

**Dreidimensionale numerische Simulation der
Dynamik von aufsteigenden Einzelblasen und
Blasenschwärmen mit einer
Volume-of-Fluid-Methode**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Phys. Winfried Sabisch

aus

Hiltrup

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Mai 2000
Hauptreferent: Prof. Dr. rer.nat. Dr. h.c. D.G. Cacuci
Korreferent: Prof. Dr. rer.nat. C. Günther

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als Doktorand am Institut für Reaktorsicherheit des Forschungszentrums Karlsruhe.

Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. D.G. Cacuci danke ich für die Möglichkeit, diese Arbeit an seinem Institut anzufertigen und für die stets anregenden Diskussionen. Seine Vorschläge haben der Arbeit wichtige Impulse gegeben.

Herrn Prof. Dr. C. Günther danke ich sehr für die Übernahme des Korreferats und die fruchtbaren Gespräche zu numerischen Problemen. Besonders möchte ich mich für die sorgfältige Durchsicht der Arbeit bedanken.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. M. Wörner. Seine ständige Diskussionsbereitschaft war eine sehr große Hilfe. Er hat mich überaus vorbildlich betreut und mich in die Denkweise eines 'Ingenieurs' eingeführt.

Herrn Dr. G. Grötzbach danke ich für die fachlichen Denkanstöße und die vielfältige Unterstützung meiner Arbeit. Seine Ideen und Vorschläge haben sehr zum Gelingen beigetragen.

Am Institut für Reaktorsicherheit habe ich die stets offene und unkomplizierte Atmosphäre sehr genossen.

Danken möchte ich Frau T. Dunker und Herrn A. Müller, die im Rahmen ihrer Ausbildung zum Mathematisch-technischen Assistenten Entwicklungen zum Analysemodul von TURBIT-VoF beigesteuert haben.

Abschließend möchte ich meiner Freundin Iris für die liebevolle Unterstützung danken.

Karlsruhe, im Mai 2000

Winfried Sabisch

Zusammenfassung

Zur numerischen Beschreibung von Strömungen mit Phasengrenzflächen wurde eine dreidimensionale, effiziente und genaue Methode entwickelt, deren mathematisches und numerisches Konzept im Rechenprogramm TURBIT-VoF realisiert wurde. Die neue Methode verwendet entsprechend der Volume-of-Fluid-Methode für die Volumenfraktion der flüssigen Phase eine zusätzliche Transportgleichung zur zeitabhängigen Beschreibung der Phasenverteilung. Zur numerischen Lösung der Volumenfraktionsgleichung wurde ein neuer dreidimensionaler Algorithmus entwickelt (EPIRA), der es ermöglicht, ebene Phasengrenzflächen exakt zu beschreiben. Die physikalischen Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls bei inkompressiblen Phasen werden mittels eines Projektionsverfahrens gelöst, wobei für die konvektiven Terme ein hochauflösendes W-ENO-Verfahren und für die Zeitintegration ein TVD-Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung verwendet wird. Die Wahl der numerischen Verfahren gewährleistet, daß die Simulation von turbulenten Strömungen mit dieser neuen Methode möglich ist. In Maschen, in denen beide Phasen vorliegen, ergeben sich in der Gleichung der Impulserhaltung Schließungsterme, die von der lokalen, momentanen Phasenrelativgeschwindigkeit abhängig sind. Erstmals in der Literatur werden diese Terme betrachtet; ein einfaches Modell zur Schließung wird vorgestellt.

Zur Verifizierung von TURBIT-VoF wurden verschiedene physikalische Phasengrenzflächenprobleme nachgerechnet. Dies sind die durch viskose Reibungskräfte gedämpften Kapillarwellen und Schwerewellen sowie die Rayleigh-Taylor-Instabilität. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen wurden entweder mit analytischen Lösungen oder mit Werten aus der Literatur verglichen, wobei sehr gute Übereinstimmungen erzielt wurden.

Mit dem neuen numerischen Verfahren wurden aufsteigende Blasen mit unterschiedlichen Stoffwertekombinationen von Blase und umgebendem Fluid in einem vertikalen Plattenkanal berechnet. Die sich in den Simulationen einstellenden formstabilen Blasenformen waren kugel-, ellipsen- und kappenförmig. Dabei zeigen die anhand der dimensionslosen Kennzahlen klassifizierten Blasen das experimentell zu erwartende Verhalten bezüglich Blasenform, Aufstiegsgeschwindigkeit und Nachlauf. Durch Anwendung des numerischen Verfahrens im Kennzahlbereich des Systems 'Luftblasen in Wasser' wurden erstmals in der Literatur forminstabile, oszillierende Blasen mit stark zeitabhängiger Dynamik der Phasengrenzfläche berechnet. Die Aufstiegsbahn war annähernd eine Spiralbahn und der Nachlauf turbulent. Die Einsetzbarkeit des numerischen Verfahrens für Blasenschwärme wurde mit der Simulation von fünf aufsteigenden ellipsenförmigen Blasen demonstriert. Selbst in dieser einfachen Blasenordnung lassen sich von Blasenströmungen her bekannte Phänomene, wie z.B. die durch die 'Lift'-Kraft hervorgerufene Wanderung der Blasen zu den Wänden, in der numerischen Simulation beobachten.

Three-dimensional numerical simulation of rising single bubbles and swarms of bubbles with a volume-of-fluid method

Abstract

A new three-dimensional, efficient, and accurate method is developed for the numerical simulation of flows with interfaces. The mathematical and numerical concept is realized in the code TURBIT-VoF. The new method is based on the volume-of-fluid method in which an additional transport equation is solved for the temporal evolution of the volume fraction of the liquid phase. A new three-dimensional algorithm (EPIRA) is developed to solve the volume fraction equation. It allows for an exact representation of plane interfaces. A fractional step approach is applied to solve the physical conservation equations for mass and momentum with incompressible phases. Convective terms are discretized by a W-ENO scheme and a TVD-Runge-Kutta scheme of third order is used for time integration. The numerical schemes ensure that the new method can be applied to numerical simulations of turbulent flows. Closure terms have to be taken into account in cells containing both phases. These terms are dependent on the local, instantaneous relative velocity between the phases and have been taken into account for the first time. A first model for the closure is proposed.

Several prototypical interfacial problems are simulated to verify TURBIT-VoF. These are viscously damped capillary and gravity waves and the Rayleigh-Taylor instability. Results of the numerical simulations are compared against either analytical solutions or data from literature; a very good agreement is obtained.

Rising bubbles of different material properties are simulated with the new numerical method in a vertical channel. Spherical, ellipsoidal, and cap shapes of the bubbles develop in the simulations. The bubbles are classified by dimensionless numbers. They show the experimentally expected behavior concerning shape, terminal rise velocity and wake characteristics. For the first time oscillating bubbles with rapid changes of the interface geometry are simulated with dimensionless numbers in the range of the system 'air bubbles in water'. The rising path is roughly a spiral and the wake is turbulent. The general applicability of the new method is demonstrated by the simulation of five ellipsoidal bubbles rising in a channel. For this simple arrangement of the bubbles phenomena are observed which are known from bubbly flow, e.g. the movement of the bubbles towards the walls caused by the lift force.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	i
Abbildungsverzeichnis	iv
Tabellenverzeichnis	viii
Nomenklatur	ix
1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung	1
1.2 Literaturübersicht zu Untersuchungen an Einzelblasen	3
1.2.1 Kennzahlen	3
1.2.2 Experimentelle Arbeiten	4
1.2.3 Numerische Arbeiten	8
1.3 Zielsetzung und Vorgehensweise	15
2 Mathematische Beschreibung	17
2.1 Physikalische Grundgleichungen der Zweiphasenströmung	17
2.1.1 Erhaltungsgleichungen einer Phase	18
2.1.2 Räumliche Mittelung	19
2.1.3 Mittel- und Schwankungswert	22
2.1.4 Gleichungen für das Zweiphasengemisch	24
2.1.5 Gleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase	27
2.1.6 Zusammenfassung des Gleichungssystems	27
2.2 Vereinfachungen des Gleichungssystems	28
2.2.1 Erste Vereinfachungen des Gleichungssystems	28
2.2.2 Dimensionsloses Gleichungssystem	31
2.2.3 Inkompressible Einzelphasen	33
2.3 Schließungsterme	34
2.3.1 'Drift'-Term in Volumenfraktionsgleichung	34
2.3.2 Zwischenphasenreibung	35
2.3.3 'Drift'-Term in Navier-Stokes-Gleichung	36
2.3.4 Modellierung der Phasenrelativgeschwindigkeit	36

3	Numerische Verfahren	39
3.1	VoF Methode / EPIRA	39
3.1.1	Gitter	41
3.1.2	Dreidimensionale Rekonstruktion	41
3.1.3	Advektion	47
3.1.4	Testrechnungen	48
3.2	Oberflächenspannung	52
3.3	Konvektive Terme	53
3.3.1	ENO	54
3.3.2	Weighted-ENO	56
3.4	Zeitintegration	58
3.4.1	TVD-Runge-Kutta-Verfahren	58
3.4.2	Zeitschrittweitenkriterien	59
3.5	Lösungsstrategie	60
3.5.1	Projektionsmethode	60
3.5.2	Berechnungsablauf für einen Zeitschritt	62
4	Implementierung in TURBIT	65
4.1	Bisherige Version von TURBIT	65
4.2	TURBIT-VoF	66
5	Verifikation	71
5.1	Strömungen einer Phase	71
5.1.1	Strömung im Kanal mit bewegten Wänden	71
5.1.2	Taylor-Green-Wirbel	72
5.2	Strömungen zweier Phasen	76
5.2.1	Gleiche Dichte	77
5.2.2	Unterschiedliche Dichte	86
6	Anwendungsrechnungen	97
6.1	Übersicht über Simulationen von Blasen	97
6.2	Blase mit $E_{O_{Bl}} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$	99
6.2.1	Gitterstudie	104
6.2.2	Korrelation zum Halbachsenverhältnis	105
6.2.3	Studie zum Dichteverhältnis	106
6.3	Fall 1BLb: $E_{O_{Bl}} = 243$ und $\log M_{Bl} = 2,42$	108
6.4	Fall 1BLc: $E_{O_{Bl}} = 0,20$ und $\log M_{Bl} = -10,60$	108
6.5	Fall 1BLd: $E_{O_{Bl}} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$	113
6.6	Fünf aufsteigende Blasen	120
7	Schlußfolgerungen und Ausblick	125
	Literaturverzeichnis	127
A	Bestimmung der Referenz-Kennzahlen	135

B Die Methode FLAIR	137
B.1 Grundidee	137
B.2 Der Algorithmus	137
B.2.1 Neun mögliche Fluidkonfigurationen: Fall 9	138
B.2.2 Neun mögliche Fluidkonfigurationen: Die restlichen acht Fälle	145
C Dividierte Differenzen	149
D W-ENO auf nicht-äquidistantem Gitter	151
D.1 Herleitung der Gewichtungsfaktoren für das W-ENO-Verfahren	152
D.2 Spezialfälle	155

Abbildungsverzeichnis

1.1	Strömungsformen im senkrechten Verdampferrohr, nach Wallis [97]	2
1.2	Diagramm aus Clift et al. ([21]) zur Abhängigkeit der Kennzahlen Reynolds, Eötvös und Morton für aufsteigende Einzelblasen	5
1.3	Aufstiegsgeschwindigkeit u_∞ von Luftblasen in Wasser über dem äquivalenten Blasenradius R_b , aus Müller [61]	7
1.4	Blase mit mitbewegtem Gitter, aus Unverdi und Tryggvason [94]	9
1.5	Vergleich zwischen stückweise konstanter (links, SLIC) und stückweise linearer (rechts, PLIC) Rekonstruktion einer Phasengrenze in einem Rechengitter	14
2.1	Kontrollvolumen V mit Ortsvektor \vec{x} zum Zeitpunkt t	19
2.2	Blase in einem Ausschnitt des Rechengebietes, nur in schraffierten Zellen sind beide Phasen gleichzeitig vorhanden	25
2.3	Faktor $C(f)$: Maximaler f -Wert über Dichteverhältnis Φ_ρ	35
2.4	Skizze zur Modellbildung für die Phasenrelativgeschwindigkeit	37
3.1	Zellen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$ mit Ebene $h(\varsigma, \eta)$; das Fluid ist unterhalb von $h(\varsigma, \eta)$; hier ist das lokale Koordinatensystem (ς, η, ξ) entsprechend dem globalen System (x, y, z) ausgerichtet	42
3.2	Beispiel: (links) die Phasengrenzfläche schneidet die oberen Seitenflächen der Maschen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$; (rechts) durch Erweiterung mittels der über den Maschen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$ liegenden Maschen kann der Gradient an der Seite Ost der Masche (i, j, k) exakt berechnet werden	43
3.3	Vier Fälle des zweidimensionalen FLAIR-Algorithmus [3]	44
3.4	Masche mit Phasengrenzfläche und vier normierten Tangentenvektoren \vec{t}_O , \vec{t}_W , \vec{t}_H und \vec{t}_V	45
3.5	Bestimmung des Punktes in der Ebene: a) und b) Skizzen zur Verdeutlichung der ersten zwei Iterationsschritte mit $b_x^{(0)}$ und $b_x^{(1)}$; c) f -Werte in Abhängigkeit des Punktes in der Ebene	46
3.6	Innerhalb Δt wird das dunkel schattierte Volumen über die Seite O(st) advektiert	47
3.7	Berechnung des Volumens δV , der Bereich der Integration ist schraffiert eingezeichnet	48

3.8	Verteilung der f -Werte zum Zeitpunkt $t = 0$ (jeweils oben links, Legende links), $t = 1, 6$ (jeweils unten links, Legende links) und Differenz beider Verteilungen (jeweils oben rechts, Legende rechts) für verschiedene Auflösungen des Tropfens im Gitter; links: 8 Maschen pro Durchmesser, rechts: 16 Maschen	51
3.9	Berechnungsablauf für einen Zeitschritt	63
4.1	Geometrie in TURBIT	66
4.2	Mittelwert vom Feld der Volumenfraktionen $f_{i,j,k}$	68
5.1	Strömung im Kanal mit bewegten Rändern: Profil der mittleren Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung (x -Richtung)	72
5.2	Strömung im Kanal mit bewegten Rändern: Lokales Profil in z -Richtung der Geschwindigkeitskomponente in y -Richtung an $x = 0,05$ und $y = 0,45$	73
5.3	Taylor-Green-Wirbel: Geschwindigkeit senkrecht (maximale Geschwindigkeit: 0,0829) und in Strömungsrichtung (x -Richtung) zum Zeitpunkt $t = 0$, Gitter: $16 \times 32 \times 10$	73
5.4	Taylor-Green-Wirbel: rms-Werte über dem Kanalquerschnitt (URMS entspricht u_x^{rms} , VRMS u_y^{rms} und WRMS u_z^{rms}) und Ortsspektren der Geschwindigkeitskomponenten für den Wandabstand $z = 0,6$ zum Zeitpunkt $t = 0$, Gitter: $16 \times 32 \times 10$	75
5.5	Taylor-Green-Wirbel: rms-Werte der Geschwindigkeitskomponenten über dem Kanalquerschnitt zum Zeitpunkt $t = 0,12$ (ursprüngliche TURBIT-Version links, TURBIT-VoF rechts), Gitter: $16 \times 32 \times 10$	75
5.6	Taylor-Green-Wirbel: Ortsspektren für den Wandabstand $z = 0,6$ der Geschwindigkeitskomponenten zum Zeitpunkt $t = 0,12$ (ursprüngliche TURBIT-Version links, TURBIT-VoF rechts), Gitter: $16 \times 32 \times 10$	76
5.7	Kapillarwellen: Ausgangsposition zum Zeitpunkt $t = 0$, links: Anfangsamplitude 10%, rechts: Anfangsamplitude 1%, jeweils auf den Wandabstand bezogen; Gitter: $4 \times 80 \times 80$	78
5.8	Kapillarwellen: Vergleich von analytischer und numerischer Lösung, Anfangsamplitude 10% bezogen auf den Wandabstand	79
5.9	Kapillarwellen: Vergleich von analytischer und numerischer Lösung, Anfangsamplitude 1% bezogen auf den Wandabstand	79
5.10	Artifizielle Strömungen an einer zylindrischen Phasengrenzfläche, maximale Geschwindigkeit: 0,154; Gitter: $80 \times 4 \times 80$	81
5.11	Artifizielle Strömungen: Maximaler Geschwindigkeitsbetrag über Anzahl der Zeitschritte für $\Delta p_{ref} = 0,1$ (oben) und $\Delta p_{ref} = 1$ (unten); Rechnungen für verschiedene Gitter und mit und ohne Berücksichtigung der Schließungsterme; Phasengrenzflächenkonzentration in beiden Fällen berücksichtigt	84

5.12	Artifizielle Strömungen: Maximaler Geschwindigkeitsbetrag über Anzahl der Zeitschritte für $\Delta p_{ref} = 10$ (oben, Phasengrenzflächenkonzentration berücksichtigt) und $We_{ref} = 0,4$ (unten, ohne Berücksichtigung der Phasengrenzflächenkonzentration); Rechnungen für verschiedene Gitter und mit und ohne Berücksichtigung der Schließungsterme	85
5.13	Anfangsbedingung für Schwerewelle und Rayleigh-Taylor-Instabilität	86
5.14	Schwerewelle: Vergleich der Amplitude der Schwingung von analytischer und numerischer Lösung	88
5.15	Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,01$, $t = 0,03$ und $t = 0,05$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$	89
5.16	Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,07$, $t = 0,09$ und $t = 0,11$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$	90
5.17	Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,13$ und $t = 0,15$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$	90
5.18	Rayleigh-Taylor-Instabilität für $Re = 1565$ und $Re = 156$: Position von Blase und Finger, lineare Approximation der Aufstiegs geschwindigkeit der Blase	92
5.19	Dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = \frac{1}{3}$, a) $t = 0$ und b) $t = 0,45$; Gitter: $32 \times 32 \times 128$	93
5.20	Dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität für $Re = 4096$: Position von Blase und Finger	94
6.1	Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,6$, $E_{OBl} = 17,658$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; Gitter: $32 \times 32 \times 32$	98
6.2	Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$; $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$ (Fall 1BLa)	100
6.3	Fall 1BLa: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; lokales Profil von u_x an $x = 0,49$ und $y = 0,32$ für $t = 1,04$	102
6.4	Fall 1BLa: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; a) $\overline{u_x} _1$: Mittelwert der Geschwindigkeit u_x der flüssigen Phase, gemittelt über 13 Zeitpunkte von $t = 1,04$ bis $t = 1,36$; b) rms-Werte flüssige Phase (\square) und Gasphase (\circ), gemittelt wie unter a)	103
6.5	Fall 1BLab: Maximale Geschwindigkeit u_{max} im Rechengebiet über der Zeit	106
6.6	Faktor CDTK1 für verschiedene Dichteverhältnisse Φ_ρ	107
6.7	Zeitliche Entwicklung der Blasenform beim Übergang von Fall 1BLa zu Fall 1BLb; a) $t = 0,58$, b) $t = 0,60$, c) $t = 0,65$, d) $t = 0,68$, e) $t = 0,69$ und f) $t = 0,70$; maximale Geschwindigkeit: 3,54	109
6.8	Stationäre Form der Blase mit Stoffwerten aus Bhaga und Weber (vgl. [5]), Fall d) (1BLb); (links) numerisch, (rechts) experimentell	110
6.9	Einzelblase: Stoffsystem Luftblasen in Wasser und NaCl-Lösung, Schlierenaufnahme (Sauter und Heinzl [78])	111
6.10	Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $E_{OBl} = 0,20$ und $\log M_{Bl} = -10,60$ (Fall 1BLc); $t = 1,06$; (oben) Totale Ansicht, (unten) Ausschnitt ohne Phasengrenze	112
6.11	Einzelblase: Stoffsystem Luftblasen in Wasser, Fotografien, Cherdron [17]	113

6.12	Fall 1BLd: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) $t = 1,39$, b) $t = 1,41$, c) $t = 1,43$ und d) $t = 1,46$; maximale Geschwindigkeit: 6,24	114
6.13	Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$ (Fall 1BLd)	115
6.14	Fall 1BLd: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) Trajektorie des Blasen-schwerpunkt dreidimensional und b) bis d) Projektionen	116
6.15	Fall 1BLd: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; lokales Profil von u_x an $x = 0,21$, $y = 0,32$ und $t = 1,41$	117
6.16	Fall 1BLd: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) $\overline{u_x} _1$: Mittelwert der Geschwindigkeit u_x der flüssigen Phase, gemittelt über 53 Zeitpunkte von $t = 0,80$ bis $t = 1,79$; b) rms-Werte flüssige Phase (\square) und Gasphase (\circ), gemittelt wie unter a)	118
6.17	Unterseite der Blase $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$ (Fall 1BLd), zwei unterschiedliche Zeitpunkte	119
6.18	Fünf aufsteigende Blasen: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 0$	120
6.19	Fünf aufsteigende Blasen mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $z = 0,7$: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 2,29$	121
6.20	Fünf aufsteigende Blasen: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; a) $t = 0$ und b) $t = 2,29$; Aufsicht	122
6.21	Fünf aufsteigende Blasen: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 2,29$; Seitenansicht	123
B.1	Bezeichnung zweier benachbarter Zellen mit den Volumenfraktionen f_l und f_r , schraffierte Fläche sei von Fluid bedeckt	138
B.2	Neun Fallunterscheidungen bei zwei benachbarten Zellen und den Fällen a) $f = 0$, b) $f = 1$ und c) $0 < f < 1$	138
B.3	Vier Unterfallunterscheidungen zu Fall 9 ($0 < f_l < 1$ und $0 < f_r < 1$)	139
B.4	Bezeichnung zweier benachbarter Zellen mit den Volumenfraktionen f_l und f_r , Unterfall 9b	141
B.5	Typerkennungsdiagramm für den Fall 9, eingezeichnete Gerade $f_l = f_r$ wegen $f_l \geq f_r$ (vgl. Gleichung (B.1))	144
B.6	Phasengrenzflächenkonfiguration für die Fälle 1,2,7,8	145
B.7	Anordnung der Geraden innerhalb einer Zelle, Fall 1	146
B.8	Typerkennungsdiagramm für die restlichen Fälle	148
D.1	Bezeichnungen: $\Phi_{x,i}^{-,0}$, $\Phi_{x,i}^{-,1}$, $\Phi_{x,i}^{+,0}$, $\Phi_{x,i}^{+,1}$ sind die vier <i>stencils</i> zur Berechnung der Ableitung von Φ an x_i	152

Tabellenverzeichnis

3.1	Integrationsgrenzen für den EPIRA-Advektionsschritt zur Berechnung des Flusses δV in den unterschiedlichen Koordinatenrichtungen	49
3.2	Drei Testfälle eines kugelförmigen Tropfens: Anzahl der Zellen mit beiden Phasen N_{int} , L_1 Fehler und Ordnung beim statischen Test der Rekonstruktion; Anzahl der Zeitschritte NTIM und Fehler $\varepsilon_{ \Delta f }$ beim dynamischen Test der Advektion mit Ordnung	49
3.3	Koeffizienten zum Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren	59
4.1	Bisherige numerische Verfahren in TURBIT	66
5.1	Artifizielle Strömungen: Simulationsparameter und Kennzahlen	81
5.2	Literaturvergleich der Aufstiegs geschwindigkeit der Blase v_{Blase} bei der zweidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität	91
5.3	Literaturvergleich der Aufstiegs geschwindigkeit der Blase v_{Blase} bei der dreidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität	94
6.1	Durchgeführte Simulationen von Blasen	97
6.2	Gitterstudie zum Wandeinfluß und zum Einfluß der Periodenlänge	104

Nomenklatur

Lateinische Buchstaben

a	Schallgeschwindigkeit
a_{int}	Phasengrenzflächenkonzentration
a_{Finger}	Fallbeschleunigung des 'Fingers' bei Rayleigh-Taylor-Instabilität
A	Atwood-Zahl
A_{int}	Phasengrenzfläche
A_{xy}, A_{xz}, A_{yz}	Flächeninhalte der Seitenflächen einer Zelle
\vec{b}	Punkt in approximierender Ebene
b	y -Achsenabschnitt (FLAIR-Algorithmus)
C_k^j	optimale Gewichte (W-ENO)
$C(f)$	Vorfaktor 'Drift'-Term
d_{Bl}	Blasendurchmesser
\underline{D}_{int}	'Drift'-Term
\vec{D}_{int}^f	Zusatzterm f -Gleichung
\vec{e}_z	Einheitsvektor in z -Richtung
E	Halbachsenverhältnis Ellipsoid
EO_{Bl}	Blasen-Eötvös-Zahl
EO_{ref}	Referenz-Eötvös-Zahl
f	Volumenfraktion der flüssigen Phase oder Fluß
\vec{f}_k^{ext}	externe Kräfte auf Phase k
Fr_{Bl}	Blasen-Froude-Zahl
\vec{g}	Schwerevektor
$h(\zeta, \eta)$	Höhenfunktion
HOT	Terme höherer Ordnung ('higher order terms')
\underline{I}	Einheitstensor
IM	Maschenanzahl in x -Richtung
IS_j	Maß für 'Glätte' (W-ENO)
JM	Maschenanzahl in y -Richtung
KM	Maschenanzahl in z -Richtung
l_{ref}	Referenzlänge, Wandabstand
L_1	Fehler EPIRA-Rekonstruktion
m_i	Index linke Stützstelle im <i>stencil</i> (ENO)
\vec{m}_{int}^σ	Austauschterm der Oberflächenspannung
M_{Bl}	Blasen-Morton-Zahl

