L}_1 und \mathbf{L}_2 zu lösen ist. Für Details hierzu sei auf [128] verwiesen. Die Lösung kann algebraisch gewonnen werden und ergibt den Sprungvektor

$$\mathbf{d} = \frac{\mu_2 - \mu_1}{\varphi_2 \mu_1 + \varphi_1 \mu_2} (\mathbf{1} + \mathbf{P}_\tau) \bar{\mathbf{D}} \mathbf{n}, \quad (6.39)$$

wobei

$$\mathbf{P}_n = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (6.40a)$$

$$\mathbf{P}_\tau = \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (6.40b)$$

6.5 Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang

die Projektoren in Normal- und Tangentialrichtung sind. Zudem folgt

$$\mathbf{L}_1 = \bar{\mathbf{L}} + \varphi_2 \mathbf{d} \otimes \mathbf{n}, \quad (6.41a)$$

$$\mathbf{L}_2 = \bar{\mathbf{L}} - \varphi_1 \mathbf{d} \otimes \mathbf{n} \quad (6.41b)$$

für die phaseninherenten Geschwindigkeitsgradienten. Mit dem Ansatz $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = \varphi_1 \boldsymbol{\sigma}_1^v + \varphi_2 \boldsymbol{\sigma}_2^v$ für die viskose Spannung der Mischung ergibt sich

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = 2\bar{\mu}^a \bar{\mathbf{D}} + \varphi_1 \varphi_2 (\mu_1 - \mu_2) (\mathbf{d} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{d}), \quad (6.42)$$

wobei $\bar{\mu}^a = \varphi_1 \mu_1 + \varphi_2 \mu_2$ die arithmetisch interpolierte Viskosität bezeichnet. Werden die Tensoren vierter Stufe

$$\mathcal{J} = (\mathbf{1} + \mathbf{P}_\tau) \square \mathbf{P}_n \quad \text{und} \quad \mathcal{J}^S = \frac{1}{2} (\mathcal{J} + \mathcal{J}^{\top_L}) \quad (6.43)$$

eingeführt, lässt sich die Viskosität der Mischung als

$$\bar{\mathcal{V}} = \bar{\mu}^a \mathcal{I}^S + (\bar{\mu}^h - \bar{\mu}^a) \mathcal{J}^S. \quad (6.44)$$

bestimmen, wobei $\bar{\mu}^h = \mu_1 \mu_2 / (\varphi_2 \mu_1 + \varphi_1 \mu_2)$ den harmonischen Mittelwert bezeichnet. Bezüglich der Notation sei an der Stelle auf Abschnitt 1.4 verwiesen. Damit ergeben sich viskose Spannung gemäß der Konstitutivgleichung

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^v = 2\bar{\mathcal{V}}[\bar{\mathbf{D}}]. \quad (6.45)$$

Es zeigt sich, dass in der Konsequenz die Viskosität innerhalb des diffusen Übergangs im Allgemeinen anisotrop wird. Der Sprungbedingungsansatz liefert eine Aufteilung in tangentiale Richtung, in der eine arithmetische Mittelung vorgenommen wird, sowie in normale Richtung, in der harmonisch gemittelt wird. Entsprechend ergeben sich für die Grenzfälle $\mathcal{J}[\bar{\mathbf{D}}] = \mathbf{0}$ und $\mathcal{J}[\bar{\mathbf{D}}] = \bar{\mathbf{D}}$ jeweils die arithmetische und harmonische Mittelung². Für diese Grenzfälle fällt der Sprungbedingungsansatz somit gerade mit der oberen und unteren theoretischen Schranke der Dissipation zusammen. Die Verwendung dieser Approximation viskoser Spannungen ist selbstverständlich auch im Gleichungssystem (6.12) für mehrphasige Partikelströmungen möglich, wobei die Approximation dann bezüglich des normierten Phasenfeldfeldes $\{\tilde{\varphi}_1^f, \tilde{\varphi}_2^f\}$ vorzunehmen ist.

6.5.3 Quantifizierung der Genauigkeit

Anhand zweier Beispiele wird nachfolgend die Genauigkeit der verschiedenen Approximationen für viskose Spannungen im diffusen Übergang gezeigt. Für erste Strömung liegen lediglich Komponenten des Geschwindigkeitsgradienten in Normalenrichtung zur Grenzfläche der Fluide vor, sodass dies dem Grenzfall $\mathcal{J}[\bar{\mathbf{D}}] = \bar{\mathbf{D}}$ entspricht. Die zweite Strömung weist einen annähernd transversalen Geschwindigkeitsgradienten mit $\mathcal{J}[\bar{\mathbf{D}}] \approx \mathbf{0}$ auf, sodass dies dem zweiten Grenzfall nahe kommt. Eine detailliertere Darstellung der Ergebnisse findet sich in der entsprechenden Veröffentlichung [128].

²Diese Grenzfälle treten genau dann ein, wenn $\mathbf{P}_\tau \bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{L}}$ bzw. $\mathbf{P}_n \bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{L}}$ gilt, d. h. dass nur Tangential- bzw. Normalanteile des Geschwindigkeitsgradienten zur Grenzfläche vorliegen.

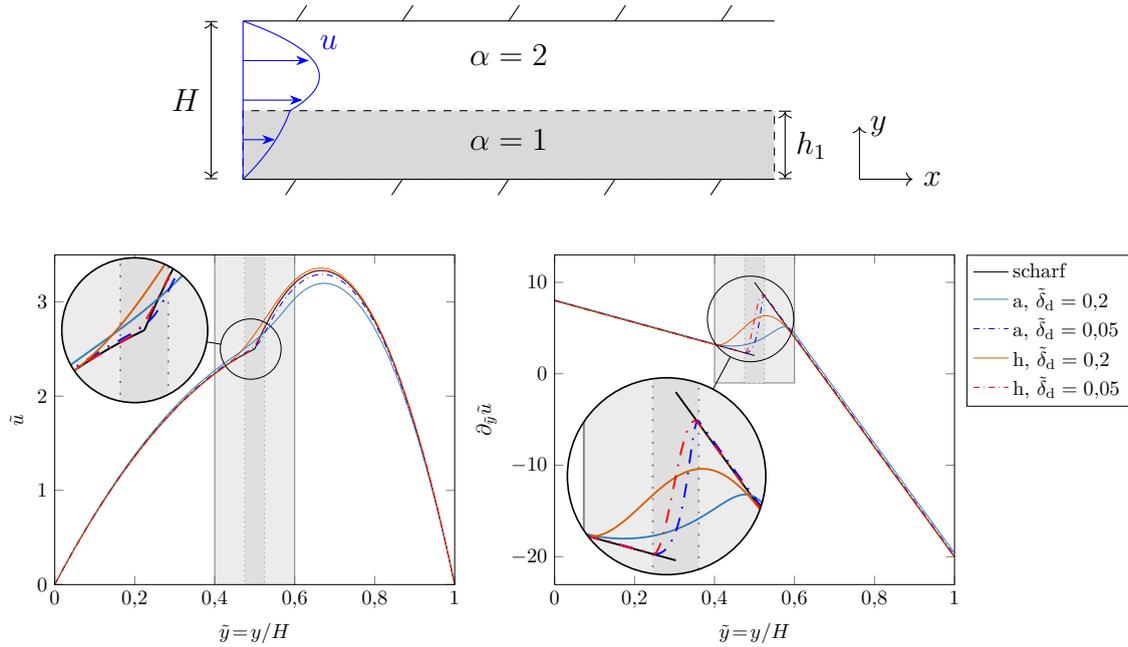


Abbildung 6.16: Zweiphasige Kanalströmung mit Viskositätskontrast. Vergleich verschiedener Approximationen für viskose Spannungen im diffusen Übergang mit der analytischen Lösung für scharfe Grenzflächen. Betrachtet wird das arithmetische (a) und harmonische (h) Mittel der Viskositäten, wobei der Sprungbedingungsansatz in diesem Fall identisch zur harmonischen Mittelung (h) ist. Oben: Skizze des Simulationsaufbaus. Mitte: Profile der normierten Geschwindigkeit (links) und des Geschwindigkeitsgradienten (rechts) für $\tilde{\mu} = 1/5$ und $\tilde{h} = 1/2$. Zwei unterschiedliche Breiten $\tilde{\delta}_d = 0.2$ und $\tilde{\delta}_d = 0.05$ werden gezeigt, die jeweils in grau hervorgehoben sind [128].

Zweiphasige Kanalströmung

Zunächst wird die voll entwickelte Kanalströmung zweier Fluide mit unterschiedlicher Viskosität betrachtet, wie in Abbildung 6.16 dargestellt. Für diese Strömung liegt lediglich ein Geschwindigkeitsgradient normal zur Grenzfläche vor, sodass der Sprungbedingungsansatz mit dem harmonischen Mittelwert der Viskositäten übereinstimmt. Für die Repräsentation mit scharfer Grenzfläche existiert eine analytische Lösung, die im Anhang von [128] dargestellt ist. Diese analytische Lösung dient als Referenz zur Quantifizierung der Fehler aus dem diffusen Modell mit unterschiedlicher Viskositätsinterpolation. Die Ergebnisse mit diffussem Übergang ergeben sich aus hochaufgelösten Simulationen, sodass numerische Fehler vernachlässigbar sind. Dabei wird das Gleichgewichtsprofil (3.29) des parabolischen Potentials vorgeschrieben. Untersuchungen mit Verwendung des Tangens hyperbolicus Profils führen allerdings auf ähnliche Resultate. Die Ergebnisse sind mit den normierten Größen

$$\tilde{y} = \frac{y}{H}, \quad \tilde{h} = \frac{h_1}{H}, \quad \tilde{u} = \frac{u}{u_c} \quad \text{und} \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu_2}{\mu_1} \quad (6.46)$$

dargestellt, wobei als charakteristische Geschwindigkeit u_c der Mittelwert einer Kanalströmung mit reinem Fluid 1 dient. Aus den Ergebnissen, die in Abbildung 6.16

6.5 Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang

und 6.17 dargestellt sind, lassen sich folgende Erkenntnisse gewinnen. Alle Approximationen gehen mit verschwindender Breite des diffusen Übergangs in die analytische Lösung über. Die Abweichungen der Ergebnisse mit diffusem Übergang hängen neben dessen Breite δ_d auch vom Viskositätsverhältnis $\tilde{\mu}$ und der Füllhöhe \tilde{h} von Fluid 1 ab. Dabei sind die Fehler des harmonischen Mittels, und damit auch des Sprungbedingungsansatzes, deutlich geringer als mit Verwendung des arithmetischen Mittelwerts. Dies entspricht den Erwartungen, da bei der vorliegenden Strömung ein longitudinaler Sprung im Geschwindigkeitsgradienten stets garantiert ist, die arithmetische Viskositätsinterpolation allerdings die Sprungimpulsbilanz im Übergang nicht erfüllt. Es zeigt sich, dass die arithmetische Interpolation zu großen Abweichungen der mittleren Geschwindigkeit führt, die nicht nur aus dem diffusen Übergang herrühren, sondern auch durch deutlich geringere Geschwindigkeiten im inneren Gebiet des weniger viskosen Fluids 2 verursacht sind. Für eine Grenzfläche in der Kanalmitte, also $\tilde{h} = 1/2$, und einem recht schmalen Übergang von $\tilde{\delta}_d = 0,05$ ist der relative Fehler in der mittleren Geschwindigkeit bei der arithmetischen Interpolation mit 0,57% um eine Größenordnung höher als bei Verwendung der harmonischen Interpolation mit einer Abweichung von 0,047%. Dies ist ein deutlicher Unterschied, zumal es sich bei $\tilde{\mu} = 1/5$ um einen moderaten Viskositätskontrast handelt.

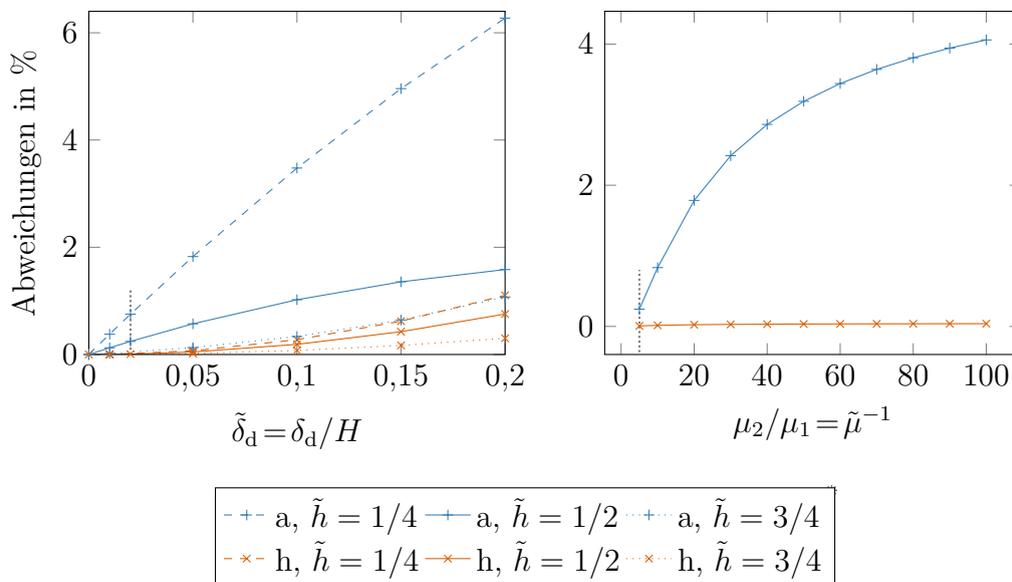


Abbildung 6.17: Zweiphasige Kanalströmung mit Viskositätskontrast. Links: Abweichungen des arithmetischen (a) und harmonischen (h) Mittels zur analytischen Lösung bezogen auf die mittlere Durchflussgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Breite des diffusen Übergangs für unterschiedliche Höhen $\tilde{h} \in \{1/4, 1/2, 3/4\}$ von Fluid 1 für die $\tilde{\mu} = 1/5$. Rechts: Abweichungen für verschiedene Viskositätsverhältnisse $\tilde{\mu}$ für $\tilde{\delta}_d = 0,02$ und $\tilde{h} = 1/2$. Die grau gepunktete Linie markiert identische Parametersätze beider Graphen [128].

In Abbildung 6.17 ist zudem die Abweichung zwischen den diffusen Approximationen und der analytischen Lösung mit scharfem Übergang für Viskositätsverhältnisse zwischen $\tilde{\mu} = 1/5$ und $\tilde{\mu} = 1/100$ gegeben. Dabei wird eine geringe Übergangsbreite mit $\tilde{\delta}_d = 0,02$ angenommen und die Abweichung über einen relativen Fehler bezüglich der mittleren Durchflussgeschwindigkeit bestimmt. Im Allgemeinen führt ein höheres Viskositätsverhältnis zu größeren Abweichungen. Während im untersuchten Intervall

eine maximale Abweichung für das harmonische Mittel von 0,04% bei $\tilde{\mu} = 1/100$ vorliegt, ist die Abweichung der arithmetischen Viskositätsinterpolation mit 4% um zwei Größenordnungen höher.

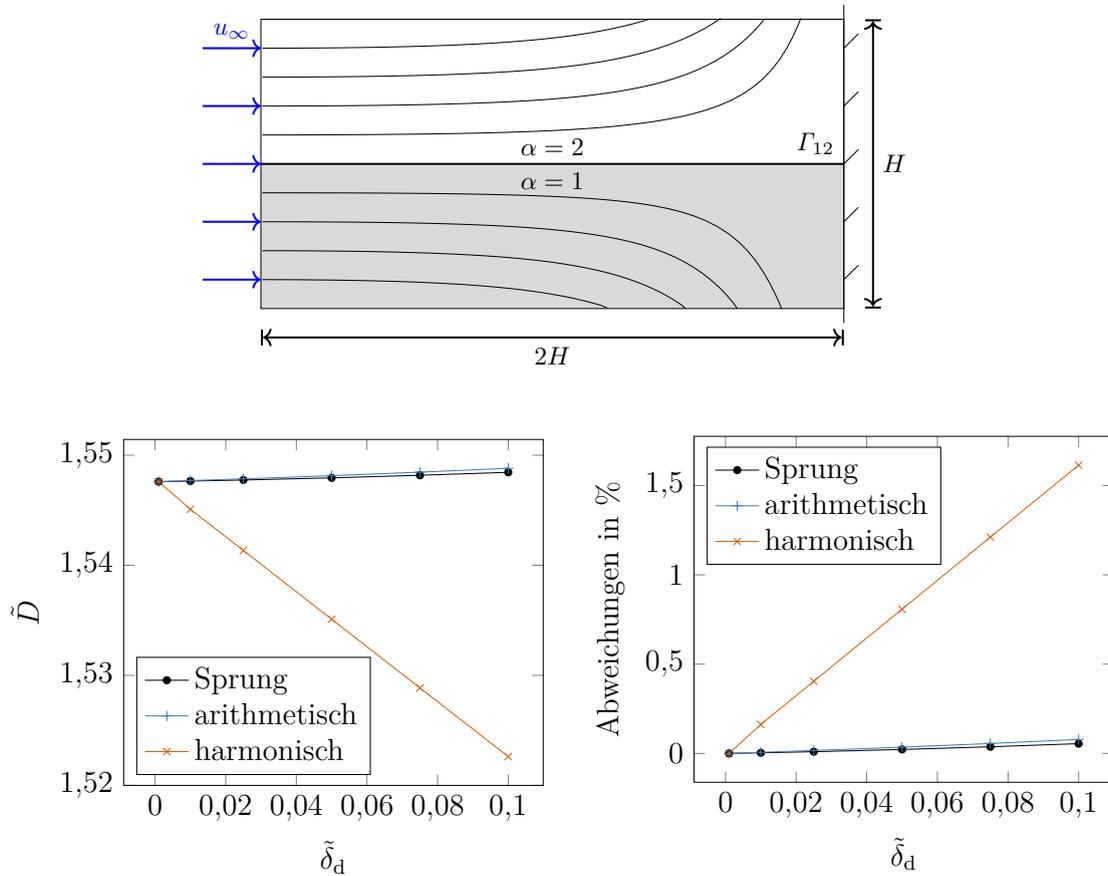


Abbildung 6.18: Zweiphasige Anströmung einer Platte. Vergleich verschiedener Approximationen für viskose Spannungen im diffusen Übergang. Oben: Skizze des Simulationsaufbaus und entsprechende Stromlinien. Unten: Normierter Mittelwert der Dissipation \bar{D} (links) und relative Abweichung in \bar{D} bezüglich des Lösung mit scharfer Grenzfläche (rechts). Es zeigt sich die Konvergenz aller Approximationen, wobei der Sprungbedingungsansatz am besten abschneidet.

Zweiphasige Anströmung einer Platte

Ein zweites Beispiel ist in der zweiphasigen Anströmung einer Platte gegeben, wie in Abbildung 6.18 gezeigt. Es kommt dabei eine hohe Auflösung zum Einsatz, um den Einfluss numerischer Fehler gering zu halten. Als Vergleichsgröße wird der Mittelwert

$$D = \frac{1}{V(\Omega)} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}^v \cdot \mathbf{D} \, dV$$

der Dissipation im Gebiet herangezogen, wobei dieser mit Normierung als $\bar{D} = DH^2/(\mu_1(u_\infty)^2)$ angegeben ist. Die vorliegende Strömung weist einen nahezu transversalen Geschwindigkeitsgradienten auf. Entsprechend ist ein besseres Abschneiden

der arithmetischen Interpolation gegenüber der harmonischen Interpolation zu erwarten, was sich mit Blick auf die Ergebnisse bestätigt. Erstere führt zu einer geringen Überschätzung der Dissipation, während das harmonische Mittel diese deutlich unterschätzt. Der Sprungbedingungsansatz liegt nochmals näher an der Lösung mit scharfer Grenzfläche. Es zeigt sich, dass alle Approximationen auf den gleichen Wert konvergieren, wobei der Sprungbedingungsansatz für finite Übergangsbreiten die geringsten Abweichungen liefert. Bei diesem liegt die Dissipation zwischen den Werten von harmonischer und arithmetischer Viskositätsinterpolation, was gut mit der Theorie übereinstimmt, da diese Mittelwerte physikalische Schranken für die effektive Dissipation darstellen.

Insgesamt steht mit dem Sprungbedingungsansatz eine Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang zweier Fluidphasen zur Verfügung, die im Allgemeinen mit geringeren Modellfehlern verglichen mit gängigen Interpolationen einhergeht. In den jeweiligen Grenzfällen von rein tangentialen oder normalen Geschwindigkeitsgradienten stimmt diese Approximation mit dem jeweils günstigeren Interpolationsschema überein. Zudem erfüllt der Sprungbedingungsansatz sowohl die Hadamard-Bedingung (6.22) als auch die Impulsbilanz der Phasengrenzfläche (6.30) bezüglich viskoser Spannungen für jeden Punkt des diffusen Übergangs, sodass damit ein thermodynamisch konsistentes Modell vorliegt. Im Gegensatz dazu erfüllen harmonische und arithmetische Interpolation im Allgemeinen nur eine dieser Sprungbedingungen lokal. Beide Sprungbedingungen zusammen werden von diesen Ansätzen nur im integralen Sinne über den diffusen Übergang erfüllt, was sich in den entsprechend größeren Abweichungen verglichen mit dem Sprungbedingungsansatz äußert.

7 Fluid-Struktur-Interaktion mit elastischem Festkörperverhalten

In den vorhergehenden Kapiteln erfolgt die Modellierung der Festkörper in einer Strömung als starre Körper. In einigen Anwendungen kann diese Annahme nicht getroffen werden, da die Kräfte der Strömung zu einer nicht vernachlässigbaren Verzerrung der Festkörper führt. Beispielhaft sind biologische Zellen in einer Strömung, z. B. Blutkörperchen, zu nennen. Biologische Zellen weisen meist ein hochgradig nichtlineares, viskoelastisches Verhalten auf [88]. Deren Steifigkeit gibt Auskunft über deren Zustand und kann somit z. B. als Indikator für die Diagnose von Krankheiten dienen [114, 42]. In derartigen Anwendungen müssen die Festkörper in der Strömung elastisch oder viskoelastisch modelliert werden. Nachfolgend wird hierzu die Modellierung solcher Systeme im Kontext der Phasenfeldmethode vorgestellt. Die vorliegende Arbeit fokussiert sich auf die Starrkörpermodellierung, weswegen die nachfolgende viskoelastische Modellierung der Festkörper weniger detailliert dargestellt ist und lediglich zwei Anwendungsbeispiele gezeigt werden. Die Inhalte des Kapitels wurden in [36] publiziert, wobei eine geteilte Hauptautorenschaft vorliegt. Aus der Publikation ist lediglich der Teil entnommen, der die Fluid-Struktur-Interaktion betrifft, während sich die beiden anderen Hauptautoren für die übrigen Teile maßgeblich verantwortlich zeigen.

7.1 Existierende Ansätze in rein Eulerscher Betrachtung

Viele Ansätze zur Modellierung von Starrkörpern innerhalb von Fluidströmungen finden sich in ähnlicher Form auch für Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) mit elastischen Festkörper wieder. Dazu zählen z. B. ALE-Methoden [70, 94] oder IB-Methoden [123, 17]. Darüber hinaus existieren Methoden, die sowohl das Fluid als auch den Festkörper in Eulerscher Konfiguration betrachten. Auf diese Methoden ist nachfolgend der Fokus gelegt. Bei Dunne [39, 40] kommt eine Variationsformulierung für das gekoppelte Fluid-Struktur-Problem mit Übergangsbedingungen zum Einsatz, die mittels FEM gelöst wird. Fluid und Festkörper sind dabei als inkompressibel modelliert und die Indikatorfunktion dient zur Unterscheidung von Fluid- und Festkörpergebiet. Sugiyama et al. [153, 154] verwenden die Fluidvolumenmethode zur Oberflächenverfolgung. Die Lösung erfolgt mittels der Methode finiter Differenzen, wobei die Übergangsbedingungen durch linear Interpolation mit der Fluidvolumenfraktion einer Zelle aufgebracht werden. Ähnliche Ansätze, die allerdings die Level-Set-Methode zur Oberflächenverfolgung nutzen, finden sich bei Cottet et al. [31, 32], wobei jeweils eine lineare Interpolation von Fluid- und Festkörperspannungen vorgenommen wird. Diese Arbeiten gehen jeweils von Inkompressibilität im

Gesamtproblem aus. Kamrin et al. [86] sowie Valkov et al. [166] nutzen ebenfalls die Level-Set-Methode und die FDM als Diskretisierungsverfahren. Jedoch verwenden diese eine Modellierung mit schwach kompressiblen Fluiden und kompressiblen Festkörpern. Zudem verwenden sie die Transportgleichung (3.72) für die inverse Bewegung anstelle einer tensoriellen Transportgleichung für den Deformationsgradienten oder den linken Cauchy-Green-Tensor.

Im Kontext der Phasenfeldmethode sind die Arbeiten von Sun et al. [155] und Mokbel et al. [113] zu erwähnen. Für die Phasevolution nutzt erstere eine volumenerhaltende Allen-Cahn-Gleichung und letztere die Cahn-Hilliard-Gleichung. In beiden Arbeiten erfolgt die Diskretisierung mittels FEM und es wird die Transportgleichung für den linken Cauchy-Green-Tensor verwendet. Beide Arbeiten gehen von einem Zweiphasenproblem aus.

Die vorliegende Arbeit kombiniert einige der bestehenden Methoden für die FSI und formuliert diese im Kontext der Multiphasenfeldmethode. Dies ermöglicht es, dass Festkörper sich wiederum aus unterschiedlichen Phasen mit z. B. verschiedener Steifigkeit oder Orientierung zusammensetzen können. Es besteht zudem die Möglichkeit in künftigen Arbeiten mit einem Ansatz analog zu Kapitel 6 mehrere Fluidphasen zu berücksichtigen.

7.2 Modellierung im Multiphasenfeldkontext

Für die Modellierung elastischer Phasen ist eine entsprechende konstitutive Gleichung notwendig. Diese wird für geometrisch nichtlineare, elastische Körper meist in materieller Konfiguration formuliert. Dabei wird der zweite Piola-Kirchhoff-Tensor $\tilde{\mathbf{P}}$ in Abhängigkeit eines geeigneten Verzerrungsmaßes gegeben. Hierzu eignet sich z. B. der rechte Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C} gemäß Gleichung (2.24). Im Rahmen einer Invarianzenformulierung kann dabei anisotropes Materialverhalten modelliert werden (siehe z. B. Böhrer [15]). Seien $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ orthogonale Einheitsvektoren, die ausgezeichnete Richtungen des Materials beschreiben, dann lassen sich sogenannte *Strukturtenoren* über

$$\mathbf{M}_{\ell\kappa} = \mathbf{v}_\ell \otimes \mathbf{v}_\kappa, \quad \ell, \kappa \in \{1, 2, 3\} \quad (7.1)$$

definieren. Der zweite Piola-Kirchhoff-Tensor kann in einen isotropen und anisotropen Anteil gemäß

$$\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^{\text{iso}} + \tilde{\mathbf{P}}^{\text{aniso}} \quad (7.2)$$

aufgeteilt werden. Letzterer lässt sich mit Hilfe der Strukturtenoren durch

$$\tilde{\mathbf{P}}^{\text{aniso}} = \sum_{\ell=1}^3 \alpha_{\ell\ell} \mathbf{M}_{\ell\ell} + \sum_{\ell=2}^3 \sum_{\kappa=1}^{\ell} \alpha_{\ell\kappa} (\mathbf{M}_{\ell\kappa} + \mathbf{M}_{\kappa\ell}), \quad (7.3)$$

$$\alpha_{\ell\kappa} = \alpha_{\ell\kappa} (\text{sp}(\mathbf{M}_{11}\mathbf{C}), \dots, \text{sp}(\mathbf{M}_{13}\mathbf{C}), \dots, \text{sp}(\mathbf{M}_{33}\mathbf{C})) \quad (7.4)$$

modellieren. In der vorliegenden Arbeit findet das Materialgesetz von Kambouchev et al. [85] als Konstitutivgleichung Anwendung. Dieses bietet den Vorteil, dass es

sich um ein polykonvexes Gesetz handelt, was eine hinreichende Bedingung für die Existenz einer Gleichgewichtslösung für rein elastische RWPs darstellt [10]. Dieses wurde für isotrope und kubische Materialien eingeführt, wobei sich der anisotrope Teil durch die Wahl von $\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{33} = 2k_3 \sum_{\iota} \text{sp}(\mathbf{M}_{\iota} \mathbf{C})$ und $\forall \iota \neq \kappa: \alpha_{\iota\kappa} = 0$ zu

$$\tilde{\mathbf{P}}^{\text{aniso}} = 2k_3 \text{sp}(\mathbf{M}^k \mathbf{C}) \mathbf{M}^k, \quad \mathbf{M}^k = \sum_{\iota=1}^3 \mathbf{M}_{\iota} \quad (7.5)$$

ergibt. Der isotrope Anteil des Kambouchev-Gesetzes ist

$$\tilde{\mathbf{P}}^{\text{iso}} = 2(k_2 \det(\mathbf{C}) - k_1) \mathbf{C}^{-1} + k_4 \mathbf{1}. \quad (7.6)$$

Dabei sind k_1 , k_2 und k_4 Materialparameter, die sich aus den auf die Deformation bezogenen, isotropen Lamé-Konstanten μ^d und λ^d durch

$$k_1 = (\lambda^d + 2\mu^d)/4, \quad k_2 = \lambda^d/4, \quad k_4 = \mu^d/2 \quad (7.7)$$

bestimmen lassen, während k_3 die Stärke der Anisotropie bestimmt. Zudem gilt $\det(\mathbf{C}) = J^2$ mit der Determinante $J = \det(\mathbf{F})$ des Deformationsgradienten. Insgesamt ergibt sich daraus

$$\tilde{\mathbf{P}} = 2(k_2 J^2 - k_1) \mathbf{C}^{-1} + 2k_3 \text{sp}(\mathbf{M}^k \mathbf{C}) \mathbf{M}^k + k_4 \mathbf{1}. \quad (7.8)$$

Hieraus lässt sich gemäß der Transformation $\boldsymbol{\sigma} = J^{-1} \mathbf{F} \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{F}^{\top}$ der Cauchy-Spannungstensor bestimmen. Für Details sei auf den Abschnitt 2.2.2 verwiesen. Treten keine inelastischen Deformationen¹ auf, ergibt dies

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{J} \left[k_4 \mathbf{B} + (k_2 J^2 - k_1) \mathbf{1} + 2k_3 \sum_{\iota=1}^3 (\tilde{\mathbf{v}}_{\iota} \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{\iota}) \tilde{\mathbf{v}}_{\iota} \otimes \tilde{\mathbf{v}}_{\iota} \right] \quad (7.9)$$

mit dem linken Cauchy-Green-Tensor \mathbf{B} und $\tilde{\mathbf{v}}_{\iota} := \mathbf{F} \mathbf{v}_{\iota}$ aufgrund von

$$\mathbf{F} \mathbf{M}^k \mathbf{F}^{\top} = \sum_{\iota=1}^3 \mathbf{F} \mathbf{v}_{\iota} \otimes \mathbf{F} \mathbf{v}_{\iota}, \quad (7.10a)$$

$$\text{sp}(\mathbf{M}^k \mathbf{C}) = \sum_{\iota=1}^3 \mathbf{v}_{\iota} \cdot (\mathbf{C} \mathbf{v}_{\iota}) = \sum_{\iota=1}^3 \mathbf{F} \mathbf{v}_{\iota} \cdot \mathbf{F} \mathbf{v}_{\iota}. \quad (7.10b)$$

Liegt Kenntnis über den Deformationsgradienten und damit der Deformationshistorie vor, können mit Gleichung (7.9) die elastischen Spannungen bestimmt werden. Zusätzlich kann durch die Hinzunahme viskoser Spannungen z. B. gemäß Gleichung (2.55) aus dem Newtonschen Materialgesetz für Fluide Kelvin-Voigt-Viskoelastizität berücksichtigt werden.

Um Kenntnis der Deformationshistorie aus dem Geschwindigkeitsfeld zu erlangen, existieren verschiedene Möglichkeiten. Zunächst kann dies über konvektiven Transport des Deformationsgradienten selbst geschehen, wie z. B. in [124, 162, 104], oder durch

¹Ansonsten geht bei $\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{F}^{\text{el}})$ nur der elastische Anteil von \mathbf{F} ein, während die Transformation den gesamten Deformationsgradienten berücksichtigt, sodass einige Vereinfachungen dann nicht möglich sind.

Transport des linken Cauchy-Green-Tensors \mathbf{B} , wie z. B. Mokbel et al. [113]. In beiden Fällen ist die Lösung einer tensoriellen Gleichung notwendig, wobei die entsprechend auftretende Zeitableitung im Englischen Sprachraum als *upper-convected Maxwell Time Derivative* bezeichnet wird. Alternativ kann die vektorwertige Transportgleichung (3.72) für die inverse Bewegung $\boldsymbol{\xi}$ gelöst werden. Der Deformationsgradient ergibt sich dann als $\mathbf{F} = (\nabla \boldsymbol{\xi})^{-1}$. Dies wurde von Kamrin et al. [86] vorgeschlagen und unter anderem in [166] verwendet. Es bieten sich gegenüber dem Transport von \mathbf{F} oder \mathbf{B} einige Vorteile. Zunächst müssen weniger skalare Differentialgleichungen gelöst werden. Während im Dreidimensionalen für \mathbf{F} neun Gleichungen vorliegen, kann bei \mathbf{B} die Symmetrie ausgenutzt werden, wodurch sich sechs Gleichungen ergeben. Für die inverse Bewegung sind lediglich drei skalare Gleichungen zu lösen was die Umsetzung weniger rechenintensiv macht. Zudem sind die tensoriellen Gleichungen nicht nur aufgrund der Komponentenanzahl aufwendiger zu lösen, sondern auch, da verglichen mit dem Transport von Vektorfeldern ein zusätzlicher Term auftritt (siehe z. B. [113]). Ein weiterer praktischer Grund ist, dass der Speicherbedarf der Felder beim Ablegen entsprechend der Komponentenanzahl geringer ist. Trotz des geringeren Speicherbedarfs ist in der inversen Bewegung mehr Information enthalten. Der Deformationsgradient enthält den Translationsanteil der Bewegung nicht und bei \mathbf{B} geht zudem noch die Information über Rotation verloren (Details siehe Kapitel 2.1.3). Dies ist nicht nur bei der Analyse von Simulationsergebnissen von Interesse. So erlaubt die Kenntnis von $\boldsymbol{\xi}$ z. B. die Transformation in die Anfangskonfiguration, was u. a. beim Setzen des Phasenfeldes gemäß dem Ansatz aus Abschnitt 3.5.2 notwendig ist.

Im Nachfolgenden wird nur der Sonderfall isotropen Materialverhaltens betrachtet, d. h. $k_3 = 0$. Das in der Arbeit zu Grunde liegende Differentialgleichungssystem zur Berücksichtigung von Kelvin-Voigt-Viskoelastizität in der Momentankonfiguration besteht aus der zeitlicher Entwicklung der inversen Bewegung, der konstitutiven Gleichung und der Impulsbilanz. Dieses ist

$$\mathbf{0} = \partial_t \boldsymbol{\xi} + (\nabla \boldsymbol{\xi}) \mathbf{u}, \quad (7.11a)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = (\nabla \boldsymbol{\xi})^{-1}, \quad (7.11b)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{J} \left[k_4 \mathbf{B} + (k_2 J^2 - k_1) \mathbf{1} \right] + 2\mu \mathbf{D} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{1}, \quad (7.11c)$$

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f}^V \quad (7.11d)$$

mit dem symmetrischen Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla^\top \mathbf{u})/2$ dem linken Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^\top$, der dynamischen Viskosität μ und der Volumenviskosität ζ . Mit dem Gleichungssatz (7.11) lassen sich nicht nur viskoelastische Festkörper, sondern auch schwach kompressible Fluide abbilden. Während sich im Allgemeinen der Druck aus einer Zustandsgleichung $p = p(\rho, T)$ abhängig von Dichte und Temperatur ergibt, wird bei schwach kompressiblen Fluiden nur eine Dichteabhängigkeit angenommen [148]. Ein sehr verbreiteter Ansatz ist dabei die lineare Zustandsgleichung

$$p(\rho) = -\lambda^d \left(\frac{\rho}{\rho^m} - 1 \right) \quad (7.12)$$

mit dem Kompressibilitätsmodul λ^d und der Massendichte ρ^m bezüglich der Anfangskonfiguration (siehe z. B. Housiadas und Georgiou [67]). Dabei gilt der Zusammenhang

7.3 Anwendung für Strömungen mit viskoelastischen Körper

zur momentanen Massendichte $J^{-1} = \rho/\rho^m$ aufgrund der Piola-Transformation (2.17c) (siehe Abschnitt 2.2.2). Es zeigt sich, dass durch die Wahl des Schubmoduls $\mu^d = 0$ die Kambouchev-Parameter $k_4 = 0$ und $k_2 = k_1 = \lambda^d/4$ sind und damit aus Gleichung (7.11c) der elastische Beitrag lediglich als $-\lambda^d/2(J^{-1} - J)\mathbf{1}$ verbleibt. Dies ist wiederum der Druckanteil eines schwach kompressiblen Fluids mit der Zustandsgleichung für den Druck

$$p(\rho) = -\frac{\lambda^d}{2}(J^{-1} - J). \quad (7.13)$$

Die lineare Gleichung (7.12) geht daraus durch Linearisierung um den Entwicklungspunkt $J^{-1} = 1$ hervor. Die Wahl von $\mu^d = 0$ führt somit dazu, dass die konstitutive Gleichung (7.11c) dem Newtonschen Materialgesetz (2.54) mit der Zustandsgleichung (7.13) für den Druck entspricht. Der Vorteil des vorliegenden Ansatzes besteht somit darin, dass sowohl Fluid als auch elastische Phasen mit dem identischen Gleichungssatz (7.11) behandelt werden können.

Im Kontext der Phasenfeldmethode bedarf es einer Interpolation phaseninherenter Größen. Im Rahmen dieser Arbeit wird davon ausgegangen, dass die Felder der Geschwindigkeit \mathbf{u} und inverser Bewegung $\boldsymbol{\xi}$ für alle Phasen identisch sind. Die Spannungen können sich jedoch aufgrund unterschiedlicher Materialparameter unterscheiden. Seien

$$\boldsymbol{\sigma}^\alpha = \boldsymbol{\sigma}^\alpha(\mathbf{F}, k_i^\alpha, \mathbf{M}_{\nu R}^\alpha, \mu^\alpha, \zeta^\alpha) \quad (7.14)$$

die phaseninherenten Cauchy-Spannungen, die gemäß Gleichung (7.11c) mit den entsprechenden phasenspezifischen Parametern berechnet werden, dann findet im Folgenden die lineare Interpolation

$$\boldsymbol{\sigma} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha \quad (7.15)$$

Anwendung. Die Massendichte lässt sich durch

$$\rho = \frac{1}{J} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \varphi_\alpha \rho^\alpha \quad (7.16)$$

bestimmen, wobei die Massendichte bezüglich des Anfangsvolumens interpoliert wird und J^{-1} die Kompression berücksichtigt. Ergänzt mit einer Methodik für die Phasenevolution, z. B. aus Abschnitt 3.5, ist durch den Gleichungssatz bestehend aus (7.11), (7.15) und (7.16) ein Phasenfeldmodell für die Fluid-Struktur-Interaktion gegeben. Dieses kann z. B. durch Addition von Kapillaritätstensoren aus Abschnitt 3.6.1 auf die Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ ergänzt werden, um Effekte von Oberflächenspannungen zu berücksichtigen.

7.3 Anwendung für Strömungen mit viskoelastischen Körper

Eine Validierung und Anwendung des Modells für reine Festkörperprobleme ist in [36] gegeben. Nachfolgend wird lediglich das letzte Anwendungsbeispiel aus dieser Arbeit

gezeigt, welches sich mit Fluid-Struktur-Interaktion befasst. Für die Diskretisierung der Differentialgleichungen in diesem Abschnitt werden die Felder \mathbf{u} und $\boldsymbol{\xi}$ auf den Zellknoten gespeichert, während \mathbf{F} , $\boldsymbol{\sigma}$ und φ_α an Zellmittelpunkten vorliegen. Die Approximation aller auftretenden Konvektionsterme erfolgt durch ein TVD-Schema mit OSPRE Flussbegrenzer [175]. Alle weiteren räumlichen Ableitungen werden über Zentralfdifferenzen bezüglich der entsprechenden Gitterposition approximiert. Für die Zeitintegration kommt das Eulersche Polygonzugverfahren zum Einsatz. Die Bestimmung des Phasenfeldes in der Momentankonfiguration erfolgt gemäß Gleichung (3.71) durch Setzen mittels der Anfangskonfiguration durch die Kenntnis der inversen Bewegung.

Als Anwendungsbeispiel wird ein Simulationsaufbau betrachtet, der Echtzeitzytometrie für die Deformation biologischer Zellen nachbildet. Dabei handelt es sich um ein Messverfahren für die Steifigkeit biologischer Zellen, wobei diese in einer Strömung transportiert werden. Aus Aufnahmen der Zellgeometrie lässt sich die Deformation der Zelle und damit wiederum deren Steifigkeit bestimmen [114].