M_{ref}	Referenz-Morton-Zahl
\vec{n}_k	Normalenvektor Phasengrenzfläche, zeigt aus Phase k heraus
NTIM	Anzahl der Zeitschritte
N_1, N_2	Anzahl an Zellen mit rein einer Phase (1 oder 2)
Oh_{Bl}	Blasen-Ohnesorge-Zahl
P_k	Druck der Phase k
p	dynamischer Druck
r	Ordnung Interpolation oder Länge <i>stencil</i>
Re_{Bl}	Blasen-Reynolds-Zahl
Re_{ref}	Referenz-Reynolds-Zahl
t	Zeit
\vec{t}	Tangentenvektor
\vec{u}_k	Geschwindigkeit der Phase k
\vec{u}_m	Schwerpunktgeschwindigkeit
u_{ref}	Referenzgeschwindigkeit
U_T	terminale Blasenaufstiegsgeschwindigkeit
v_{Blase}	Aufstiegsgeschwindigkeit der 'Blase' bei Rayleigh-Taylor-Instabilität
V	Kontrollvolumen
V_k	Volumen der Phase k
We_{Bl}	Blasen-Weber-Zahl
We_{ref}	Referenz-Weber-Zahl
x, y, z	Koordinatenrichtungen

Griechische Buchstaben

α	lokale Steigung approximierende Ebene
α_k	Volumenfraktion der Phase k ($f \equiv \alpha_1$)
α_k^j	positive Konstanten (W-ENO)
β	lokale Steigung approximierende Ebene oder Steigung FLAIR-Algorithmus
$\varepsilon_{ \Delta f }$	Fehler EPIRA-Rekonstruktion und Advektion
γ_k	Phasenindikatorfunktion für Phase k
$\overset{m}{\underset{,}{\rightarrow}}_k$	Massenaustausch über Phasengrenzfläche
$\overset{i}{\underset{,}{\rightarrow}}_k$	Impulsaustausch über Phasengrenzfläche
$\delta[\cdot]$	Dirac'sche Deltadistribution
δf	Fluß der Volumenfraktion f
$\delta \vec{u}_{int}$	Phasenrelativgeschwindigkeit
Δt_i	i -te Zeitschrittweite
κ	Krümmung
μ_k	Koeffizient der dynamischen Zähigkeit der Phase k
ν	Koeffizient der dimensionslosen, kinematischen Zähigkeit

ξ_k	Koeffizient der Druckzähigkeit der Phase k
ρ_k	Dichte der Phase k
ρ_m	scheinbare Dichte
ρ_{ref}	Referenzdichte
σ	Oberflächenspannung
ς, η, ξ	lokales Koordinatensystem
Φ_μ	Viskositätsverhältnis (μ_2/μ_1)
Φ_ρ	Dichteverhältnis (ρ_2/ρ_1)
$\vec{\omega}_{int}$	Geschwindigkeit der Phasengrenzfläche
Ω_k	Gebiet der Phase k
\mathcal{T}_{int}	Zwischenphasenreibung
$\underline{\mathcal{T}}_k$	Schubspannungstensor der Phase k

Operatoren

∇	Gradient, Nablaoperator
∇_h	diskreter Nablaoperator
$\nabla \cdot$	Divergenz
\otimes	Tensorprodukt
$\langle \cdot \rangle$	räumliche Mittelung bezogen auf V
$\langle \cdot \rangle_k$	räumliche Mittelung bezogen auf V_k
\times	Kreuzprodukt
\mathcal{V}	Operator der Volumenintegration
\mathcal{L}	Differentialoperator der räumlichen Ableitungen
\mathcal{K}	Differentialoperator der konvektiven Terme
\mathcal{D}	Differentialoperator der diffusiven Terme
\mathcal{Q}	Operator der Quellterme
\mathcal{I}	Differentialoperator der Zweiphasen-Schließungsterme
\mathcal{O}	Operator der Oberflächenspannungskräfte

Indizes, unten

Bl	Blase
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
exp	experimentell
H	hinten
i	ganzzahliger Laufindex
int	Wert auf der Phasengrenzfläche

j	ganzzahliger Laufindex
k	Phase k oder ganzzahliger Laufindex
l	links
N	Nord
NS	Nord-Süd
num	numerisch
o	oben
O	Ost
OW	Ost-West
r	rechts
ref	Referenz
S	Süd oder bei konstanter Entropie
T	terminal
u	unten
V	vorne
VH	vorne-hinten
W	West
$Wand$	Wert an der Wand
x, y, z	Komponente in x -, y - oder z -Richtung

Indizes, oben

$+$	positiv oder von rechts
$-$	negativ oder von links
$'$	Schwankungsanteil
$*$	Schätzgeschwindigkeitsfeld ohne Druck
(1), (2)	Zwischenwerte des Runge-Kutta-Verfahrens
ext	äußere
n	Zeitebene
rms	'root mean square'

Kapitel 1

Einleitung

Ziel dieses einleitenden Kapitels ist die Darstellung der in dieser Arbeit behandelten Problemstellung der numerischen Simulation von Einzelblasen und Blasenschwärmen. Dabei wird in einem ersten Abschnitt diese Arbeit in den generellen Zusammenhang der Zweiphasenströmungen eingeordnet. In einem folgenden Abschnitt werden die Kennzahlen zur Charakterisierung des physikalischen Systems vorgestellt. Danach wird eine Literaturübersicht über vorhandene experimentelle und numerische Arbeiten gegeben. Abschließend wird die Zielsetzung und die Vorgehensweise dieser Arbeit erläutert.

1.1 Problemstellung

Zweiphasenströmungen kommen in vielfältiger Weise in unserer natürlichen Erfahrungswelt ebenso wie in vielen technischen Prozessen vor. Alltägliche Beispiele sind Naturphänomene wie Regen, Nebel oder Wolken, aber auch kochendes Wasser oder die Teezubereitung. In der chemischen Industrie finden sich Beispiele in Anlagen der Prozeßtechnik, bei Wärmekraftwerken in Anlagenteilen wie Dampferzeugern oder Kondensatoren oder bei der Nahrungsmittelindustrie in Fertigungsanlagen.

Zur Begriffsbildung: Unter einer Phase wird ein homogenes Gebiet innerhalb eines Systems verstanden, welches durch Trennflächen von anderen homogenen Gebieten abgegrenzt ist. Beispiele hierfür sind in der Thermodynamik die drei Aggregatzustände fest, flüssig und gasförmig, oder nebeneinander existierende feste Modifikationen des gleichen Stoffes. Somit ist eine Strömung aus Wasser und Wasserdampf im klassischen Sinne eine Zweiphasenströmung. Eine Zweikomponentenströmung besteht aus zwei Komponenten unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung. Als Beispiel wäre hierbei eine Strömung, bestehend aus Luft und Wasser, zu nennen. In der Literatur werden die Begriffe Zweiphasen- und Zweikomponentenströmung häufig vereinfachend synonym verwendet, deshalb wird in dieser Arbeit nur der Begriff Zweiphasenströmung benutzt.

Zur Auslegung und Optimierung von technischen Anlagen mit Zweiphasenströmungen werden vermehrt Rechenprogramme eingesetzt. Die Dynamik der zeitlich veränderlichen Phasengrenzfläche macht dabei die mathematische und numerische Beschreibung schwierig, eine analytische Vorgehensweise nahezu unmöglich. In der Literatur werden deshalb verschiedene Methoden zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen entwickelt (empirische Korrelationen, homogenes Strömungsmodell, Driftströmungsmodell oder Zweifluid-

modell, vgl. Wallis [97] oder Müller [61]), deren Detaillierungsgrad von der jeweiligen (technischen) Anforderung abhängt. Bei diesen Methoden werden zeitliche Mittelungen eingeführt, um statistische Aussagen über integrale (zeitlich gemittelte) Größen zu treffen. Die statistischen Methoden betrachten nur integrale Größen, obwohl diese Größen grundsätzlich von Detailphänomenen wie z.B. der Dynamik der Phasengrenzfläche oder dem lokalen Geschwindigkeitsfeld im Nahfeld von Blasen beherrscht werden.

Ein Problem bei der statistischen Beschreibung turbulenter Zweiphasenströmungen ist die Modellierung der Turbulenz. Blasen können die Turbulenz anfachen oder dämpfen. Die von Blasen im Fluid erzeugten Fluktuationen werden Pseudoturbulenz genannt. Van Wijngaarden [96] berechnet mit Hilfe der Potential- und Grenzschichttheorie die kinetische Energie der Pseudoturbulenz. Zur Modellierung der Turbulenz in Zweiphasenströmungen wird oft die Arbeit von Sato et al. [77] herangezogen. Hierin wird die Turbulenz in zwei Anteile aufgespalten, einen, der die Wandturbulenz wiedergibt und unabhängig von den Blasen ist, und einen, der von den Blasen verursacht wird. Beide Anteile werden jeweils mit einem einfachen Wirbelviskositätsansatz modelliert.

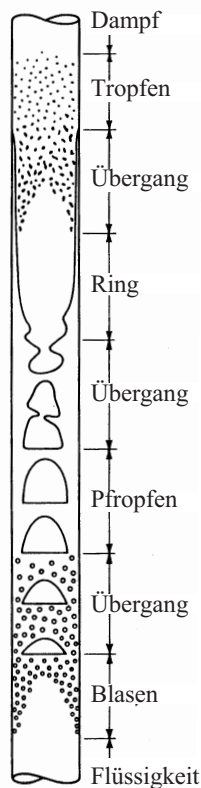


Abbildung 1.1: Strömungsformen im senkrechten Verdampferrohr, nach Wallis [97]

Die meisten empirischen Modelle sind auf eine bestimmte Strömungsform abgestimmt. Unter der Strömungsform versteht man eine rein empirische Einteilung der Zweiphasenströmungen in verschiedene Strömungsklassen. Für eine senkrechte Rohrströmung sind die unterschiedlichen Strömungsformen in Abbildung 1.1 angegeben, welche ein senkrecht Verdampferrohr mit der groben Abfolge der Strömungsformen zeigt. Am unteren Ende des Rohres tritt das flüssige Medium ein und wird im Laufe des Aufstieges entlang der skizzierten Rohrlänge vollständig verdampft. Die Unterteilung in Blasen-, Pfropfen-, Ring- und Tropfenströmung ist sehr subjektiv und es gibt Übergangsbereiche, die zwei Strömungsformen zuzuordnen sind. Innerhalb einer Strömungsform können empirische Korrelationen zur Beschreibung der Zweiphasenströmung verwendet werden. Für viele Rechenprogramme bedeutet dies, daß bei Übergängen der Strömungsformen in irgendeiner Weise ein 'Umschalten' der Korrelationen vorstatten gehen muß. Vor allem Blasenströmungen haben in vielen technischen Anwendungen eine große Relevanz, so z.B. in der chemischen Industrie in Blasensäulen bzw. chemischen Reaktoren.

Am Institut für Reaktorsicherheit des Forschungszentrums Karlsruhe werden mehrere Experimente zu Zweiphasenströmungen durchgeführt. Diese lassen sich in zwei Klassen unterteilen. Zum einen existieren zwei Kreislaufexperimente, die unter dem Namen TWOFLEX (Two-Phase Flow Experiment, siehe hierzu Samstag [76] und Cherdron et

al. [18]) firmieren. In diesen Anlagen werden Experimente zu adiabaten Wasser-Luft- und zukünftig zu nicht-adiabaten Wasser-Wasserdampf-Strömungen in senkrechten Röhren in Auf- und Abwärtsströmung durchgeführt. Verschiedene Arten der Zweiphasenströmung, besonders die Umverteilung der Gasphase, Strömungsdaten und Entwicklung der Turbulenz in einer Blasenströmung, sollen damit betrachtet werden. Als Meßsonden stehen eine Röntgentomographie und Widerstandssonden für die Ermittlung des lokalen Gasgehaltes, sowie Heißfilmsonden zur Bestimmung lokaler Turbulenzdaten zur Verfügung. Zum anderen werden Laborexperimente an Einzelblasen durchgeführt, die den Namen LABFLEX (Laboratory Flow Experiments, siehe hierzu Aberle et al. [1]) haben. Dabei werden in Wasser aufsteigende Luftblasen in ihrem Aufstiegsverhalten untersucht. Ziel ist hierbei, die Vorgänge im Nahfeld der Phasengrenze zu studieren.

Experimente können nicht alle Daten von Interesse und in ausreichender Detaillierung liefern, deshalb werden numerische Simulationen zur Ergänzung von Feldinformationen eingesetzt. Diese Arbeit behandelt die Direkte Numerische Simulation (DNS) von aufsteigenden Einzelblasen und Blasenschwärmen unter isothermen Bedingungen, um grundlegende Mechanismen der Wechselwirkung zwischen den beiden Phasen zu verstehen. In einphasigen Bereichen der Strömung wird eine DNS durchgeführt, Grenzschichten an den Phasengrenzflächen werden dabei aber nicht aufgelöst. Die Strömungsgrößen werden lokal, momentan aufgelöst ohne statistische Mittelungen. Dies bedeutet, daß die in dieser Arbeit vorgestellte Methode aufgrund des numerischen Aufwandes praktisch nicht auf alle Strömungsformen der Zweiphasenströmungen angewendet werden kann. Limitierend ist die Auflösung der Phasengrenzfläche im numerischen Gitter, somit bleibt die Methode auf die Simulation von z.B. Einzelblasen oder Schwärmen, bestehend aus wenigen Blasen, beschränkt. Für praktische Anwendungen können die aus den Simulationen gewonnenen Daten der besseren Modellbildung in den statistischen Methoden dienen. Ebenso können die Daten in die Entwicklung von Feinstrukturmodellen einfließen.

1.2 Literaturübersicht zu Untersuchungen an Einzelblasen

Nach der Einführung von dimensionslosen Kennzahlen wird zum einen dargelegt, welche unterschiedlichen Blasenformen und Blasennachläufe in Abhängigkeit von Stoffwerten und Gasvolumen sich bei aufsteigenden Blasen in experimentellen Untersuchungen einstellen. Zum anderen wird eine Literaturübersicht über numerische Simulationen von Einzelblasen gegeben. Dabei wird auf verschiedene Konzepte zur Abbildung einer Zweiphasenströmung in einem Rechenprogramm eingegangen.

1.2.1 Kennzahlen

Zur Klassifizierung und Charakterisierung einer in einer Flüssigkeit aufsteigenden Einzelblase werden dimensionslose Kennzahlen eingeführt, von denen Blasen-Reynolds- (Re_{Bl}),

Blasen-Eötvös- (Eo_{Bl}) und Blasen-Morton-Kennzahl (M_{Bl}) besonders hilfreich sind:

$$Re_{Bl} = \frac{\rho_1 U_T d_{Bl}}{\mu_1} \quad (1.1)$$

$$Eo_{Bl} = \frac{g (d_{Bl})^2 (\rho_1 - \rho_2)}{\sigma} \quad (1.2)$$

$$M_{Bl} = g (\mu_1)^4 \frac{\rho_1 - \rho_2}{(\rho_1)^2 \sigma^3}, \quad (1.3)$$

mit ρ : Dichte, μ : dynamische Viskosität, d_{Bl} : äquivalenter Durchmesser einer zur Blase volumengleichen Kugel ($V_{Bl} = \frac{1}{6}\pi (d_{Bl})^3$), U_T : terminale Aufstiegs geschwindigkeit der Blase, σ : Koeffizient der Oberflächenspannung und g : Gravitationskonstante ($= 9,81 \frac{m}{s^2}$). Die Indizes 1 und 2 stehen für die beiden unterschiedlichen Phasen, wobei 1 die flüssige Phase kennzeichnet und 2 die gasförmige. In der Literatur wird die Blasen-Eötvös-Zahl auch als Blasen-Bond-Zahl bezeichnet. Mit Blasen-Reynolds-, Blasen-Eötvös- und Blasen-Morton-Kennzahlen lassen sich die physikalischen Eigenschaften der Blase eindeutig charakterisieren. In der Literatur werden häufig auch weitere Kennzahlen, die aus den drei obigen abgeleitet werden können, verwendet. Dies sind z.B. die Blasen-Weber-Zahl (We_{Bl})

$$We_{Bl} = \frac{\rho_1 (U_T)^2 d_{Bl}}{\sigma} = (Re_{Bl})^2 \sqrt{\frac{M_{Bl}}{Eo_{Bl}}}, \quad (1.4)$$

die Blasen-Ohnesorge-Zahl (Oh_{Bl})

$$Oh_{Bl} = \frac{\mu_1}{\sqrt{\rho_1 \sigma d_{Bl}}} = \left(\frac{M_{Bl}}{Eo_{Bl}} \right)^{1/4} = \frac{\sqrt{We_{Bl}}}{Re_{Bl}} \quad (1.5)$$

oder die Blasen-Froude-Zahl (Fr_{Bl})

$$Fr_{Bl} = \frac{(U_T)^2}{g d_{Bl}} = \frac{We_{Bl} \rho_1 - \rho_2}{Eo_{Bl} \rho_1}. \quad (1.6)$$

Einzig die Blasen-Morton-Zahl enthält nur Stoffwerte und ist somit allein durch das physikalische Stoffsystem bestimmt. Aufgrund der sehr sensitiven Abhängigkeit der Blasen-Morton-Zahl von der Viskosität der flüssigen Phase ($M_{Bl} \propto (\mu_1)^4$) wird manchmal auch die vierte Wurzel der Blasen-Morton-Zahl in der Literatur verwendet, siehe z.B. Maxworthy et al. [55].

Die Blasen-Reynolds-Zahl gibt das Verhältnis von Trägheits- zu viskosen Reibungskräften an, die Blasen-Weber-Zahl das Verhältnis von Trägheits- zu Oberflächenspannungskräften, die Blasen-Eötvös-Zahl das Verhältnis von Auftriebs- zu Oberflächenspannungskräften und die Blasen-Froude-Zahl das Verhältnis von Trägheits- zu Schwerkraften.

1.2.2 Experimentelle Arbeiten

In der Literatur existiert eine große Anzahl an experimentellen Arbeiten zu in ruhendem Fluid aufsteigenden Einzelblasen, die in dem Buch von Clift, Grace und Weber [21] sehr gut zusammenfassend dargestellt sind.

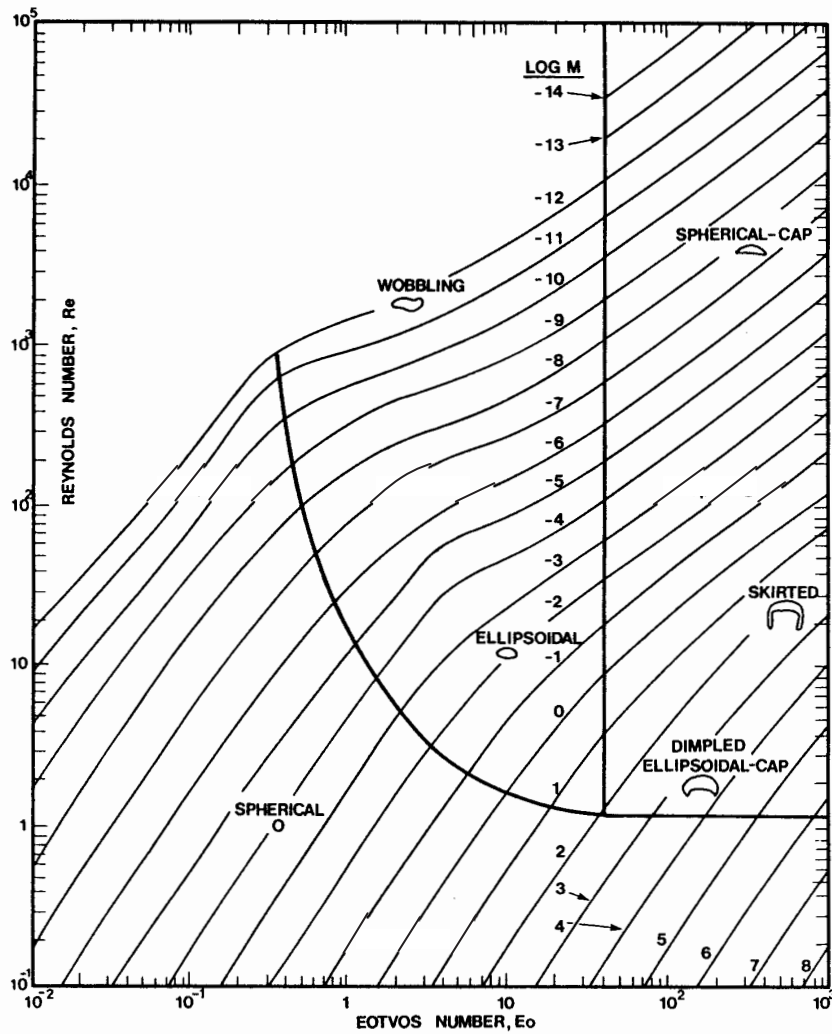


Abbildung 1.2: Diagramm aus Clift et al. ([21]) zur Abhängigkeit der Kennzahlen Reynolds, Eötvös und Morton für aufsteigende Einzelblasen

In Abbildung 1.2 (aus Clift et al. [21]) sind eine Vielzahl von Experimenten in einem Diagramm zusammengestellt. Dabei ist die Blasen-Reynolds-Zahl über der Blasen-Eötvös-Zahl aufgetragen für unterschiedliche Blasen-Morton-Zahlen. Kleine Blasen-Eötvös-Zahlen bedeuten kleine Blasendurchmesser d_{Bl} und eine Dominanz der Oberflächenspannungskräfte gegenüber den Auftriebskräften. Für kleine Blasen-Reynolds-Zahlen überwiegen die Reibungskräfte die Trägheitskräfte. Für ein fest vorgegebenes Stoffsystem, was einer konstanten Blasen-Morton-Zahl entspricht, können die experimentellen Zusammenhänge der Kennzahlen im Diagramm abgelesen werden. Beispielsweise für das System Luftblasen in Wasser ergibt sich mit $\mu_{Wasser} = 0,001 \frac{Ns}{m^2}$, $\rho_{Wasser} = 1000 \frac{kg}{m^3}$, $\rho_{Luft} = 1 \frac{kg}{m^3}$ und $\sigma = 0,072 \frac{N}{m}$

$$\log M_{Luft/Wasser} = -10,6, \quad (1.7)$$

entlang dieser Linie sind die zugehörigen Paare von Blasen-Eötvös- und Blasen-Reynolds-

Zahl aus Abbildung 1.2 zu entnehmen.

Zur Entwicklung von Blase und Nachlauf der Blase in Abhängigkeit vom äquivalenten Durchmesser lassen sich folgende, allgemeine Beobachtungen wiedergeben. Blasen mit sehr kleinen Volumina V_{Bl} (und somit kleinen Blasen-Eötvös-Zahlen, siehe Abbildung 1.2) verhalten sich wie starre Kugeln. Die Blase besitzt einen geschlossenen Nachlauf, der durch die Potentialtheorie beschrieben werden kann. Sie ist formbeständig mit starrer Phasengrenzfläche. Der Widerstandsbeiwert c_D entspricht dem einer Kugel (Stokes'sches Gesetz, Gleichgewicht zwischen den viskosen Reibungskräften und den Auftriebskräften). Wächst das Gasvolumen der Blase an, so wird innerhalb der Blase ein Ringwirbel induziert. Die Blasenform bleibt aber weiterhin kugelförmig, die Phasengrenzfläche ist beweglich. Dadurch wächst die Aufstiegs geschwindigkeit auf den bis zu $1\frac{1}{2}$ fachen Wert einer aufsteigenden starren Kugel an. Bei weiter ansteigendem Gasvolumen werden die Blasen ellipsenförmig mit innerer Zirkulation und beweglicher Phasengrenzfläche. Bis zu dieser Größe der aufsteigenden Blase ist der Nachlauf der Blase geschlossen, was sich in einer stationären Phasengrenzfläche äußert, die Blasen sind formbeständig. Bei einer weiteren Vergrößerung des Gasvolumens der Blase treten unregelmäßige Formen auf, es kommt zu Ablösungen des Nachlaufes. Abhängig von den Stoffwerten, für ungefähr $M_{Bl} < 10^{-8}$, entstehen unregelmäßige Ablösungen und dadurch die sogenannten oszillierenden ('wobbling') Blasen. Für jede Stoffwertekombination werden bei weiterem Vergrößern des Blasen volumens sogenannte Kappenformen erhalten. Diese sind nicht formbeständig und besitzen eine bewegliche Phasengrenzfläche. Die Dynamik der Phasengrenzfläche, vor allem die Mobilität, wird entscheidend durch Verschmutzungspartikel im Fluid beeinflusst. Schon kleine Mengen an diesen zusätzlichen Partikeln im Fluid lagern sich gezielt an der Phasengrenzfläche ab und verringern deren Mobilität. Dadurch werden die Blasen starren Körpern ähnlicher.

Es gibt eine Vielzahl an experimentellen Arbeiten zur Blasenform und Aufstiegs geschwindigkeit. Maxworthy et al. [55] haben in einem Mortonzahlbereich von $M_{Bl} = 10^{-12}$ bis $M_{Bl} = 10^1$ an einem Gemisch aus Wasser und Glyzerin aufsteigende Luftblasen untersucht. In Abhängigkeit der Eötvös-Zahl haben sie sechs Bereiche identifiziert, die den Übergang bilden von einer von Schwer- und Reibungskraft dominierten Strömung zu einer nur von der Schwerkraft dominierten. Im Übergang nimmt die zuerst starke Bedeutung der Oberflächenspannung zunehmend ab.