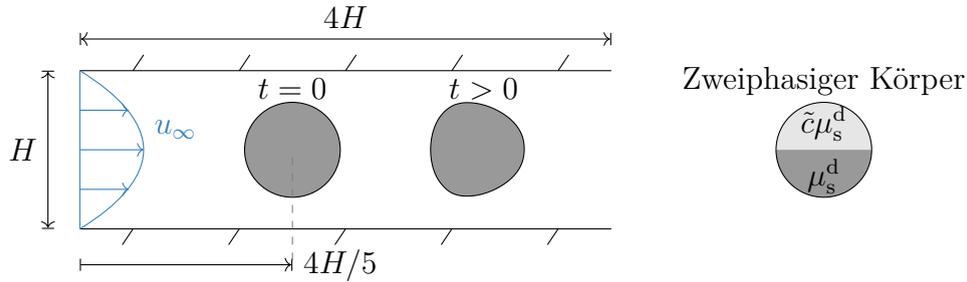


Abbildung 7.1: Skizze des Simulationsaufbaus: Transport und Deformation eines viskoelastischen Körpers in einer Kanalströmung. Der Körper besteht aus zwei Festkörperphasen, wobei die obere Phase eine um den Faktor \tilde{c} verschiedene Steifigkeit aufweist. Im Fall I ist $\tilde{c} = 1$ und die Steifigkeiten sind identisch. Im Fall II ist $\tilde{c} = 1/4$, sodass die obere Phase weniger steif ist.

Der Simulationsaufbau ist in Abbildung 7.1 dargestellt, wobei H die Höhe des Kanals bezeichnet. Für die Einströmung wird ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil mit der mittleren Geschwindigkeit u_∞ vorgegeben. Die biologische Zelle wird als viskoelastischer Körper modelliert, der anfangs einer Sphäre mit dem Durchmesser $3H/5$ entspricht. Die Massendichte aller Phasen ist konstant, d. h. $\rho_f = \rho_s = \rho$, sodass keine Gravitationseffekte auftreten. Die Parameter sind derart gewählt, dass sich die Reynolds-Zahl $Re = \rho u_\infty H / \mu_f = 0,17$ und das Verhältnis $\mu_s^d H / (\mu_f u_\infty) = 46$ zwischen elastischen und viskosen Spannungen im Festkörper ergeben. Des Weiteren sind die Materialparameter

$$\lambda_s^d = \lambda_f^d = \mu_s^d, \quad \zeta_f = \mu_f/10, \quad \mu_s = \mu_f/2, \quad \zeta_s = \mu_f/20.$$

Der Festkörper wird aus zwei Phasen bestehend modelliert. Es erfolgen zwei Simulationen, bei denen sich der Körper unterscheidet. In Fall I sind beide Phasen identisch, während in Fall II die obere Phase eine reduzierte Steifigkeit von $\mu_s^d/4$ aufweist (siehe Abbildung 7.1). Das zweite Simulationsbeispiel ist hierbei nicht durch eine Anwendung motiviert, sondern soll lediglich die Fähigkeit des vorliegenden Ansatzes zeigen, Mehrphasenprobleme zu berücksichtigen. Die Diskretisierung erfolgt mit 800×200 Gitterzellen und dem Verhältnis von diffuser Übergangsbreite zu Diskretisierungsschrittweite von 8.

7.3 Anwendung für Strömungen mit viskoelastischen Körper

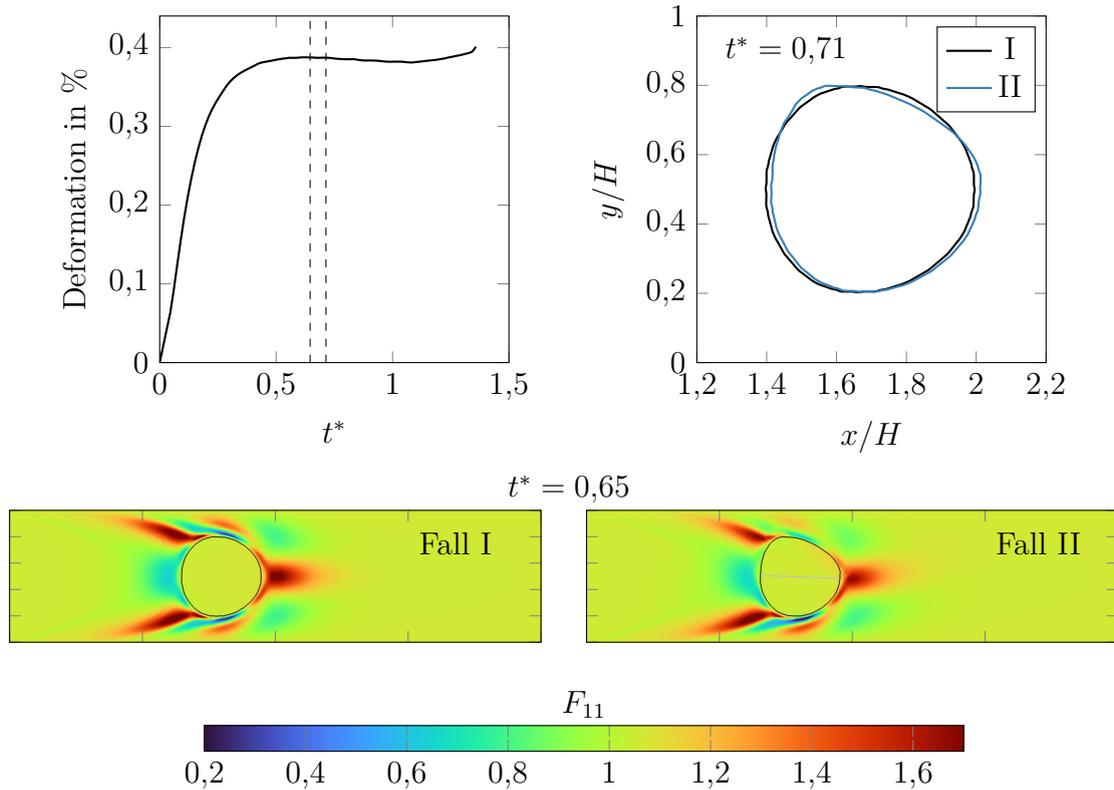


Abbildung 7.2: Deformation biologischer Zellen in einem Kanal. Oben links: Zeitentwicklung der Deformation gemäß der Abweichung zur Sphärizität $1 - 2\sqrt{\pi A(\Omega_s)/l(\partial\Omega_s)}$, wobei $A(\Omega_s)$ der Flächeninhalt und $l(\partial\Omega_s)$ die Randlänge der Zelle bezeichnet. Die dimensionslose Zeit ist durch $t^* = tu_\infty/H$ gegeben. Oben rechts: Resultierende Randkontur für eine einphasige Zelle (I) und eine zweiphasige (II) zum Zeitpunkt 0,714. Unten: F_{11} -Komponente des Deformationsgradienten zum Zeitpunkt 0,646 für die Fälle I und II, wobei im letzteren die Solidgrenzfläche grau hervorgehoben ist.

Die Simulationsergebnisse im Hinblick auf die Deformation der Zelle sind in Abbildung 7.2 dargestellt. Dabei findet die entdimensionalisierte Zeit $t^* = tu_\infty/H$ Verwendung. Im einphasigen Fall I ergibt sich über die Zeit eine qualitative Übereinstimmung des Deformationsverhaltens mit den Ergebnissen aus [113]. Die Deformation wird dabei jedoch ca. um den Faktor 3 unterschätzt. Dies liegt in dem unterschiedlichen Aufbau begründet, da in der vorliegenden Arbeit eine Kanalströmung anstelle einer Rohrströmung modelliert ist, sodass die Dreidimensionalität des Problems nicht richtig abgebildet wird. Zudem ergeben sich Unterschiede in der Modellierung, da für die vorliegende Simulation Kapillaritätseffekte vernachlässigt werden und anstelle einer inkompressiblen Modellierung aller Phasen eine schwache Kompressibilität angenommen wird. Abbildung 7.2 zeigt neben dem Zeitverlauf der Deformation die Form der Zelle zum Zeitpunkt $t^* = 0,714$ für die Fälle I und II, wobei im Letzteren der Steifigkeitsunterschied zu einer deutlich asymmetrischen Verformung führt. Bezüglich des Deformationsgradienten ergeben sich beispielhaft für die F_{11} -Komponente Werte zwischen 0,2 und 1,7 im Fluid sowie Werte im Bereich 0,9 bis 1,05 in der Zelle. Erwartungsgemäß treten im Fluid damit deutlich stärkere Verzerrungen auf. Die

Werte der Jacobi-Determinante J liegen im Bereich 0,98 bis 1, was auf eine geringe Kompressibilität schließen lässt.

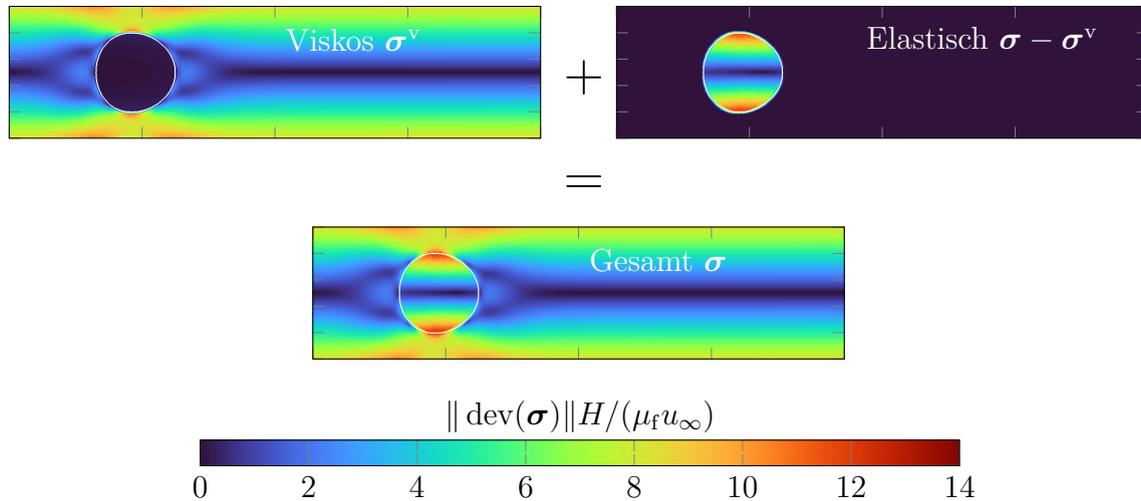


Abbildung 7.3: Frobenius-Norm deviatorischer Anteile des Spannungsfeldes für die einphasige Zelle zum Zeitpunkt $t^* = 0,122$. Es findet eine Normierung durch $\mu_f u_\infty / H$ statt. Oben: Ergebnis für viskose und elastische Anteile. Unten: Frobenius-Norm der deviatorischen Gesamtspannungen, die sich additiv aus viskosem und elastischen Anteil zusammensetzen. Die Additivität bezieht sich hierbei auf die Spannungstensoren, nicht auf deren Frobenius-Norm.

Des Weiteren ist in Abbildung 7.3 das Feld der Frobenius-Norm deviatorischer Spannungen gegeben, wobei die Werte bezüglich des elastischen und viskosen Anteils sowie bezogen auf die Gesamtspannung angegeben sind. Es zeigt sich, dass in der Zelle sehr kleine Geschwindigkeitsgradienten auftreten, sodass die viskosen Spannungen dort nahezu verschwinden. Hingegen tritt im Fluid kein deviatorischer Anteil elastischer Spannungen auf, da diese durch die Modellierung als schwach kompressibles Fluid mit $\mu_f^d = 0$ per Definition verschwinden. Da die Zustandsgleichung des Drucks mit einem elastischen Materialgesetz modelliert ist, liegen im Fluid ausschließlich sphärische Anteile der elastischen Spannung vor.

7.4 Diskussion und Weiterentwicklungsperspektiven

Mit dem vorliegenden Beispiel wird gezeigt, dass eine viskoelastische Modellierung in Eulerscher Konfiguration grundsätzlich für Probleme der Fluid-Struktur-Interaktion geeignet ist. Die vorliegende Methode erlaubt dabei die Berücksichtigung mehrerer Phasen sowie die Erweiterung durch Kapillaritätsterme, die gemäß Abschnitt 3.6.1 auf einfache Weise in der Impulsgleichung des Systems (7.11) zu ergänzen sind. Hierfür muss allerdings das Gleichgewichtsprofil des Phasenfeldes aufrechterhalten werden, da ansonsten Ungenauigkeiten in der Approximation der Dirac-Distribution auftreten. Im Hinblick auf die Phasenfeldevolution erfordert dies Anpassungen, da der Erhalt des Gleichgewichtsprofils durch das Setzen des Phasenfeldes über die Abbildung aus der Anfangskonfiguration mittels inverser Bewegung gemäß Abschnitt 3.5.2

nicht gewährleistet ist. Verzerrungen des diffusen Übergangs durch Geschwindigkeitsgradienten werden dabei nicht durch molekulare Diffusion ausgeglichen, wie in Abschnitt 3.5 ausführlich dargelegt ist. Auch was die Berücksichtigung mehrerer Fluidphasen angeht sind Anpassungen für eine quantitative Modellierung notwendig. Zwar erlaubt die vorgestellte Methode die Verwendung beliebig vieler Phasen, wobei ohne Weiteres für mehrere Phasen $\mu^d = 0$ gewählt werden kann, sodass sie sich als schwach kompressibles Fluid verhalten. Allerdings ergibt sich daraus noch keine korrekte Dynamik der Tripellinien, da das Benetzungsverhalten nicht mitmodelliert wird. Die direkte Verwendung der Multiphasenfeldmethode mit entsprechenden Evolutionsgleichungen würde dies leisten und auch eine Relaxation zum Gleichgewichtsprofil herbeiführen. Allerdings ergibt sich bei einem solchen Vorgehen eine künstliche Formänderung von Festkörpern an Tripellinien durch lokale Diffusion. Dies äußert sich in pyramidenförmigen Ausbeulungen der Solid-Fluid-Grenzfläche, wie sie beispielsweise in [147, Abbildung 1.2.10-1] dargestellt sind. Diese entstehen durch molekulare Diffusion, um die richtigen Kontaktwinkel einzustellen. Da Formänderungen des Festkörpers einzig durch Spannungen, welche von der Tripellinie induziert werden, stattfinden sollte, sind Verformungen durch molekulare Diffusion zwischen Fluid- und Festkörperphase unphysikalisch. Hier kann ein analoger Normierungsansatz zu Kapitel 6 Abhilfe schaffen, sodass die Phasenevolution der Fluidphasen separat mit einem Cahn-Hillard-Ansatz unter korrekten Benetzungsrandbedingungen erfolgt. Auch hierzu ist allerdings ein Gleichgewichtsprofil bezüglich des Fluid-Solid-Übergangs zur korrekten Approximation der Dirac-Distribution notwendig, sodass ein Setzen aus der Anfangskonfiguration gemäß Gleichung (3.71) nicht mehr in Frage kommt. Eine mögliche Lösung, die Gegenstand künftiger Arbeiten sein kann, sei nachfolgend skizziert.

Die Normierungsprozedur gemäß Gleichung (6.4) erlaubt die Entkopplung in ein separates Phasenfeld für das Fluid- und Solidproblem. Für das Teilproblem der Fluidphasen lässt sich die Evolutionsgleichung (6.10) ansetzen, während bezüglich der festen Phasen, so mehrere vorhanden sind, eine entsprechende Gleichung verwendet werden kann. Dies führt zur Kenntnis von $\partial_t \tilde{\varphi}_a^f$ und $\partial_t \tilde{\varphi}_b^f$. Zusätzlich kann ein Zweiphasenproblem bezüglich der Gesamtphasen φ^s und φ^f formuliert werden. Dieses ist mit einer Methode aus Abschnitt 3.5 derart zu lösen, dass Form, Volumen und das Gleichgewichtsprofil erhalten bleiben, was beispielsweise durch den Ansatz aus [157] erfolgen kann. Damit sind alle benötigten Felder für die Rücknormierung der Teillösungen von Fluid- und Festkörperphasenfeld gemäß der Kettenregel

$$\begin{aligned}\partial_t \varphi_a^f &= \varphi^f \partial_t \tilde{\varphi}_a^f + \tilde{\varphi}_a^f \partial_t \varphi^f \\ \partial_t \varphi_b^s &= \varphi^s \partial_t \tilde{\varphi}_b^s + \tilde{\varphi}_b^s \partial_t \varphi^s\end{aligned}$$

bekannt.

8 Schlussbetrachtung und Ausblick

Der Gegenstand dieser Arbeit ist die Modellierung der Interaktion von Festkörpern mit Mehrphasenströmungen, wobei die Repräsentation und Zeitentwicklung aller Phasen unter Verwendung der Phasenfeldmethode erfolgt. Der Hauptfokus liegt dabei auf einer Modellierung der Festkörper als starre Körper. Darüber hinaus wird auch ein Modell für Körper mit viskoelastischem Materialverhalten gegeben und in Simulationsbeispielen angewendet. Für Partikelströmungen mit starren Festkörperpartikeln erfolgt die Anpassung einer Methode fiktiver Gebiete zur Verwendung im Phasenfeldkontext. Dies wird durch ein Kollisionsmodell ergänzt, das den Kontakt sphärischer Partikel mit beliebig geformten Randgeometrien abbilden kann, wobei die auftretenden Strukturen durch das Phasenfeld parametrisiert sind. Diese Modelle werden dahingehend erweitert, dass sie mit dem gängigen Hohenberg-Halperin Modell für Zweiphasenströmungen gekoppelt werden können. Hierzu dient eine Normierung, die zunächst eine Entkopplung von Partikelströmung und Zweiphasenströmung erlaubt, sodass diese Erweiterung algorithmisch auf einfache Weise dem Modell für einphasige Partikelströmungen nachgeschaltet werden kann. Im Ergebnis lassen sich mehrphasige Partikelströmungen unter Berücksichtigung verschiedener Oberflächenbenetzbarkeit von Festkörperoberflächen sowie Kapillaritätseffekte simulieren. Dies geschieht ausschließlich in einer Eulerschen Konfiguration, was eine separate Handhabung von Partikeln und Fluid vermeidet und somit in der numerischen Umsetzung die Verwendung kartesischer Gitter trotz des Auftretens komplexer Geometrien und Grenzflächen erlaubt. Darüber hinaus wird für die im Phasenfeldkontext notwendige Approximation viskoser Spannungen im diffusen Übergang bei Zweiphasenströmungen ein Ansatz eingeführt, der die Genauigkeit gegenüber gängiger Viskositätsinterpolationen erhöht. Dies erfolgt durch die Übertragung existierender Sprungbedingungsansätze aus der Festkörpermechanik auf viskose Spannungen.

Im Rahmen der Arbeit erfolgt die Implementierung der hier vorgestellten Modelle. Es werden zahlreiche Anwendungen der Modelle in numerischen Experimenten gezeigt, die einerseits zu deren Validierung und Verifikation dienen und andererseits die Fähigkeiten des Modells darlegen. Darunter zählen die Berücksichtigung beliebig geformter Starrkörper, die Simulation großer Partikelanzahlen in Strömungen durch komplexe Geometrien wie Schaumstrukturen mit entsprechendem Festkörperkontakt sowie die Abbildung der Fluidgrenzflächen- und Kontaktlinendynamik bei unterschiedlicher Benetzbarkeit. Des Weiteren wird anhand von Simulationsbeispielen das Potential des vorgestellten Modells verdeutlicht, simultan zur Strömung stattfindende Phasenumwandlungsprozesse abzubilden. Die Simulationsbeispiele zeigen, dass dies qualitativ bereits möglich ist. Entsprechende Modellerweiterungen für eine quantitative Betrachtung werden dargelegt und diskutiert, sind allerdings in dieser Arbeit nicht umgesetzt.

Die vorliegende Arbeit eröffnet verschiedene Möglichkeiten für darauf aufbauende

Untersuchungen und Weiterentwicklungen. Dies umfasst einerseits die Anwendung der Modelle für Simulationsstudien zur Untersuchung verschiedener Prozesse, wie z. B. des Trocknungsprozesses zur Herstellung von Batterieelektroden. Das vorgeschlagene Modell bildet eine Vielzahl der dort relevanten physikalischen Prozesse ab und kann, mit geringfügigen Anpassungen im Blick auf die Abbildung von Evaporation, für Untersuchungen in diesem Bereich dienen. Neben Anwendungen ergeben sich weitere Möglichkeiten für Modellerweiterungen. Dies ist beispielsweise für die Hinzunahme von Phasenumwandlungsprozessen, wie bereits angemerkt, möglich.

Des Weiteren kann die viskoelastische Modellierung aus Kapitel 7 mit dem Ansatz aus Kapitel 6 kombiniert werden, um die Interaktion elastischer Körper, die wiederum aus mehreren Phasen bestehen können, mit Zweiphasenströmungen bei korrektem Benetzungsverhalten zu simulieren. Hierfür ergeben sich v. a. noch Herausforderungen im Hinblick auf die Zeitentwicklung der Festkörperphasen. Diese muss von den Fluidphasen entkoppelt sein, wenn Formänderungen der Festkörper durch Massendiffusion in den Fluidbereich unterbunden werden sollen. Ein mögliches Vorgehen, wie dies in künftigen Arbeiten erreicht werden könnte, ist in Abschnitt 7.4 skizziert.

Darüber hinaus erscheint bei der viskoelastischen Modellierung die Verwendung des Sprungbedingungsansatzes [140] für elastische Spannungen anstelle der linearen Interpolation im diffusen Übergang wünschenswert, um die Modellgenauigkeit zu erhöhen. Zudem kann der hier vorgestellte Sprungbedingungsansatz für viskose Spannungen künftig auf Mehrphasenprobleme erweitert werden, sodass in Kombination eine Approximation der Gesamtspannungen gemäß mechanischer Sprungbedingungen erfolgt, wodurch eine konsistente und genaue Approximation in diffusen Übergängen bereitgestellt würde.

Die genannten Punkte können zum Gegenstand künftiger Forschungsarbeiten gemacht werden, um anknüpfend an die hier vorgestellten Methoden einerseits eine höhere Genauigkeit und andererseits ein noch breiteres Spektrum möglicher Anwendungen der Simulationsmodelle zu erreichen.

A Details zur verwendeten Diskretisierung und numerischen Lösung

A.1 Aufbringen der Randbedingungen im Kontext der FDM

Die Lösung eines RWP erfordert die Erfüllung der Feldgleichung in jedem inneren Punkt unter den gegebenen Randbedingungen (RBen). Im Folgenden wird die Berücksichtigung der RBen in der finiten Differenzenmethode vorgestellt. Die Betrachtung beschränkt sich auf *lineare Randbedingungen*¹ und Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Im allgemeinen liegen sogenannte *Robin-Randbedingungen*

$$\alpha\phi + \beta\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \gamma \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (\text{A.1})$$

vor, wobei α , β und γ bekannte Funktionen des Ortes und der Zeit sind. Für den Spezialfall $\beta = 0$ ergeben sich Dirichlet- und für $\alpha = 0$ *Neumann-Randbedingungen*. In der vorliegenden Arbeit ist das Rechengebiet Ω stets rechteckig, sodass auf dem Rand

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \pm \partial_\iota\phi \quad \text{mit} \quad \iota = x, y, z \quad (\text{A.2})$$

ist.

A.1.1 Knotenzentrierte Stützstellen

Es wird zunächst von einer Diskretisierung an Gitterknoten ausgegangen, wodurch auf dem Rand regulär Stützstellen vorliegen (siehe Abbildung 4.1). Den einfachsten Fall für die numerische Behandlung stellen Dirichlet-Randbedingungen dar. D. h. es gilt

$$\phi = \gamma/\alpha \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_{\text{D}} \quad (\text{A.3})$$

mit dem Dirichlet-Rand Ω_{D} . In diesem Fall sind die Werte von ϕ an den Randknoten bereits vorgeschrieben und diese können aus dem Gleichungssystem herausgenommen werden. Die Werte der Randknoten tauchen dann nur noch in den Gleichungen benachbarter, innerer Knoten auf. Dabei lassen sich deren Beiträge direkt bestimmen.

¹Die Linearität bezieht sich dabei auf die Lösungsfunktion und deren Gradienten in den Randbedingungen.

Bei einer zeitlich impliziten Lösung können diese in die rechte Seite integriert werden und tauchen dann nicht mehr in der Systemmatrix auf.

Im Fall $\beta \neq 0$ stellt sich die Situation komplizierter dar. Für die numerische Lösung des RWP muss dann der Gradient in der Randbedingung durch ein geeignetes Diskretisierungsschema approximiert werden. Bei der Betrachtung in x -Richtung liegt es zunächst nahe, am linken bzw. rechten Rand jeweils auf Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen zurückzugreifen. Der Index des linken und rechten Randknotens ist durch $i = 0$ bzw. $i = n_x$ gegeben, was entsprechend auf

$$\alpha_0 \phi_0 - \beta_0 \frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x} = \gamma_0 \quad (\text{A.4})$$

$$\alpha_{n_x} \phi_{n_x} + \beta_{n_x} \frac{\phi_{n_x} - \phi_{n_x-1}}{\Delta x} = \gamma_{n_x} \quad (\text{A.5})$$

führt, wobei die Indizes j und k bei allen auftretenden Größen der Einfachheit halber entfallen. Diese Gleichungen erlauben die Bestimmung von $\phi_{0,j,k}$ und $\phi_{n_x,j,k}$ ohne dass die Feldgleichung für Randknoten betrachtet werden müsste. Dies stellt allerdings lediglich eine Approximation erster Ordnung dar, was meist nicht wünschenswert erscheint. Die Verwendung von Schemata mit größerem Abhängigkeitsbereich birgt jedoch die Problematik, dass diese Stützstellen außerhalb des Rechengebiets benötigen. Exemplarisch wird nachfolgend das Zentralschema zweiter Ordnung betrachtet. Dieses führt zu

$$\alpha_0 \phi_0 - \beta_0 \frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{2\Delta x} = \gamma_0 \quad (\text{A.6})$$

$$\alpha_{n_x} \phi_{n_x} + \beta_{n_x} \frac{\phi_{n_x+1} - \phi_{n_x-1}}{2\Delta x} = \gamma_{n_x}. \quad (\text{A.7})$$

Die Randbedingungen liefern damit Bestimmungsgleichungen für die extrapolierten Werte $\phi_{-1,j,k}$ und $\phi_{n_x+1,j,k}$ gemäß

$$\phi_{-1} = \phi_1 + \frac{2\Delta x}{\beta_0} (\gamma_0 - \alpha_0 \phi_0) \quad (\text{A.8a})$$

$$\phi_{n_x+1} = \phi_{n_x-1} + \frac{2\Delta x}{\beta_{n_x}} (\alpha_{n_x} \phi_{n_x} - \gamma_{n_x}) \quad (\text{A.8b})$$

sofern $\beta \neq 0$ gilt. Die Werte aus den Gleichungen (A.8) können wiederum in die Feldgleichung für den Knoten $i = 0$ bzw. $i = n_x$ eingesetzt werden. Für das Beispiel der generischen Konvektions-Diffusionsgleichung (4.16) mit Zentralschema folgt somit am linken Rand

$$\partial_t \phi_0 = \mathcal{R}_0 \frac{\phi_{-1} - 2\phi_0 + \phi_1}{\Delta x^2} - u_0 \frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{2\Delta x} = \mathbf{f}(\phi_0, \phi_1), \quad (\text{A.9})$$

wobei die rechte Seite nach Einsetzen von ϕ_{-1} nur noch von den Knotenwerten ϕ_0 und ϕ_1 abhängt. Dies führt bei impliziter Zeitintegration zu den entsprechenden Einträgen in die Systemmatrix oder ermöglicht bei expliziter Zeitintegration die direkte Berechnung von ϕ_0^{n+1} zum neuen Zeitschritt. Im Falle der höherdimensionalen Gleichung folgt

$$\mathbf{f}_{0,j,k} = \mathbf{f}(\phi_{0,j,k}, \phi_{1,j,k}, \phi_{0,j+1,k}, \phi_{1,j+1,k}, \phi_{0,j,k+1}, \phi_{1,j,k+1}, \phi_{0,j-1,k}, \dots), \quad (\text{A.10})$$

sodass in 2D sechs und in 3D zehn Knoten eingehen. Es ist anzumerken, dass für eine knotenbasierte Diskretisierung in den Randknoten die Erhaltungsform der DGL nicht verwendet werden kann, da hierzu Kenntnis von $\Upsilon_{-1/2}$ und $u_{-1/2}$ nötig wäre. Im Inneren ergibt sich dagegen keine Restriktion für die Verwendung der Erhaltungsform für Knoten.

A.1.2 Zellzentrierte Stützstellen

Die Behandlung des Randes bei zellzentrierten Gittern unterscheidet sich von der beim Knotenschema, da sich bei ersterem zunächst keine Stützstellen auf dem Rand befinden, an dem die RBen aufzuprägen sind. Der Rand liegt hier bei den Indizes $i = 1/2$ bzw. $i = n_x + 1/2$ und analog für j und k . In diesem Fall bietet sich die Verwendung der Erhaltungsform an, da für diese Flüsse auf den Zelloberflächen zu berücksichtigen sind. Diese Oberflächen können wiederum mit dem Rand übereinstimmen, an dem Flüsse direkt vorgegeben sind, wodurch die Interpolation der Zellmittelpunktwerte auf die Oberflächen entfällt. Es wird exemplarisch der linke Rand für die generische Transportgleichung betrachtet. Die numerischen Flüsse dort sind

$$\mathfrak{g}_{1/2}^{\text{konv}} = u\phi|_{1/2} \quad (\text{A.11})$$

$$\mathfrak{g}_{1/2}^{\text{diff}} = \Upsilon \partial_x \phi|_{1/2}. \quad (\text{A.12})$$

Diese gehen in die Differenzgleichung des Zellmittelpunkts $\{i = 1, j, k\}$ ein. Bei Dirichlet-RBen ist der konvektive Fluss durch Kenntnis von $\phi_{1/2}$ vorgegeben und bei Neumann-RBen der diffusive Fluss durch Kenntnis von $\partial_x \phi_{1/2}$. In keinem Fall können beide Flüsse direkt bestimmt werden. Abhilfe schafft die Berücksichtigung der Feldgleichung für die Randstelle $\{i = 1/2, j, k\}$. Nach der Diskretisierung am Flächenmittelpunkt ergibt sich aus der Feldgleichung

$$\partial_t \phi_{1/2} = \Upsilon_{1/2} \frac{\phi_0 - 2\phi_{1/2} + \phi_1}{(\Delta x/2)^2} - u_{1/2} \frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x}. \quad (\text{A.13})$$

Es ist anzumerken, dass in dieser die halbe Diskretisierungsschrittweite Δx auftritt, da der Flächenmittelpunkt relativ zum Zellenmittelpunkt nur um $\Delta x/2$ versetzt ist. Für Dirichlet-RBen, ist $\phi_{1/2}$ und $\partial_t \phi_{1/2}$ bekannt, sodass eine Bestimmungsgleichung für ϕ_0 vorliegt. Damit lässt sich wiederum $\partial_x \phi_{1/2}$ und somit die beiden Flüsse $\mathfrak{g}_{1/2}^{\text{konv}}$ und $\mathfrak{g}_{1/2}^{\text{diff}}$ bestimmen. Für Neumann- oder Robin-RBen, also $\beta \neq 0$, kann analog zum knotenzentrierten Fall der extrapolierte Wert

$$\phi_0 = \phi_1 + \frac{\Delta x}{\beta_{1/2}} \left(\gamma_{1/2} - \alpha_{1/2} \phi_{1/2} \right) \quad (\text{A.14})$$

genutzt werden. Gleichung (A.13) ermöglicht die Bestimmung von $\phi_{1/2}$ nach Einsetzen von ϕ_0 . Für bekannte Werte von $\phi_{1/2}$ ist $\partial_x \phi_{1/2} = (\gamma - \alpha\phi)/\beta|_{1/2}$ aus der Randbedingung gegeben, wodurch sich die Flüsse berechnen lassen. Für stationäre Randbedingungen, also wenn $\forall x \in \partial\Omega: \partial_t \phi = 0$, dann ergibt sich aus dem Gleichungssystem von Feldgleichung und Randbedingung

$$0 = \Upsilon \frac{\phi_0 - 2\phi_{1/2} + \phi_1}{(\Delta x/2)^2} - u \frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x} \quad (\text{A.15a})$$

$$\gamma = \alpha\phi_{1/2} - \beta \frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x} \quad (\text{A.15b})$$

die Lösung

$$\phi_0 = \frac{[u\alpha\Delta x^2 + 4\Upsilon(2\beta - \alpha\Delta x)]\phi_1 + 8\Upsilon\gamma\Delta x}{u\alpha\Delta x^2 + 4\Upsilon(\alpha\Delta x + 2\beta)}, \quad (\text{A.16a})$$

$$\phi_{1/2} = \frac{\gamma}{\alpha} + \beta \frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x}, \quad (\text{A.16b})$$

wobei α , β , γ , Υ und u an $i = 1/2$ auszuwerten sind. Analog folgt am oberen Rand

$$\phi_{n_x+1} = \frac{[-u\alpha\Delta x^2 + 4\Upsilon(2\beta - \alpha\Delta x)]\phi_{n_x} + 8\Upsilon\gamma\Delta x}{-u\alpha\Delta x^2 + 4\Upsilon(\alpha\Delta x + 2\beta)} \quad (\text{A.17a})$$

$$\phi_{n_x+1/2} = \frac{\gamma}{\alpha} - \beta \frac{\phi_{n_x+1} - \phi_{n_x}}{\Delta x} \quad (\text{A.17b})$$

mit einer Auswertung bei $i = n_x + 1/2$. Die Spezialfälle für Dirichlet und Neumann-Randbedingung ergeben sich aus den Gleichungen (A.16) und (A.17) mit $\beta = 0$ bzw. $\alpha = 0$.

A.2 Komponentenweise versetzte Gitteranordnung

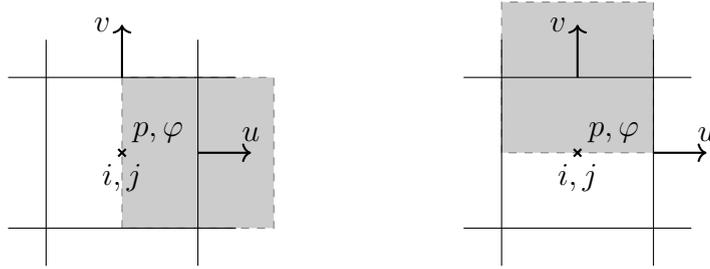


Abbildung A.1: Versetzte Gitteranordnung für die Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes im zweidimensionalen Fall. Das Kontrollvolumen zur Auswertung der NSGL für die x - und y -Komponente ist grau unterlegt.

Zur Lösung des Navier-Stokes-Systems wird in dieser Arbeit eine komponentenweise versetzte Gitteranordnung verwendet. Dies bedeutet, dass der Druck und die Phasenvariable auf den Zellmittelpunkten des numerischen Gitters vorliegen, wohingegen die Stützstellen des Geschwindigkeitsfeldes auf den Flächenmittelpunkten gewählt wird (siehe Abbildung A.1). Dabei ist jede Geschwindigkeitskomponente jeweils auf dem Mittelpunkt der oberen Zellfläche in der entsprechenden Richtung positioniert, sodass keine gemeinsame Stützstelle für den gesamten Geschwindigkeitsvektor existiert. Dies bietet den Vorteil, dass die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes im Zellmittelpunkt auf einfache Weise numerisch bestimmt werden kann, ohne dass eine Interpolation der Geschwindigkeit notwendig ist. Die Auswertung der Navier-Stokes-Gleichung erfolgt in jede Richtung auf einem jeweils um $\Delta x/2$, $\Delta y/2$ bzw. $\Delta z/2$ versetzten Gitter, während die Lösung der Poisson-Gleichung für den Druck auf dem ursprünglichen Gitter vorgenommen wird. Nachfolgend wird auf die Diskretisierung im zweidimensionalen Fall eingegangen, wobei die NSGL in der Erhaltungsform

$$\rho \partial_t \mathbf{u} = -\nabla p - \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + 2\nabla \cdot (\mu \mathbf{D}) \quad (\text{A.18})$$

A.2 Komponentenweise versetzte Gitteranordnung

mit dem Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{u} = [u, v]^\top$ vorliegt. Zunächst ist in x -Richtung die Geschwindigkeit $u_{i+1/2,j}$ zu bestimmen. Entsprechend muss die rechte Seite der NSGL für die Position $\{i + 1/2, j\}$ ausgewertet werden. Der Druckgradient in x -Richtung ist mit einem Zentralschema auf einfache Weise durch

$$\mathfrak{d}_x p_{i+1/2,j} = \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \quad (\text{A.19})$$

gegeben². Der Konvektionsterm ist

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{e}_x = \partial_x(\rho u^2) + \partial_y(\rho uv). \quad (\text{A.20})$$

Der erste Teil ergibt sich mit der Darstellung über numerische Flüsse als

$$\mathfrak{d}_x(\rho u^2)|_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta x} \left(\rho u^i u^{\text{konv}}|_{i+1,j} - \rho u^i u^{\text{konv}}|_{i,j} \right). \quad (\text{A.21})$$

Da weder $u_{i+1,j}$ noch $u_{i,j}$ bekannt sind, müssen diese durch eine Interpolation approximiert werden. Dabei wird mit den Hochstellungen i und konv eine unterschiedliche Approximation des Wertes zum Ausdruck gebracht. Es bietet sich das Zentralschema

$$u_{i,j}^{\text{konv}} = \frac{1}{2} \left(u_{i-1/2,j} + u_{i+1/2,j} \right) \quad (\text{A.22})$$

$$u_{i+1,j}^{\text{konv}} = \frac{1}{2} \left(u_{i+1/2,j} + u_{i+3/2,j} \right) \quad (\text{A.23})$$

für die konvektive Geschwindigkeit an. Mögliche Approximationen für $u_{i+1,j}^i$ sind im Kapitel 4.3 angegeben, z. B. das γ -Schema

$$u_{i,j}^i = (1 - \gamma) u_{i,j}^{\text{konv}} + \begin{cases} \gamma u_{i-1/2,j} & u_{i,j}^{\text{konv}} \geq 0 \\ \gamma u_{i+1/2,j} & u_{i,j}^{\text{konv}} < 0 \end{cases}. \quad (\text{A.24})$$

Die Dichte kann über $\rho = \rho(\varphi)$ ebenfalls eine räumliche Abhängigkeit aufweisen. Diese ist in den Zellmittelpunkten bekannt, da φ an den Zellmitten vorliegt und kann somit direkt in den Flüssen verwendet werden. Der zweite Summand des Konvektionsterms ist

$$\mathfrak{d}_y(\rho uv)|_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta y} \left(\rho u^i v^{\text{konv}}|_{i+1/2,j+1/2} - \rho u^i v^{\text{konv}}|_{i+1/2,j-1/2} \right). \quad (\text{A.25})$$

Auch hier kann eine Zentralapproximation für v genutzt werden, was auf

$$v^{\text{konv}}|_{i+1/2,j\pm 1/2} = \frac{1}{2} \left(v_{i,j\pm 1/2} + v_{i+1,j\pm 1/2} \right) \quad (\text{A.26})$$

führt. Die Interpolation von u^i kann z. B. wiederum durch

$$u_{i+1/2,j+1/2}^i = \frac{1 - \gamma}{2} (u_{i+1/2,j} + u_{i+1/2,j+1}) + \begin{cases} \gamma u_{i+1/2,j} & v_{i+1/2,j+1/2}^{\text{konv}} \geq 0 \\ \gamma u_{i+1/2,j+1} & v_{i+1/2,j+1/2}^{\text{konv}} < 0 \end{cases}$$

erfolgen und die Dichte muss auf die Position $\{i + 1/2, j \pm 1/2\}$ interpoliert werden. Das Vorgehen lässt sich analog auf den viskosen Term übertragen, wobei sich lediglich die numerischen Flüsse unterscheiden. Bei der Behandlung der y -Richtung ist darauf

²Analog folgt für die y -Komponente $\mathfrak{d}_y p_{i,j+1/2} = (p_{i,j+1} - p_{i,j})/\Delta y$.

zu achten, dass die Gleichung an $\{i, j + 1/2\}$ auszuwerten ist. Es zeigt sich, dass bei Verwendung der versetzten Gitteranordnung ggf. durch Interpolation sichergestellt sein muss, dass die benötigten Größen an der geeigneten Gitterposition vorliegen, um die Auswertung zu ermöglichen. Die Druckgleichung

$$\nabla^2 p = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^{\text{pre}} \quad (\text{A.27})$$

lässt sich mit der versetzten Anordnung sehr leicht handhaben. Der Divergenzterm der rechten Seite kann über

$$(\mathfrak{d}_x u^{\text{pre}} + \mathfrak{d}_y v^{\text{pre}}) \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j}^{\text{pre}} - u_{i-1/2,j}^{\text{pre}}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1/2}^{\text{pre}} - v_{i,j-1/2}^{\text{pre}}}{\Delta y} \quad (\text{A.28})$$

bestimmt werden, ohne die vorläufige Geschwindigkeit interpolieren zu müssen.