Ebenfalls mit einem Gemisch aus Wasser und Glyzerin arbeiten Raymond und Rosant [70]. Die Morton-Zahlen liegen im Gegensatz zu Maxworthy et al. [55] bei größeren Werten. Die experimentellen Daten werden mit numerischen Werten für Blasenform und Aufstiegs geschwindigkeit verglichen.

Für das System Luftblasen in Wasser ergibt sich für die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase folgende, in Abbildung 1.3 graphisch dargestellte Abhängigkeit vom äquivalenten Radius (entnommen aus Müller [61]). Die Größenbereiche für die oben beschriebenen verschiedenen Aufstiegsformen der Blase können aus dem Diagramm entnommen werden. Für mit Verschmutzungspartikeln versetztes Wasser wird das stark ausgeprägte lokale Maximum bei $d_{Bl} = 0,14$ cm nicht erreicht, stattdessen kommt es zu einer Aufweitung des Bereiches der beobachteten Aufstiegs geschwindigkeiten. Die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase in Abhängigkeit vom äquivalenten Blasenradius wird monoton steigend.

Die unterschiedlichen Typen an Aufstiegswegen von Luftblasen in Wasser können fol-

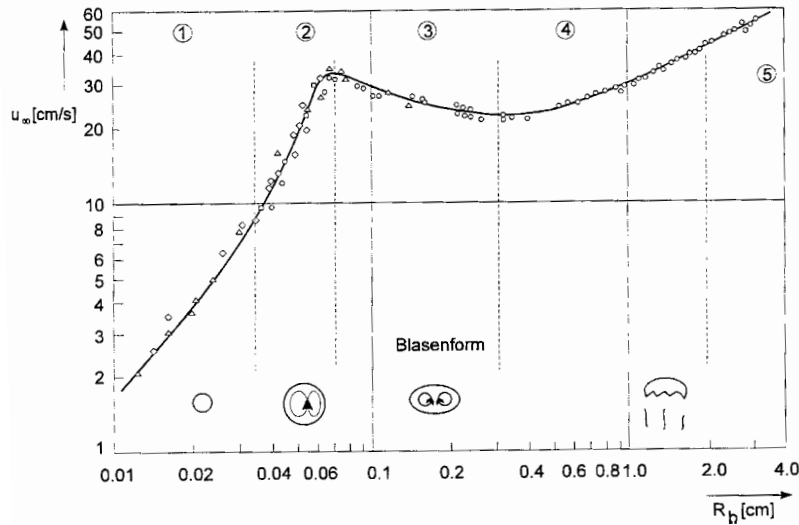


Abbildung 1.3: Aufstiegsgeschwindigkeit u_∞ von Luftblasen in Wasser über dem äquivalenten Blasendurchmesser R_b , aus Müller [61]

gendermaßen eingeteilt werden (siehe hierzu z.B. Saffman [75] und vergleiche dazu auch Abbildung 1.3). Bis zu einem äquivalenten Blasendurchmesser von $d_{Bl} = 0,14$ cm steigt die Blase geradlinig auf. Im Bereich des Blasendurchmessers d_{Bl} von 0,14 cm bis 0,2 cm wird die Bewegung der Blase mit Zig-Zag beschrieben. Dies meint, daß die Luftblase, bedingt durch unregelmäßige Ablösungen im Nachlauf, eine Taumelbewegung ausführt. Liegt der Blasendurchmesser d_{Bl} zwischen 0,2 cm und 0,46 cm, so beschreibt die Blase entweder eine Zig-Zag- oder eine Helixbahn. Oberhalb von $d_{Bl} = 0,48$ cm ist weder eine Zig-Zag- noch eine Helixbahn möglich. Wohl durch Verschmutzungspartikel im Wasser bedingt, kommt es vor, daß manche Autoren keine Zig-Zag-Bahn beobachten.

Saffman [75] gibt an, daß die Zig-Zag-Bewegung bedingt ist durch die Instabilität der geradlinigen Aufstiegsbewegung gegenüber einer periodischen Oszillation des Nachlaufes. Neue Untersuchungen von Brücker [13] an Luftblasen in einem Gemisch aus Wasser und Glycerin ergeben folgendes Bild. Danach sind Zig-Zag- und Helixbewegung bedingt durch das Auftreten eines sogenannten Haarnadelwirbels ('hairpin vortex'). Der Unterschied zwischen den beiden Aufstiegsformen ist nur die Amplitude der entgegengesetzt rotierenden Wirbelelemente. Bei der Helixbahn kommt es zu keinem Ablösen des Wirbels, der asymmetrisch zur Blase angesetzt ist. Dadurch entsteht die gleichförmige Bewegung. Bei der Zig-Zag-Bahn liegt eine periodische Ablösung des Wirbels vor, wie es auch an Strömungen um feste Kugeln beobachtet wurde. Die laterale Drift der Blasenbewegung kann durch die unterschiedliche Stärke der Haarnadelwirbel erklärt werden.

Lunde und Perkins [53] haben in Leitungswasser aufsteigende Luftblasen experimentell vermessen. Untersucht wurden von ihnen Blasen mit Zig-Zag- und helixförmigen Aufstiegsverhalten. Sie konnten zeigen, daß drei verschiedene charakteristische Frequenzen auftreten, die vom Ablösen der Wirbel und von zwei Moden der Oszillation der Blasen-

oberfläche herrühren.

Duineveld [26] hat die Aufstiegsgeschwindigkeit und Form von in hochreinem Wasser aufsteigenden Luftblasen untersucht. Dabei stellt er fest, daß die mittels der Potentialtheorie von Moore [60] bestimmte Korrelation zur Bestimmung der Blasenauftiegs- geschwindigkeit bis zu einem äquivalenten Blasendurchmesser von $d_{Bl} = 0,12$ cm sehr gut mit seinen Experimenten übereinstimmt. Für größere Blasen beobachtet er ein Abwei- chen von der Moore' schen Theorie, welches er auf das Abweichen dieser Blasen von der Ellipsenform zurückführt, welche nicht in der theoretischen Korrelation berücksichtigt ist.

1.2.3 Numerische Arbeiten

In diesem Abschnitt werden numerische Arbeiten aus der Literatur zu aufsteigenden Ein- zelblasen betrachtet. Nach einer Darstellung der Methoden und der bisherigen Anwen- dungen und Ergebnisse werden diese bewertet.

Methoden

Zur numerischen Beschreibung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung von Strömun- gen mit Diskontinuitäten wird in der Literatur zwischen *front-capturing*- und *tracking*- Methoden unterschieden (vgl. z.B. [94]).

front-capturing Die *front-capturing*-Verfahren benutzen auf einer Finiten-Volumen- Diskretisierung numerische Verfahren hoher Ordnung, die an Diskontinuitäten künstliche Diffusion hinzufügen, wodurch numerische Oszillationen vermieden werden. Es werden keine zusätzlichen mathematischen Hilfsfunktionen zur Verfolgung der Phasengrenzfläche eingeführt, sondern die Diskontinuitäten der Zustandsgrößen mittels hochgenauer Verfa- hren aufgelöst. Für eine Übersicht eignet sich der Artikel von Boris [9]. Die Anwendung liegt vor allem bei Problemstellungen mit anfänglich unbekannter Lage der Grenzfläche, z.B. in der Gasdynamik und bei Schockwellen.

tracking Die *tracking*-Methoden führen zusätzliche Elemente zur Verfolgung der Pha- sengrenzfläche ein. Dies können Marker-Partikel oder sogenannte Farbfunktionen sein, die den Volumenanteil einer Phase in einer Masche angeben. Bei den *tracking*-Methoden wird zwischen zwei Verfahren unterschieden, dem *surface-tracking* und dem *volume-tracking*.

surface-tracking Bei den *surface-tracking*-Verfahren wird die Grenzfläche selber durch weitere Elemente beschrieben. Dies können Höhenfunktionen oder in weiterent- wickelten Verfahren Polygonzüge sein, die ein der Blase eigenes, auf der Blasenoberfläche mitbewegtes Gitter bilden.

Historisch gesehen wurde in einem ersten Schritt die Grenzflächen durch Höhenfunk- tionen beschrieben (SOLA-SURF [42]). Hierdurch konnten Testprobleme, wie das Damm- bruchproblem, gelöst werden.

Bei Unverdi und Tryggvason [94] wird das *surface-tracking*-Verfahren für eine inkom- pressible, viskose Zweiphasenströmung benutzt. Bei der Simulation aufsteigender Blasen

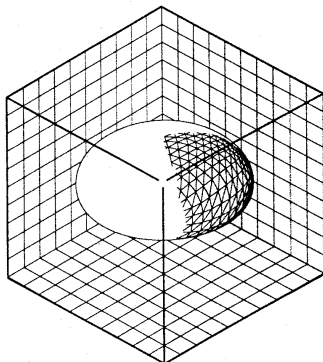


Abbildung 1.4: Blase mit mitbewegtem Gitter, aus Unverdi und Tryggvason [94]

in ruhendem Fluid zeigt sich eine Schwachstelle des Konzeptes, die Behandlung der Koaleszenz von Grenzflächen z.B. beim Blasenzusammenschluß. Für kompressible Einphasenströmungen in der Gasdynamik konnte das *surface-tracking* erfolgreich zur Beschreibung der Schockausbreitung eingesetzt werden (vgl. [19]).

Level-Set Osher und Sethian [64] haben die sogenannte *level-set*-Formulierung in der Literatur eingeführt. Allgemein haben sie diese Methode zur Beschreibung von Fronten mit krümmungsabhängiger Geschwindigkeit konzipiert. Beispiel hierfür ist die Flammausbreitung. Die brennende Flamme wird dabei idealisiert als infinitesimale Grenzfläche zwischen unverbranntem und verbranntem Fluid angesehen, die sich in Richtung des unverbrannten Fluids mit einer von der lokalen Krümmung abhängigen Geschwindigkeit bewegt. Die Front wird bei dieser Methode als konstanter Wert einer zusätzlichen vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion (*level-set*) dargestellt. Die *level-set*-Funktion wird mittels einer Transportgleichung zeitlich entwickelt. Im Laufe der zeitlichen Entwicklung kann sie nicht mehr als Abstandsfunktion interpretiert werden, sie stellt dann nur noch die Phasengrenze für einen bestimmten, konstanten Wert dar. Deshalb muß die *level-set*-Funktion durch einen zusätzlichen Algorithmus reinitialisiert werden. Zusätzlich ergeben sich bei der *level-set*-Formulierung Probleme bezüglich der Volumenerhaltung.

Sussman et al. [86] simulieren mit dieser Methode zweidimensionale Blasen. Dabei wurde von ihnen das Aufbrechen und die Kollision von Blasen bei hohem Dichteverhältnis demonstriert. Sussman und Semerka [85] erweitern ihre Methode aus [86] für achsensymmetrische Probleme. Es werden aufsteigende Blasen unterschiedlichster Form nachgerechnet, das Herabfallen eines Tropfens auf eine Wasseroberfläche und die Bildung eines Wasser Jets durch eine an der Wasseroberfläche aufplatzende Blase.

volume-tracking Die *volume-tracking*-Verfahren berechnen und speichern nur Informationen über die Fluidverteilung im Gitter ab. Aus dieser Information wird die Grenzfläche rekonstruiert, Krümmungen für die Berechnung der Oberflächenspannungen bestimmt und die Advektion des Fluids vorgenommen. Es wird eine volumetrische Prozeßvariable eingeführt, die z.B. eine sogenannte Farbfunktion sein kann, die den Volumenanteil einer Phase in der jeweiligen Masche angibt. Problem hierbei ist, daß diese Prozeßvariable

ble, die starke räumliche Gradienten aufweist, ohne ein Verschmieren transportiert werden muß.

Marker-and-Cell Die Marker-and-Cell-Methode von Harlow et al. [34] ist einer der ersten Algorithmen zur zeitabhängigen, viskosen, inkompressiblen Strömungsberechnung mit freien Oberflächen. Hierbei werden Marker-Partikel in das Fluid eingebracht und mit der lokalen Fluidgeschwindigkeit advektiert. Die Verteilung dieser Marker-Partikel bestimmt die Fluidkonfiguration. Mit dieser Methode können beliebige freie Oberflächen behandelt werden. Probleme ergeben sich in Strömungen mit hohen Scherkräften, in denen es zu einer willkürlichen Ansammlung der Marker in bestimmten Regionen kommt. Desweiteren können keine Informationen zur Orientierung der Oberfläche erhalten werden, und Randbedingungen sind problematisch zu implementieren. Viele dieser Probleme können durch eine Erhöhung der Anzahl der Marker-Partikel umgangen werden, was wiederum zu einem gesteigerten Rechenaufwand führt.

SLIC Die SLIC-Methode (Simple Line Interface Calculation) von Noh und Woodward [63] benutzte als erster Algorithmus eine Farbfunktion anstelle der Marker-Partikel. Dabei handelt es sich um die Flüssigkeitsfraktion f der flüssigen Phase, die das Verhältnis von Volumen der Phase zum Gesamtvolumen der Masche angibt. Maschen mit $f = 1$ sind somit vollständig mit Flüssigkeit gefüllt, mit $f = 0$ vollständig mit der Gasphase. Die zeitliche Entwicklung wird dabei wie folgt beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \vec{u} \cdot \nabla f = 0 . \quad (1.8)$$

Das Feld der Flüssigkeitsfraktionen wird sequentiell getrennt nach den Koordinatenrichtungen transportiert. Dazu wird die Grenzfläche mit zu den Koordinatenachsen parallelen Linien rekonstruiert, wobei die Orientierung nur von den Nachbarn stromauf- und stromabwärts bestimmt wird. Diese Orientierung der Phasengrenzfläche richtet sich nach der Richtung der Advektion im Koordinatensystem. SLIC ist ein sehr einfacher Algorithmus, mit dem Noh und Woodward [63] kompliziert aufgebaute Systeme aus mehreren Fluiden und deformierbaren Festkörpern berechnen konnten.

Volume-of-Fluid (VoF) Die Volume-of-Fluid-Methode (VoF-Methode) wurde 1980 von Hirt und Nichols (vgl. [62] und [41]) vorgestellt. Wie bei den obigen Verfahren wird von einem inkompressiblen Fluid ausgegangen. Im Vergleich zu SLIC wird eine detailliertere Rekonstruktion der Grenzfläche vorgenommen, sowie ein verbesserter Transportmechanismus für die f -Gleichung gewählt, der das Verschmieren der Volumenfraktion verhindert. Die Orientierung der Phasengrenzfläche wird aus den acht Nachbarn (im zweidimensionalen Fall) berechnet. Dadurch kann die lokale Krümmung der Grenzfläche bestimmt werden, die über die Oberflächenspannung als externe Kraft wiederum in die Navier-Stokes-Gleichung eingeht. Der Transport des Volumenfraktionenfeldes wird mittels des Donor-Acceptor-Verfahrens [69] bewerkstelligt, das ein Verschmieren der f -Verteilung verhindert und die Massenerhaltung des Fluids garantiert. Dem Donor-Acceptor-Verfahren wird eine feste, zu den Koordinatenachsen parallele Orientierung der Phasengrenzfläche

zugrunde gelegt. Der Algorithmus von Hirt und Nichols ist für nichtäquidistante Gitter konzipiert.

Die VoF-Methode wurde für eine Vielzahl von Problemstellungen benutzt. Die Autoren Hirt und Nichols rechneten einige Testfälle wie das Dammbrechproblem und Rayleigh-Taylor-Instabilitäten. Desweiteren wurde von ihnen der Algorithmus in Sicherheitsuntersuchungen bei Siedewasserreaktoren eingesetzt (siehe zu all diesen Fragestellungen [62] und [41]).

Mit NASA-VOF2D [91] wurde ein Programm auf der Grundlage der VoF-Methode vorgestellt, welches auch komplexe Geometrien mit gekrümmten Rändern behandeln kann. Dies wurde konzipiert für verschiedene Vorgänge an Treibstofftanks wie deren Befüllung und das Schwappen des Treibstoffes bei leichten Beschleunigungen.

In einer ganzen Serie von Papieren wird von Tomiyama und Koautoren die VoF-Methode genutzt. Dabei werden aufsteigende Blasen konstanter Dichte in ruhendem, inkompressiblen Fluid [87] in zweidimensionaler Geometrie untersucht. Die berechneten Formen und Aufstiegsgeschwindigkeiten werden mit experimentell ermittelten verglichen. In [90] wird die Fluktuationsbewegung einer zweidimensionalen, aufsteigenden Blase untersucht. Dreidimensionale Blasen, in einem ruhenden Fluid aufsteigend und in einer laminaren Blasenströmung, werden in [89] betrachtet. In [88] werden Experimente und numerische Simulationen aufsteigender Einzelblasen (dreidimensional) verglichen, wobei vor allem Wandeinflüsse untersucht werden. Alle numerischen Untersuchungen von Tomiyama und Koautoren beschränken sich auf laminare Strömungen und stationäre Blasenformen.

Lafaurie et al. [49] beschreiben mit der VoF-Methode ein inkompressibles Fluid, welches der Navier-Stokes-Gleichung mit Newtonscher Reibung gehorcht. Hauptaugenmerk wird auf eine Verbesserung der Behandlung der Oberflächenspannungen gelegt. Der verwendete Volume-of-Fluid-Algorithmus ist an die Arbeit von Hirt und Nichols angelehnt. Die Kollision von Tropfen bei unterschiedlichen Weberzahlen wird numerisch simuliert.

Eine ganz andere Anwendungsrichtung liegt in der Papierindustrie, wo die Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten einer ausströmenden Flüssigkeit als Modell zur Papierbogenherstellung berechnet werden sollen (vgl. [56]).

Youngs [102] führte einen verbesserten Transportmechanismus für die Volumenfraktion ein. Dabei wird eine Gerade mit der Steigung β in jede Masche so eingeschrieben, daß sie die Fluidfraktionen entsprechend dem vorgegebenen f -Wert trennt. Die Steigung bestimmt sich aus den acht Nachbarn (zweidimensionaler Fall). Der Transport der Volumenfraktion wird aufgrund dieser Fluidkonfiguration vorgenommen. Das Verfahren von Youngs ist für zeitabhängige, kompressible Strömungen konzipiert, die Gleichung der Massenerhaltung wird mit einem hochauflösenden Verfahren [95] gelöst. Daß dieser Algorithmus keine weite Verbreitung gefunden hat, liegt sehr wahrscheinlich an der relativ dürftigen Dokumentation.

Chen et al. (siehe [15] und [16]) benutzen eine modifizierte VoF-Methode zur numerischen Simulation einer inkompressiblen Strömung zweier nicht mischbarer Flüssigkeiten (Wasser und Gas). Mittels des SIMPLE-Verfahrens [65] wird eine Kopplung des Geschwindigkeitsfeldes mit dem Druck vorgenommen. Es wird zwei- sowie dreidimensional der Wandeinfluß auf eine einzelne, sehr große Blase im ruhenden Fluid sowie die Bildung einer torodial auseinanderbrechenden Blase untersucht.

Der FLAIR-Algorithmus (Flux Line-Segment Model for Advection and Interface Recon-

struction) von Ashgriz und Poo [3] ist dem oben erwähnten Verfahren von Youngs sehr ähnlich. Er stellt eine Verbesserung der Volume-of-Fluid-Methode im Bereich der Transportgleichung für die Volumenfraktionen dar. Ebenso wie bei Hirt oder Tomiyama kann mit FLAIR eine inkompressible Zweiphasenströmung zeitabhängig numerisch berechnet werden. Für die Advektion der Volumenfraktionen f wird an jedem Maschenrand eine Steigung β berechnet, wobei einzig die Füllstände der zu diesem Rand benachbarten zwei Zellen benutzt werden. Im Gegensatz zu Youngs sind also diese Steigungen an den Rändern definiert. Die Flüsse über die Maschenränder werden jeweils mittels der Steigungen zwischen zwei benachbarten Maschen integral berechnet. Dadurch kann eine sehr hohe Genauigkeit im Advektionsmechanismus erhalten werden, die durch die genauere Auflösung der Phasengrenzfläche bedingt ist.

Im Bereich der Magnetohydrodynamik benutzt Schneider (siehe [81] und [80]) den FLAIR-Algorithmus zur Beschreibung des Plasmarandes in einem Tokamak-Fusionsreaktor. Dabei konnte die relativ einfache Umsetzbarkeit und Genauigkeit der Methode gezeigt werden. Die Erhöhung der Interpolationsordnung von linearer zu zweiter Ordnung wurde als nicht notwendig angesehen.

Mashayek und Ashgriz [54] erweitern FLAIR zu A-FLAIR (Axisymmetric Flux Line Segment Model for Advection and Interface Reconstruction), um achsensymmetrische Probleme lösen zu können. Damit wird eine sehr hohe Genauigkeit in der Volumenerhaltung ($\sim 10^{-7}$) erzielt.

Rider und Kothe [71] haben einen neuen zweidimensionalen Algorithmus entwickelt, der die Phasengrenzfläche ebenso wie bei Youngs oder Ashgriz und Poo mit linearen Funktionen approximiert. Dabei wurde vor allem Wert auf eine sogenannte mehrdimensionale 'unsplitted' Zeitintegration gelegt, die eine hohe zeitliche Genauigkeit ermöglicht. Dabei wird unter einer 'unsplitted' Zeitintegration verstanden, daß die Flüsse der Volumenfraktion über die Zellgrenzen hinaus nicht getrennt nach Koordinatenrichtungen berechnet werden, sondern direkt in einem Schritt. Problem hierbei ist aber, daß die Massenerhaltung durch den 'unsplitted' Algorithmus nicht gewährleistet ist und dies mittels eines zusätzlichen Verteilungsalgorithmus korrigiert werden muß.

Ubbink und Issa [93] haben eine hochauflösende Methode (CICSAM) zur Verfolgung der Phasengrenzfläche entwickelt, die für beliebige, unstrukturierte Gitter konzipiert ist. Da auf diesem Gittertyp die Rekonstruktion der Phasengrenzfläche sehr aufwendig ist, wird ein anderer Weg beschritten. Die Volumenfraktionsgleichung wird mittels eines hochauflösenden Differenzschemas diskretisiert. Somit wird die explizite Rekonstruktion der Phasengrenzfläche vermieden. Hergeleitet wird CICSAM in Anlehnung zum Donor-Acceptor-Verfahren, welches Hirt und Nichols [41] nutzen. Die Güte des Verfahrens wird an verschiedenen Testfällen auf strukturierten und unstrukturierten Gittern demonstriert.

Scardovelli und Zaleski [79] haben einen sehr umfassenden Überblick über verschiedene Anwendungen der Volume-of-Fluid-Methode und den aktuellen Stand gegeben. Sie betonen, daß die VoF-Methode Fortschritte durch die Anwendung höherer Approximationsordnungen und den Übergang zu dreidimensionalen Fluidverteilungen gemacht hat. Die Autoren merken an, daß bisher Simulationen unter den 'schwierigen' Stoffbedingungen des Systems Luftblasen in Wasser ausgeblieben sind.

Sonstige Für die zweidimensionale Simulation eines inkompressiblen Fluids benutzt Rudman [73] das Konzept des fluß-korrigierten Transportes (flux-corrected transport: FCT [103]). Ohne eine explizite Rekonstruktion der Oberfläche werden extrem scharfe Grenzflächen (liegen innerhalb einer Masche) erhalten. Interessant ist der Artikel von Rudman auch deshalb, weil er einen Vergleich zwischen seiner Methode und verschiedenen *tracking*-Methoden (SLIC, Hirt und Nichols, Youngs) anstellt. Dabei schneidet die Methode von Youngs [102] als die mit der genauesten Grenzflächenrekonstruktion und mit dem genauesten Transport der Flüssigkeitsfraktionen ab.

Bewertung und Auswahl

Das in dieser Arbeit entwickelte numerische Konzept wird in dem Rechenprogramm TURBIT umgesetzt (siehe zu TURBIT und zur Implementierung Kapitel 4), welches zur Direkten Numerischen Simulation (DNS) und Large Eddy Simulation (LES) von einphasigen laminaren und turbulenten Strömungen entwickelt wurde. Dabei kann auf verschiedenste Elemente von TURBIT wie z.B. Datenstruktur oder graphische Ausgabe zurückgegriffen werden.

Zur Begründung, welches Verfahren für die hier vorliegende Arbeit verwendet wird, müssen Auswahlkriterien festgelegt werden. Diese sind in erster Linie durch die zu beschreibende Physik festgelegt, aber auch durch die Randbedingung, daß das Konzept in TURBIT umgesetzt wird. Folgende Liste an Eigenschaften an das Verfahren kann aufgestellt werden:

- feststehendes, zeitlich unveränderliches und strukturiertes Gitter (EULER-Beschreibung),
- dreidimensionale Beschreibung,
- möglichst genaue Rekonstruktion der Lage der Phasengrenzfläche ohne aber Grenzschichten (aus Effizienzgründen) aufzulösen,
- gute Massenerhaltungseigenschaften,
- Möglichkeit der Beschreibung von Fragmentierung und Koaleszenz.

Es hat sich gezeigt, daß die Volume-of-Fluid-Methode ein mächtiger Ansatz zur Beschreibung von Strömungen mit Grenzflächen ist. Vor allem Änderungen in der Topologie wie die Kollision oder das Aufreißen von Grenzflächen können damit relativ einfach beschrieben werden, was andere Methoden wie MAC oder *surface-tracking* nicht ohne weiteres bewerkstelligen.