A.3 Adaptive Einstellung numerischer Parameter

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen erfolgt eine adaptive Einstellung der Zeitschrittweite Δt in solcher Weise, dass die in Kapitel 4.2 behandelten Stabilitätskriterien stets erfüllt sind. Für den konvektiven Term der Navier-Stokes-Gleichung kommt das γ -Schema (4.17) zum Einsatz, wobei auch hier eine adaptive Einstellung des Parameters γ^{NS} vorgenommen wird. Dabei ist das Ziel einen möglichst kleinen Wert zu wählen, um soweit in Richtung des Zentralschemas zu tendieren, wie es das Kriterium (4.21) erlaubt. Die adaptive Einstellung der numerischen Parameter erfolgt am Beginn eines neuen Zeitschritts anhand der Abfolge:

1. Komponentenweise Bestimmung der maximalen Geschwindigkeit

$$u_i^{\max} = \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t^n) \cdot \mathbf{e}_i)| \quad i = 1, 2, 3$$

2. Berechnung der maximalen Zell-Reynolds-Zahl

$$Re_{\max}^z = \max_i \left(\frac{u_i^{\max} \Delta x_i}{\nu^{\min}} \right)$$

3. Bestimmung von γ anhand eines vorgegebenen $Re_{\lim}^z < 2$

$$\gamma^{\text{NS}} = \begin{cases} 0 & Re_{\max}^z \leq Re_{\lim}^z \\ 1 - Re_{\lim}^z / Re_{\max}^z & \text{sonst} \end{cases}$$

4. Maximal mögliche Zeitschrittweite für die Navier-Stokes-Lösung

$$\Delta t^{\text{NS}} = \left(\sum_{i=1}^D \frac{u_i^{\max} \gamma^{\text{NS}} + 2\nu^{\max} / \Delta x_i}{\Delta x_i} \right)^{-1}$$

5. Maximal mögliche Zeitschrittweite für die Phasenfeld-Lösung

$$\Delta t^{\text{AC}} = \left[\sum_{i=1}^D \frac{u_i^{\max} \gamma^{\text{AC}}}{\Delta x_i} + 2(M\sigma)^{\max} \left(\frac{k_1}{\Delta x_i^2} + \frac{k_2}{\epsilon^2} \right) \right]^{-1}$$

6. Festlegung der Zeitschrittweite mit Sicherheitsfaktor $c^s < 1$ durch

$$\Delta t = c^s \min(\Delta t^{\text{AC}}, \Delta t^{\text{NS}})$$

Hierin ist D die Dimensionalität des Problems, d. h. $D = 2$ und $D = 3$ im zwei- und dreidimensionalen Fall. Die Prüfung der Zeitschrittweite für das Phasenfeld wird nur dann vorgenommen, wenn eine entsprechende Evolutionsgleichung gelöst wird. In diesem Fall kommt meist ein Diskretisierungsschema mit Flussbegrenzer zum Einsatz, wobei dann $\gamma^{\text{AC}} = 0$ folgt. Bei Berücksichtigung der Cahn-Hilliard-Gleichung wird statt Δt^{AC}

$$\Delta t^{\text{CH}} = \left[\sum_{i=1}^D \frac{u_i^{\max} \gamma^{\text{CH}}}{\Delta x_i} + \frac{2(\kappa\sigma)^{\max}}{\Delta x_i^2} \left(D \frac{3k_1\epsilon}{\Delta x_i^2} + \frac{2k_2}{\epsilon} \right) \right]^{-1}$$

verwendet, wobei die Annahme getroffen wird, dass $\mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta y^2) = \mathcal{O}(\Delta x^4)$ usw. gilt. Dies führt vor dem vierter Ordnungsterm zum zusätzlichen Faktor D anstelle der Kreuzterme.

A.4 Estimation numerischer Fehler

Die numerische Lösung von Differentialgleichungen führt gegenüber der exakten Lösung verschiedene numerische Fehler ein. Aus der notwendigen Repräsentation reeller Zahlen durch Fließkommazahlen ergibt sich ein *Rundungsfehler*, dessen Größe von der Anzahl berücksichtigter, signifikanter Stellen abhängt. Die vorliegenden Simulationen sind mit der sogenannten doppelten Genauigkeit durchgeführt, d. h. es werden binär 53 signifikante Stellen genutzt, was im Dezimalsystem zu einer Maschinengenauigkeit von ca. $1 \cdot 10^{-16}$ führt. Die doppelte Genauigkeit geht mit geringen Rundungsfehlern einher, sodass diese vernachlässigbar im Vergleich zu anderen numerischen Fehlern sind.

Iterationsfehler

Bei Verwendung impliziter Zeitintegrationsverfahren ergibt sich ein lineares Gleichungssystem für die Werte der Lösungsvariablen an den räumlichen Stützstellen. Darüber hinaus führt das Navier-Stokes-System auch für eine explizite Zeitintegration der NSGL zu einem linearen Gleichungssystem aus der Poisson-Gleichung (2.66). Die direkte Lösung eines linearen Gleichungssystems z. B. mittels Gauß-Algorithmus ist jedoch sehr rechenaufwendig, da die benötigten Rechenoperationen kubisch³ mit der Anzahl N der Unbekannten steigt. Es wird daher auf iterative Lösungsverfahren zurückgegriffen. Als Beispiele sind hier das *Jacobi-Verfahren*, das *Gauß-Seidel-Verfahren*, das *sukzessive Überrelaxationsverfahren* und die *Methode konjugierter Gradienten* zu nennen. Für Details sei auf Schwarz und Köckler [143, Kapitel 11] verwiesen. Es sei das LGS

$$\mathbf{A}z = \mathbf{b} \quad (\text{A.29})$$

mit der regulären Systemmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, dem Lösungsvektor $z \in \mathbb{R}^N$ und der rechten Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ gegeben. Dieses lässt sich mit einer Anfangsabschätzung $z^{(0)}$ iterativ durch

$$z^{(k+1)} = z^{(k)} + \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{A}z^{(k)}) \quad (\text{A.30})$$

bzw.

$$z^{(k+1)} = (\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}) z^{(k)} + \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b} \quad (\text{A.31})$$

lösen, wobei die Matrix \mathbf{B} vom Verfahren abhängig ist. Sie sollte einerseits leicht zu invertieren sein und andererseits eine möglichst gute Approximation von \mathbf{A} darstellen. Insbesondere ergibt sich für $\mathbf{B} = \mathbf{A}$ wiederum die direkte Lösung, was natürlich keine sinnvolle Wahl für das iterative Verfahren ist. Die Matrix $\mathbf{T} = \mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ heißt *Iterationsmatrix* des Verfahrens. Die iterative Lösung ist nicht exakt, sodass ein *Iterationsfehler* eingeführt wird, der von der Kondition des Systems, der Konvergenz des Verfahrens und der Anzahl durchgeführter Iterationen abhängt. Um den Iterationsfehler abzuschätzen kann das *Residuum* dienen. Der Residuenvektor $\mathbf{R}^{(k)} \in \mathbb{R}^N$ ergibt sich nach der k -ten Iteration aus

$$\mathbf{R}^{(k)} = \mathbf{A}z^{(k)} - \mathbf{b}. \quad (\text{A.32})$$

³Die exakte Anzahl der Rechenoperationen des Gaußalgorithmus ist $N^3/3 + N^2 - N/3$.

Für den Vektor der Iterationsfehler $\mathbf{e}^{(k)} = \mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}$ gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{e}^{(k)} = \mathbf{R}^{(k)}. \quad (\text{A.33})$$

Als Abbruchkriterium für die Lösung ist es ausreichend, eine geeignete Norm des Residuen- bzw. Fehlervektors zu betrachten, wobei z. B. die L_2 -Norm oder die Maximumsnorm zum Einsatz kommt. Die Konvergenz des iterativen Verfahrens ist abhängig von dem *Spektralradius* λ^s der Iterationsmatrix \mathbf{T} . Bei diesem handelt es sich um den betragsmäßig größten Eigenwert

$$\lambda^s = \max_i |\lambda_i(\mathbf{T})|. \quad (\text{A.34})$$

Ist die iterative Lösung kontrahierend, also $\lambda^s < 1$, konvergiert sie gegen die exakte Lösung des LGS, wobei das Residuum und der Fehler über die Iterationen mit gleicher Rate abnehmen, da sie einzig über die Systemmatrix miteinander gekoppelt sind. Es ist meist ausreichend, ein kleines Residuum als Abbruchkriterium der iterativen Lösung zu verwenden. Soll jedoch der tatsächliche Iterationsfehler quantifiziert werden, kann die a posteriori Abschätzung

$$\|\mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}\| \leq \frac{\lambda^s}{1 - \lambda^s} \|\mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}^{(k-1)}\| \quad (\text{A.35})$$

genutzt werden [143, Satz 4.4], wobei der Spektralradius zu approximieren ist. Für diesen gilt

$$\lambda^s = \frac{\|\mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}^{(k-1)} - \mathbf{z}\|} \approx \hat{\lambda}^{(k)} = \frac{\|\mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}^{(k-1)}\|}{\|\mathbf{z}^{(k-1)} - \mathbf{z}^{(k-2)}\|}. \quad (\text{A.36})$$

Eine bessere Approximation ergibt sich durch die Verwendung eines Mittelwertes über mehrere Iterationen [24], also

$$\lambda^s \approx \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \hat{\lambda}^{(k-i)} \quad k > n - 2. \quad (\text{A.37})$$

Mit dem so approximierten Wert kann aus Gleichung (A.35) der Iterationsfehler direkt abgeschätzt werden.

Diskretisierungsfehler

Die größte Quelle numerischer Fehler stellt der Diskretisierungsfehler der Differentialgleichung dar. Um diesen abzuschätzen dient z. B. die Richardson-Extrapolation [131, 132]. Sei \bar{p} die effektive Konvergenzordnung des gesamten numerischen Diskretisierungsverfahrens, \mathbf{h} die mittlere Diskretisierungsschrittweite und ϕ eine beliebige Lösungsgröße, dann kann die exakte Lösung ϕ durch die Reihenentwicklung

$$\phi = \phi^{\text{num}}(\mathbf{h}) + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \mathbf{h}^{\bar{p}+i} \quad (\text{A.38})$$

mit der numerischen Lösung ϕ^{num} ausgedrückt werden, sofern die Reihe konvergiert und \mathbf{h} hinreichend klein ist, um innerhalb ihres Konvergenzradius zu liegen. Das hier vorgestellte Vorgehen kann sowohl für den räumlichen als auch den zeitlichen Verlauf

angewendet werden. Exemplarisch wird nachfolgend eine räumlichen Betrachtung vorgenommen, wobei

$$\mathfrak{h} = \sqrt{\Delta x \Delta y} \quad \text{bzw.} \quad \mathfrak{h} = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (\text{A.39})$$

für den ebenen bzw. dreidimensionalen Fall gilt. Die effektive Ordnung $\bar{\mathfrak{p}}$ wird im Wesentlichen von der geringsten Konsistenzordnung eines der verwendeten Diskretisierungsschemata bestimmt. Bei der Lösungsgröße ϕ kann es sich um ein Lösungsfeld selbst handeln, wobei die Reihenentwicklung dann punktweise gilt, oder um eine integrale Größe, die sich aus einem Lösungsfeld ergibt. Die Methode von Richardson basiert darauf, die exakte Lösung, die Konvergenzordnung $\bar{\mathfrak{p}}$ und einige Reihenkoeffizienten zu bestimmen, indem die numerische Lösung auf verschieden feinen Diskretisierungen vorgenommen wird. Meist beschränkt sich dieses Vorgehen auf den ersten Term der Reihe, sodass sich mit

$$\hat{\phi} = \phi_\iota + \hat{a} \mathfrak{h}_\iota^{\hat{\mathfrak{p}}} \quad \iota = 1, 2, 3 \quad (\text{A.40})$$

und $\phi_\iota = \phi^{\text{num}}(\mathfrak{h}_\iota)$ für drei verschiedene Diskretisierungen⁴ entsprechende Gleichungen zur Bestimmung der Unbekannten $\hat{\phi}$, \hat{a} und $\hat{\mathfrak{p}}$ ergeben. Dabei wird durch $\hat{\cdot}$ verdeutlicht, dass es sich lediglich um Approximationen der entsprechenden Größe handelt. Die Extrapolation für $\mathfrak{h} = 0$ führt zu einer Approximation $\hat{\phi}$ der gitterunabhängigen Lösung, die dann von der Genauigkeitsordnung $\mathfrak{p} + 1$ ist. Anstatt $\hat{\mathfrak{p}}$ ebenfalls zu approximieren, kann hierfür die formale Ordnung des ungenauerten Diskretisierungsschemas eingesetzt werden. Dadurch genügen zwei numerische Lösungen. Allerdings kann mit der Approximation von \mathfrak{p} geprüft werden, inwieweit diese mit der formalen Ordnung übereinstimmt, sodass dies einen Indikator zur Einschätzung der Güte der vorgenommenen Richardson-Extrapolation liefert. Der extrapolierte Wert $\hat{\phi}$ kann zur Abschätzung des Diskretisierungsfehlers für die numerische Lösung bei allen betrachteten Diskretisierungen dienen. Für den Fall $\mathfrak{h}_1 < \mathfrak{h}_2 < \mathfrak{h}_3$ ergibt sich mit $r_{\iota\kappa} := \mathfrak{h}_\iota / \mathfrak{h}_\kappa$ aus (A.40) die implizite Gleichung

$$\hat{\mathfrak{p}} = \frac{1}{\ln r_{21}} \left[\ln \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1} \right) + \ln \left(\frac{r_{21}^{\hat{\mathfrak{p}}} - 1}{r_{32}^{\hat{\mathfrak{p}}} - 1} \right) \right] \quad (\text{A.41})$$

zur Bestimmung von $\hat{\mathfrak{p}}$. Diese lässt sich iterativ mittels Fixpunktiteration oder des Newton-Verfahrens lösen. Für den Fall, dass die Verfeinerungsfaktoren r_{21} und r_{32} identisch sind, ist die Ordnung explizit durch

$$\hat{\mathfrak{p}} = \frac{1}{\ln r_{21}} \left[\ln \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1} \right) \right] \quad (\text{A.42})$$

bestimmt. Dies kann auch als Anfangslösung der impliziten Gleichung für den Fall $r_{21} \neq r_{32}$ dienen. Mit der bekannten Konvergenzordnung ergibt sich

$$\hat{a} = \frac{1}{\mathfrak{h}_1^{\hat{\mathfrak{p}}}} \frac{\phi_1 - \phi_2}{r_{21}^{\hat{\mathfrak{p}}} - 1} \quad (\text{A.43a})$$

$$\hat{\phi} = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{r_{21}^{\hat{\mathfrak{p}}} - 1}. \quad (\text{A.43b})$$

⁴Bei nicht äquidistanten Gittern müssen die verschiedenen Diskretisierungen geometrisch ähnlich sein.

Das Fehlermaß $e_l^d := \hat{\phi} - \phi_l$ liefert eine Abschätzung des absoluten Diskretisierungsfehlers für die Diskretisierung auf dem entsprechenden Gitter. Meist werden relative Fehlermaße angegeben, wobei entweder $\hat{\phi}$ oder ϕ_l zur Normierung dienen. Problematisch ist die Verwendung eines solchen relativen Fehlers, falls die Lösung nahe oder exakt Null ist. Für diesen Fall können andere charakteristische Größen zur Normierung verwendet werden (siehe z. B. [111]). Um möglichst eine konservative Fehlerabschätzung vorzunehmen, wurde die Verwendung eines Sicherheitsfaktors durch Roache [133] vorgeschlagen, der einen Wert von 1,25 empfiehlt. Voraussetzung für die hier genannte Fehlerabschätzung ist, dass auch das größte Gitter innerhalb des Bereichs asymptotischer Konvergenz liegt (siehe [47, Abbildung 4.6]). Um dies einzuschätzen kann das gewichtete Verhältnis der Lösungsänderungen

$$V = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2} \frac{r_{32}}{r_{21}} \quad (\text{A.44})$$

herangezogen werden. Für identische Verfeinerungsfaktoren bedeutet eine Konvergenz, dass die Änderung der Lösung vom feinsten zum mittleren Gitter geringer sein muss als diejenige vom mittleren zum groben. Allgemein lassen sich die vier Fälle

$$\begin{cases} 0 \leq V < 1 & \text{monotone Konvergenz} \\ 0 \geq V > -1 & \text{oszillierende Konvergenz} \\ V \geq 1 & \text{monotone Divergenz} \\ V \leq -1 & \text{oszillierende Divergenz} \end{cases} \quad (\text{A.45})$$

unterscheiden. Bei Divergenz ist die Auflösung des größten Gitters zu gering und die Reihe (A.39) konvergiert dort nicht. Um in der Abschätzung auch oszillierende Konvergenz abbilden zu können, lässt sich die Anpassung

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{\ln r_{21}} \left| \ln \left| \frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1} \right| + \ln \left(\frac{r_{21}^{\hat{\mathbf{p}}} - \text{sgn}(V)}{r_{32}^{\hat{\mathbf{p}}} - \text{sgn}(V)} \right) \right| \quad (\text{A.46})$$

für die Konvergenzordnung verwenden [24]. Wird die Richardson-Methode auf Lösungsfelder angewendet, muss diese punktweise vorgenommen werden. Es ist in diesem Fall zu beachten, dass nur für Verfeinerungsfaktoren $r = 2$ die Lösungsfelder aller Diskretisierungen an gleichen Punkten, den Stützstellen des größten Gitters, vorliegen. Im allgemeinen ist die Lösungsinformation der verschiedenen Gitter jedoch stets an unterschiedlichen Positionen bekannt, sodass eine Interpolation der Lösungsfelder auf ein Referenzgitter nötig ist. Es bietet sich hierbei an, das grobe Gitter als Referenz zu verwenden, da dann die geringsten Interpolationsfehler auftreten [21]. Darüber hinaus ist zu beachten, dass der eingeführte Fehler aus der Interpolation deutlich geringer sein muss als der abzuschätzende Diskretisierungsfehler, um dessen Approximation nicht zu verfälschen.

B Details zur Behandlung des diffusen Übergang

B.1 Geschwindigkeitsrandbedingungen am Fluid-Solid-Übergang

In diesem Abschnitt wird die Anpassung der Navier-Stokes-Gleichung auf einen diffusen Fluid-Solid Übergang gezeigt. Li et al. [102] führen eine allgemeine Vorgehensweise zum Aufprägen von Randbedingungen vom Dirichlet-, Neumann- und Robin-Typ über einen diffusen Übergang ein. Diese lässt sich auf die Navier-Stokes-Gleichung anwenden. Sei Ω_f das vom Fluid eingenommene Volumen und I die Indikatorfunktion bezüglich des Fluids

$$I = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Omega_f \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (\text{B.1})$$

dann lässt sich für eine räumlich konstante Viskosität und Dirichlet Randbedingungen das gesamte Navier-Stokes System schreiben als

$$\partial_t(\rho I \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho I \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -I \nabla p + \nabla \cdot (I \mu \nabla \mathbf{u}) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}^w) \nabla \cdot (\mu \nabla I) + \rho I \mathbf{f}^V + I \mathbf{K}, \quad (\text{B.2a})$$

$$\nabla \cdot (I \mathbf{u}) - \mathbf{u}^w \cdot \nabla I = 0. \quad (\text{B.2b})$$

Dabei ist \mathbf{u}^w die Geschwindigkeit der Fluid-Solid-Grenzfläche, die bei einer festen Wand als $\mathbf{0}$ zu wählen ist. Im Kontext von diffusen Übergängen kann die Indikatorfunktion entsprechend approximiert werden, z. B. durch $I = \varphi^f$. Die Druckprojektions aus Gleichung (2.66) lässt sich für das Gleichungssystem (B.2) zu

$$\nabla \cdot \left(I \frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{1}{\Delta t} \left[\nabla \cdot (I^n \mathbf{u}^{\text{pre}}) + \mathbf{u}^w \cdot \nabla I^{n+1} \right], \quad (\text{B.3a})$$

$$I^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} = I^n \mathbf{u}^{\text{pre}} - I^{n+1} \frac{1}{\rho} \nabla p \quad (\text{B.3b})$$

umschreiben.

Dieses Vorgehen führt zum gleichen Ergebnis wie die Formulierung von Beckermann et al. [13]. Diese ist für den Fall eines einzelnen Fluids ohne Volumenkraftdichte und $\mathbf{u}^w = \mathbf{0}$ als

$$\partial_t(\rho I \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho I \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -I \nabla p + \nabla \cdot [\mu \nabla (I \mathbf{u})] - \mu (\nabla \mathbf{u}) \nabla I \quad (\text{B.4})$$

gegeben. Es lässt sich zeigen, dass beide Formulierungen in diesem Fall identisch sind, da

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (I\mu\nabla\mathbf{u}) &= \nabla \cdot [\mu\nabla(I\mathbf{u}) - \mu\mathbf{u} \otimes \nabla I] \\ &= \nabla \cdot [\mu\nabla(I\mathbf{u})] - \mathbf{u} \nabla \cdot (\mu\nabla I) - \mu(\nabla\mathbf{u})\nabla I\end{aligned}$$

gilt.

Die Herleitung des Gleichungssystems (B.2) wird im Folgenden skizziert. Eine Multiplikation der NSGL mit der Testfunktion \mathbf{w} im Sinne des Innenprodukts und eine Integration über das Fluidgebiet Ω_f führt zur Darstellung des viskosen Terms

$$\int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} \, dV. \quad (\text{B.5})$$

Die zweimalige Anwendung der Produktregel liefert

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} &= \nabla \cdot (\mu\nabla^\top \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mu\nabla\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{w} \\ &= \nabla \cdot (\mu\nabla^\top \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - [\nabla \cdot (\mu\mathbf{u} \cdot \nabla^\top \mathbf{w}) - \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{w})]\end{aligned}$$

und damit aus zweifacher partieller Integration mit dem Satz von Gauß

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} \, dV &= \int_{\Omega_f} \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{w}) \, dV \\ &\quad + \int_{\Gamma_{fs}} \mu\mathbf{w} \cdot (\nabla\mathbf{u})\mathbf{n}^{fs} - \mu\mathbf{u} \cdot (\nabla\mathbf{w})\mathbf{n}^{fs} \, dO\end{aligned}$$

wobei an Wänden $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}^w(t)$, $\mathbf{x} \in \Gamma_{fs}$ gilt. Hierbei bezeichnet \mathbf{n}^{fs} den Oberflächennormalenvektor auf der Fluid-Solid-Grenzfläche Γ_{fs} . Mit der Indikatorfunktion I und der korrespondierenden Oberflächen-Dirac-Distribution δ^{fs} auf Γ_{fs} lassen sich die Integrale über das Gesamtgebiet Ω gemäß Gleichung (3.4) ausweiten, wobei $\Omega_f \subset \Omega$ und $\Gamma_{fs} \cap \partial\Omega = \emptyset$ gilt. Dies führt zu

$$\int_{\Omega} I\mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{w}) + \delta^{fs}\mu(\mathbf{w} \cdot (\nabla\mathbf{u})\mathbf{n}^{fs} - \mathbf{u}^w \cdot (\nabla\mathbf{w})\mathbf{n}^{fs}) \, dV.$$

Unter Ausnutzung, dass $-\delta^{fs}\mathbf{n}^{fs} = \nabla I$ gilt, folgt

$$\int_{\Omega} I\mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{w}) - \mu\mathbf{w} \cdot (\nabla\mathbf{u})\nabla I + \mathbf{u}^w \cdot \mu(\nabla\mathbf{w})\nabla I \, dV.$$

Mit Hilfe der Index-Notation und der Einsteinschen Summationskonvention, nach der über doppelt auftretende Indizes summiert wird, folgen die Umformungen

$$\begin{aligned}\mu(\nabla\mathbf{w})\nabla I &= \mu \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \frac{\partial I}{\partial x_j} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu w_i \frac{\partial I}{\partial x_j} \right) - w_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial I}{\partial x_j} \right)\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 I\mathbf{u} \cdot \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{w}) &= I u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) \\
 &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(I u_i \mu \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) - I \mu \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \mu u_i \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \frac{\partial I}{\partial x_j} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(I u_i \mu \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(I \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} w_i \right) + w_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(I \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu u_i w_i \frac{\partial I}{\partial x_j} \right) + w_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu u_i \frac{\partial I}{\partial x_j} \right).
 \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich wiederum

$$\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot [\nabla \cdot (I \mu \nabla \mathbf{u}) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}^w) \nabla \cdot (\mu \nabla I)] \, dV,$$

wobei der Randterm

$$\int_{\partial\Omega} \mu (\mathbf{u} - \mathbf{u}^w) \nabla I \cdot \mathbf{n} + (I \mu (\nabla^\top \mathbf{w}) \mathbf{u} - I \mu (\nabla^\top \mathbf{u}) \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n} \, dO$$

verschwindet, da $I, \nabla I = 0$, $\mathbf{x} \in \partial\Omega$.

B.2 Herleitung der diffusen Benetzungsrandbedingung

Analog zur diffusen Geschwindigkeitsrandbedingung kann durch das Vorgehen von Li et al. [102] die Benetzungsrandbedingung für diffuse Fluid-Solid-Übergänge hergeleitet werden. Statt zweimaliger partieller Integration muss nur einmal partiell integriert werden, da statt Dirichlet-Randbedingungen solche vom Robin-Typ, wenn auch in nichtlinearer Form, vorliegen. Die Herleitung der diffusen Benetzungsrandbedingung ist im Folgenden dargestellt. Die Cahn-Hilliard-Gleichung für einen Ordnungsparameter in einem zweiphasigen Fluid ist

$$\Phi = a_2 \partial_\varphi \psi - a_1 \nabla^2 \varphi \tag{B.6a}$$

$$\dot{\varphi} = \kappa \nabla^2 \Phi \tag{B.6b}$$

mit den Randbedingungen für stationäre Benetzung

$$\nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = 0 \tag{B.7a}$$

$$a_1 \nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} = (\sigma_{2s} - \sigma_{1s}) \partial_\varphi h^{\text{ff}}(\varphi). \tag{B.7b}$$

Die Feldgleichungen werden zunächst mit einer Testfunktion $\Psi \in H_D^1(\Omega_f)$ multipliziert. Dabei ist der Sobolew-Raum durch $H_D^1(\Omega_f) = \{v \in H^1(\Omega_f) : \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_f^D \text{ gilt } v = 0\}$ gegeben, sodass die Testfunktion auf dem Dirichlet-Rand $\partial\Omega_f^D$ des Fluids verschwindet. Eine Integration über das Fluidvolumen $\Omega_f \subset \Omega$ ergibt die schwache Form

$$\int_{\Omega_f} \dot{\varphi} \Psi + \kappa \nabla \Phi \cdot \nabla \Psi \, dV - \kappa \int_{\Gamma_{\text{fs}}} \Psi \nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \, dO = 0 \tag{B.8}$$

des Randwertproblems, wobei Γ_{fs} die Fluid-Solid-Grenzfläche bezeichnet. Das Integral kann gemäß Gleichung (3.4) mit Hilfe der Indikatorfunktion I bezogen auf das

Fluid und der Oberflächen-Dirac-Distribution δ^{fs} der Fluid-Solid-Grenzfläche auf das gesamte Rechengebiet Ω ausgedehnt werden. Dies führt zu

$$\int_{\Omega} I\dot{\varphi} \Psi + \kappa I \nabla \Phi \cdot \nabla \Psi - \kappa \delta^{\text{fs}} \Psi \nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \, dV = 0. \quad (\text{B.9})$$

Es kann ausgenutzt werden, dass

$$\int_{\Omega} I \nabla \Phi \cdot \nabla \Psi \, dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (I \Psi \nabla \Phi) - \Psi \nabla \cdot (I \nabla \Phi) \, dV \quad (\text{B.10})$$

gilt. Der erste Summand des Integranden verschwindet nach Anwendung des Satzes von Gauß, da am Gebietsrand $\partial\Omega$ die Indikatorfunktion I verschwindet. Dadurch ergibt sich

$$\int_{\Omega} \Psi \left[I\dot{\varphi} - \kappa \nabla \cdot (I \nabla \Phi) - \kappa \delta^{\text{fs}} \nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \right] \, dV = 0. \quad (\text{B.11})$$

Analog folgt das Vorgehen für das chemische Potential. Die schwache Form ist

$$\int_{\Omega_{\text{f}}} \Phi \Psi - a_1 \nabla \varphi \cdot \nabla \Psi - a_2 \partial_{\varphi} \psi \Psi \, dV + a_1 \int_{\Gamma_{\text{fs}}} \Psi \nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \, dO = 0 \quad (\text{B.12})$$

und damit folgt

$$\int_{\Omega} \Psi \left[I\Phi + a_1 \nabla \cdot (I \nabla \varphi) - a_2 I \partial_{\varphi} \psi + a_1 \delta^{\text{fs}} \nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \right] \, dV = 0. \quad (\text{B.13})$$

Mit dem Fundamentallemma der Variationsrechnung kann das Gleichungssystem

$$I\Phi = a_2 I \partial_{\varphi} \psi - a_1 \nabla \cdot (I \nabla \varphi) - a_1 \delta^{\text{fs}} \nabla \varphi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \quad (\text{B.14a})$$

$$I\dot{\varphi} = \kappa \nabla \cdot (I \nabla \Phi) + \kappa \delta^{\text{fs}} \nabla \Phi \cdot \mathbf{n}^{\text{fs}} \quad (\text{B.14b})$$

gewonnen werden, wobei die Randbedingungen über den Term mit der Dirac-Distribution δ^{fs} berücksichtigt sind. Das Einsetzen der Randbedingungen (B.7) führt zu

$$I\Phi = a_2 I \partial_{\varphi} \psi - a_1 \nabla \cdot (I \nabla \varphi) - \delta^{\text{fs}} (\sigma_{2\text{s}} - \sigma_{1\text{s}}) \partial_{\varphi} h^{\text{ff}} \quad (\text{B.15a})$$

$$I\dot{\varphi} = \kappa \nabla \cdot (I \nabla \Phi). \quad (\text{B.15b})$$

Aus der Produktregel folgt

$$\nabla \cdot (I \nabla \Phi) = \nabla^2 (I \Phi) - \nabla \Phi \cdot \nabla I - \Phi \nabla^2 I$$

wobei $\nabla I = -\delta^{\text{fs}} \mathbf{n}^{\text{fs}}$ gilt und somit aufgrund der Randbedingung $\nabla \Phi \cdot \nabla I = 0$, was zur alternativen Darstellung

$$I\dot{\varphi} = \kappa \left[\nabla^2 (I \Phi) - \Phi \nabla^2 I \right] \quad (\text{B.16})$$

für Gleichung (B.15b) führt. Eine diffuse Approximation dieser Repräsentation des RWP erfolgt durch die Wahl der Indikatorfunktion als $I \approx h^{\text{fs}}(\varphi^{\text{f}})$ und der Dirac-Distribution als $\delta^{\text{fs}} = \|\nabla I\| \approx \partial_{\varphi^{\text{f}}} h^{\text{fs}}(\varphi^{\text{f}}) \|\nabla \varphi^{\text{f}}\|$, womit die diffuse Benetzungsrandbedingung sich zu

$$h^{\text{fs}} \Phi = a_2 h^{\text{fs}} \partial_{\varphi} \psi - a_1 \nabla \cdot (h^{\text{fs}} \nabla \varphi) - \partial_{\varphi^{\text{f}}} h^{\text{fs}} \|\nabla \varphi^{\text{f}}\| (\sigma_{2\text{s}} - \sigma_{1\text{s}}) \partial_{\varphi} h^{\text{ff}} \quad (\text{B.17a})$$

$$h^{\text{fs}} \dot{\varphi} = \kappa \nabla \cdot (h^{\text{fs}} \nabla \Phi) \quad (\text{B.17b})$$

ergibt.

B.3 Kontinuierliche Approximationen der Dirac-Distribution

In diesem Abschnitt werden Beispiele für verschiedene, kontinuierliche Approximationen der Dirac-Distribution für die Mittelwertbildung aus Kapitel 3.4 gezeigt, wobei diese jeweils für die Profile P1, P2 und P3 dargestellt werden. Dabei ist P1 das Gleichgewichtsprofil des quartischen und P3 dasjenige des parabolischen Potentials.

Parabolisches Potential

Für das parabolische Potential ergibt sich das Gleichgewichtsprofil und dessen Gradient

$$\varphi(\eta) = \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right) \right]$$

$$\|\nabla\varphi\| = \frac{\pi}{2\delta_d} \cos \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right).$$

Zur Parametrierung bezüglich φ folgt

$$\varphi(1 - \varphi) = \frac{1}{4} \left[1 - \sin^2 \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right) \right] = \frac{1}{4} \cos^2 \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right)$$

$$\Rightarrow \|\nabla\varphi\| = \frac{\pi}{\delta_d} \sqrt{\varphi(1 - \varphi)}.$$

$g_i(\varphi)$	$w(\varphi) = g_i \ \nabla\varphi\ $	$w(\eta)$
$\frac{8}{\pi} \sqrt{\varphi(1 - \varphi)}$	$\frac{8}{\delta_d} \varphi(1 - \varphi)$	$2 \cos^2 \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right)$
$6\varphi(1 - \varphi)$	$\frac{6\pi}{\delta_d} (\varphi(1 - \varphi))^{3/2}$	$\frac{3\pi}{2} \cos^3 \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right)$
$30\varphi^2(1 - \varphi)^2$	$\frac{30\pi}{\delta_d} (\varphi(1 - \varphi))^{5/2}$	$\frac{15\pi}{16} \cos^5 \left(\frac{\pi\eta}{\delta_d} \right)$

Quartisches Potential

Für das quartische Potential ergibt sich das Gleichgewichtsprofil

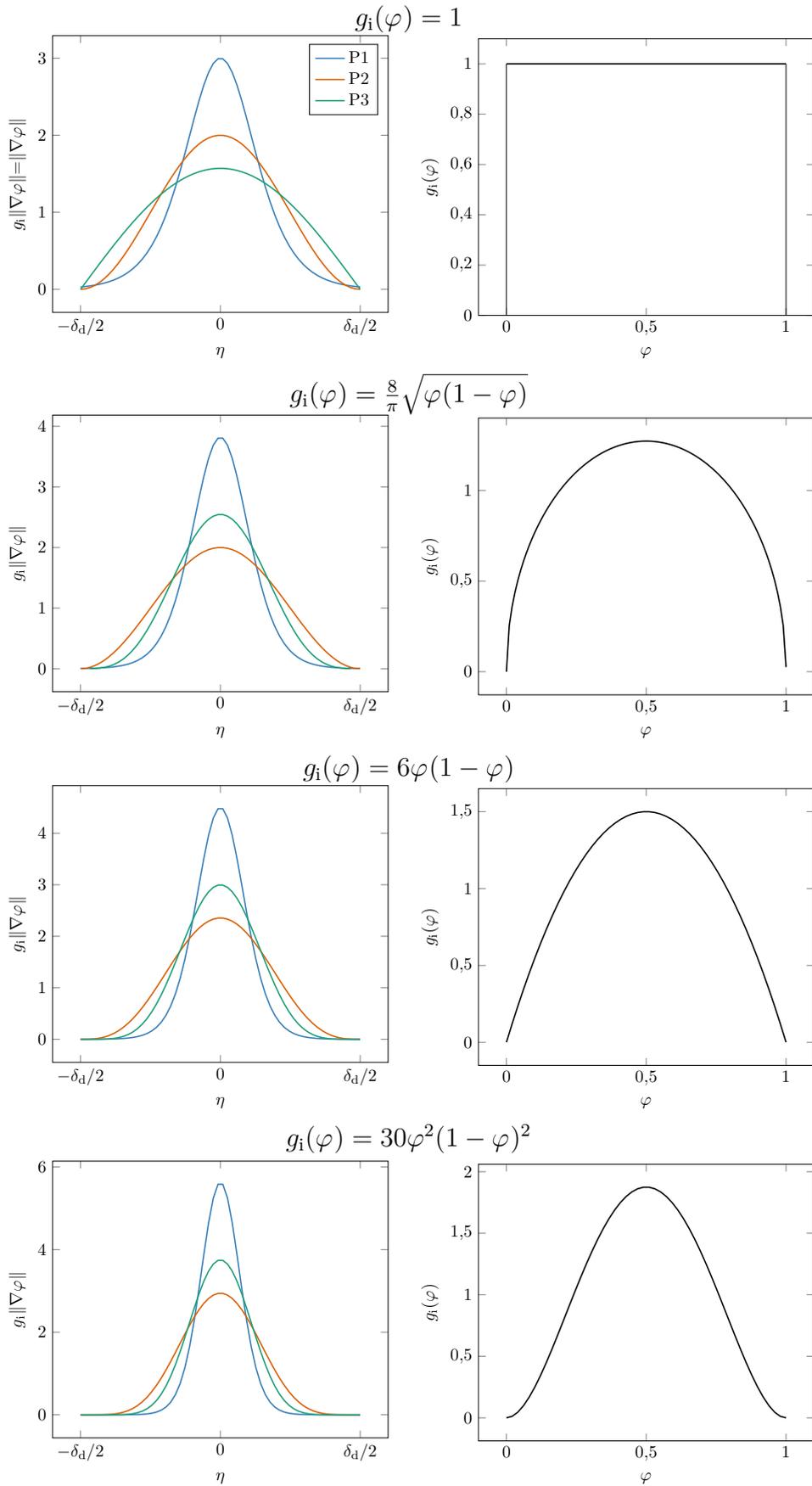
$$\varphi = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(k \frac{\eta}{\epsilon} \right) \right]. \quad (\text{B.18})$$

Für den Betrag des Gradienten folgt hier

$$\|\nabla\varphi\| = \frac{k}{2\epsilon} \left[1 - \tanh^2 \left(k \frac{\eta}{\epsilon} \right) \right] = \frac{2k}{\epsilon} \varphi(1 - \varphi) \quad (\text{B.19})$$

$g_i(\varphi)$	$w(\varphi) = g_i \ \nabla\varphi\ $	$w(\eta)$
$\frac{8}{\pi} \sqrt{\varphi(1 - \varphi)}$	$\frac{16k}{\pi\epsilon} (\varphi(1 - \varphi))^{3/2}$	$\frac{2k}{\pi\epsilon} \left[1 - \tanh^2(k\eta/\epsilon) \right]^{3/2}$
$6\varphi(1 - \varphi)$	$\frac{12k}{\epsilon} (\varphi(1 - \varphi))^2$	$\frac{3k}{4\epsilon} \left[1 - \tanh^2(k\eta/\epsilon) \right]^2$
$30\varphi^2(1 - \varphi)^2$	$\frac{60k}{\epsilon} (\varphi(1 - \varphi))^3$	$\frac{15k}{16\epsilon} \left[1 - \tanh^2(k\eta/\epsilon) \right]^3$

B Details zur Behandlung des diffusen Übergang



Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

AC	Allen-Cahn
ALE	gemischt Lagrange-Euler (englisch: arbitrary Lagrange-Euler)
AWP	Anfangswertproblem
CFL	Courant-Friedrich-Lewy
CH	Cahn-Hilliard
DGL	Differentialgleichung
DLM	verteilter Lagrange-Multiplikator (englisch: distributed Lagrange multiplier)
FDM	finite Differenzenmethode
FEM	finite Elementemethode
FVM	finite Volumenmethode
IB	Immersed boundary
KV	Kontrollvolumen
LGS	lineares Gleichungssystem
NSGL	Navier-Stokes-Gleichung
NVD	Normiertes Variablendiagramm
RTT	Reynolds-Transporttheorem
RVE	Repräsentatives Volumenelement
RWP	Randwertproblem
TVD	Total Variation Diminishing

Operatoren

$d_x = \frac{d}{dx}$	Totale Ableitung nach x
$\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$	Partielle Ableitung nach x
\mathfrak{D}_x	Differenzenapproximation der Ableitung nach x
∇	Gradientenoperator
$\nabla \cdot$	Divergenzoperator
∇^2	Laplace-Operator
$\nabla \times$	Rotationsoperator
δ	Variation
Δ	Differenz
\mathcal{D}	Diskretisierungsoperator
\mathcal{K}_t	Platzierungsoperator
\mathcal{M}	Mobilitätsoperator der Phasenevolutionsgleichung
\mathcal{O}	Größenordnung
$\text{sym}(\cdot) = \frac{1}{2} \left((\cdot) + (\cdot)^\top \right)$	Symmetrischer Anteil
$\text{skw}(\cdot) = \frac{1}{2} \left((\cdot) - (\cdot)^\top \right)$	Schiefsymmetrischer Anteil
$\text{dev}(\cdot)$	deviatorischer Anteil

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

$\text{sph}(\cdot)$	sphärischer Anteil
$\text{sp}(\cdot)$	Spur
$\text{det}(\cdot)$	Determinante
$\ \boldsymbol{x}\ $	Euklidische Norm eines Vektors \boldsymbol{x}
$\ \boldsymbol{T}\ $	Frobenius-Norm eines Tensors \boldsymbol{T}
$(\cdot)^\top$	Transposition
$f \circ g$	Verkettung der Funktionen f und g
$\overline{\eta(\cdot)}$	Mittlung über den diffusen Übergang in Normalrichtung
$\llbracket(\cdot)\rrbracket = (\cdot)_1 - (\cdot)_2$	Differenz phaseninherenter Größen (Sprung)

Tief- und Hochstellungen

α, β	Indizierung verschiedener Phasen
i, j, k	Zellmittelpunktsindex im karthesischen Gitter
$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	Knotenindex im karthesischen Gitter
ges	gesamt
num	numerisch
m	materielle Größe
\mathbf{n} ,	Index für den Zeitschritt
$(\cdot)_c$	Charakteristische Größe
$(\cdot)^*$	Entdimensionierte Größe
E, L	Euler- bzw. Lagrange-Darstellung für Felder