Die Volume-of-Fluid-Algorithmen können in folgende Klassen unterteilt werden. Ursprüngliche Versionen wie z.B. von Hirt und Nichols [41] oder Noh und Woodward [63] rekonstruieren die Phasengrenzflächen mit Linien parallel zu den Koordinatenachsen. Deshalb werden diese Algorithmen zur Klasse mit stückweiser konstanten ('piecewise constant') Rekonstruktion gezählt. Die Algorithmen von Youngs [102], Ashgriz und Poo [3] oder Rider und Kothe [71] rekonstruieren die Phasengrenzfläche mit stückweise linearen

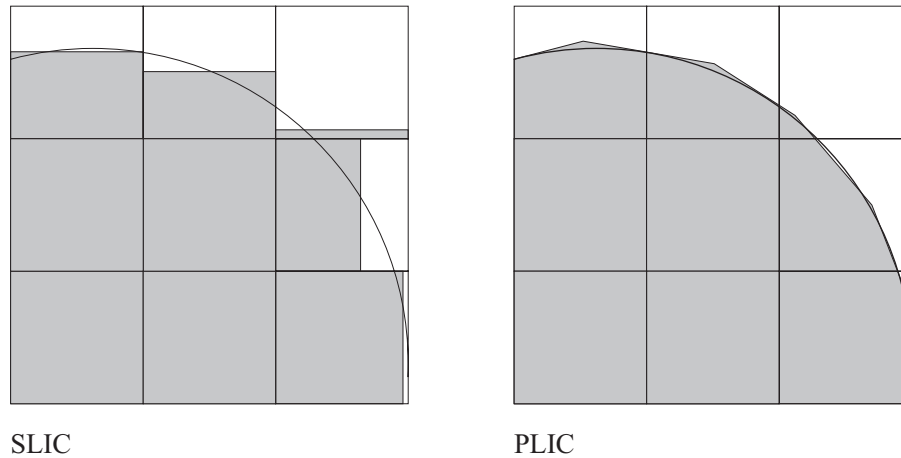


Abbildung 1.5: Vergleich zwischen stückweise konstanter (links, SLIC) und stückweise linearer (rechts, PLIC) Rekonstruktion einer Phasengrenze in einem Rechengitter

(‘piecewise linear’ oder auch PLIC, ‘Piecewise Linear Interface Calculation’) Elementen. Zum schematischen Vergleich siehe Abbildung 1.5.

Im Bereich der Blasenströmungen wurden wichtige Arbeiten von Tomiyama und Koautoren gemacht, denen die VoF-Methode zugrunde liegt. Dabei wurde sie aber ausschließlich für inkompressible und laminare Fluide verwendet, bei Benutzung relativ grober Auflösungen der Phasengrenzfläche (‘piecewise constant’).

Fast alle in der Literatur vorgestellten Verfahren behandeln zweidimensionale Fluidkonfigurationen; bisher fehlt ein hochauflösender Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmus für dreidimensionale Fluidverteilungen.

In allen Veröffentlichungen wird die Gleichung für die Volumenfraktion f postuliert. Es wird von einem Lagrange-Ansatz für die Transportgleichung ausgegangen. Die darin enthaltene Geschwindigkeit des Transportes \vec{u} wird nicht genauer spezifiziert. Stillschweigend gehen die Autoren davon aus, daß wohl ein homogenes Strömungsmodell (siehe dazu [15]) angewendet werden kann, somit nur eine Geschwindigkeit vorliegt. In dieser Arbeit wird zur einheitlichen Beschreibung ein komplettes Gleichungssystem ausgehend von den Erhaltungsgleichungen der einzelnen Phasen hergeleitet, in dem die enthaltenen Geschwindigkeiten eindeutig gekennzeichnet sind.

Bei den Rekonstruktionsalgorithmen der Phasengrenzfläche gibt es verschiedenste Ansätze. Die genauesten Beschreibungen erfolgen mit PLIC-Algorithmen, wobei hierbei noch die Möglichkeit zur Erhöhung der Interpolationsordnung gegeben ist. Ein Vergleich der Oberflächendarstellung ergibt, daß PLIC-Algorithmen am besten die gegebene Fluidkonfiguration wiedergeben. Dies wird auch durch die Arbeit von Rudman [73] belegt, in der die Methode von Youngs besser als alle anderen (‘piecewise constant’) VoF-Methoden abschneidet.

Einzig die Volume-of-Fluid-Methode erfüllt vollständig obige Anforderungsliste. Zusätzlich konnte die vielseitige Einsatzfähigkeit der VoF-Methode in einem breiten Spektrum von Anwendungen gezeigt werden. Deshalb wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit die Volume-of-Fluid-Methode verwendet.

In der zu der Volume-of-Fluid-Methode angegebenen Literatur werden für die Diskretisierung der konvektiven Terme Standardverfahren verwendet. Hohe Dichteunterschiede der beiden Phasen bedeuten ein diskontinuierliches Verhalten der Dichte über die Phasengrenze hinweg, weshalb das Einsetzen hochauflösender Verfahren, wie sie speziell für Strömungen mit Diskontinuitäten entwickelt wurden (z.B. Gasdynamik), Vorteile gegenüber diesen Standardverfahren bietet.

1.3 Zielsetzung und Vorgehensweise

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines dreidimensionalen Algorithmus zur numerischen Simulation von Einzelblasen und Schwärmen von Blasen. Für die formulierten Anforderungen wird als Ergebnis der Literaturstudien vom Volume-of-Fluid-Algorithmus ausgegangen. Die zusätzliche Transportgleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase wird in der Literatur postuliert. In dieser Arbeit wird die Volume-of-Fluid-Methode auf ein solides mathematisches Fundament gestellt, die Volumenfraktionsgleichung aus den physikalischen Erhaltungsgleichungen hergeleitet. Zur numerischen Lösung dieser Gleichung wird ein dreidimensionaler Algorithmus mit lokal linearer Approximation der Phasengrenzfläche entwickelt. Zusammen mit numerisch hochauflösenden Verfahren zur Lösung der physikalischen Erhaltungsgleichungen für inkompressible Fluide bedeutet dies ein wesentlicher Fortschritt zu den in der Literatur angewendeten Verfahren. Anhand von Phasengrenzflächenproblemen werden die numerischen Verfahren verifiziert. Das neue numerische Verfahren wird für die Simulation von aufsteigenden Einzelblasen verschiedenster Stoffkombinationen eingesetzt. Es wird gezeigt, daß sich in der Simulation die physikalisch bedingten Blasenformen und Aufstiegsgeschwindigkeiten einstellen. Die Grenzen des neuen Verfahrens werden anhand des zu erreichenden Dichteverhältnisses ausgelotet. Zur Demonstration der universellen Einsetzbarkeit des neuen numerischen Verfahrens werden in einer Simulation mehrere aufsteigende Blasen berechnet.

Die Vorgehensweise in dieser Arbeit ist folgende: In Kapitel 2 wird die mathematische Beschreibung einer Zweiphasenströmung dargestellt. Dabei wird auf die Struktur der physikalischen Erhaltungsgleichungen eingegangen sowie auf die zu modellierenden Schließungsterme. Die in der Literatur zu Volume-of-Fluid-Methoden postulierte Volumenfraktionsgleichung wird als Massenerhaltungsgleichung der flüssigen Phase physikalisch motiviert abgeleitet.

Kapitel 3 behandelt die in dieser Arbeit verwendeten numerischen Verfahren. Dabei wird ein neuer Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmus für dreidimensionale Fluidkonfigurationen vorgestellt, mit dem die Volumenfraktionsgleichung der Volume-of-Fluid-Methode numerisch gelöst wird. Zusätzlich wird auf die hochauflösende Diskretisierung der konvektiven Terme, das verwendete Zeitintegrationsverfahren, die Behandlung der Oberflächenspannung und das generelle Konzept zur Lösung des Gleichungssystems aus Kapitel 2 eingegangen.

Kapitel 4 gibt zum einen einen Überblick über das verwendete Rechenprogramm TURBIT, welches für die Simulation einer Zweiphasenströmung zu dem neu bezeichneten Rechenprogramm TURBIT-VoF erweitert wurde. Danach wird erläutert, wie das in Kapitel 2 und 3 vorgestellte Konzept programmtechnisch umgesetzt wurde.

Kapitel 5 dokumentiert die mit TURBIT-VoF durchgeführten Verifikationsrechnungen. Dabei werden zum einen Strömungen mit nur einer Phase betrachtet. Die Ergebnisse der Rechnungen mit TURBIT-VoF werden mit denen von Rechnungen mit TURBIT verglichen. Zum anderen werden physikalische Problemstellungen mit zwei Phasen berechnet. Die Ergebnisse der TURBIT-VoF Berechnungen werden entweder mit analytischen Lösungen verglichen oder mit Werten aus der Literatur.

Kapitel 6 stellt die Anwendungsrechnungen für aufsteigende Blasen zusammen. Dabei werden Blasen mit verschiedensten Stoffwertkombinationen berechnet und mit experimentellen Arbeiten aus der Literatur verglichen. Bei der Anwendung des neuen numerischen Verfahrens auf aufsteigende Einzelblasen im Kennzahlenbereich des Systems Luftblasen in Wasser werden erstmals Blasen im 'wobbling' Bereich mit stark dynamischer Phasengrenzfläche numerisch simuliert. Zusätzlich wird die Anwendung des neuen Verfahrens auf Strömungen mit mehreren Blasen anhand einer Simulation mit fünf aufsteigenden Blasen demonstriert.

Kapitel 7 enthält die zusammenfassenden Schlußfolgerungen und den Ausblick auf die Fragestellungen, die durch diese Arbeit aufgeworfen werden.

Kapitel 2

Mathematische Beschreibung

Ziel dieses Kapitels ist die Darstellung der mathematischen Beschreibung einer Zweiphasenströmung, wie sie im Rechenprogramm TURBIT-VoF verwirklicht wurde. Das Kapitel gliedert sich wie folgt. In einem ersten Abschnitt werden die physikalischen Grundgleichungen von Zweiphasenströmungen erörtert. Die grundlegende Vorgehensweise zur Erlangung des Gleichungssystems, wie es im Rechenprogramm gelöst wird, wird dargelegt. Der zweite Abschnitt dieses Kapitels beschäftigt sich mit den Schließungstermen und einem Ansatz zu deren Modellierung.

2.1 Physikalische Grundgleichungen der Zweiphasenströmung

In diesem Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung eines zweiphasigen Gemisches dargestellt. Dabei wird von den physikalischen Erhaltungsgleichungen, wie sie von den einphasigen Strömungen her bekannt sind, ausgegangen. Da eine isotherme Strömung betrachtet wird, handelt es sich um die Erhaltungsgleichung für die Masse, auch Kontinuitätsgleichung, und die Erhaltungsgleichung für den Impuls, auch Navier-Stokes-Gleichung genannt. Für beide Phasen lassen sich diese Erhaltungsgleichungen getrennt aufstellen. Es wird eine räumliche Mittelung des Gleichungssystems durchgeführt, wodurch mathematische Kopplungsterme zwischen den Phasen entstehen, die physikalisch interpretiert werden. Durch Addition der jeweiligen Erhaltungsgleichung für beide Phasen wird eine Gemisch-Kontinuitäts- und eine Gemisch-Navier-Stokes-Gleichung gebildet. In einem weiteren Schritt wird eine Aufspaltung der physikalischen Zustandsgrößen in einen räumlichen Mittelwert und einen Fluktuationsanteil durchgeführt. Desweiteren wird neben der Gemisch-Kontinuitätsgleichung die Kontinuitätsgleichung für eine Phase eingeführt (flüssige Phase), die Verwendung in der Volume-of-Fluid-Methode findet. Anschließend wird das Gleichungssystem in dimensionslose Zustandsgrößen überführt; dadurch ist die Skalierung auf verschiedene physikalische Probleme unterschiedlicher Stoffsysteme möglich. Abschließend wird das Gleichungssystem vereinfacht unter Berücksichtigung inkompressibler Einzelphasen und inkompressibler Gemischdichte.

2.1.1 Erhaltungsgleichungen einer Phase

Es wird eine isotherme Zweiphasenströmung mit kompressiblen Einzelphasen betrachtet. Für die beiden Phasen können die Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik getrennt aufgestellt werden. Dabei bezeichnet der Index $k = 1$ die erste Phase (z.B. flüssig) und der Index $k = 2$ die zweite Phase (z.B. gasförmig). Da nur isotherme Strömungen betrachtet werden, muß die Gleichung für die Energieerhaltung nicht behandelt werden. Aus der Literatur zu einphasigen Strömungen (z.B. [6], [100] oder [104]) können die physikalischen Erhaltungsgleichungen entnommen werden. Der in dieser Arbeit beschrittene Weg der Herleitung unter Annahme einer infinitesimalen, funktionalen Phasengrenzfläche wird ebenso in der klassischen Literatur zu Zweiphasenströmungen gewählt (siehe hierzu Ishii [45], Lahey und Drew [50] oder Drew [24]).

Die Zweiphasenströmung befinde sich im Gebiet Ω , wobei die einzelne Phasen k jeweils das zeitabhängige Gebiet $\Omega_k(t)$ einnehme. Insgesamt muß somit gelten

$$\Omega = \Omega_1(t) \cup \Omega_2(t) . \quad (2.1)$$

Die Massenerhaltung der Phasen in den Gebieten $\Omega_k(t)$, in denen nur die Phase k vorliegt, führt auf die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = 0 \quad (2.2)$$

mit

$$\begin{aligned} \rho_k &= \rho_k(\vec{x}, t) && \text{Dichte der Phase } k \\ \vec{u}_k &= \vec{u}_k(\vec{x}, t) && \text{Geschwindigkeit der Phase } k . \end{aligned}$$

Aus der Impulserhaltung ergibt sich die Navier-Stokes-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \vec{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) = -\nabla P_k + \nabla \cdot \underline{\tau}_k + \rho_k \vec{f}_k^{ext} \quad (2.3)$$

mit

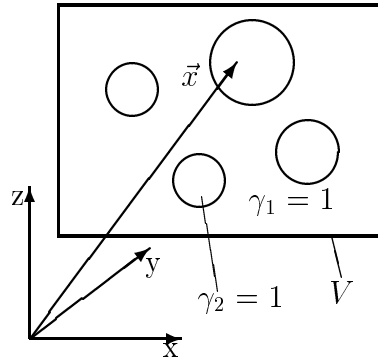
$$\begin{aligned} P_k &= P_k(\vec{x}, t) && \text{Druck der Phase } k \\ \underline{\tau}_k &= \underline{\tau}_k(\vec{x}, t) && \text{Schubspannungstensor der Phase } k \\ \vec{f}_k^{ext} &= \vec{f}_k^{ext}(\vec{x}, t) && \text{externe Kräfte auf Phase } k . \end{aligned}$$

Der Schubspannungstensor $\underline{\tau}_k$ wird unter Annahme einer Newtonschen Flüssigkeit, bei der die Reibungsspannungen als linear von den Deformationsgeschwindigkeiten abhängig betrachtet werden, folgendermaßen gebildet:

$$\underline{\tau}_k = \mu_k \left[\nabla \otimes \vec{u}_k + (\nabla \otimes \vec{u}_k)^T \right] + \left(\xi_k - \frac{2}{3} \mu_k \right) (\nabla \cdot \vec{u}_k) \underline{I} \quad (2.4)$$

mit

$$\begin{aligned} \mu_k &= \mu_k(\vec{x}, t) && \text{Koeffizient der dynamischen Zähigkeit der Phase } k \\ \xi_k &= \xi_k(\vec{x}, t) && \text{Koeffizient der Druckzähigkeit der Phase } k . \end{aligned}$$

Abbildung 2.1: Kontrollvolumen V mit Ortsvektor \vec{x} zum Zeitpunkt t

2.1.2 Räumliche Mittelung

Gleichungen (2.2) und (2.3) sind in differentieller Form als kontinuierliche Gleichungen angegeben. Für ein Rechenprogramm wird aber eine diskrete Formulierung des physikalischen Problems benötigt. Um die in der diskreten Formulierung enthaltenen abhängigen Variablen physikalisch interpretieren zu können, werden Mittelungsoperatoren eingeführt. In diesem Abschnitt wird deshalb die räumliche Filterung der Grundgleichungen durchgeführt, was weiterhin auf kontinuierliche Größen führt.

Räumliche Mittelungsoperatoren

Es wird ein Kontrollvolumen V betrachtet, über dem durch räumliche Integration die Mittelung durchgeführt wird. Für diese Integration wird eine Phasenindikatorfunktion $\gamma_k(\vec{x}, t)$ eingeführt, die angibt, ob sich der Ortsvektor \vec{x} zum Zeitpunkt t in der Phase k befindet (siehe Abbildung 2.1):

$$\gamma_k(\vec{x}, t) := \begin{cases} 1 & \text{für } \vec{x} \in \text{Phase } k \text{ zur Zeit } t \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Als Volumenfraktionen α_k , die den Volumenanteil der Phase k im Kontrollvolumen V darstellen, ergeben sich:

$$\alpha_k \equiv \alpha_k(t) := \frac{1}{V} \int_V \gamma_k(\vec{x}, t) dV = \frac{V_k}{V}. \quad (2.6)$$

Der Vollständigkeit halber wird hier die Definition der Phasengrenzflächenkonzentration a_{int} mit angeführt:

$$a_{int} = \frac{1}{V} \int_{A_{int}} dA_{int}. \quad (2.7)$$

Die Phasengrenzflächenkonzentration ist eine dimensionsbehaftete Größe mit der Dimension einer inversen Länge. Sie wurde im Rahmen der Formulierung des Zweifluidmodells von Ishii [45] eingeführt, da sie den Transport von Masse, Impuls und Energie über die Oberfläche entscheidend beeinflusst.

Folgende Mittelungsoperatoren für eine skalare Größe Ψ_k werden definiert:

$$\langle \Psi_k \rangle := \frac{1}{V} \int_V \Psi_k \gamma_k(\vec{x}, t) dV \quad (2.8)$$

und

$$\langle \Psi_k \rangle_k := \frac{1}{V_k(t)} \int_V \Psi_k \gamma_k(\vec{x}, t) dV . \quad (2.9)$$

Somit gilt:

$$\langle \Psi_k \rangle = \alpha_k \langle \Psi_k \rangle_k . \quad (2.10)$$

$\langle \Psi_k \rangle$ bezieht sich auf das zeitunabhängige Kontrollvolumen V , $\langle \Psi_k \rangle_k$ auf das von der Phase k eingenommene zeitabhängige Volumen $V_k(t)$.

In Gray et al. [31] werden folgende Mittelwerttheoreme für eine skalare Größe Ψ_k hergeleitet (siehe hierzu auch [8] und [43]):

$$\langle \nabla \Psi_k \rangle = \nabla \langle \Psi_k \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \Psi_k \vec{n}_k dA_{int} \quad (2.11)$$

und

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \Psi_k \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_k \rangle - \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \Psi_k \vec{\omega}_{int} \vec{n}_k dA_{int} \quad (2.12)$$

wobei gilt

- \vec{n}_k Normalenvektor, der aus der Phase k herauszeigt
- A_{int} Phasengrenzfläche
- $\vec{\omega}_{int}$ Geschwindigkeit der Phasengrenzfläche .

Diese Mittelwerttheoreme aus Gleichungen (2.11) und (2.12) werden zum Vertauschen der Differentialoperatoren ∇ bzw. $\frac{\partial}{\partial t}$ mit dem Operator der räumlichen Mittelung $\langle \cdot \rangle$ benötigt. Es tritt jeweils ein integraler Zusatzterm in Form eines Oberflächenintegrals, gebildet über die Phasengrenzfläche, auf.

Räumliche Mittelung der Grundgleichung

Die Kontinuitätsgleichung (2.2) und die Navier-Stokes-Gleichung (2.3) werden räumlich gemittelt, indem sie mit der Phasenindikatorfunktion $\gamma_k(\vec{x}, t)$ multipliziert und danach über das Kontrollvolumen V räumlich integriert werden.

Für die Kontinuitätsgleichung ergibt sich:

$$\underbrace{\frac{1}{V} \int_V \gamma_k(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \rho_k dV}_{\langle \frac{\partial}{\partial t} \rho_k \rangle} + \underbrace{\frac{1}{V} \int_V \gamma_k(\vec{x}, t) \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) dV}_{\langle \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) \rangle} = 0 , \quad (2.13)$$

bzw.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \rho_k \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) \rangle = 0 . \quad (2.14)$$

Durch die Anwendung der Mittelwerttheoreme (2.11) und (2.12) wird daraus:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_k \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_k \vec{u}_k \rangle = \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \rho_k (\vec{\omega}_{int} - \vec{u}_k) \vec{n}_k dA_{int} , \quad (2.15)$$

oder mit der Abkürzung $,^m_k$ für den Massenaustausch über die Phasengrenzfläche

$$,^m_k := \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \rho_k (\vec{\omega}_{int} - \vec{u}_k) \vec{n}_k dA_{int} \quad (2.16)$$

ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_k \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_k \vec{u}_k \rangle = ,^m_k . \quad (2.17)$$

Ebenso kann mit der Navier-Stokes-Gleichung verfahren werden:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \vec{u}_k) \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) \rangle = -\langle \nabla P_k \rangle + \langle \nabla \cdot \underline{\tau}_k \rangle + \langle \rho_k \vec{f}_k^{ext} \rangle . \quad (2.18)$$

Durch die Mittelwerttheoreme wird daraus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_k \vec{u}_k \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k \rangle &= -\nabla \langle P_k \rangle + \nabla \cdot \langle \underline{\tau}_k \rangle + \langle \rho_k \vec{f}_k^{ext} \rangle \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{int}} [\rho_k \vec{u}_k \otimes (\vec{\omega}_{int} - \vec{u}_k) - p_k \underline{I} + \underline{\tau}_k] \vec{n}_k dA_{int} , \end{aligned} \quad (2.19)$$

oder mit der Abkürzung $,^i_k$ für den Impulsaustausch über die Phasengrenzfläche

$$,^i_k := \frac{1}{V} \int_{A_{int}} [\rho_k \vec{u}_k \otimes (\vec{\omega}_{int} - \vec{u}_k) - P_k \underline{I} + \underline{\tau}_k] \vec{n}_k dA_{int} , \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_k \vec{u}_k \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k \rangle = -\nabla \langle P_k \rangle + \nabla \cdot \langle \underline{\tau}_k \rangle + \langle \rho_k \vec{f}_k^{ext} \rangle + ,^i_k . \quad (2.21)$$

Gleichungen (2.17) und (2.21) sind aus dem Zweifluidmodell (siehe Ishii [45], Lahey und Drew [50], Drew [24] oder Drew und Passman [25]) bekannt.

Sprungbedingungen an der Phasengrenzfläche

Aus der räumlichen Mittelung der Grundgleichungen ergeben sich die Austauschsterme $,^m_k$ und $,^i_k$, die für einen Massenaustausch zwischen den beiden Phasen in der Kontinuitätsgleichung und für einen Impulsaustausch in der Navier-Stokes-Gleichung stehen.

Summiert man diese Terme für beide Phasen auf, so ergibt sich unter Annahme einer massenlosen, infinitesimal dünnen Grenzfläche (vgl. [45] und [29]):

$$\sum_{k=1,2} \vec{m}_k^m = 0 \quad (2.22)$$

und

$$\sum_{k=1,2} \vec{m}_k^i = \sum_{\beta=1}^3 \left[\frac{1}{V} \int_{A_{int}} (t_\alpha a^{\alpha\beta} \sigma)_\beta dA_{int} \right] \equiv \vec{m}_{int}^\sigma . \quad (2.23)$$

Nach Drew und Passmann [25] kann gezeigt werden:

$$\vec{m}_{int}^\sigma = a_{int} [\sigma \kappa \vec{n} + \nabla_{int} \sigma] , \quad (2.24)$$

mit σ : Koeffizient der Oberflächenspannung, κ : Krümmung der Phasengrenzfläche, a_{int} : Phasengrenzflächenkonzentration, \vec{n} : Einheitsnormalenvektor und ∇_{int} : Ableitung entlang der Oberflächenkoordinaten. Der Koeffizient der Oberflächenspannung σ hängt von der Temperatur und der Konzentration an Verunreinigungen ab. In dieser Arbeit wird eine isotherme Zweiphasenströmung angenommen und es wird davon ausgegangen, daß beide Phasen aus reinen Fluiden bestehen. Deshalb wird die Oberflächenspannung als konstant angenommen, somit fällt der zweite Term der rechten Seite in Gleichung (2.24) weg und es ergibt sich:

$$\vec{m}_{int}^\sigma = a_{int} \sigma \kappa \vec{n} . \quad (2.25)$$

Bei Addition der gemittelten Massengleichungen fallen die Austauschsterme in der Summe heraus. In der Navier-Stokes-Gleichung bleibt der Zusatzterm \vec{m}_{int}^σ übrig, der physikalisch als Impulsaustausch durch die Oberflächenspannung zu interpretieren ist.

2.1.3 Mittel- und Schwankungswert

Die lokalen, instantanen, kontinuierlichen Größen werden aufgeteilt in einen Mittelwert des von der Phase k eingenommenen Volumens V_k und einen Schwankungswert, der die Abweichung von diesem mittleren Wert angibt. Für die lokale Geschwindigkeit ergibt sich somit:

$$\vec{u}_k = \langle \vec{u}_k \rangle_k + \vec{u}'_k . \quad (2.26)$$

Bei der linearen räumlichen Mittelung wird daraus:

$$\langle \vec{u}_k \rangle_k = \underbrace{\langle \langle \vec{u}_k \rangle_k \rangle_k}_{\langle \vec{u}_k \rangle_k} + \langle \vec{u}'_k \rangle_k , \quad (2.27)$$

also

$$\langle \vec{u}'_k \rangle_k = 0 . \quad (2.28)$$

Wie gefordert verschwindet der Schwankungsanteil über V_k gemittelt.

Diese Aufspaltung in Mittel- und Schwankungswert ähnelt sehr der von Reynolds in der Theorie turbulenter Strömungen eingeführten (vgl. [39] und [72]). Zu beachten ist hierbei, daß es sich im Gegensatz zur Turbulenztheorie von Reynolds um eine räumliche, nicht zeitliche Mittelung handelt. Somit können die in der Turbulenztheorie vorgenommene Interpretationen, z.B. die der Reynoldsspannungen, nicht ohne weiteres übernommen werden. Vielmehr handelt es sich hier um Werte, wie sie ähnlich bei der Grobstruktursimulation von Turbulenz vorkommen, und dort mit Feinstrukturmodellen behandelt werden.

Insgesamt werden folgende Aufspaltungen vorgenommen:

$$\begin{aligned}\vec{u}_k &= \langle \vec{u}_k \rangle_k + \vec{u}'_k \\ \rho_k &= \langle \rho_k \rangle_k + \rho'_k \\ P_k &= \langle P_k \rangle_k + P'_k \\ \mu_k &= \langle \mu_k \rangle_k + \mu'_k \\ \xi_k &= \langle \xi_k \rangle_k + \xi'_k ,\end{aligned}$$

wobei unter Annahme eines Newtonschen Fluids μ_k als Koeffizient der dynamischen Zähigkeit und ξ_k als Koeffizient der Druckzähigkeit im Schubspannungstensor $\underline{\tau}_k$ vorkommen.

Bei der Einführung obiger Aufspaltung der Variablen in Mittel- und Schwankungswert in die Erhaltungsgleichungen treten Zusatzterme auf, die durch die Korrelation der Schwankungswerte bedingt sind.

Für die Kontinuitätsgleichung muß betrachtet werden:

$$\begin{aligned}\langle \rho_k \vec{u}_k \rangle &= \langle (\langle \rho_k \rangle_k + \rho'_k) (\langle \vec{u}_k \rangle_k + \vec{u}'_k) \rangle = \langle \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k \rangle + \underbrace{\langle \langle \rho_k \rangle_k \vec{u}'_k \rangle}_0 \\ &+ \underbrace{\langle \rho'_k \langle \vec{u}_k \rangle_k \rangle}_0 + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle \\ &= \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle .\end{aligned}\tag{2.29}$$

Damit ergibt sich insgesamt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k + \nabla \cdot \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k = , \frac{m}{k} - \nabla \cdot \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle .\tag{2.30}$$

Bei der Impulsgleichung tritt, neben der obigen Zweifachkorrelation, folgende Dreifachkorrelation auf:

$$\begin{aligned}\langle \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k \rangle &= \langle (\langle \rho_k \rangle_k + \rho'_k) (\langle \vec{u}_k \rangle_k + \vec{u}'_k) \otimes (\langle \vec{u}_k \rangle_k + \vec{u}'_k) \rangle \\ &= \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k \otimes \langle \vec{u}_k \rangle_k + \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle + 2 \langle \vec{u}_k \rangle_k \otimes \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle .\end{aligned}\tag{2.31}$$

Probleme bereitet hier nur der Schubspannungstensor $\underline{\tau}_k$ wegen der Geschwindigkeits-

ableitungen:

$$\begin{aligned}
\langle \underline{\mathcal{I}}_k \rangle &= \alpha_k \left\{ \langle \mu_k \rangle_k \left[\nabla \otimes \langle \vec{u}_k \rangle_k + (\nabla \otimes \langle \vec{u}_k \rangle_k)^T \right] + \left(\langle \xi_k \rangle_k - \frac{2}{3} \langle \mu_k \rangle_k \right) (\nabla \cdot \langle \vec{u}_k \rangle_k) \underline{\mathbf{I}} \right\} \\
&+ \left\langle \left\{ \mu'_k \left[\nabla \otimes \vec{u}'_k + (\nabla \otimes \vec{u}'_k)^T \right] + \left(\xi'_k - \frac{2}{3} \mu'_k \right) (\nabla \cdot \vec{u}'_k) \underline{\mathbf{I}} \right\} \right\rangle \\
&+ \langle \mu_k \rangle_k \left[\langle \nabla \otimes \vec{u}'_k \rangle + (\langle \nabla \otimes \vec{u}'_k \rangle)^T \right] + \left(\langle \xi_k \rangle_k - \frac{2}{3} \langle \mu_k \rangle_k \right) (\langle \nabla \cdot \vec{u}'_k \rangle) \underline{\mathbf{I}} \\
&= \alpha_k \langle \underline{\mathcal{I}}_k^{\langle \vec{u}_k \rangle_k} \rangle_k + \langle \underline{\mathcal{I}}'_k \rangle + \langle \underline{\mathcal{I}}_k^{u'} \rangle . \tag{2.32}
\end{aligned}$$

In dieser Arbeit wird keine Verdampfung und Kondensation betrachtet, deshalb sind die Geschwindigkeiten an der Phasengrenzfläche kontinuierlich. Aus der Kontinuität der Geschwindigkeiten folgt innerhalb eines Kontrollvolumens auch die Kontinuität der Schwankungsgeschwindigkeiten. Somit ergibt sich für die Terme $\langle \nabla \otimes \vec{u}'_k \rangle$:

$$\langle \nabla \otimes \vec{u}'_k \rangle = \nabla \otimes \underbrace{\langle \vec{u}'_k \rangle}_0 + \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \vec{u}'_k \otimes \vec{n}_k dA_{int} = \frac{1}{V} \int_{A_{int}} \vec{u}'_k \otimes \vec{n}_k dA_{int} = 0 . \tag{2.33}$$

Aus Gleichung (2.33) folgt:

$$\langle \underline{\mathcal{I}}_k^{u'} \rangle = 0 . \tag{2.34}$$

Insgesamt ergibt sich als Navier-Stokes-Gleichung für die Phase k :

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k + \nabla \cdot \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}_k \rangle_k \otimes \langle \vec{u}_k \rangle_k \\
&= -\nabla \alpha_k \langle P_k \rangle_k + \nabla \cdot \alpha_k \langle \underline{\mathcal{I}}_k^{\langle \vec{u}_k \rangle_k} \rangle_k + \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k \vec{f}_k^{ext} + \vec{\tau}_k^i \\
&+ \nabla \cdot \langle \underline{\mathcal{I}}'_k \rangle - \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle \\
&- \nabla \cdot (\langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle + 2 \langle \vec{u}_k \rangle_k \otimes \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle) . \tag{2.35}
\end{aligned}$$

2.1.4 Gleichungen für das Zweiphasengemisch

Wie schon in Abschnitt 2.1.2 angedeutet, führt die Addition der Gleichungen für beide Phasen k (Gleichung (2.30) und (2.35)) zu einem Herausfallen der Austauschsterme $\vec{\tau}_k^m$. Ein weiteres Vorteil der Addition kann aus Abbildung 2.2 abgelesen werden. Hier ist eine Blase im Rechengebiet dargestellt. Aufgrund der feinen Auflösung der Phasengrenzfläche durch das Gitter enthalten die meisten Zellen nur eine Phase. Somit macht es in diesen Zellen keinen Sinn, Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung für beide Phasen zu lösen. Durch die Addition der jeweiligen Erhaltungsgleichung über beide Phasen vereinfacht sich das System nicht nur durch den Wegfall der Summe $\vec{\tau}_k^m$, sondern generell wird der numerische Aufwand auf ein sinnvolles Maß beschränkt.

Für die Kontinuitätsgleichung ergibt sich mit $f \equiv \alpha_1$ (f : Volumenfraktion der Phase 1, bzw. der flüssigen Phase):

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} (f \langle \rho_1 \rangle_1 + (1-f) \langle \rho_2 \rangle_2) + \nabla \cdot (f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1-f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \\
&= -\nabla \cdot \langle \rho'_1 \vec{u}'_1 \rangle - \nabla \cdot \langle \rho'_2 \vec{u}'_2 \rangle , \tag{2.36}
\end{aligned}$$

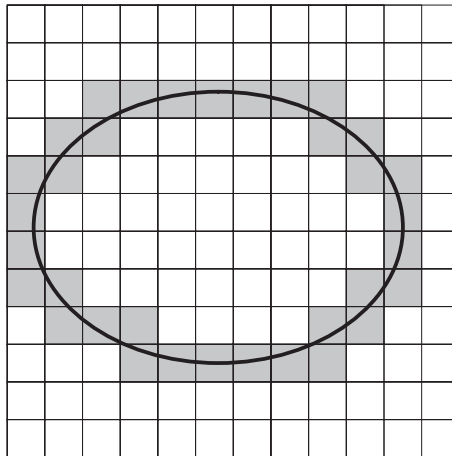


Abbildung 2.2: Blase in einem Ausschnitt des Rechengebietes, nur in schraffierten Zellen sind beide Phasen gleichzeitig vorhanden

oder mit folgenden Größen:

$$\begin{aligned}
 \rho_m &:= f \langle \rho_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 && \text{gemittelte (scheinbare) Dichte} \\
 \vec{u}_m &:= \frac{1}{\rho_m} (f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2) && \text{Schwerpunktgeschwindigkeit} \\
 A_k &:= -\nabla \cdot \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \nabla \cdot \rho_m \vec{u}_m = \sum_{k=1,2} A_k . \quad (2.37)$$

Entsprechend wird bei der Navier-Stokes-Gleichung vorgegangen:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \\
 & + \nabla \cdot (f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 \otimes \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2 \otimes \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \\
 & = -\nabla (f \langle P_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle P_2 \rangle_2) + \nabla \cdot \left(f \langle \underline{\mathcal{T}}_1^{\langle \vec{u}_1 \rangle_1} \rangle_1 + (1 - f) \langle \underline{\mathcal{T}}_2^{\langle \vec{u}_2 \rangle_2} \rangle_2 \right) \\
 & + f \langle \rho_1 \rangle_1 \vec{f}_1^{ext} + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \vec{f}_2^{ext} \\
 & + \sum_{k=1,2} \left(\nabla \cdot \langle \underline{\mathcal{T}}'_k \rangle - \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle \right) \\
 & + \sum_{k=1,2} [-\nabla \cdot (\langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle + 2 \langle \vec{u}'_k \rangle_k \otimes \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle)] \\
 & + \vec{m}_{int}^\sigma . \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Der Term in der zweiten Zeile kann umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
 & f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 \otimes \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2 \otimes \langle \vec{u}_2 \rangle_2 \\
 & = \rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + f(1 - f) \frac{\langle \rho_1 \rangle_1 \langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \otimes (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \\
 & = \rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + \underline{D}_{int} . \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

Eine ähnliche Umformung kann für den zweiten Term in der dritten Zeile vorgenommen werden zu:

$$f \langle \mathcal{I}_1^{\langle \vec{u}_1 \rangle_1} \rangle_1 + (1-f) \langle \mathcal{I}_2^{\langle \vec{u}_2 \rangle_2} \rangle_2 = \mathcal{I}_m + \mathcal{I}_{int} \quad (2.40)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_m &:= [f \langle \mu_1 \rangle_1 + (1-f) \langle \mu_1 \rangle_1] \left[\nabla \otimes \vec{u}_m + (\nabla \otimes \vec{u}_m)^T \right] \\ &+ \left[f \left(\langle \xi_1 \rangle_1 - \frac{2}{3} \langle \mu_1 \rangle_1 \right) + (1-f) \left(\langle \xi_2 \rangle_2 - \frac{2}{3} \langle \mu_2 \rangle_2 \right) \right] (\nabla \cdot \vec{u}_m) \underline{I} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{int} &:= -f \langle \mu_1 \rangle_1 \nabla \otimes \left[(1-f) \frac{\langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} \left\{ \delta \vec{u}_{int} + (\delta \vec{u}_{int})^T \right\} \right] \\ &+ (1-f) \langle \mu_2 \rangle_2 \nabla \otimes \left[f \frac{\langle \rho_1 \rangle_1}{\rho_m} \left\{ \delta \vec{u}_{int} + (\delta \vec{u}_{int})^T \right\} \right] \\ &- f \left(\langle \xi_1 \rangle_1 - \frac{2}{3} \langle \mu_1 \rangle_1 \right) \left(\nabla \cdot \left[(1-f) \frac{\langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} \delta \vec{u}_{int} \right] \right) \underline{I} \\ &+ (1-f) \left(\langle \xi_2 \rangle_2 - \frac{2}{3} \langle \mu_2 \rangle_2 \right) \left(\nabla \cdot \left[f \frac{\langle \rho_1 \rangle_1}{\rho_m} \delta \vec{u}_{int} \right] \right) \underline{I} \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\delta \vec{u}_{int} := \langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2 \quad (2.43)$$

Auch hier bietet es sich an Abkürzungen einzuführen:

$$\begin{aligned} P_m &:= f \langle P_1 \rangle_1 + (1-f) \langle P_2 \rangle_2 \\ \vec{f}_m^{ext} &:= f \langle \rho_1 \rangle_1 \vec{f}_1^{ext} + (1-f) \langle \rho_2 \rangle_2 \vec{f}_2^{ext} \\ B_k &:= + \nabla \cdot \langle \mathcal{I}_k \rangle - \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle \\ &\quad - \nabla \cdot \langle \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle + 2 \langle \vec{u}'_k \rangle_k \otimes \langle \rho'_k \vec{u}'_k \rangle + \langle \rho'_k \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle \rangle . \end{aligned}$$

Damit ergibt sich insgesamt für die Navier-Stokes-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + \underline{D}_{int}) &= -\nabla P_m + \nabla \cdot (\mathcal{I}_m + \mathcal{I}_{int}) + \vec{f}_m^{ext} \\ &+ \sum_{k=1,2} B_k + \vec{m}_{int}^\sigma . \end{aligned} \quad (2.44)$$

Durch die Addition der Erhaltungsgleichungen der Einzelphasen wurde eine Form erhalten, die den einphasigen Gleichungen bis auf Zusatzterme in der Impulsgleichung entspricht. Dies ist analog zur Favre-Mittelung zu sehen, bei der durch Einführung eines dichtegewichteten Mittelungsoperators die Form der kompressiblen Erhaltungsgleichungen auf die Form der inkompressiblen zurückgeführt wird (vgl. [44]).

Gleichungen (2.37) und (2.44) sehen den Gleichungen des Driftströmungsmodells (vgl. Wallis [97] und Müller [61]) sehr ähnlich, wobei hier wieder darauf hinzuweisen ist, daß es sich bei den Mittelungen in dieser Arbeit um eine räumliche handelt, nicht um eine zeitliche. In der Navier-Stokes-Gleichung (2.44) treten zwei Zusatzterme auf, welche in Zellen mit nur einer Phase verschwinden, also nur in Zellen mit Phasengrenzfläche berücksichtigt werden müssen. Aus diesem Grund wurde in Gleichung (2.43) für die Differenzgeschwindigkeit zwischen den Phasen die Bezeichnung $\delta \vec{u}_{int}$ gewählt. Der erste Term, der aus

der Umformung des konvektiven Terms herrührt, wird hier als 'Drift'-Term bezeichnet (\underline{D}_{int}). Er hängt quadratisch von der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen beiden Phasen ab. Der zweite Term ($\underline{\mathcal{T}}_{int}$) wird hier Zwischenphasenreibung genannt. In ihm kommt die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \vec{u}_{int}$ linear vor. Beide Terme verschwinden in Zellen, in denen nur eine Phase präsent ist. Gleichungen (2.37) und (2.44) gehen in Gebieten mit nur einer Phase über in (2.30) und (2.35), den volumengemittelten Erhaltungsgleichungen einer Phase.

2.1.5 Gleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase

Aus Gleichung (2.30) läßt sich für die Volumenfraktion der flüssigen Phase entnehmen:

$$\frac{\partial}{\partial t} f \langle \rho_1 \rangle_1 + \nabla \cdot f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 = , \overset{m}{1} - \nabla \cdot \langle \rho_1' \vec{u}_1' \rangle , \quad (2.45)$$

bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot f \langle \vec{u}_1 \rangle_1 = - \frac{f}{\langle \rho_1 \rangle_1} \frac{D}{Dt} \langle \rho_1 \rangle_1 + \frac{1}{\langle \rho_1 \rangle_1} [, \overset{m}{1} - \nabla \cdot \langle \rho_1' \vec{u}_1' \rangle] . \quad (2.46)$$

Nach Umformung des zweiten Terms in (2.45) kann auch folgende Form erhalten werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f \langle \rho_1 \rangle_1 + \nabla \cdot f \langle \rho_1 \rangle_1 \vec{u}_m = , \overset{m}{1} - \nabla \cdot \langle \rho_1' \vec{u}_1' \rangle \\ - \nabla \cdot \left[f (1 - f) \frac{\langle \rho_1 \rangle_1 \langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \right] . \end{aligned} \quad (2.47)$$

Gleichung (2.46) und (2.47) sind äquivalent. Gleichung (2.47) wird so beim Driftströmungsmodell für die zeitlich gemittelten Größen verwendet. Der Zusatzterm auf der rechten Seite ähnelt sehr dem 'Drift'-Term in der Navier-Stokes-Gleichung, nur daß hier die instantane Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den beiden Phasen linear eingeht. Ebenso verschwindet er in Gebieten mit nur einer Phase, und (2.47) geht für diesen Fall in die volumengemittelte Erhaltungsgleichung für die Strömung der einen Phase über.

Für die vorliegende Arbeit bietet sich die Form (2.47) an, da in dieser Formulierung die ebenso in der Navier-Stokes-Gleichung auftretende Schwerpunktgeschwindigkeit enthalten ist. Der aus der Umformung resultierende Zusatzterm auf der rechten Seite wird mit \vec{D}_{int}^f bezeichnet:

$$\vec{D}_{int}^f := f (1 - f) \frac{\langle \rho_1 \rangle_1 \langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) . \quad (2.48)$$

2.1.6 Zusammenfassung des Gleichungssystems

In diesem Abschnitt sollen die relevanten Gleichungen zusammenfassend dargestellt werden.

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \nabla \cdot \rho_m \vec{u}_m = \sum_{k=1,2} A_k \quad (2.49)$$

mit

$$\begin{aligned}
\rho_m &:= f\langle\rho_1\rangle_1 + (1-f)\langle\rho_2\rangle_2 && \text{gemittelte (scheinbare) Dichte} \\
\vec{u}_m &:= \frac{1}{\rho_m} (f\langle\rho_1\rangle_1\langle\vec{u}_1\rangle_1 + (1-f)\langle\rho_2\rangle_2\langle\vec{u}_2\rangle_2) && \text{Schwerpunktgeschwindigkeit} \\
A_k &:= -\nabla \cdot \langle\rho'_k\vec{u}'_k\rangle
\end{aligned}$$

Volumenfraktionsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f\langle\rho_1\rangle_1 + \nabla \cdot \left[f\langle\rho_1\rangle_1\vec{u}_m + \vec{D}_{int}^f \right] = \frac{m}{1} - \underbrace{\nabla \cdot \langle\rho'_1\vec{u}'_1\rangle}_{A_1} \quad (2.50)$$

Impulsgleichung:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + \underline{D}_{int}) &= -\nabla P_m + \nabla \cdot (\underline{\mathcal{T}}_m + \underline{\mathcal{T}}_{int}) + \vec{f}_m^{ext} \\
&+ \sum_{k=1,2} B_k + \vec{m}_{int}^\sigma \quad (2.51)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
P_m &:= f\langle P_1\rangle_1 + (1-f)\langle P_2\rangle_2 \\
\underline{D}_{int} &:= \text{siehe Definition (2.39)} \\
\underline{\mathcal{T}}_m &:= \text{siehe Definition (2.41)} \\
\underline{\mathcal{T}}_{int} &:= \text{siehe Definition (2.42)} \\
\vec{f}_m^{ext} &:= f\langle\rho_1\rangle_1\vec{f}_1^{ext} + (1-f)\langle\rho_2\rangle_2\vec{f}_2^{ext} \\
B_k &:= \nabla \cdot \langle\underline{\mathcal{T}}'_k\rangle - \frac{\partial}{\partial t} \langle\rho'_k\vec{u}'_k\rangle \\
&\quad - \nabla \cdot (\langle\rho_k\rangle_k \langle\vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k\rangle + 2\langle\vec{u}_k\rangle_k \otimes \langle\rho'_k\vec{u}'_k\rangle + \langle\rho'_k\vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k\rangle) \\
\langle\underline{\mathcal{T}}'_k\rangle &:= \left\langle \left\{ \mu'_k \left[\nabla \otimes \vec{u}'_k + (\nabla \otimes \vec{u}'_k)^T \right] + \left(\xi'_k - \frac{2}{3}\mu'_k \right) (\nabla \cdot \vec{u}'_k) \underline{\mathbb{1}} \right\} \right\rangle
\end{aligned}$$

2.2 Vereinfachungen des Gleichungssystems

Das Gleichungssystem aus Abschnitt 2.1.6 kann in dieser Form nicht gelöst werden, da mehr Unbekannte in den Gleichungen vorkommen als Gleichungen vorhanden sind. Deshalb werden Vereinfachungen vorgenommen. Diese beziehen sich auf die Fluktuationsgrößen. Desweiteren wird das Gleichungssystem dimensionslos formuliert, um Probleme unterschiedlicher physikalischer Stoffwerte behandeln zu können.

2.2.1 Erste Vereinfachungen des Gleichungssystems

Es werden erste Vereinfachungen eingeführt, die sich auf die Fluktuationsgrößen beziehen.

Viskosität

Die Schwankung des Koeffizienten der dynamischen Zähigkeit μ'_k und ebenso die Schwankung des Koeffizienten der Druckzähigkeit ξ'_k können in beiden Phasen vernachlässigt werden:

$$\mu'_k = 0 \text{ für } k = 1, 2 \quad (2.52)$$

und

$$\xi'_k = 0 \text{ für } k = 1, 2 . \quad (2.53)$$

Hierdurch ergibt sich:

$$\langle \underline{\tau}'_k \rangle = 0 \text{ für } k = 1, 2 . \quad (2.54)$$

Dichte

Die Flüssigkeit kann als inkompressibel betrachtet werden, weshalb die Dichteschwankungen ρ'_1 vernachlässigt werden können:

$$\rho'_1 = 0 . \quad (2.55)$$

Bei der Gasphase muß sorgfältiger argumentiert werden. Die Dichteschwankungen ρ'_2 können aus den Druckschwankungen p'_2 über die Zustandsgleichung abgeschätzt werden. Als Zustandsgleichung soll hier das ideale Gasgesetz genommen werden:

$$P = \rho \frac{R}{M} T \quad (2.56)$$

mit

$$\begin{aligned} R & \text{ Gaskonstante } (8,31 \frac{J}{K \text{ mol}}) \\ M & \text{ molare Masse} \\ T & \text{ Temperatur.} \end{aligned}$$

Es gilt also

$$P'_2 \propto \rho'_2 \quad (2.57)$$

und somit entsprechen die Druckfluktuationen den Dichtefluktuationen. Für die Druckfluktuationen auf einer Blasenoberfläche gibt es Ansätze, die zur Berechnung der Widerstandskraft einer angeströmten Blase dienen (vgl. [21], [59] und [60]).

Nach Clift et al. [21] ergibt sich für eine kugelförmige Blase mit Radius a analytisch:

$$P'_2 \simeq \frac{\mu U}{2a} \frac{2 + 3\Phi_\mu}{1 + \Phi_\mu} \quad (2.58)$$

mit

$$\begin{aligned} \Phi_\mu & \text{ Verhältnis der dynamischen Viskositäten (hier: } \Phi_\mu = 0) \\ \mu & \text{ Viskosität der kontinuierlichen Phase} \\ U & \text{ Aufstiegsgeschwindigkeit der Blase .} \end{aligned}$$

Mit $\mu_{Wasser} = 0,001 \frac{N}{m^2 s}$ [104] wird bei einem Blasendurchmesser von 1 mm und einer Aufstiegsgeschwindigkeit von $0,3 \frac{m}{s}$ daraus:

$$P'_2 \simeq 3 \cdot 10^{-6} \text{ bar} . \quad (2.59)$$

Bei einem Bezugsdruck von 1 *bar* ergibt sich:

$$\frac{P'_2}{P_{\text{Bezug}}} \simeq 3 \cdot 10^{-6} \simeq \frac{\rho'_2}{\rho} . \quad (2.60)$$

Somit können auch die Dichtefluktuationen der Gasphase vernachlässigt werden

$$\rho'_2 = 0 . \quad (2.61)$$

Hierdurch ergibt sich:

$$A_k = 0 \text{ für } k = 1, 2 \quad (2.62)$$

und

$$B_k = -\nabla \cdot \langle \rho_k \rangle_k \langle \vec{u}'_k \otimes \vec{u}'_k \rangle \text{ für } k = 1, 2 . \quad (2.63)$$

Der Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.63) ist die sogenannte Feinstrukturspannung. In dieser Arbeit sollen nur Strömungen betrachtet werden, bei denen alle Skalen vollständig vom Gitter aufgelöst werden. Dies bedeutet, daß Direkte Numerische Simulationen (DNS) behandelt werden. Somit ist die Zweifachkorrelation ebenfalls in dieser Arbeit zu vernachlässigen und es ergibt sich:

$$B_k = 0 \text{ für } k = 1, 2 . \quad (2.64)$$

Zusammenfassung des vereinfachten Gleichungssystems

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \nabla \cdot \rho_m \vec{u}_m = 0 \quad (2.65)$$

mit

$$\begin{aligned} \rho_m &:= f \langle \rho_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 && \text{gemittelte (scheinbare) Dichte} \\ \vec{u}_m &:= \frac{1}{\rho_m} (f \langle \rho_1 \rangle_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_1 + (1 - f) \langle \rho_2 \rangle_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_2) && \text{Schwerpunktgeschwindigkeit} \end{aligned}$$

Volumenfraktionsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f \langle \rho_1 \rangle_1 + \nabla \cdot \left[f \langle \rho_1 \rangle_1 \vec{u}_m + \vec{D}_{int}^f \right] = , \frac{m}{1} \quad (2.66)$$

Impulsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + \underline{D}_{int}) &= -\nabla P_m + \nabla \cdot (\underline{\mathcal{I}}_m + \underline{\mathcal{I}}_{int}) \\ &+ \vec{f}_m^{ext} + \vec{m}_{int}^\sigma \end{aligned} \quad (2.67)$$

2.2.2 Dimensionsloses Gleichungssystem

Um die Lösung des Gleichungssystems aus (2.65), (2.66) und (2.67) nicht nur für einen konkreten Fall zu berechnen, sondern für eine ganze Klasse physikalisch ähnlicher Probleme, sollen die Gleichungen dimensionslos formuliert werden. Dazu ist es notwendig, die einzelnen physikalischen Größen mittels Referenzgrößen zu normieren. Es wird eingeführt:

$$\begin{aligned}
 u^* &= \frac{u}{u_{ref}} \\
 \rho^* &= \frac{\rho}{\rho_{ref}} \text{ mit } \rho_{ref} = \langle \rho_1 \rangle_1 \\
 \mu^* &= \frac{\mu}{\mu_{ref}} \text{ mit } \mu_{ref} = \langle \mu_1 \rangle_1 \\
 x^* &= \frac{x}{l_{ref}} \\
 t^* &= t \frac{u_{ref}}{l_{ref}} \\
 P^* &= \frac{P}{P_{ref}} \text{ mit } P_{ref} = \rho_{ref} u_{ref}^2.
 \end{aligned} \tag{2.68}$$

Dabei wurden die Referenzlänge l_{ref} , die Referenzgeschwindigkeit u_{ref} und die Referenzdichte ρ_{ref} eingeführt. Aus numerischen Erwägungen sollten die Referenzgrößen so gewählt werden, daß die Terme in den Gleichungen alle von vergleichbarer Größenordnung sind, z.B. in der Größenordnung von Eins. Nach Lösen des dimensionslosen Gleichungssystems können mit der Vorgabe entsprechender dimensionsbehafteter Referenzgrößen die Ergebnisse auf reale Systeme übertragen werden.