Griechische Buchstaben

γ	Interpolationsfaktor des γ -Schemas zur Diskretisierung
$\Gamma_{\alpha\beta}$	Grenzfläche zweier Phasen
$\Gamma_{\alpha\beta}^d$	Diffuser Übergangsbereich
δ	Variation
δ_Γ	Dirac-Distribution über die Grenzfläche Γ
δ^{fs}	Dirac-Distribution auf der Fluid-Solid Grenzfläche
δ_d	Breite des diffusen Übergangsbereichs
ϵ	Parameter für die Breite des diffusen Übergangsbereichs
ζ	Volumenviskosität
η	Koordinate in Grenzflächennormalenrichtung
θ_1^w	Kontaktwinkel zwischen Fluid 1 und Festkörpern
θ_p	Orientierungswinkel z. B. von Starrkörpern
Θ	Kapillarer Oberflächenspannungstensor
κ	Mobilität der Cahn-Hilliard-Gleichung
κ_Γ	Oberflächenkrümmung
λ^{sum}	Lagrange-Multiplikator für die Summationsbedingung
λ^{vol}	Lagrange-Multiplikator für die Volumenerhaltung
μ	Dynamische Viskosität
ν	Kinematische Viskosität
ξ	Inverse Bewegungsfunktion
ρ	Massendichte
σ	Cauchy-Spannungstensor
σ	Oberflächenspannung
τ	Tangentialvektor
\mathcal{T}	Generische Diffusivität
φ	Phasenvariable
ϕ	Generische Variable für Feldgrößen
Φ	Chemisches Potential
χ	Bewegungsfunktion
ψ	Potentialterm der freien Energiedichte
ω_p	Winkelgeschwindigkeit
Ω, Ω_α	Berechnungsgebiet bzw. Gebiet von Phase α
$\Omega_{\varphi_\alpha=1}$	Inneres Gebiet der Phase α
$\partial\Omega$	Rand des Berechnungsgebiets

Lateinische Buchstaben

a_1, a_2	Koeffizienten im freien Energiefunktional
a, b, c	Volumen- und Oberflächendichten in der allgemeinen Bilanzgleichung
\mathcal{A}	Abhängigkeitsbereich
\mathfrak{B}	Flussbegrenzungsfunktion
\mathbf{B}, \mathbf{C}	linker und rechter Cauchy-Green- Tensor
c	Courant-Zahl
\mathbf{d}	Sprungvektor des Geschwindigkeitsgradienten
dO	Oberflächenelement
dV	Volumenelement
d_{pq}	Abstand
\mathbf{D}	Streckgeschwindigkeitstensor
D	Diffusionszahl
e	Dichte der inneren Energie
e_r	Restitutionskoeffizient
$\mathbf{e}_{(\cdot)}$	Einheitsvektor in Richtung \cdot
f	Dichte der freie Energie
\mathfrak{f}	Rechte Seite für die zeitliche Änderung einer DGL
\mathbf{f}^K	Starrkörpervolumenkraftdichte
\mathbf{f}^V	Massenkraftdichte in der Impulsbilanz
\mathcal{F}	Freies Energiefunktional
\mathbf{F}	Deformationsgradient
g	Gravitationskonstante
\mathfrak{g}	Numerischer Fluss
G	Extensive Größe
g_i	Gewichtsfunktion bezüglich der Phasenvariable φ
I_α	Indikatorfunktion der Phase α
J	Determinante des Deformationsgradienten
\mathbf{J}_p	Massenträgheitstensor
h	Phasenfeldinterpolationsfunktion
H_Γ	Heaviside-Funktion über die Grenzfläche
k	Skalierungsfaktor im Gleichgewichtsprofil
k_1, k_2	Proportionalitätskonstanten in der Definition von a_1 bzw. a_2
\mathbf{K}	Kapillaritätsterm
l	Drehimpuls
\mathbf{L}	Geschwindigkeitsgradient
m	Masse
\mathbf{M}	Strukturtensor
M	Mobilitätsparameter der Allen-Cahn-Gleichung
\mathbf{n}	Normalenvektor
n_x, n_y, n_z	Anzahl der Knoten in entsprechender Richtung (Zahl innerer Zellen ist $n - 1$)
N_α	Anzahl der auftretenden Phasen
N^a	Anzahl lokal aktiver Phasen
p	Druckfeld
\mathbf{p}	Impuls
\mathfrak{p}	Konsistenz- bzw. Konvergenzordnung der numerischen Methode
\mathbf{P}	Erster Piola-Kirchhoff-Tensor

$\tilde{\mathbf{P}}$	Zweiter Piola-Kirchhoff-Tensor
$\mathbf{P}_\tau, \mathbf{P}_n$	Projektor in Tangential- bzw. Normalrichtung
\mathbf{q}	Wärmestromvektor
q^w	Wärmequelle
$\mathbf{r}^S, \mathbf{t}^N$	Sweby- bzw. NVD-Normierung
\mathbf{r}_p	Relativvektor eines Punktes zum Schwerpunkt des p -ten Starrkörpers
R	Radius
\mathbf{R}	Rotationstensor aus der polaren Zerlegung der Deformation
s	Entropiedichte
\mathbf{s}	Verschiebungsfeld
t	Zeit
T	Temperatur
\mathbf{t}	Momentaner Spannungsvektor
\mathbf{u}	Räumliches Geschwindigkeitsfeld
\mathbf{u}^m	Materielles Geschwindigkeitsfeld
\mathbf{u}_p	Starrkörpergeschwindigkeitsfeld
$\tilde{\mathbf{u}}$	Vorläufiges Geschwindigkeitsfeld
\mathbf{U}_p	Schwerpunktsgeschwindigkeit des p -ten Starrkörpers
\mathbf{U}, \mathbf{V}	Strecktensoren aus der polaren Zerlegung des Deformationsgradienten
V	Volumen
v°	Grenzflächengeschwindigkeit aufgrund von Phasenumwandlung
\mathfrak{Z}	Inkrementfunktion eines Zeitintegrationsverfahrens
w	Gewichtsfunktion bezüglich der Grenzflächennormalkoordinate η
\mathbf{W}	Spintensor
\mathbf{x}	Räumlicher Punkt in der Momentankonfiguration
\mathbf{X}	Punkt in der Anfangskonfiguration
\mathbf{x}_p	Massenmittelpunkt des p -ten Starrkörpers

Abbildungsverzeichnis

2.1	Polare Zerlegung des Deformationsgradienten	16
3.1	Skizze von Mehrphasenproblemen	25
3.2	Scharfe und diffuse Repräsentation von Phasenübergängen	27
3.3	Gängige Phasenfeldpotentiale	32
3.4	Gleichgewichtsprofile des Phasenfeldes	32
3.5	Diffuse Verteilung der Oberflächenspannung	34
3.6	Interpolationsfunktionen für volumetrische Energiedichten	38
3.7	Verläufe für Diffuse Übergänge	42
3.8	Interpolation von Materialparametern	43
4.1	Numerische Diskretisierung mit kartesischen Gittern	56
4.2	Numerischer Abhängigkeitsbereich für die Zeitintegration	62
4.3	NVD für verschiedene Diskretisierungsschemata	67
4.4	Stützstellenpositionen im kartesischen Gitter	68
5.1	Illustration von Partikelkontakt	85
5.2	Kollision von Partikeln mit Randstrukturen	86
5.3	Abstand von Grenzflächen im Phasenfeldkontext	87
5.4	Referenzlösung einer fallenden Scheibe	91
5.5	Ergebnisse der Konvergenzstudie zur Partikeldynamik	92
5.6	Einfluss der Impulskorrektur	93
5.7	Validierung für fallende Sphären	95
5.8	Simulationsaufbau für Zylinderumströmungen	97
5.9	Ergebnisse der Zylinderumströmung	98
5.10	Wirkende Kräfte für die Zylinderumströmung	99
5.11	Simulationsergebnisse der Umströmung eines frei rotierbaren Kreuzes	102
5.12	Mehrpartikelproblem mit Berandungsstruktur	103
5.13	Geschwindigkeitsfeld in einem Wirbelbett	104
5.14	Simulation eines Wirbelbetts zu verschiedenen Zeiten	105
5.15	Interaktion von Partikelströmungen mit einer Schaumstruktur	106
5.16	Partikelströmung mit evolvierender Berandung	107
5.17	Partikel mit kubischer Anisotropie	108
6.1	Skizze mehrphasiger Partikelströmungen	113
6.2	Kontaktwinkel an der Tripellinie zweier Fluidphasen mit Festkörpern	115
6.3	Ablauf des Lösungsalgorithmus	117
6.4	Tropfenbenetzung einer Oberfläche	119
6.5	Simulationsergebnisse für die statische Benetzung	120
6.6	Simulationsaufbau für oszillierende Partikelbewegung auf freien Oberflächen	121
6.7	Ergebnisse für oszillierende Partikelbewegung auf freien Oberflächen	122

Abbildungsverzeichnis

6.8	Skizze des Partikelaufralls auf freie Oberflächen	123
6.9	Geschwindigkeit während des Partikelaufralls auf freie Oberflächen .	124
6.10	Feldinformationen für den Partikelaufrall auf freie Oberflächen . . .	125
6.11	Dreidimensionaler Partikelaufrall	126
6.12	Aufbau zur Partikelinteraktion in Zweiphasenströmungen	126
6.13	Ergebnisse zur Partikelinteraktion in Zweiphasenströmungen	127
6.14	Aufbau des Dambruchproblems	127
6.15	Ergebnisse des Dambruchproblems	128
6.16	Viskositätsinterpolation für zweiphasige Kanalströmungen	136
6.17	Abweichungen der Viskositätsinterpolationen für zweiphasige Kanalströmungen	137
6.18	Viskositätsinterpolation bei zweiphasiger Plattenanströmung	138
7.1	Viskoelastische Körper in einer Strömung	146
7.2	Deformation viskoelastischer Körper in einer Strömung	147
7.3	Spannungsfeld für viskoelastische Körper in einer Strömung	148
A.1	Skizze zur versetzten Gitteranordnung	156

Tabellenverzeichnis

3.1	Diffuse Approximationen zur Repräsentation von Gebieten und Grenzflächen.	45
4.1	Überblick über lineare Diskretisierungsschemata	65
4.2	Flussbegrenzer für TVD-Schemata	66
5.1	Auflösungen für die Simulation fallender Scheiben	91
5.2	Ergebnisse der Konvergenzstudie zur Partikeldynamik	92
5.3	Validierung für fallende Sphären	96
5.4	Ergebnisvergleich für umströmte rotierende Zylinder	99
5.5	Ergebnisvergleich für umströmte feste Zylinder	100
6.1	Ergebnisse für oszillierende Partikelbewegung auf freien Oberflächen .	122
6.2	Parameter für den Partikelauflprall auf freie Oberflächen	123

Eigene Publikationen

Publikationen als Hauptautor

- [128] M. Reder, A. Prahs, D. Schneider, and B. Nestler. Viscous stress approximations in diffuse interface methods for two-phase flow based on mechanical jump conditions. 2023. In submission. Preprint available at SSRN: <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4523250>.
- [126] M. Reder, P. W. Hoffrogge, D. Schneider, and B. Nestler. A phase-field based model for coupling two-phase flow with the motion of immersed rigid bodies. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 123(16):3757–3780, 2022.
- [129] M. Reder, D. Schneider, F. Wang, S. Daubner, and B. Nestler. Phase-field formulation of a fictitious domain method for particulate flows interacting with complex and evolving geometries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 93(8):2486–2507, 2021.

Publikationen mit geteilter Hauptautorenschaft

- [127] M. Reder, J. Holland-Cunz, P. Lorson, A. August, and B. Nestler. Simulative determination of effective mechanical properties for digitally generated foam geometries. *Advanced Engineering Materials*, 25(19):2300340, 2023.
- [36] S. Daubner, M. Reder, N. Prajapati, D. Schneider, and B. Nestler. Multiphase-field modelling of anisotropic elasticity at finite deformation in eulerian space. *Journal of Computational Science*, 66:101930, 2023.

Publikationen mit Co-Autorenschaft

- [125] A. Prahs, M. Reder, D. Schneider, and B. Nestler. Thermomechanically coupled theory in the context of the multiphase-field method. *International Journal of Mechanical Sciences*, page 108484, 2023.
- [45] L. Fan, M. Reder, D. Schneider, M. Hinterstein, and B. Nestler. A phase-field model for ferroelectric materials—based on the multiphase-field method. *Computational Materials Science*, 230:112510, 2023.
- [173] L. Wallat, M. Reder, M. Selzer, F. Poehler, and B. Nestler. Shape optimization of porous structures by phase-field modelling with strain energy. *Materials Today Communications*, 37:107018, 2023.
- [172] L. Wallat, P. Altschuh, M. Reder, B. Nestler, and F. Poehler. Computational design and characterisation of gyroid structures with different gradient functions for porosity adjustment. *Materials*, 15(10):3730, 2022.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Abels, H. Garcke, and G. Grün. Thermodynamically consistent, frame indifferent diffuse interface models for incompressible two-phase flows with different densities. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 22(03):1150013, 2012.
- [2] F. F. Abraham. Functional dependence of drag coefficient of a sphere on reynolds number. *The Physics of Fluids*, 13(8):2194–2195, 1970.
- [3] S. Aland, J. Lowengrub, and A. Voigt. Two-phase flow in complex geometries: A diffuse domain approach. *Computer modeling in engineering & sciences: CMES*, 57(1):77, 2010.
- [4] S. Aland, J. Lowengrub, and A. Voigt. Particles at fluid-fluid interfaces: A new navier-stokes-cahn-hilliard surface-phase-field-crystal model. *Physical Review E*, 86(4):046321, 2012.
- [5] S. Aland and A. Voigt. Benchmark computations of diffuse interface models for two-dimensional bubble dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 69(3):747–761, 2012.
- [6] S. M. Allen and J. W. Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, 27(6):1085–1095, 1979.
- [7] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual review of fluid mechanics*, 30(1):139–165, 1998.
- [8] S. V. Apte, M. Martin, and N. A. Patankar. A numerical method for fully resolved simulation (frs) of rigid particle–flow interactions in complex flows. *Journal of Computational Physics*, 228(8):2712–2738, 2009.
- [9] A. August, J. Ettrich, M. Rölle, S. Schmid, M. Berghoff, M. Selzer, and B. Nestler. Prediction of heat conduction in open-cell foams via the diffuse interface representation of the phase-field method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 84:800–808, 2015.
- [10] J. M. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 63(4):337–403, dec 1976.
- [11] S. Basting, A. Quaini, S. Čanić, and R. Glowinski. Extended ale method for fluid–structure interaction problems with large structural displacements. *Journal of Computational Physics*, 331:312–336, 2017.
- [12] R. M. Beam and R. F. Warming. An implicit finite-difference algorithm for hyperbolic systems in conservation-law form. *Journal of computational physics*, 22(1):87–110, 1976.

- [13] C. Beckermann, H.-J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma, and X. Tong. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. *Journal of Computational Physics*, 154(2):468–496, 1999.
- [14] B. Bigot, T. Bonometti, L. Lacaze, and O. Thual. A simple immersed-boundary method for solid–fluid interaction in constant- and stratified-density flows. *Computers & Fluids*, 97:126–142, 2014.
- [15] J.-P. Boehler. *Applications of tensor functions in solid mechanics*, volume 292. Springer, Wien, 1987.
- [16] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, and A. Karma. Phase-field simulation of solidification. *Annual review of materials research*, 32(1):163–194, 2002.
- [17] D. Boffi and L. Gastaldi. A finite element approach for the immersed boundary method. *Computers & structures*, 81(8-11):491–501, 2003.
- [18] R. M. Brannon. *Rotation, Reflection, and Frame Changes*. 2053-2563. IOP Publishing, 2018.
- [19] M. Brassel and E. Bretin. A modified phase field approximation for mean curvature flow with conservation of the volume. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 34(10):1157–1180, 2011.
- [20] P. P. Brown and D. F. Lawler. Sphere drag and settling velocity revisited. *Journal of environmental engineering*, 129(3):222–231, 2003.
- [21] J. Cadafalch, C. Pérez-Segarra, R. Consul, and A. Oliva. Verification of finite volume computations on steady-state fluid flow and heat transfer. *Journal of Fluids Engineering*, 124(1):11–21, 2002.
- [22] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *The Journal of chemical physics*, 28(2):258–267, 1958.
- [23] A. Calderer, S. Kang, and F. Sotiropoulos. Level set immersed boundary method for coupled simulation of air/water interaction with complex floating structures. *Journal of Computational Physics*, 277:201–227, 2014.
- [24] I. Celik, U. Ghia, P. Roache, C. Freitas, H. Coleman, and P. Raad. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in *cfD* applications. *Journal of Fluids Engineering*, 130(7), 2008.
- [25] P. Cermelli, E. Fried, and M. E. Gurtin. Transport relations for surface integrals arising in the formulation of balance laws for evolving fluid interfaces. *Journal of Fluid Mechanics*, 544:339–351, 2005.
- [26] Y.-C. Chang, T. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of computational Physics*, 124(2):449–464, 1996.
- [27] J. G. Charney, R. Fjørtoft, and J. v. Neumann. Numerical integration of the barotropic vorticity equation. *Tellus*, 2(4):237–254, 1950.
- [28] Y. J. Choi and P. D. Anderson. Cahn–hilliard modeling of particles suspended in two-phase flows. *International journal for numerical methods in fluids*, 69(5):995–1015, 2012.

- [29] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762, 1968.
- [30] B. D. Coleman and M. E. Gurtin. Thermodynamics with internal state variables. *Journal of Chemical Physics*, 47(2):597–613, 1967.
- [31] G.-H. Cottet, E. Maitre, and T. Milcent. An eulerian method for fluid-structure coupling with biophysical applications. In *Proceedings of the European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD 2006)*, pages 1–16, 2006.
- [32] G.-H. Cottet, E. Maitre, and T. Milcent. Eulerian formulation and level set models for incompressible fluid-structure interaction. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 42(3):471–492, 2008.
- [33] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100(1):32–74, 1928.
- [34] M. Coutanceau and C. Menard. Influence of rotation on the near-wake development behind an impulsively started circular cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 158:399–446, 1985.
- [35] S. Daubner, P. W. Hoffrogge, M. Minar, and B. Nestler. Triple junction benchmark for multiphase-field and multi-order parameter models. *Computational Materials Science*, 219:111995, 2023.
- [36] S. Daubner, M. Reder, N. Prajapati, D. Schneider, and B. Nestler. Multiphase-field modelling of anisotropic elasticity at finite deformation in eulerian space. *Journal of Computational Science*, 66:101930, 2023.
- [37] H. Ding, P. D. Spelt, and C. Shu. Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios. *Journal of Computational Physics*, 226(2):2078–2095, 2007.
- [38] S. Dong, D. Liu, M. R. Maxey, and G. E. Karniadakis. Spectral distributed lagrange multiplier method: algorithm and benchmark tests. *Journal of Computational Physics*, 195(2):695–717, 2004.
- [39] T. Dunne. An eulerian approach to fluid-structure interaction and goal-oriented mesh adaptation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51:1017–1039, 2006.
- [40] T. Dunne and R. Rannacher. Adaptive finite element approximation of fluid-structure interaction based on an eulerian variational formulation. In *Fluid-structure interaction*, pages 110–145. Springer, 2006.
- [41] C. Eck, H. Garcke, and P. Knabner. *Mathematische Modellierung*, volume 2. Springer, 2008.
- [42] A. E. Ekpenyong, G. Whyte, K. Chalut, S. Pagliara, F. Lautenschläger, C. Fiddler, S. Paschke, U. F. Keyser, E. R. Chilvers, and J. Guck. Viscoelastic properties of differentiating blood cells are fate-and function-dependent. *PloS one*, 7(9):e45237, 2012.

- [43] H. Emmerich. Advances of and by phase-field modelling in condensed-matter physics. *Advances in Physics*, 57(1):1–87, 2008.
- [44] E. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, and J. Mohd-Yusof. Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *Journal of Computational Physics*, 161(1):35–60, 2000.
- [45] L. Fan, M. Reder, D. Schneider, M. Hinterstein, and B. Nestler. A phase-field model for ferroelectric materials—based on the multiphase-field method. *Computational Materials Science*, 230:112510, 2023.
- [46] J. Feng, H. H. Hu, and D. D. Joseph. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a newtonian fluid part 1. sedimentation. *Journal of Fluid Mechanics*, 261:95–134, 1994.
- [47] J. H. Ferziger and M. Peric. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag, 2008.
- [48] R. Folch, J. Casademunt, A. Hernández-Machado, and L. Ramirez-Piscina. Phase-field model for hele-shaw flows with arbitrary viscosity contrast. i. theoretical approach. *Physical Review E*, 60(2):1724, 1999.
- [49] R. Fosdick and G. Royer-Carfagni. Hadamard’s conditions of compatibility from cesaro’s line-integral representation. *International Journal of Engineering Science*, 146:103174, 2020.
- [50] K. O. Friedrichs. Symmetric hyperbolic linear differential equations. *Communications on pure and applied Mathematics*, 7(2):345–392, 1954.
- [51] J. E. Fromm. A method for reducing dispersion in convective difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 3(2):176–189, 1968.
- [52] C. G. Gal and T. T. Medjo. On a regularized family of models for homogeneous incompressible two-phase flows. *Journal of Nonlinear Science*, 24(6):1033–1103, 2014.
- [53] S. Gallier, E. Lemaire, L. Lobry, and F. Peters. A fictitious domain approach for the simulation of dense suspensions. *Journal of Computational Physics*, 256:367–387, 2014.
- [54] R. Glowinski, T.-W. Pan, T. I. Hesla, and D. D. Joseph. A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(5):755–794, 1999.
- [55] R. Glowinski, T.-W. Pan, T. I. Hesla, D. D. Joseph, and J. Periaux. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: application to particulate flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):363–426, 2001.
- [56] C. Günther. *Fortgeschrittene Upwind-Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung*. PhD thesis, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1992.
- [57] Z. Guo, F. Yu, P. Lin, S. Wise, and J. Lowengrub. A diffuse domain method for two-phase flows with large density ratio in complex geometries. *Journal of Fluid Mechanics*, 907:A38, 2021.