Aus den Definitionen (2.68) ergeben sich für die Differentialoperatoren folgende Relationen:

$$\begin{aligned}
 \nabla &= \frac{1}{l_{ref}} \nabla^* \\
 \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{u_{ref}}{l_{ref}} \frac{\partial}{\partial t^*}.
 \end{aligned} \tag{2.69}$$

Für die externe Kraft wird die Gravitation angesetzt

$$\vec{f}_m^{ext} = \rho_m \vec{g}. \tag{2.70}$$

Der Druck läßt sich in einen dynamischen und hydrostatischen Teil aufspalten

$$P = \underbrace{p_{dyn}}_p - \rho_{ref} g x_z, \tag{2.71}$$

wodurch sich für den Term $-\nabla P_m + \vec{f}_m^{ext}$ ergibt:

$$-\nabla P_m + \vec{f}_m^{ext} = -\nabla p_m + (\rho_{ref} - \rho_m) \vec{g}. \tag{2.72}$$

Gleichung (2.65) wird mit den Definitionen aus (2.68) zu:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \rho_m^* + \nabla^* \cdot \rho_m^* \vec{u}_m^* = 0 . \quad (2.73)$$

Für die Volumenfraktionsgleichung (2.66) ergibt sich, wenn keine Verdampfung oder Kondensation behandelt wird:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} f + \nabla \cdot (f \vec{u}_m^*) = -\nabla \cdot \left(\vec{D}_{int}^f \right)^* . \quad (2.74)$$

Bei der Impulsgleichung (2.67) wird folgende Form erhalten, wobei für die Oberflächenspannungskraft \vec{m}_{int}^σ Gleichung (2.25) eingesetzt wurde:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t^*} \rho_m^* \vec{u}_m^* + \nabla^* \cdot (\rho_m^* \vec{u}_m^* \otimes \vec{u}_m^* + \underline{D}_{int}^*) &= -\nabla^* p_m^* + \frac{1}{Re_{ref}} \nabla^* \cdot (\underline{\tau}^* + \underline{\tau}_{int}^*) \\ &+ (1-f) \frac{Eo_{ref}}{We_{ref}} \vec{e}_z + \frac{1}{We_{ref}} a_{int}^* \kappa^* \vec{n} . \end{aligned} \quad (2.75)$$

In der dimensionslosen Gleichung (2.75) treten die folgenden, schon in Abschnitt 1.2.1 eingeführten Kennzahlen auf:

$$\text{Reynolds-Zahl :} \quad Re_{ref} = \frac{\rho_{ref} u_{ref} l_{ref}}{\mu_{ref}} \quad (2.76)$$

$$\text{Eötvös-Zahl :} \quad Eo_{ref} = \frac{(\langle \rho_1 \rangle_1 - \langle \rho_2 \rangle_2) g l_{ref}^2}{\sigma} \quad (2.77)$$

$$\text{Weber-Zahl :} \quad We_{ref} = \frac{\rho_{ref} u_{ref}^2 l_{ref}}{\sigma} \quad (2.78)$$

Als weitere wichtige Kennzahl wird bei Blasenströmungen die Morton-Zahl eingeführt ($M_{ref} = \frac{g \mu_{ref}^4 \Delta \rho}{\rho_{ref}^2 \sigma^3}$), die aber wegen der Abhängigkeit

$$M_{ref} = \frac{Eo_{ref} We_{ref}^2}{Re_{ref}^2} \quad (2.79)$$

nicht als unabhängiger Parameter in Gleichung (2.75) vorkommt.

Die dimensionslose Formulierung der physikalischen Erhaltungsgleichungen ermöglicht einen einfachen Vergleich mit experimentellen Daten. Beispielsweise zeigen Strömungskarten für in ruhendem Fluid aufsteigende Einzelblasen die Abhängigkeit der Blasenform von den Kennzahlen Morton, Reynolds und Eötvös (siehe hierzu [21]). Über Relation (2.79) lassen sich die numerischen Ergebnisse direkt mit den experimentellen vergleichen. Zu den Referenz-Kennzahlen siehe auch Anhang A.

Gleichung (2.75) formuliert erstmals die Impulsgleichung in Abhängigkeit der für eine Blasenströmung physikalisch relevanten drei Kennzahlen. Durch die Aufspaltung des Drucks in einen dynamischen und einen hydrostatischen Anteil ergibt sich die Eötvös-Zahl aus der Kombination von Schwerkraft und hydrostatischem Druck. Die Weber-Zahl als

Verhältnis von Trägheits- zu Reibungskräften tritt als Vorfaktor des Oberflächenterms bei Division durch die Trägheitskräfte auf.

Ab hier wird in dieser Arbeit auf den Stern (*) zur Kennzeichnung der dimensionslosen Größen verzichtet. Alle weiteren Gleichungen beziehen sich auf dimensionslose Größen gemäß den Definitionen in (2.68).

2.2.3 Inkompressible Einzelphasen

Bisher wird die Volume-of-Fluid-Methode, welche von Hirt und Nichols [41] zuerst vorgestellt wurde, nur für inkompressible Strömungen verwendet. Diese Annahme ist bei der Betrachtung von Einzelblasen und Schwärmen von Blasen laut Clift et al. [21] gerechtfertigt. Die inkompressible Behandlung der physikalischen Erhaltungsgleichungen hat ferner den Vorteil, daß auf bewährte Lösungsverfahren zurückgegriffen werden kann.

Die Schallgeschwindigkeit a ist folgendermaßen definiert:

$$a^2 = \frac{dp}{d\rho} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s . \quad (2.80)$$

Die Gleichung besagt, daß sich Druckstörungen isentrop ausbreiten. Im inkompressiblen Fall wird $\frac{dp}{d\rho} = 0$, die Schallgeschwindigkeit beträgt also unendlich. Die inkompressible Behandlung der Erhaltungsgleichungen bedeutet somit, daß sich Druckänderungen mit unendlicher Geschwindigkeit im Rechenggebiet ausbreiten.

Auch in dieser Arbeit wird der Weg eingeschlagen, die Einzelphasen beide als inkompressibel zu betrachten. Damit gilt:

$$\rho_1 \equiv \langle \rho_1 \rangle_1 = konst.1 \quad (2.81)$$

$$\rho_2 \equiv \langle \rho_2 \rangle_2 = konst.2 . \quad (2.82)$$

Für einen mit der Strömung mitbewegten Beobachter ändert sich die Gemischdichte ρ_m nicht und es gilt darum:

$$\frac{d}{dt} \rho_m = \frac{\partial}{\partial t} \rho_m + \vec{u}_m \nabla \cdot \rho_m = 0 . \quad (2.83)$$

Aus Gleichung (2.83) folgt mit der dimensionslosen Kontinuitätsgleichung (2.73) Gleichung (2.84).

Insgesamt sieht das skalierte System aus Kontinuitäts-, Volumenfraktions- und Navier-Stokes-Gleichung für inkompressible Phasen folgendermaßen aus:

$$\nabla \cdot \vec{u}_m = 0 \quad (2.84)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f \vec{u}_m) = -\nabla \cdot (\vec{D}_{int}^f) \quad (2.85)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m + \underline{D}_{int}) &= -\nabla p_m + \frac{1}{Re_{ref}} \nabla \cdot (\underline{\mathcal{T}} + \underline{\mathcal{T}}_{int}) \\ &+ (1-f) \frac{Eo_{ref}}{We_{ref}} \vec{e}_z + \frac{1}{We_{ref}} a_{int} k \vec{n} \end{aligned} \quad (2.86)$$

2.3 Schließungsterme

In diesem Abschnitt werden die Schließungsterme zusammengefaßt. Dabei werden drei Terme diskutiert. In der Volumenfraktionsgleichung tritt der Term $-\nabla \cdot \vec{D}_{int}^f$ auf, der linear von der Phasenrelativgeschwindigkeit $\delta \vec{u}_{int}$ abhängt. $-\nabla \cdot \vec{D}_{int}^f$ ist nur in Zellen von Null verschieden, in denen beide Phasen vorhanden sind. In der Navier-Stokes-Gleichung treten Zwischenphasenreibung und 'Drift'-Term auf. Beide Terme müssen ebenfalls nur in solchen Zellen berücksichtigt werden, in denen beide Phasen vorhanden sind und hängen dort von der momentanen lokalen Relativgeschwindigkeit der Phasen ab. Diese Phasenrelativgeschwindigkeit ist unbekannt und muß modelliert werden, um das Gleichungssystem zu schließen. Ein einfaches Modell wird in Abschnitt 2.3.4 vorgestellt. Bisher werden diese Schließungsterme nicht betrachtet. Dies bedeutet, daß in anderen Arbeiten implizit von einem homogenen Strömungsmodell ausgegangen wird. Für feine Gitterauflösungen ($\Delta x \rightarrow 0$) ist diese Annahme gerechtfertigt, da $\delta \vec{u}_{int}$ dann aufgrund der Kontinuität der Geschwindigkeiten an der Phasengrenze verschwindet.

2.3.1 'Drift'-Term in Volumenfraktionsgleichung

In der Volumenfraktionsgleichung (2.85) ist auf der rechten Seite der Quellterm $-\nabla \cdot \vec{D}_{int}^f$ vorhanden mit:

$$\vec{D}_{int}^f := f(1-f) \underbrace{\frac{\langle \rho_1 \rangle_1 \langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m}}_{C(f)} (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) . \quad (2.87)$$

Dieser Term geht darauf zurück, daß der konvektive Term der Volumenfraktionsgleichung (2.85) nicht mit $\langle u_1 \rangle_1$, sondern mit \vec{u}_m formuliert ist. Eine mögliche Schließung von \vec{D}_{int}^f auf der Basis eines lokalen Modells für die Phasenrelativgeschwindigkeit würde in Zellen mit beiden Phasen zu lokalen Quellen und Senken der flüssigen Phase führen. Um die globale Massenerhaltung der flüssigen Phase sicherzustellen, muß der integrale Beitrag dieses Terms im gesamten Rechengebiet jederzeit Null sein. Die Entwicklung eines physikalisch fundierten lokalen Modells für die Phasenrelativgeschwindigkeit, das gleichzeitig der Restriktion einer globalen Massenerhaltung genügt, ist jedoch außerhalb der Zielsetzung dieser Arbeit. Im folgenden wird daher

$$\vec{D}_{int}^f = 0 \quad (2.88)$$

gesetzt, was zusammen mit

$$\nabla \cdot \vec{D}_{int}^f = 0 \quad (2.89)$$

die lokale und globale Massenerhaltung sicherstellt.

Zur Abschätzung der Größenordnung von \vec{D}_{int}^f wird der Vorfaktor $C(f)$ näher diskutiert. $C(f)$ kann durch Einführung des Dichteverhältnisses $\Phi_\rho = \langle \rho_2 \rangle_2 / \langle \rho_1 \rangle_1$ folgendermaßen umgeformt werden:

$$C(f) = \frac{f(1-f)\Phi_\rho}{f + (1-f)\Phi_\rho} . \quad (2.90)$$

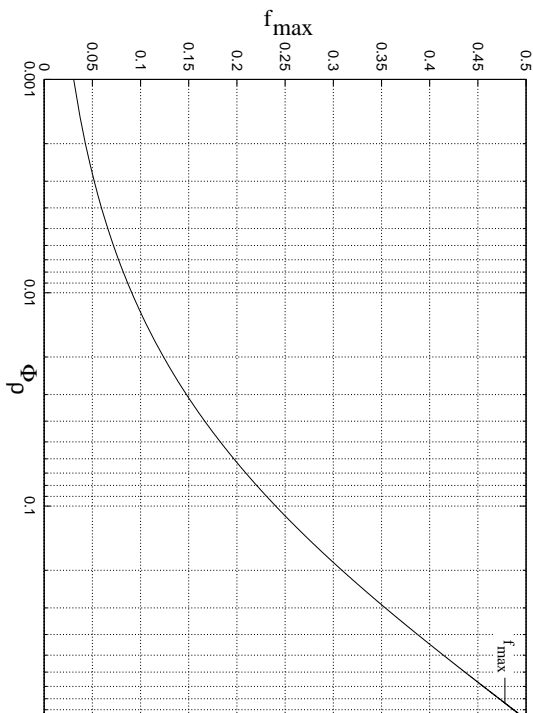


Abbildung 2.3: Faktor $C(f)$: f_{\max} über Dichteverhältnis Φ_ρ , Gleichung (2.91)

Es ergibt sich für die Extremwerte von $C(f)$:

$$f_{\max} = \frac{\Phi_\rho - \sqrt{\Phi_\rho}}{\Phi_\rho - 1} \quad (2.91)$$

$$C(f_{\max}) = (f_{\max})^2. \quad (2.92)$$

Abbildung 2.3 zeigt die Abhängigkeit von f_{\max} in Bezug auf das Dichteverhältnis Φ_ρ . Aus der Abbildung läßt sich entnehmen, daß \vec{D}_{int}^f gering gegen Eins ist und daher Annahme (2.88) gerechtfertigt ist.

Damit folgt für die Volumenfraktionsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f \vec{u}_m) = 0 \quad (2.93)$$

2.3.2 Zwischenphasenreibung

In Abschnitt 2.1.4 wurde gezeigt, daß bei der Umformung des Schubspannungstensors folgender Tensor der Zwischenphasenreibung \mathcal{T}_{int} gebildet werden kann:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{int} = & -f \langle \mu_1 \rangle_1 \nabla \otimes \left[(1-f) \frac{\langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} \left\{ \delta \vec{u}_{int} + (\delta \vec{u}_{int})^T \right\} \right] \\ & + (1-f) \langle \mu_2 \rangle_2 \nabla \otimes \left[f \frac{\langle \rho_1 \rangle_1}{\rho_m} \left\{ \delta \vec{u}_{int} + (\delta \vec{u}_{int})^T \right\} \right] \\ & - f \left(\langle \xi_1 \rangle_1 - \frac{2}{3} \langle \mu_1 \rangle_1 \right) \left(\nabla \cdot \left[(1-f) \frac{\langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} \delta \vec{u}_{int} \right] \right) \underline{I} \\ & + (1-f) \left(\langle \xi_2 \rangle_2 - \frac{2}{3} \langle \mu_2 \rangle_2 \right) \left(\nabla \cdot \left[f \frac{\langle \rho_1 \rangle_1}{\rho_m} \delta \vec{u}_{int} \right] \right) \underline{I}. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Die Zwischenphasenreibung sorgt für eine zusätzliche Dämpfung der Geschwindigkeiten in Zellen, in denen beide Phasen vorkommen. Dies wirkt sich auf die artifiziiellen Strömungen, die durch das numerische Verfahren induziert werden, aus, wie in Abschnitt 5.2.1 gezeigt wird. Gleichung (2.94) wird mit zentralen Differenzen diskretisiert, wie der eigentliche Diffusionsterm τ_m auch.

2.3.3 'Drift'-Term in Navier-Stokes-Gleichung

Ebenso wird in Abschnitt 2.1.4 der sogenannte 'Drift'-Term \underline{D}_{int} eingeführt:

$$\nabla \cdot \underline{D}_{int} = \nabla \cdot \left[\underbrace{f(1-f)}_{C(f)} \frac{\langle \rho_1 \rangle_1 \langle \rho_2 \rangle_2}{\rho_m} (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \otimes (\langle \vec{u}_1 \rangle_1 - \langle \vec{u}_2 \rangle_2) \right]. \quad (2.95)$$

Dieser Term ist von seiner Struktur her aus dem Driftströmungsmodell bekannt (vgl. [61]), wobei er dort aber anders behandelt wird.

In Abschnitt 2.3.1 wurde für den Vorfaktor $C(f)$ eine Größenabschätzung gegeben. Dort hat sich gezeigt, daß dieser Term sehr gering ist (vgl. dazu auch Mitran [58]), da die Differenzgeschwindigkeit bezogen auf die Gesamtgeschwindigkeit nicht signifikant Eins überschreiten kann.

In Abschnitt 5.2.1 ist der 'Drift'-Term bei den Berechnungen der artifiziiellen Strömungen berücksichtigt worden.

2.3.4 Modellierung der Phasenrelativgeschwindigkeit

Folgendes vereinfachendes Modell zur Modellierung der lokalen Differenzgeschwindigkeit zwischen den beiden Phasen wurde in TURBIT-VoF implementiert. Es wird die Annahme getroffen, daß sich in der Nähe der Phasengrenzflächen die Geschwindigkeiten der einzelnen Phasen räumlich nicht ändern. Dies ist natürlich grob vereinfachend und trifft die physikalische Realität nur bedingt. Für die hier betrachteten Fälle ohne Stoffübergang an der Phasengrenzfläche sollte die Annahme jedoch näherungsweise verwendet werden können.

Es werden drei in einer Koordinatenrichtung benachbarte Zellen betrachtet, deren Mittelpunkte mit den Indizes $i-1$, i und $i+1$ bezeichnet werden, siehe hierzu Abbildung 2.4. Ziel ist es, volumenzentrierte Geschwindigkeiten $\langle u_1 \rangle_1|_i$ und $\langle u_2 \rangle_2|_i$ der beiden Phasen im Zellmittelpunkt aus den mittleren Geschwindigkeiten auf den Zellseitenflächen $u_m|_{i+1/2}$ und $u_m|_{i-1/2}$ zu berechnen. $\langle u_1 \rangle_1|_i$ und $\langle u_2 \rangle_2|_i$ werden in der Diskretisierung der Zwischenphasenreibung nach Abschnitt 2.3.2 und des 'Drift'-Terms nach Abschnitt 2.3.3 benötigt. Abbildung 2.4 enthält zusätzlich zu den eingezeichneten Maschen (durchgezogene Linien) die Kontrollvolumina der versetzten Geschwindigkeiten $u_m|_{i+1/2}$ und $u_m|_{i-1/2}$ (gestrichelt).

Die Geschwindigkeiten des Gemisches $u_m|_{i+1/2}$ und $u_m|_{i-1/2}$ sind aus der Simulation

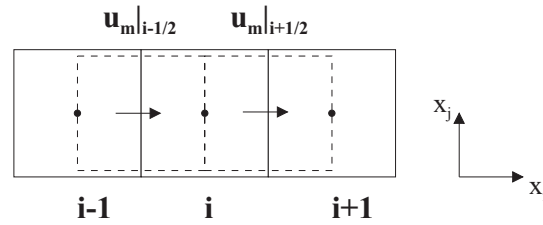


Abbildung 2.4: Skizze zur Modellbildung für die Phasenrelativgeschwindigkeit zwischen den Phasen; Maschen mit Mittelpunkten $i-1$, i und $i+1$; Kontrollvolumina des versetzten Gitters gestrichelt

bekannt und nach Definition gilt

$$u_m|_{i+1/2} = \frac{1}{\rho_m|_{i+1/2}} \left[f_{i+1/2} \langle \rho_1 \rangle_1|_{i+1/2} \langle u_1 \rangle_1|_{i+1/2} + (1 - f_{i+1/2}) \langle \rho_2 \rangle_2|_{i+1/2} \langle u_2 \rangle_2|_{i+1/2} \right] \quad (2.96)$$

$$u_m|_{i-1/2} = \frac{1}{\rho_m|_{i-1/2}} \left[f_{i-1/2} \langle \rho_1 \rangle_1|_{i-1/2} \langle u_1 \rangle_1|_{i-1/2} + (1 - f_{i-1/2}) \langle \rho_2 \rangle_2|_{i-1/2} \langle u_2 \rangle_2|_{i-1/2} \right] . \quad (2.97)$$

Es wird zur Lösung des Gleichungssystems aus Gleichung (2.96) und (2.97) angenommen, daß die Gasphase in den Kontrollvolumina $i+1/2$ und $i-1/2$ und in der Masche i die gleiche Geschwindigkeit hat, ebenso wird diese Annahme für die flüssige Phase getroffen:

$$\langle u_1 \rangle_1|_{i+1/2} = \langle u_1 \rangle_1|_{i-1/2} = \langle u_1 \rangle_1|_i \quad (2.98)$$

$$\langle u_2 \rangle_2|_{i+1/2} = \langle u_2 \rangle_2|_{i-1/2} = \langle u_2 \rangle_2|_i . \quad (2.99)$$

Mit den Annahmen (2.98) und (2.99) kann das System aus Gleichung (2.96) und (2.97) eindeutig gelöst werden. Die Lösung wird singular für $f_{i-1/2} = f_{i+1/2}$, d.h. bei gleicher Befüllung der Zellen kann das hier vorgestellte Modell nicht genommen werden und es wird für die Differenzgeschwindigkeit zwischen den Phasen Null angenommen.

Erste Ergebnissen zum Verhalten dieses Modells sind in Abschnitt 5.2.1 bei den sogenannten artifiziiellen Strömungen dokumentiert. Zukünftige weiterführende Arbeiten wird es vorbehalten sein, verbesserte Modelle für die Phasenrelativgeschwindigkeit zu entwickeln.

Kapitel 3

Numerische Verfahren

In diesem Kapitel werden die numerischen Verfahren erläutert, die zur Lösung des Systems aus physikalischen Erhaltungsgleichungen (2.84) bis (2.86) angewendet werden. Zuerst wird die Volume-of-Fluid-Methode dargestellt, die die numerische Beschreibung einer Zweiphasenströmung ermöglicht. Diese Methode verwendet eine zusätzliche Transportgleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase. Diese Gleichung ist in Abschnitt 2.1 aus den allgemeinen physikalischen Erhaltungsgleichungen hergeleitet worden (Gleichung (2.85)). Zur geometrischen Rekonstruktion der Phasengrenzfläche aus der dreidimensionalen Verteilung der Volumenfraktion der flüssigen Phase wird ein neuer Algorithmus entworfen. Dieser ermöglicht es, beliebig im Raum orientierte Ebenen exakt zu rekonstruieren und zu transportieren. Der Algorithmus wird EPIRA genannt, was eine Abkürzung für Exact Plane Interface Reconstruction Algorithm ist. Der rekonstruierte Normalenvektor wird für eine verbesserte Berechnung der Krümmung im Oberflächenspannungsterm genutzt. In einem weiteren Abschnitt wird auf das numerische Verfahren zur Beschreibung der konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichung eingegangen. Dabei wird ein W-ENO-Verfahren ('Weighted Essentially Non-Oscillatory') angewendet, welches die Auflösung starker Gradienten in den Zustandsvariablen ermöglicht. Für die zeitliche Diskretisierung kommt ein Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren zum Einsatz, welches von hoher Ordnung ist. Dieses Kapitel wird abgeschlossen mit einer Betrachtung zum Zeitschrittweitenkriterium und einer Darstellung der generellen Lösungsstrategie durch ein Projektionsverfahren für den Druck.

3.1 VoF Methode / EPIRA

Die Volume-of-Fluid-Methode wurde von Hirt und Nichols [41] für die Beschreibung von Strömungen, bestehend aus zwei Phasen, entworfen. Kernstück dieser Methode ist das Lösen einer zusätzlich zu den physikalischen Erhaltungsgleichungen für Massen und Impuls eingeführten Transportgleichung für die Volumenfraktion einer Phase. Dies ist in der ursprünglichen Arbeit die flüssige Phase. In den Herleitungen des letzten Abschnitts wurde gezeigt, daß diese ursprünglich postulierte Transportgleichung der Kontinuitätsgleichung einer Phase entspricht. Wegen der Wichtigkeit für diesen Abschnitt wird die

Transportgleichung (2.93) hier nochmals aufgeführt:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f \vec{u}_m) = 0 . \quad (2.93)$$

Aufgrund der stark diskontinuierlichen Verteilung der f -Werte würde die Phasengrenzfläche bei Anwendung von klassischen Differenzenformeln durch die numerische Diffusion verschmiert. Deshalb schlagen Hirt und Nichols [41] zur Lösung dieser Gleichung einen anderen Weg ein, den sie Volume-of-Fluid-Methode nennen. Die VoF-Methode besteht aus zwei Schritten zur Lösung von Gleichung (2.85):

- **Rekonstruktion:** Darunter wird die möglichst genaue Rückgewinnung der Geometrie der Phasengrenzfläche aus den diskreten Volumenfraktionen der flüssigen Phase $f_{i,j,k}$ verstanden.
- **Advektion:** Damit ist der konvektive Transport der rekonstruierten Phasenverteilung gemeint.

In diesem Abschnitt wird für die dreidimensionale Rekonstruktion und Advektion der Volumenfraktion der Phase 1 (flüssige Phase) ein neuer Algorithmus entworfen. Für zweidimensionale Verteilungen existieren in der Literatur eine Vielzahl von Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmen [71]. Diese können in Algorithmen mit stückweiser konstanter ('piecewise constant') und mit stückweiser linearer ('piecewise linear' oder auch PLIC, 'Piecewise Linear Interface Calculation') Rekonstruktion unterteilt werden. Für die Methoden mit stückweiser konstanter Rekonstruktion steht prototypisch SLIC von Noh und Woodward [63], ein Beispiel für die Algorithmen mit stückweiser linearer Rekonstruktion ist FLAIR von Ashgriz und Poo [3] (siehe zum Vergleich Abbildung 1.5). Beim SLIC-Algorithmus werden die Elemente der Phasengrenzfläche nur parallel zu den Koordinatenachsen des Gitters angeordnet, es ergibt sich der schematisch in Abbildung 1.5 links dargestellte recht grobe Verlauf der numerischen Grenzfläche. Dagegen werden beim FLAIR-Algorithmus die Flächenelemente der Grenzfläche durch Geraden approximiert, welches zu einer im Vergleich zum SLIC-Algorithmus besseren Auflösung führt.

PLIC-Algorithmen sind somit in der Lage, Phasengrenzflächen, bestehend aus Geraden im zweidimensionalen Raum, exakt zu rekonstruieren. Im dreidimensionalen Raum entspricht dem die exakte Rekonstruktion einer Ebene. Bisher ist in der Literatur kein Algorithmus verfügbar, der dies leisten kann. Deshalb wurde ein neuer Algorithmus entwickelt, der es ermöglicht, ebene Phasengrenzflächen im dreidimensionalen Raum exakt zu rekonstruieren und zu advektieren. Dieser wird EPIRA genannt, was für Exact Plane Interface Reconstruction Algorithm steht.

Der Abschnitt gliedert sich wie folgt. Nach einer Einführung des numerischen Gitters behandelt ein erster Unterabschnitt die dreidimensionale Rekonstruktion der Phasengrenzfläche aus dem diskreten Feld der Volumenfraktionen der flüssigen Phase. Danach wird die Advektion aufgrund der geometrischen Rekonstruktion in den verschiedenen Zellen mit Phasengrenzfläche behandelt. In einem letzten Unterabschnitt werden Testrechnungen zum EPIRA-Algorithmus präsentiert.

3.1.1 Gitter

Zur Diskretisierung des Strömungsgebiets wird ein strukturiertes, rechtwinkliges Gitter verwendet. Die Maschenmittelpunkte seien an $\vec{x} = (x_i, y_j, z_k)^T$ und die Seiten der Zellen an $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm \Delta x_i/2$, $y_{j\pm 1/2} = y_j \pm \Delta y_j/2$ und $z_{k\pm 1/2} = z_k \pm \Delta z_k/2$. Die Zellweiten Δx_i , Δy_j und Δz_k können variabel und verschieden sein. Die sechs Seitenflächen einer Zelle (i, j, k) werden folgend benannt: O(st) ($x_{i+1/2}$), W(est) ($x_{i-1/2}$), N(ord) ($z_{k+1/2}$), S(üd) ($z_{k-1/2}$), H(inten) ($y_{j+1/2}$) und V(orne) ($y_{j-1/2}$). Die Volumenfraktionen der Phase 1 (flüssige Phase) sei im Maschenmittelpunkt definiert: $f_{i,j,k}$. Zellen, die Phasengrenzfläche enthalten, werden Grenzflächenzellen genannt.

3.1.2 Dreidimensionale Rekonstruktion

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie aus der diskreten, dreidimensionalen Verteilung der Volumenfraktion von Phase 1 (oder auch der flüssigen Phase) $f_{i,j,k}$ die Geometrie der Phasengrenzfläche rekonstruiert wird.

Dazu wird die Phasengrenzfläche als funktionale Fläche angenommen, die lokal von einer Höhenfunktion $\xi = h(\zeta, \eta)$ beschrieben wird. Dabei definieren (ζ, η, ξ) ein lokales, kartesisches Koordinatensystem. Eine Taylor-Entwicklung von $h(\zeta, \eta)$ um (ζ_0, η_0) ergibt:

$$\begin{aligned} h(\zeta, \eta) &= h(\zeta, \eta) + (\zeta - \zeta_0) \left. \frac{\partial}{\partial \zeta} h(\zeta, \eta) \right|_{(\zeta_0, \eta_0)} + (\eta - \eta_0) \left. \frac{\partial}{\partial \eta} h(\zeta, \eta) \right|_{(\zeta_0, \eta_0)} \\ &\quad + (\zeta - \zeta_0)(\eta - \eta_0) \left. \frac{\partial^2}{\partial \zeta \partial \eta} h(\zeta, \eta) \right|_{(\zeta_0, \eta_0)} + \dots \\ &= h_0 + \alpha(\zeta - \zeta_0) + \beta(\eta - \eta_0) + HOT, \end{aligned} \quad (3.1)$$

wobei *HOT* für Terme höherer Ordnung steht und α, β die partiellen Ableitungen von h in ζ - bzw. η -Richtung sind. Im EPIRA-Algorithmus wird davon ausgegangen, daß die Phasengrenzfläche lokal von einer Ebene approximiert werden kann. Dies bedeutet für die Taylor-Entwicklung (3.1), daß nur die ersten drei Terme auf der rechten Seite berücksichtigt werden. In der Umgebung von (ζ_0, η_0) ist diese Näherung stets eine gute Approximation der Phasengrenzfläche.

Eine Ebene ist mathematisch eindeutig durch ihren Normalenvektor $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ und durch einen Punkt $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)^T$ in der Ebene bestimmt. Im folgenden wird beschrieben, wie der EPIRA-Algorithmus $\vec{n}_{i,j,k}$ und $\vec{b}_{i,j,k}$ für jede Zelle mit Phasengrenzfläche aus den diskreten Werten $f_{i,j,k}$ berechnet. Der Rekonstruktionsalgorithmus für Grenzflächenzellen besteht aus drei Teilen:

- Berechnung von Tangentenvektoren \vec{t} an den Seitenflächen der Zelle, die von der Phasengrenzfläche geschnitten werden;
- Bestimmung eines Einheitsnormalenvektors $\vec{n}_{i,j,k}$ aus diesen Tangentenvektoren, der repräsentativ für den Zellmittelpunkt ist;
- Bestimmung des Punktes $\vec{b}_{i,j,k}$ in der Ebene, so daß die Ebene die Zelle in zwei Zonen mit entsprechendem Anteil Fluid teilt.

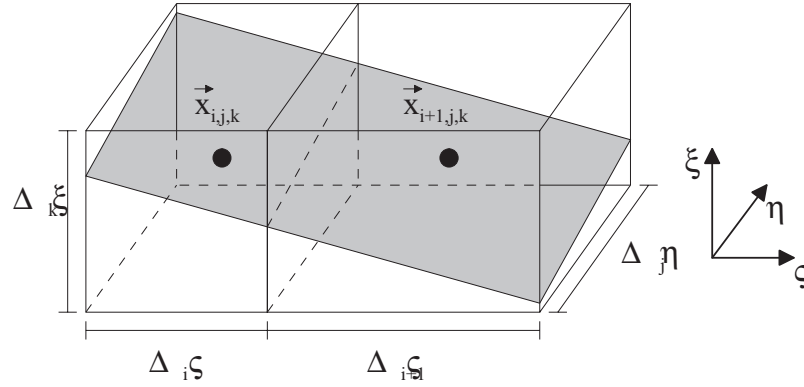


Abbildung 3.1: Zellen (i, j, k) und $(i+1, j, k)$ mit Ebene $h(\zeta, \eta)$; das Fluid ist unterhalb von $h(\zeta, \eta)$; hier ist das lokale Koordinatensystem (ζ, η, ξ) entsprechend dem globalen System (x, y, z) ausgerichtet

Berechnung der Tangentenvektoren an den Seiten der Zellen

Zur Berechnung des Tangentenvektors \vec{t} an einer Seitenfläche der Zelle wird die benachbarte Zelle mit berücksichtigt. Ist der Volumenanteil f der benachbarten Zelle entweder Null oder Eins ($f = 0$, $f = 1$, damit nur eine Phase vorhanden), dann schneidet die Phasengrenzfläche nicht diese Seite und \vec{t} wird zu Null gesetzt. Für den Fall $0 < f < 1$ ist der Tangentenvektor von Null verschieden und muß berechnet werden. Dies soll am Beispiel des Tangentenvektors \vec{t}_O der Zelle (i, j, k) exemplarisch gezeigt werden, wobei die Bezeichnungen wie in Abbildung 3.1 seien.

In Fällen, in denen die Höhenfunktion $h(\zeta, \eta)$ nicht die oberen oder unteren Seitenfläche der beiden benachbarten Zellen schneidet (wie in Abbildung 3.1), gelten folgende Relationen (in diesem Beispiel sind (ζ, η, ξ) entsprechend dem globalen Koordinatensystem (x, y, z) ausgerichtet, andere Fälle analog dazu):

$$f_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta\zeta_i \Delta\eta_j \Delta\xi_k} \int_0^{\Delta\zeta_i} \int_0^{\Delta\eta_j} h(\zeta, \eta) d\eta d\zeta \quad (3.2)$$

$$f_{i+1,j,k} = \frac{1}{\Delta\zeta_{i+1} \Delta\eta_j \Delta\xi_k} \int_{\Delta\zeta_i}^{\Delta\zeta_i + \Delta\zeta_{i+1}} \int_0^{\Delta\eta_j} h(\zeta, \eta) d\eta d\zeta, \quad (3.3)$$

wobei der Ursprung bei $(x_i - \Delta\zeta_i, y_j - \Delta\eta_j, z_k - \Delta\xi_k)$ liegt. Das Einsetzen der Taylor Entwicklung aus Gleichung (3.1) in Gleichungen (3.2) und (3.3), anschließende analytische Integration und Zusammenfassung führt zu

$$\alpha_{i+1/2} = \left. \frac{\partial}{\partial\zeta} h(\zeta, \eta) \right|_{(\Delta\zeta_i, \Delta\eta_j/2)} = \frac{2\Delta\xi_k}{\Delta\zeta_i + \Delta\zeta_{i+1}} (f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}). \quad (3.4)$$

$\alpha_{i+1/2}$ repräsentiert den Gradienten von $h(\zeta, \eta)$ in ζ -Richtung, somit ergibt sich für den

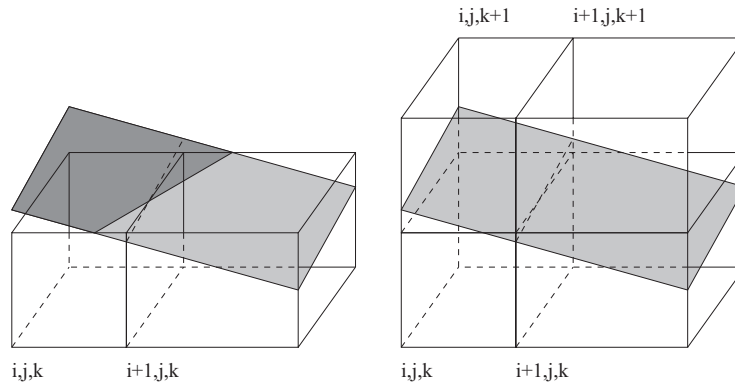


Abbildung 3.2: Beispiel: (links) die Phasengrenzfläche schneidet die oberen Seitenflächen der Maschen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$; (rechts) durch Erweiterung mittels der über den Maschen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$ liegenden Maschen kann der Gradient an der Seite Ost der Masche (i, j, k) exakt berechnet werden

normierten Tangentialvektor \vec{t}_O , der in der $\zeta - \xi$ -Ebene liegt:

$$\vec{t}_O = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha_{i+1/2}^2}} \left(1, 0, \alpha_{i+1/2} \right)^T . \quad (3.5)$$

Dieser Tangentenvektor ist für jede ebene Grenzfläche exakt, falls die unteren und oberen Integrationsgrenzen in Gleichungen (3.2) und (3.3) korrekt sind, was bedeutet, daß die Grenzfläche nicht obere oder untere Seitenflächen der beiden benachbarten Maschen schneidet. Ist dies nicht der Fall, müssen die Integrationsgrenzen angepaßt werden, um dem Schnitt der Grenzfläche an oberer oder unterer Seitenfläche Rechnung zu tragen. Dies bedeutet aber, daß eine ganze Reihe von Schnittkonfigurationen betrachtet werden müßten, um die jeweils richtigen Integrationsgrenzen zu erhalten. Zur Vermeidung dieser Fallunterscheidung wird hier ein anderer Weg beschritten.

Zur Verdeutlichung des Algorithmus wird angenommen, daß die Grenzfläche die oberen Seitenflächen der Maschen (i, j, k) und $(i + 1, j, k)$ schneidet, wie dies in Abbildung 3.2, links dargestellt ist. Zur Vermeidung der Bestimmung der oberen Integrationsgrenzen in Gleichungen (3.2) und (3.3), was für eine exakte Berechnung des Tangentenvektors nötig wäre, werden die \vec{t} bestimmenden Volumina geändert. Dies wird durch eine Erweiterung in entsprechender Koordinatenrichtung getan. Im Beispiel aus Abbildung 3.2 wird dies verdeutlicht: zwei neue Integrationsvolumina, nämlich $(i, j, k) \cup (i, j, k + 1)$ sowie $(i + 1, j, k) \cup (i + 1, j, k + 1)$, werden betrachtet (siehe Abbildung 3.2, rechts). Somit kann \vec{t}_O exakt berechnet werden, wenn in Gleichungen (3.2) und (3.3) die linken Seiten durch $f_{i,j,k} + f_{i,j,k+1}$ bzw. $f_{i+1,j,k} + f_{i+1,j,k+1}$ ersetzt werden und $\Delta\xi_k$ durch $\Delta\xi_k + \Delta\xi_{k+1}$. Diese Vorgehensweise kann analog angewendet werden bei einem Schnitt der Grenzfläche mit den unteren Seitenflächen der beiden benachbarten Zellen.

Wenn eine der beiden Steigungen α oder β aus Gleichung (3.1) zu steil ist, kann es vorkommen, daß die Erweiterung um ein oberes und/oder unteres Paar an Zellen nicht ausreicht (im Beispiel aus Abbildung 3.2 würde dies bedeuten, daß z.B. ebenso die Seitenfläche Nord der Zelle $(i, j, k + 1)$ von der Grenzfläche geschnitten wird). Um aber nicht

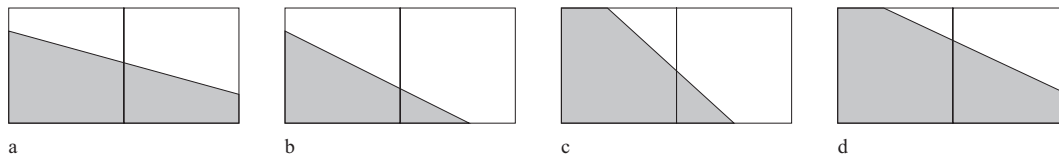


Abbildung 3.3: Vier Fälle des zweidimensionalen FLAIR-Algorithmus [3]

die Lokalität der Rekonstruktion zu verlieren, werden keine zusätzlichen Erweiterungen vorgenommen. Stattdessen wird nach der Erweiterung ein für nicht-äquidistante Gitter modifizierter zweidimensionaler FLAIR-Algorithmus [3] zur Abschätzung der Steigung verwendet (vergleiche dazu Anhang B). Dabei wird angenommen, daß eine der beiden Steigungen α oder β zu Null gesetzt werden kann, das Problem wird also auf eine zweidimensionale Konfiguration abgebildet. Unter Auswahl eines von vier verschiedenen Fällen (schematisch dargestellt in Abbildung 3.3) mittels eines Fallunterscheidungsdiagramms wird die Steigung ermittelt. Mit diesem Steigungswert wird eine Abschätzung der Tangentenvektors über Gleichung (3.5) vorgenommen.

Mit diesem Algorithmus werden für jede Grenzflächenzelle mindestens drei, maximal sechs normierte Tangentenvektoren an den Zelloberflächen berechnet. Ein Tangentenvektor wird als 'exakt' gekennzeichnet, wenn seine Steigung mittels Gleichung (3.4) berechnet wurde, er wird als 'nicht exakt' gekennzeichnet, wenn seine Steigung mit dem modifizierten FLAIR-Algorithmus bestimmt wurde.

Bestimmung des Normalenvektors im Zellmittelpunkt

Aus den normierten Tangentenvektoren \vec{t} an den verschiedenen Seiten wird ein zellzentrierter Einheitsnormalenvektor \vec{n} für jede Zelle (i, j, k) mit Phasengrenzfläche bestimmt. Wie diese Berechnung vonstatten geht, wird an einem Beispiel demonstriert, welches in Abbildung 3.4 skizziert ist. In diesem Beispiel sind die Tangentenvektoren an der Nord- und Süd-Seite der Zelle Null, nur die Vektoren \vec{t}_O , \vec{t}_W , \vec{t}_H und \vec{t}_V sind von Null verschieden. Zuerst wird in jeder Koordinatenrichtung ein repräsentativer Tangentenvektor bestimmt. Liegen z.B. \vec{t}_O und \vec{t}_W innerhalb einer Ebene und haben die gleiche Kennzeichnung ('exakt' oder 'nicht exakt'), dann wird folgende Mittelung

$$\vec{t}_{OW} = \frac{1}{2} (\vec{t}_O + \vec{t}_W) \quad (3.6)$$

mit nachfolgender Normierung durchgeführt. Anderenfalls wird entweder \vec{t}_O oder \vec{t}_W als repräsentativer Tangentenvektor ausgewählt, wobei der 'exakt' gekennzeichnete Vektor bevorzugt wird. Ebenso werden \vec{t}_{NS} und \vec{t}_{VH} bestimmt. Aus diesen drei repräsentativen Tangentenvektoren werden drei vorläufige Normalenvektoren durch Bildung der Kreuzprodukte berechnet:

$$\vec{n}_1 = \vec{t}_{OW} \times \vec{t}_{NS}, \quad \vec{n}_2 = \vec{t}_{NS} \times \vec{t}_{VH}, \quad \vec{n}_3 = \vec{t}_{VH} \times \vec{t}_{OW} . \quad (3.7)$$

Die Richtungen der vorläufigen Normalenvektoren werden, falls nötig, so korrigiert, daß sie in Phase 1 (flüssige Phase) zeigen. Schlußendlich werden die drei Normalenvektoren

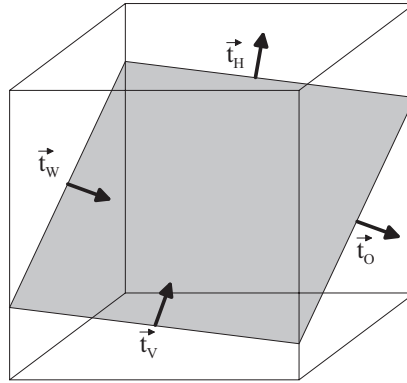


Abbildung 3.4: Masche mit Phasengrenzfläche und vier normierten Tangentenvektoren \vec{t}_O , \vec{t}_W , \vec{t}_H und \vec{t}_V

\vec{n}_1 , \vec{n}_2 und \vec{n}_3 zu einem Normalenvektor gemittelt, wobei auch hier 'exakte' Vektoren bevorzugt werden, und dieser Vektor danach normiert wird. Im Beispiel aus Abbildung 3.4 ist der Vektor \vec{t}_{NS} Null, deshalb ist nur ein vorläufiger Normalenvektor (\vec{n}_3) von Null verschieden und es muß keine Mittelung über die Normalenvektoren durchgeführt werden. Aus dem Einheitsnormalenvektor $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ können die Steigungen $\alpha = -n_1/n_3$ und $\beta = -n_2/n_3$ berechnet werden.

Wenn der EPIRA-Algorithmus keinen sinnvollen Einheitsnormalenvektor \vec{n} berechnen kann, da die Volumenverteilungen der benachbarten Grenzflächenzellen dies nicht ermöglichen, wird die TURBIT-VoF Rechnung in der derzeitigen Programmfassung mit einer entsprechenden Fehlermeldung gestoppt. Diese Fälle treten bei sehr großen Krümmungen oder bei Verwerfungen der Phasengrenzfläche auf.

Bestimmung des Punktes in der Ebene

Der Punkt $\vec{b}_{i,j,k}$ in der Ebene wird für jede Grenzflächenzelle über eine Iteration erhalten. Wegen $h := h(\vec{n}_{i,j,k}, \vec{b}_{i,j,k})$ kann geschrieben werden:

$$f_{i,j,k} = \frac{1}{V} \int h(\vec{n}_{i,j,k}, \vec{b}_{i,j,k}) dV . \quad (3.8)$$

Dies ist eine implizite Gleichung, da $f_{i,j,k}$ und $\vec{n}_{i,j,k}$ bekannt sind. $\vec{b}_{i,j,k}$ wird solange iterativ verändert, bis Gleichung (3.8) erfüllt ist. In der Praxis werden dazu nur ungefähr 2 bis 4 Iterationsschritte mit dem weiter unten beschriebenen Verfahren benötigt. Die Berechnung des Integrals in (3.8) wird im nächsten Unterabschnitt 3.1.3 besprochen.

Zur Veranschaulichung des Iterationsprozesses wird das in TURBIT-VoF implementierte Verfahren an einem zweidimensionalen Beispiel gemäß Skizze 3.5 a) und b) erläutert. Zu jedem Punkt \vec{b} gehört bei einem vorgegebenen Normalenvektor \vec{n} ein Volumenanteil f . Wird dieser Volumenanteil über einer Komponente des Punktes \vec{b} aufgetragen, dann ergibt sich ein Diagramm wie in Abbildung 3.5 c). Der Funktionsverlauf ergibt sich durch eine Faltungsoperation der linearen Verschiebung von \vec{b} mit dem Volumenelement. Ziel ist

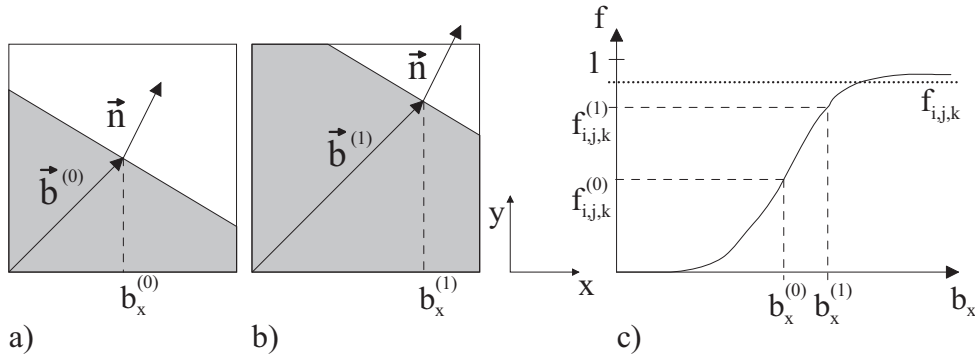


Abbildung 3.5: Bestimmung des Punktes in der Ebene: a) und b) Skizzen zur Verdeutlichung der ersten zwei Iterationsschritte mit $b_x^{(0)}$ und $b_x^{(1)}$; c) f -Werte in Abhängigkeit des Punktes in der Ebene

es, den Punkt so zu wählen, daß dadurch der Volumenanteil $f_{i,j,k}$ der Zelle erhalten wird. In TURBIT-VoF wird folgende Iteration durchgeführt

$$\vec{b}^{(0)} = \begin{pmatrix} b_x^{(0)} & , & b_y^{(0)} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\vec{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} b_x^{(0)} + \delta b_x^{(1)} & , & b_y^{(0)} + \delta b_y^{(1)} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

⋮

$$\vec{b}^{(n)} = \begin{pmatrix} b_x^{(n-1)} + \delta b_x^{(n)} & , & b_y^{(n-1)} + \delta b_y^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

mit

$$\delta b_x^{(i)} = \frac{f_{i,j,k} - c_x^{(i)}}{a_x^{(i)}} - b_x^{(i-1)} \quad (3.12)$$

und

$$a_x^{(i)} = \frac{f(b_x^{(i-1)} + \tilde{\delta} b_x^{(i)}) - f(b_x^{(i-1)})}{\delta b_x^{(i)}} \quad (3.13)$$

$$c_x^{(i)} = f(b_x^{(i-1)}) - a_x^{(i)} \cdot b_x^{(i-1)} . \quad (3.14)$$

Als Anfangswerte $b_x^{(0)}$ und $b_y^{(0)}$ wird der Zellmittelpunkt gewählt. Analog wird dieses Verfahren für die andere Koordinatenrichtung durchgeführt.