- [58] M. E. Gurtin and B. D. Reddy. Some issues associated with the intermediate space in single-crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95:230–238, 2016.
- [59] S. G. Hahn. Stability criteria for difference schemes. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 11(2):243–255, 1958.
- [60] A. Harten. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(1):1–23, 1984.
- [61] R. D. Henderson. Details of the drag curve near the onset of vortex shedding. *Physics of Fluids*, 7(9):2102–2104, 1995.
- [62] A. Hindmarsh, P. Gresho, and D. Griffiths. The stability of explicit euler time-integration for certain finite difference approximations of the multi-dimensional advection–diffusion equation. *International journal for numerical methods in fluids*, 4(9):853–897, 1984.
- [63] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [64] P. Hoffrogge, A. Mukherjee, E. Nani, P. K. Amos, F. Wang, D. Schneider, and B. Nestler. Multiphase-field model for surface diffusion and attachment kinetics in the grand-potential framework. *Physical Review E*, 103(3):033307, 2021.
- [65] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 49(3):435, 1977.
- [66] G. A. Holzapfel and N.-I. S. Mechanics. *Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering*. John Wiley and Sons, Chichester, UK, 2000.
- [67] K. D. Housiadas and G. C. Georgiou. New analytical solutions for weakly compressible newtonian poiseuille flows with pressure-dependent viscosity. *International Journal of Engineering Science*, 107:13–27, 2016.
- [68] H. H. Hu, D. D. Joseph, and M. J. Crochet. Direct simulation of fluid particle motions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 3(5):285–306, 1992.
- [69] H. H. Hu, N. A. Patankar, and M. Zhu. Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary lagrangian–eulerian technique. *Journal of Computational Physics*, 169(2):427–462, 2001.
- [70] T. J. Hughes, W. K. Liu, and T. K. Zimmermann. Lagrangian-eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 29(3):329–349, 1981.
- [71] M. Šilhavý. *The mechanics and thermodynamics of continuous media*. Texts and monographs in physics. Springer, Berlin, 1997.
- [72] S. Itō. *Study of the Transient Heave Oscillation of a Floating Cylinder*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1971.
- [73] E. Izard, T. Bonometti, and L. Lacaze. Simulation of an avalanche in a fluid with a soft-sphere/immersed boundary method including a lubrication force. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 6(4):391–405, 2014.

- [74] D. Jacqmin. An energy approach to the continuum surface tension method. In *34th Aerospace sciences meeting and exhibit*, page 858. AIAA, 1996.
- [75] D. Jacqmin. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155(1):96–127, 1999.
- [76] H. Jasak, H. Weller, and A. Gosman. High resolution nvd differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. *International journal for numerical methods in fluids*, 31(2):431–449, 1999.
- [77] J. Jeong and F. Hussain. On the identification of a vortex. *Journal of fluid mechanics*, 285:69–94, 1995.
- [78] A. A. Johnson and T. E. Tezduyar. Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 134(3-4):351–373, 1996.
- [79] A. A. Johnson and T. E. Tezduyar. 3d simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 145(3-4):301–321, 1997.
- [80] V. Joshi and R. K. Jaiman. A positivity preserving and conservative variational scheme for phase-field modeling of two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 360:137–166, 2018.
- [81] V. Joshi and R. K. Jaiman. A hybrid variational allen-cahn/ale scheme for the coupled analysis of two-phase fluid-structure interaction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 117(4):405–429, 2019.
- [82] T. Kajishima and K. Taira. *Computational fluid dynamics: incompressible turbulent flows*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2016.
- [83] T. Kajishima, S. Takiguchi, H. Hamasaki, and Y. Miyake. Turbulence structure of particle-laden flow in a vertical plane channel due to vortex shedding. *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, 44(4):526–535, 2001.
- [84] T. Kajishima, S. Takiguchi, and Y. Miyake. Modulation and subgrid scale modeling of gas-particle turbulent flow. In *Recent Advances in DNS and LES*, pages 235–244. Springer, Dordrecht, 1999.
- [85] N. Kambouchev, J. Fernandez, and R. Radovitzky. A polyconvex model for materials with cubic symmetry. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(5):451, 2007.
- [86] K. Kamrin, C. H. Rycroft, and J.-C. Nave. Reference map technique for finite-strain elasticity and fluid–solid interaction. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 60(11):1952–1969, 2012.
- [87] T. Karl and T. Böhlke. Unified mean-field modeling of viscous short-fiber suspensions and solid short-fiber reinforced composites. *Archive of Applied Mechanics*, 92(12):3695–3727, 2022.
- [88] K. E. Kasza, A. C. Rowat, J. Liu, T. E. Angelini, C. P. Brangwynne, G. H. Koenderink, and D. A. Weitz. The cell as a material. *Current opinion in cell biology*, 19(1):101–107, 2007.

- [89] F. Kemm. A comparative study of tvd-limiters – well-known limiters and an introduction of new ones. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 67(4):404–440, 2011.
- [90] J. Kim. A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models. *Journal of Computational Physics*, 204(2):784–804, 2005.
- [91] J. Kim. Phase-field models for multi-component fluid flows. *Communications in Computational Physics*, 12(3):613–661, 2012.
- [92] J. Kim, S. Lee, and Y. Choi. A conservative allen–cahn equation with a space–time dependent lagrange multiplier. *International Journal of Engineering Science*, 84:11–17, 2014.
- [93] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, and E. M. Viggien. *The Lattice Boltzmann method : principles and practice*. Graduate texts in physics. Springer International Publishing, Berlin, Heidelberg, 2017.
- [94] U. Küttler and W. A. Wall. Fixed-point fluid–structure interaction solvers with dynamic relaxation. *Computational Mechanics*, 43(1):61–72, 2008.
- [95] B. Lalanne, L. R. Villegas, S. Tanguy, and F. Risso. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with level set/ghost fluid method. *Journal of Computational Physics*, 301:289–307, 2015.
- [96] P. Lax and B. Wendroff. Systems of conservation laws commun. *Pure Appl. Math*, 13:217–37, 1960.
- [97] P. D. Lax and R. D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Communications on pure and applied mathematics*, 9(2):267–293, 1956.
- [98] D.-G. Lee and H.-Y. Kim. Impact of a superhydrophobic sphere onto water. *Langmuir*, 24(1):142–145, 2008.
- [99] H. G. Lee. High-order and mass conservative methods for the conservative allen–cahn equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 72(3):620–631, 2016.
- [100] B. P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 19(1):59–98, 1979.
- [101] H.-L. Li, H.-R. Liu, and H. Ding. A fully 3d simulation of fluid-structure interaction with dynamic wetting and contact angle hysteresis. *Journal of Computational Physics*, 420:109709, 2020.
- [102] X. Li, J. Lowengrub, A. Rätz, and A. Voigt. Solving pdes in complex geometries: a diffuse domain approach. *Communications in mathematical sciences*, 7(1):81–107, 2009.
- [103] C. Liu and J. Shen. A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a fourier-spectral method. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 179(3-4):211–228, 2003.

- [104] C. Liu and N. J. Walkington. An eulerian description of fluids containing visco-elastic particles. *Archive for rational mechanics and analysis*, 159(3):229–252, 2001.
- [105] J. Lowengrub and L. Truskinovsky. Quasi-incompressible cahn-hilliard fluids and topological transitions. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 454(1978):2617–2654, 1998.
- [106] A. Malvandi, A. Ghasemi, R. Nikbakhti, A. Ghasemi, and F. Hedayati. Modeling and parallel computation of the non-linear interaction of rigid bodies with incompressible multi-phase flow. *Computers & Mathematics with Applications*, 72(4):1055–1065, 2016.
- [107] J. E. Marsden and T. J. Hughes. *Mathematical foundations of elasticity*. Dover publications, Inc., New York, NY, unabridged, corrected republication of the edition published by prentice-hall, englewood cliffs, 1983 edition, 1994.
- [108] S. Maskell and F. Ursell. The transient motion of a floating body. *Journal of Fluid Mechanics*, 44(2):303–313, 1970.
- [109] B. Maury. A many-body lubrication model. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, 325(9):1053–1058, 1997.
- [110] M. Maxey. Simulation methods for particulate flows and concentrated suspensions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 49:171–193, 2017.
- [111] F. Menter. Cfd best practice guidelines for cfd code validation for reactor safety applications, 2002. EC Project ECORA, Report EVOL-ECORA-D01.
- [112] S. Mittal and B. Kumar. Flow past a rotating cylinder. *Journal of fluid mechanics*, 476:303–334, 2003.
- [113] D. Mokbel, H. Abels, and S. Aland. A phase-field model for fluid–structure interaction. *Journal of Computational Physics*, 372:823–840, 2018.
- [114] M. Mokbel, D. Mokbel, A. Mietke, N. Traber, S. Girardo, O. Otto, J. Guck, and S. Aland. Numerical simulation of real-time deformability cytometry to extract cell mechanical properties. *ACS Biomaterials Science & Engineering*, 3(11):2962–2973, 2017.
- [115] B. Nestler, H. Garcke, and B. Stinner. Multicomponent alloy solidification: phase-field modeling and simulations. *Physical Review E*, 71(4):041609, 2005.
- [116] B. Nestler, F. Wendler, M. Selzer, B. Stinner, and H. Garcke. Phase-field model for multiphase systems with preserved volume fractions. *Physical Review E*, 78(1):011604, 2008.
- [117] M. Nicoli, M. Plapp, and H. Henry. Tensorial mobilities for accurate solution of transport problems in models with diffuse interfaces. *Physical Review E*, 84(4):046707, 2011.
- [118] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1):12–49, 1988.

- [119] T.-W. Pan, R. Glowinski, and G. P. Galdi. Direct simulation of the motion of a settling ellipsoid in newtonian fluid. *Journal of computational and applied mathematics*, 149(1):71–82, 2002.
- [120] T.-W. Pan, D. Joseph, R. Bai, R. Glowinski, and V. Sarin. Fluidization of 1204 spheres: simulation and experiment. *Journal of Fluid Mechanics*, 451:169–191, 2002.
- [121] N. Patankar. A formulation for fast computations of rigid particulate flows. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, 2001:185–196, 2001.
- [122] N. A. Patankar, P. Singh, D. D. Joseph, R. Glowinski, and T.-W. Pan. A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(9):1509–1524, 2000.
- [123] C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves: a numerical method. *Journal of computational physics*, 10(2):252–271, 1972.
- [124] B. J. Plohr and D. H. Sharp. A conservative eulerian formulation of the equations for elastic flow. *Advances in Applied Mathematics*, 9(4):481–499, 1988.
- [125] A. Prahs, M. Reder, D. Schneider, and B. Nestler. Thermomechanically coupled theory in the context of the multiphase-field method. *International Journal of Mechanical Sciences*, 257:108484, 2023.
- [126] M. Reder, P. W. Hoffrogge, D. Schneider, and B. Nestler. A phase-field based model for coupling two-phase flow with the motion of immersed rigid bodies. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 123(16):3757–3780, 2022.
- [127] M. Reder, J. Holland-Cunz, P. Lorson, A. August, and B. Nestler. Simulative determination of effective mechanical properties for digitally generated foam geometries. *Advanced Engineering Materials*, 25(19):2300340, 2023.
- [128] M. Reder, A. Prahs, D. Schneider, and B. Nestler. Viscous stress approximations in diffuse interface methods for two-phase flow based on mechanical jump conditions. 2023. In submission. Preprint available at SSRN: <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4523250>.
- [129] M. Reder, D. Schneider, F. Wang, S. Daubner, and B. Nestler. Phase-field formulation of a fictitious domain method for particulate flows interacting with complex and evolving geometries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 93(8):2486–2507, 2021.
- [130] A. Reuss. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1):49–58, 1929.
- [131] L. Richardson. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 210:307–357, 1911.

- [132] L. Richardson and J. Gaunt. The deferred approach to the limit. part i. single lattice. part ii. interpenetrating lattices. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, pages 299–361, 1927.
- [133] P. Roache. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, 116(3):405–413, 1994.
- [134] R. Rojas, T. Seta, K. Hayashi, and A. Tomiyama. Immersed boundary-finite difference lattice boltzmann method for liquid-solid two-phase flows. *Journal of Fluid Science and Technology*, 6(6):1051–1064, 2011.
- [135] R. Rojas, T. Takaki, and M. Ohno. A phase-field-lattice boltzmann method for modeling motion and growth of a dendrite for binary alloy solidification in the presence of melt convection. *Journal of Computational Physics*, 298:29–40, 2015.
- [136] J. Rubinstein and P. Sternberg. Nonlocal reaction—diffusion equations and nucleation. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 48(3):249–264, 1992.
- [137] L. Schiller and A. Naumann. Fundamental calculations in gravitational processing. *Zeitschrift Des Vereines Deutscher Ingenieure*, 77:318–320, 1933.
- [138] L. Schöller, D. Schneider, C. Herrmann, A. Prahs, and B. Nestler. Phase-field modeling of crack propagation in heterogeneous materials with multiple crack order parameters. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 395:114965, 2022.
- [139] D. Schneider, E. Schoof, O. Tschukin, A. Reiter, C. Herrmann, F. Schwab, M. Selzer, and B. Nestler. Small strain multiphase-field model accounting for configurational forces and mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 61(3):277–295, 2018.
- [140] D. Schneider, F. Schwab, E. Schoof, A. Reiter, C. Herrmann, M. Selzer, T. Böhlke, and B. Nestler. On the stress calculation within phase-field approaches: a model for finite deformations. *Computational Mechanics*, 60(2):203–217, 2017.
- [141] D. Schneider, O. Tschukin, A. Choudhury, M. Selzer, T. Böhlke, and B. Nestler. Phase-field elasticity model based on mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 55:887–901, 2015.
- [142] E. Schoof, D. Schneider, N. Streichhan, T. Mittnacht, M. Selzer, and B. Nestler. Multiphase-field modeling of martensitic phase transformation in a dual-phase microstructure. *International Journal of Solids and Structures*, 134:181–194, 2018.
- [143] H. Schwarz and N. Köckler. *Numerische Mathematik*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 8., aktualisierte auflage edition, 2011.
- [144] J. A. Sethian. *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, volume 3. Cambridge university press, 1999.

- [145] N. Sharma and N. A. Patankar. A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 205(2):439–457, 2005.
- [146] J. C. Slattery, E.-S. Oh, and K. Fu. Extension of continuum mechanics to the nanoscale. *Chemical engineering science*, 59(21):4621–4635, 2004.
- [147] J. C. Slattery, L. Sagis, and E.-S. Oh. *Interfacial Transport Phenomena*. Springer Science & Business Media, New York, 2 edition, 2007.
- [148] C. C. S. Song and M. Yuan. A Weakly Compressible Flow Model and Rapid Convergence Methods. *Journal of Fluids Engineering*, 110(4):441–445, 12 1988.
- [149] J. Spurk and N. Aksel. *Strömungslehre : Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [150] I. Steinbach. Phase-field models in materials science. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 17(7):073001, 2009.
- [151] I. Steinbach and F. Pezzolla. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 134(4):385–393, 1999.
- [152] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G. J. Schmitz, and J. L. Rezende. A phase field concept for multiphase systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 94(3):135–147, 1996.
- [153] K. Sugiyama, S. Ii, S. Takeuchi, S. Takagi, and Y. Matsumoto. Full eulerian simulations of biconcave neo-hookean particles in a poiseuille flow. *Computational Mechanics*, 46(1):147–157, 2010.
- [154] K. Sugiyama, S. Ii, S. Takeuchi, S. Takagi, and Y. Matsumoto. A full eulerian finite difference approach for solving fluid–structure coupling problems. *Journal of Computational Physics*, 230(3):596–627, 2011.
- [155] P. Sun, J. Xu, and L. Zhang. Full eulerian finite element method of a phase field model for fluid–structure interaction problem. *Computers & Fluids*, 90:1–8, 2014.
- [156] Y. Sun and C. Beckermann. Diffuse interface modeling of two-phase flows based on averaging: mass and momentum equations. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 198(3-4):281–308, 2004.
- [157] Y. Sun and C. Beckermann. Sharp interface tracking using the phase-field equation. *Journal of Computational Physics*, 220(2):626–653, 2007.
- [158] P. K. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM journal on numerical analysis*, 21(5):995–1011, 1984.
- [159] T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno, and Y. Shibuta. Phase-field lattice boltzmann simulations of multiple dendrite growth with motion, collision, and coalescence and subsequent grain growth. *Computational Materials Science*, 147:124–131, 2018.
- [160] A. Ten Cate, C. Nieuwstad, J. Derksen, and H. van den Akker. Particle imaging velocimetry experiments and lattice-boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity. *Physics of Fluids*, 14(11):4012–4025, 2002.

- [161] V. Thomée. Stability theory for partial difference operators. *Siam Review*, 11(2):152–195, 1969.
- [162] J. A. Trangenstein and P. Colella. A Higher-Order Godunov Approach for Modeling Finite Deformation in Elastic-Plastic Solids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 44(1):41–100, 1991.
- [163] C. Truesdell and R. Toupin. The classical field theories. In S. Flügge, editor, *Encyclopedia of Physics*, pages 226–793, Berlin, 1960. Springer.
- [164] M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209(2):448–476, 2005.
- [165] H. Uzawa. Iterative methods for concave programming. *Studies in linear and nonlinear programming*, 6:154–165, 1958.
- [166] B. Valkov, C. H. Rycroft, and K. Kamrin. Eulerian method for multiphase interactions of soft solid bodies in fluids. *Journal of Applied Mechanics*, 82(4):041011, 2015.
- [167] B. van Albada, Gand van Leer and W. Roberts. comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics. *Astronomy and Astrophysics*, 108(1):76–84, 1982.
- [168] J. D. van der Waals. The thermodynamic theory of capillarity flow under the hypothesis of a continuous variation of density. *Verhandel/Konink. Akad. Wetten*, 1(8), 1893. Englische Übersetzung: *Journal of Statistical Physics*, 20, 1979.
- [169] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics*, 14(4):361–370, 1974.
- [170] C. Veeramani, P. D. Mineev, and K. Nandakumar. A fictitious domain formulation for flows with rigid particles: A non-lagrange multiplier version. *Journal of Computational Physics*, 224(2):867–879, 2007.
- [171] W. Voigt. Über die beziehung zwischen den beiden elasticitätsconstanten isotroper körper. *Annalen der Physik*, 274(12):573–587, 1889.
- [172] L. Wallat, P. Altschuh, M. Reder, B. Nestler, and F. Poehler. Computational design and characterisation of gyroid structures with different gradient functions for porosity adjustment. *Materials*, 15(10):3730, 2022.
- [173] L. Wallat, M. Reder, M. Selzer, F. Poehler, and B. Nestler. Shape optimization of porous structures by phase-field modelling with strain energy. *Materials Today Communications*, 37:107018, 2023.
- [174] D. Wan and S. Turek. Fictitious boundary and moving mesh methods for the numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 222(1):28–56, 2007.
- [175] N. P. Waterson and H. Deconinck. Design principles for bounded higher-order convection schemes—a unified approach. *Journal of Computational Physics*, 224(1):182–207, 2007.

- [176] X. Yang, J. J. Feng, C. Liu, and J. Shen. Numerical simulations of jet pinching-off and drop formation using an energetic variational phase-field method. *Journal of Computational Physics*, 218(1):417–428, 2006.
- [177] Z. Yu and X. Shao. A direct-forcing fictitious domain method for particulate flows. *Journal of computational physics*, 227(1):292–314, 2007.
- [178] Y. Yuki, S. Takeuchi, and T. Kajishima. Efficient immersed boundary method for strong interaction problem of arbitrary shape object with the self-induced flow. *Journal of Fluid Science and Technology*, 2(1):1–11, 2007.
- [179] R. Zanella, G. Tegze, R. Le Tellier, and H. Henry. Two-and three-dimensional simulations of rayleigh–taylor instabilities using a coupled cahn–hilliard/navier–stokes model. *Physics of Fluids*, 32(12):124115, 2020.
- [180] H.-Q. Zhang, U. Fey, B. R. Noack, M. König, and H. Eckelmann. On the transition of the cylinder wake. *Physics of Fluids*, 7(4):779–794, 1995.