Die Inkremente der Iteration $\tilde{\delta} b_x^{(i)}$ und $\tilde{\delta} b_y^{(i)}$ werden folgendermaßen erhalten:

$$\tilde{\delta} b_x^{(i)} = \text{FAC}_x^{(i)} \cdot n_x|_{i,j,k} \quad (3.15)$$

$$\tilde{\delta} b_y^{(i)} = \text{FAC}_y^{(i)} \cdot n_y|_{i,j,k} \quad (3.16)$$

Entscheidend für eine schnelle Konvergenz des Verfahrens ist die Wahl des Parameters FAC. Es hat sich folgende Wahl als optimal herausgestellt:

$$\text{FAC}_x^{(i)} := - |f(b_x^{(i-1)}) - f_{i,j,k}| / 5000 \quad (3.17)$$

$$\text{FAC}_y^{(i)} := - |f(b_y^{(i-1)}) - f_{i,j,k}| / 5000 . \quad (3.18)$$

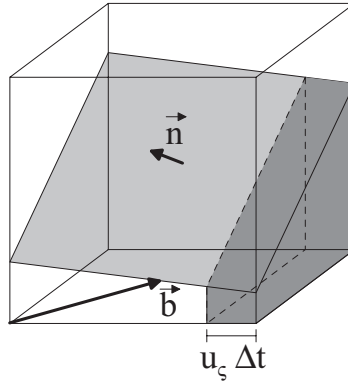


Abbildung 3.6: Innerhalb Δt wird das dunkel schattierte Volumen über die Seite $O(st)$ advektiert

Dieser Ansatz ist ganz analog auf drei Dimensionen zu erweitern. Die Iteration wird abgebrochen, wenn der relative Fehler der Volumenfraktion unter einer Schranke liegt. In dieser Arbeit wurde für diese Schranke der Wert 10^{-6} verwendet.

3.1.3 Advektion

Im Advektionsschritt werden die Flüsse der Phase 1 (flüssige Phase) über die Seitenflächen der Maschen berechnet. Der in EPIRA benutzte Algorithmus behandelt die Flüsse entlang der einzelnen Koordinatenrichtungen getrennt nacheinander ('operator split'). Im folgenden wird dies für die Berechnung des Flusses entlang der ζ -Richtung veranschaulicht, die Konfiguration sei wie in Abbildung 3.6. $u_\zeta > 0$ sei die Geschwindigkeitskomponente normal zur Seitenfläche $O(st)$ an $(x_i + \Delta\zeta_i/2, y_j, z_k)$. Innerhalb eines Zeitschrittes Δt wird das dunkel schraffierte Volumen aus Abbildung 3.6 in die ostwärts benachbarte Zelle transportiert. Zur Berechnung des Flusses δf gibt es verschiedene Ansätze in der Literatur. Beim zweidimensionalen FLAIR-Algorithmus [3] z.B. wird der Fluß mittels einer größeren Anzahl an Fallunterscheidungen berechnet. Im dreidimensionalen Raum ist dies nicht praktikabel, deshalb wird hier ein anderer Weg eingeschlagen und ein allgemeiner Algorithmus zur Berechnung von δf entwickelt.

Die lineare Höhenfunktion

$$h(\zeta, \eta) = (b_1 - \zeta) \frac{n_1}{n_3} + (b_2 - \eta) \frac{n_2}{n_3} + b_3 \quad (3.19)$$

repräsentiert die Phasengrenzfläche. Ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit wird angenommen, daß gilt: $n_1 > 0$, $n_2 > 0$ und $n_3 > 0$. Anderenfalls wird das Koordinatensystem so gedreht, daß alle Komponenten des Einheitsnormalenvektors größer Null sind. Es wird folgender Operator \mathcal{V} der Volumenintegration eingeführt:

$$\mathcal{V}(\zeta_1, \zeta_2, \eta, \xi) := \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \int_{\eta}^{\eta_m(\zeta, \xi)} h_m(\zeta', \eta') d\eta' d\zeta' \quad (3.20)$$

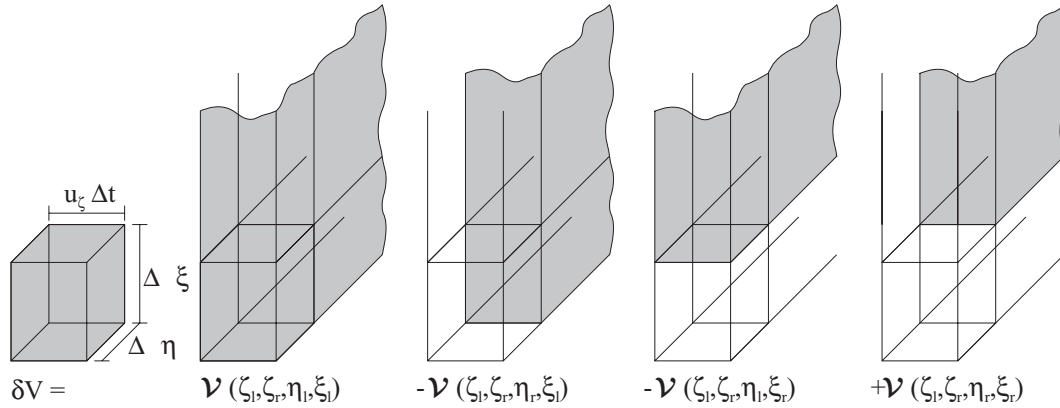


Abbildung 3.7: Berechnung des Volumens δV , der Bereich der Integration ist schraffiert eingezeichnet

mit

$$\eta_m(\varsigma, \xi) := \min\{\max\{\eta, \tilde{\eta}(\varsigma, \xi)\}, M\}; \quad h_m(\varsigma, \eta) := \min\{\max\{0, h(\varsigma, \eta) - \xi\}, M\} \quad (3.21)$$

und

$$\tilde{\eta}(\varsigma, \xi) := \left[(b_1 - \varsigma) \frac{n_1}{n_3} + b_3 - \xi \right] \frac{n_3}{n_2} + b_2 . \quad (3.22)$$

Die Integrale zur Berechnung von \mathcal{V} können analytisch ausgewertet werden. Anschaulich gesprochen gibt der Operator \mathcal{V} der Volumenintegration das Volumen der Höhenfunktion $h(\varsigma, \eta)$ im Gebiet $[\varsigma_1, \varsigma_2] \times [\eta, \eta_m] \times [\xi, h_m]$ wieder. In Gleichung (3.21) ist M als positive Konstante eingeführt, die nur in den Fällen $n_1 = 0$ und $n_2 = 0$ benötigt wird. In der Praxis hat sich ein Wert von $M = 1000$ bewährt. Durch die Kombination von \mathcal{V} , angewendet auf verschiedene Gebiete, wird der Fluß in einem bestimmten Volumenbereich $[\varsigma_l, \varsigma_r] \times [\eta_l, \eta_r] \times [\xi_l, \xi_r]$ über folgende Relation bestimmt:

$$\delta V = \mathcal{V}(\varsigma_l, \varsigma_r, \eta_l, \xi_l) - \mathcal{V}(\varsigma_l, \varsigma_r, \eta_r, \xi_l) - \mathcal{V}(\varsigma_l, \varsigma_r, \eta_l, \xi_r) + \mathcal{V}(\varsigma_l, \varsigma_r, \eta_r, \xi_r) , \quad (3.23)$$

vergleiche dazu auch Abbildung 3.7. Der Fluß der Volumenfraktion von Phase 1 (flüssige Phase) bestimmt sich dann zu:

$$\delta f = \frac{\delta V}{\Delta \varsigma_i \Delta \eta_j \Delta \xi_k} . \quad (3.24)$$

Die in Tabelle 3.1 verzeichneten Integrationsgrenzen gelten allgemein zur Berechnung des Flusses δV in einer beliebigen Koordinatenrichtung, die Grenzen für negative Geschwindigkeiten ergeben sich analog dazu.

3.1.4 Testrechnungen

Um die Leistungsfähigkeit des EPIRA-Algorithmus zu untersuchen wurden mehrere Tests mit dreidimensionalen Fluidkonfigurationen durchgeführt.

u	ς_l	ς_r	η_l	η_r	ξ_l	ξ_r
$u_\varsigma > 0$	$\varsigma_{i+1/2} - u_\varsigma \Delta t$	$\varsigma_{i+1/2}$	$\eta_{j-1/2}$	$\eta_{j+1/2}$	$\xi_{k-1/2}$	$\xi_{k+1/2}$
$u_\eta > 0$	$\varsigma_{i+1/2}$	$\varsigma_{i+1/2}$	$\eta_{j+1/2} - u_\eta \Delta t$	$\eta_{j+1/2}$	$\xi_{k-1/2}$	$\xi_{k+1/2}$
$u_\xi > 0$	$\varsigma_{i+1/2}$	$\varsigma_{i+1/2}$	$\eta_{j-1/2}$	$\eta_{j+1/2}$	$\xi_{k+1/2} - u_\xi \Delta t$	$\xi_{k+1/2}$

Tabelle 3.1: Integrationsgrenzen für den EPIRA-Advektionsschritt zur Berechnung des Flusses δV in den unterschiedlichen Koordinatenrichtungen

Test des Rekonstruktionsalgorithmus

Der Rekonstruktionsalgorithmus wurde mit fest vorgegebenen, dreidimensionalen Fluidkonfigurationen getestet. Dazu wurde ein diskretes Feld $f_{i,j,k}$ der Volumenfraktionen der Phase 1 (flüssige Phase) aus einer analytischen Phasengrenzflächenverteilung mit einem separaten Programm erzeugt. Dieses Feld $f_{i,j,k}$ wird als Eingabe für den Rekonstruktionsteil des EPIRA-Algorithmus genommen. Es wird die Position der Phasengrenzfläche ($\vec{n}_{i,j,k}$ und $\vec{b}_{i,j,k}$) mittels EPIRA bestimmt und mit der analytisch berechneten verglichen.

Für eine ebene Grenzfläche ergibt sich mit EPIRA immer eine korrekte Rekonstruktion unabhängig von der räumlichen Orientierung der Phasengrenzfläche. Dies wurde für ein äquidistantes Gitter und für ein Gitter mit nicht äquidistanten Maschen in einer Raumrichtung getestet. Die exakte Rekonstruktion ist auf die oben besprochene Erweiterung zurückzuführen, wodurch die Steigungen an den Zellseiten exakt bestimmt werden können. Aufgrund dieser Vorgehensweise werden immer mindestens zwei exakte seitenzentrierte Tangentenvektoren berechnet, was zu einem korrekten Einheitsnormalenvektor führt.

Desweiteren wurden Tests mit kugelförmigen Tropfen durchgeführt. Diese wurden auf äquidistanten Gittern mit isotropen Maschenweiten diskretisiert. Drei verschiedene Simulationen mit jeweils unterschiedlicher Auflösung wurden durchgeführt, nämlich mit einer Auflösung des Tropfendurchmessers mit 8, 16 und 32 Maschen. In Tabelle 3.2 ist der L_1 Fehler der EPIRA-Rekonstruktion für diesen statischen Test bei verschiedenen Auflösungen angegeben. Dieser Fehler wurde durch den Vergleich des rekonstruierten Einheitsnormalenvektors mit dem analytisch bestimmten errechnet. Für die größte Gitterauflösung des Tropfendurchmessers wird ein Fehler von 4,2% bestimmt, im Fall der feinsten Auflösung wird ein L_1 Fehler von 0,9% erzielt. Wie zu erwarten, ist das Verfahren der dreidimensionalen Rekonstruktion von erster Ordnung.

Auflösung Tropfen	$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	N_{int}	L_1	Ord.	NTIM	$\varepsilon_{ \Delta f }$	Ord.
$8 \times 8 \times 8$	0,1	272	0,0417		160	0,024	
				1,17			1,50
$16 \times 16 \times 16$	0,05	1160	0,0185		320	0,0085	
				1,06			5,73
$32 \times 32 \times 32$	0,025	4760	0,0089		640	0,00016	

Tabelle 3.2: Drei Testfälle eines kugelförmigen Tropfens: Anzahl der Zellen mit beiden Phasen N_{int} , L_1 Fehler und Ordnung beim statischen Test der Rekonstruktion; Anzahl der Zeitschritte NTIM und Fehler $\varepsilon_{|\Delta f|}$ beim dynamischen Test der Advektion mit Ordnung

Die Anzahl an 'nicht exakten' Tangentenvektoren hängt von der Form der Phasengrenzfläche, insbesondere der lokalen Krümmung, ab. Für den kugelförmigen Tropfen im Ausgangszustand wurde ermittelt, daß alle Tangentenvektoren 'exakt' bestimmt werden konnten.

Test des Advektionsalgorithmus

Die reine Advektion zu testen, ist nicht sinnvoll, da in der Praxis der Advektion immer ein Rekonstruktionsschritt vorausgeht. Deshalb wird der gesamte EPIRA-Algorithmus getestet. Die Testrechnungen wurden in einem quaderförmigen Rechengebiet mit periodischen Randbedingungen in x - und y -Richtung durchgeführt. In z -Richtung wird das Rechengebiet durch undurchdringliche Wände begrenzt. In den Rechnungen wird ein gleichförmiges Geschwindigkeitsfeld fest vorgegeben, die Wände bewegen sich gemäß diesem Geschwindigkeitsfeld. Somit sind alle Deformationen der Anfangsgeometrie auf Ungenauigkeiten des EPIRA-Algorithmus zurückzuführen.

In allen Simulationen ist die Erhaltung der Volumenfraktion von Phase 1 (flüssige Phase) exakt innerhalb einer benutzerseitig eingeführten Schranke ϵ gegeben. Nach jedem Zeitschritt wird der Wert der Volumenfraktion einer Zelle mit $0 < f < \epsilon$ zu Null gesetzt und einer Zelle mit $1 - \epsilon < f < 1$ zu Eins. Es wird eine Schranke von $\epsilon = 10^{-8}$ im Rechenprogramm vorgegeben.

Tests mit ebenen Phasengrenzflächen wurden realisiert, indem sich Phase 1 zwischen zwei parallelen Ebenen beliebiger Orientierung im Raum befindet. Diese Konfigurationen wurden immer exakt transportiert.

Ebenso wurden Simulationen mit kugelförmigen Tropfen mit derselben Auflösung des Durchmessers wie beim Test der Rekonstruktion durchgeführt. Dabei wurde das gleichförmige Geschwindigkeitsfeld $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)^T = (5, 0, 0)^T$ bei allen Simulationen vorgegeben. Die Zeitschrittweite Δt wurde so angepaßt, daß mit einer Courant Zahl von $C = (u_x \Delta t) / \Delta x = 0,5$ gerechnet wurde. Für jede Auflösung wurde ein Transport des Tropfens von 10 Durchmessern berechnet, was einer Problemzeit von $t = 1,6$ und einer Anzahl von Zeitschritten NTIM gemäß Tabelle 3.2 entspricht. Aufgrund der periodischen Randbedingungen sollte die Position des Tropfens nach NTIM Zeitschritten genau an der selben Stelle wie zum Zeitpunkt $t = 0$ liegen. Um den Fehler der Advektion zu quantifizieren wird das Maß $\varepsilon_{|\Delta f|}$ eingeführt, welches für die horizontale Mittelebene der Tropfen berechnet wird:

$$\varepsilon_{|\Delta f|} = \frac{1}{2} \frac{\sum_{i,j} |f_{i,j,k}(t = 1,6) - f_{i,j,k}(t = 0)|}{\sum_{i,j} f_{i,j,k}(t = 0)} . \quad (3.25)$$

Für eine absolut exakte Advektion ist $\varepsilon_{|\Delta f|}$ Null, im schlechtesten Fall ohne Übereinstimmung von Anfangs- und Endkonfiguration Eins. Für die drei gewählten Tropfen mit unterschiedlicher Auflösung des Durchmessers sind die Werte $\varepsilon_{|\Delta f|}$ in Tabelle 3.2 verzeichnet. Für das gröbste Gitter wird ein Fehler von nur 2,4%, auf dem feinsten von 0,02% durch den EPIRA-Algorithmus erzielt. Es ergibt sich eine Fehlerordnung für $\varepsilon_{|\Delta f|}$ von bis zu sechster Ordnung.

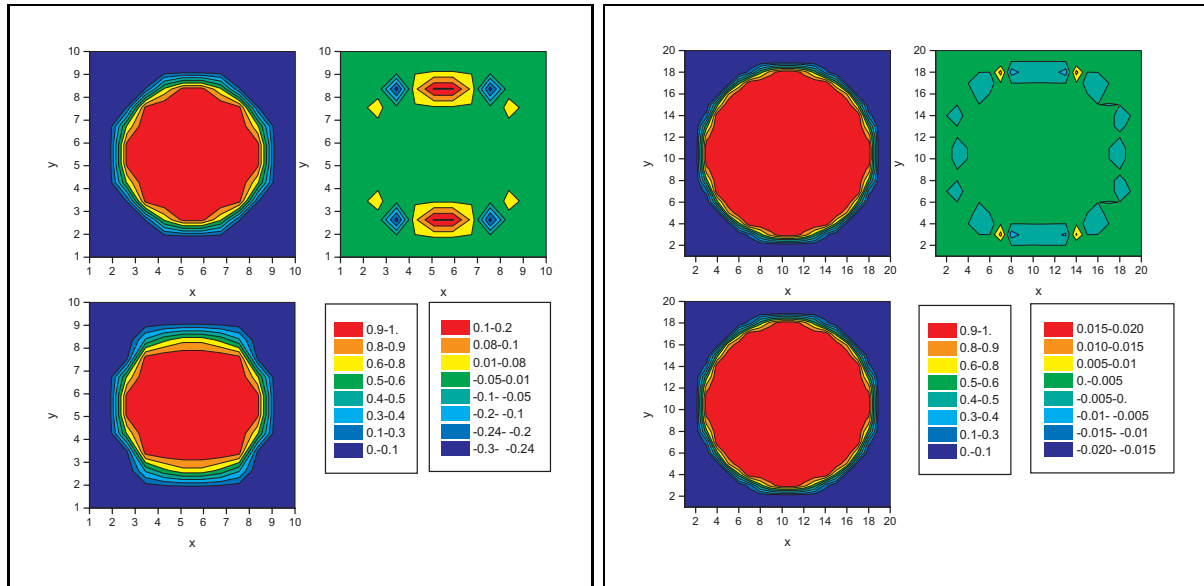


Abbildung 3.8: Verteilung der f -Werte zum Zeitpunkt $t = 0$ (jeweils oben links, Legende links), $t = 1,6$ (jeweils unten links, Legende links) und Differenz beider Verteilungen (jeweils oben rechts, Legende rechts) für verschiedene Auflösungen des Tropfens im Gitter; links: 8 Maschen pro Durchmesser, rechts: 16 Maschen

Abbildung 3.8 zeigt die horizontalen Mittelebenen für die Tropfen mit größter (links) und mit mittlerer Auflösung (rechts). Oben links ist jeweils die Anfangsverteilung der Volumenfraktion von Phase 1, darunter die Verteilung nach der Advektion zum Zeitpunkt $t = 1,6$ dargestellt (jeweils linke Legende). Oben rechts ist die Differenz der beiden linken Diagramme gezeichnet (jeweils rechte Legende). Auf dem Gitter mit der größten Auflösung ergibt sich nach der Advektion um 10 Durchmesser eine Deformation des Tropfens. Die Summe der $f_{i,j,k}$ bleibt aber in jeder horizontalen Ebene konstant, es handelt sich um eine Umlagerung der Volumenfraktion. Der Fehler akkumuliert an den Seiten des Tropfens, an denen die Flächennormalenvektoren senkrecht zur Strömungsrichtung stehen. Für die mittlere Auflösung ist solch eine Akkumulation nicht zu beobachten.

Die Ergebnisse für den Tropfen mit der feinsten Auflösung im Gitter sind vergleichbar mit denen der mittleren Auflösung, eine Deformation ist nicht zu erkennen und der Fehler ist ebenso einheitlich über die Phasengrenzfläche verteilt.

Bewertung der Testergebnisse

Beide Tests für den EPIRA-Algorithmus haben gezeigt, daß Diskretisierungen kugelförmiger Fluidverteilungen mit hoher Genauigkeit rekonstruiert und advektiert werden. Selbst bei sehr groben Auflösungen des Durchmessers durch 8 Maschen werden Fehler kleiner 5% erzielt. Dabei kommt es zu einer Deformation der Phasengrenzfläche. Für die beiden feineren Auflösungen von 16 und 32 Maschen pro Durchmesser sind keine Deformationen zu beobachten und die Fehler liegen deutlich unter 1%.

Dies bedeutet, daß für eine Simulation von nahezu sphärischen Blasen eine Auflösung

des Durchmessers mit 16 Maschen voll ausreichend ist und eventuell sogar 10 - 12 Maschen genügen.

3.2 Oberflächenspannung

In Gleichung (2.86) ist der Term \vec{m}_{int}^σ enthalten, der den Impulssprung an der Phasengrenze aufgrund der Oberflächenspannung wiedergibt. Dieser Term wird in vielen Arbeiten (vgl. hierzu z.B. [89]) mit der Kraft \vec{F}_{Fl}^σ , die nur an der Position der Phasengrenzfläche von Null verschieden ist, berücksichtigt:

$$\vec{m}_{int}^\sigma \doteq \vec{F}_{Fl}^\sigma = \sigma \kappa \frac{\vec{S}}{\Delta V} \quad (3.26)$$

mit

κ	Krümmung
σ	Oberflächenspannung
\vec{S}	Flächenelement der Phasengrenze
ΔV	Volumenelement.

Zur Berechnung der Krümmung in Gleichung (3.26) wird meist eine Formel der Differentialgeometrie angewendet. Es zeigt sich, daß diese aufgrund ihres komplexen Aufbaus und durch die verschachtelte Anordnung der Ableitungen nur unzureichend die Oberflächenspannung wiedergibt. Desweiteren ist an dieser Formulierung numerisch problematisch, daß die Kraft \vec{F}_{Fl}^σ nur an der infinitesimalen Grenzschicht wirkt.

Besser erscheint der Ansatz von Brackbill et al. (siehe [11], [47]), die Oberflächenspannung über einen Volumenterm zu berechnen, also über ein Volumenelement zu mitteln (CSF-Modell für 'Continuum Surface Force'). Es wird angenommen, daß die Phasengrenzfläche die endliche Dicke h habe. Nach [47] ergibt sich dann als Volumenterm \vec{F}_{Vo}^σ :

$$\vec{m}_{int}^\sigma \doteq \vec{F}_{Vo}^\sigma = \sigma \kappa a_{int} \nabla_h f \quad (3.27)$$

mit ∇_h als diskretem Nabla-Operator. Dabei hat die Kraft \vec{F}_{Vo}^σ die gewünschten Eigenschaften:

- In Normalenrichtung zur Phasengrenzfläche ergibt sich der theoretisch vorgegebene Drucksprung (P_1 und P_2 Punkte in Phase 1 bzw. in Phase 2)

$$\int_{P_1}^{P_2} \vec{F}_{Vo}^\sigma(\vec{x}) d\vec{x} = \int_0^1 \sigma \kappa a_{int} d\vec{f} = \sigma \kappa a_{int} \vec{n} \quad (3.28)$$

- Für den Grenzwert einer sehr dünnen Phasengrenzfläche ergibt sich

$$\lim_{h \rightarrow 0} \vec{F}_{Vo}^\sigma = \vec{F}_{Fl}^\sigma \delta[\vec{x} - \vec{x}_s] \quad (3.29)$$

Mit entscheidend für die Genauigkeit des Kontinuum-Modells ist die Berechnung der Krümmung, die folgendermaßen geschieht:

$$\kappa = -(\nabla \cdot \vec{n}) . \quad (3.30)$$

Brackbill et al. [11] verwenden zur Diskretisierung von Gleichung (3.30) ein Verfahren, welches nicht berücksichtigt, daß den Nachbarzellen von Grenzflächenzellen kein Normalenvektor zugeordnet werden kann. In TURBIT-VoF kommt deshalb der EPIRA-Algorithmus zum Einsatz, denn für den Einheitsnormalenvektor \vec{n} in Gleichung (3.30) wird der aus der Rekonstruktion berechnete eingesetzt.

Für die Berechnung der Phasengrenzflächenkonzentration a_{int} wird ein Algorithmus angewendet, der ganz analog der vorherigen Integrationsberechnung von EPIRA ist. Anstatt der Volumenintegrale müssen Oberflächenintegrale berechnet werden. Dies bedeutet, daß zwar andere Integrationsformeln benötigt werden, die generelle Struktur der Berechnung bleibt aber gleich.

3.3 Konvektive Terme

Als Diskretisierungsverfahren für die konvektiven Terme der Impulsgleichung wird in TURBIT-VoF ein sogenanntes Weighted-ENO-Verfahren angewendet. Dies ist notwendig, da die scheinbare Dichte ρ_m stark diskontinuierlich ist und deshalb der konvektive Term ($\rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m$) besonderer Beachtung bedarf. In diesem Abschnitt wird auf die Theorie dieses Verfahrens eingegangen.

Die linke Seite der Navier-Stokes-Gleichung, bestehend aus dem Zeitableitungsterm und dem nichtlinearen konvektiven Transportterm (vgl. Gleichung (2.86)), kann durch folgende, in der Literatur viel diskutierte, hyperbolische Differentialgleichung (z.B. [35], [83] oder [84]) in Erhaltungsform dargestellt werden

$$\vec{u}_t + \sum_{i=1}^d \vec{f}_i(\vec{u})_{x_i} = 0 \quad (3.31)$$

mit $\vec{u} = (u_1(x_1, \dots, x_d), \dots, u_m(x_1, \dots, x_d))^T$ und jede reelle Kombination $\sum_{i=1}^d \xi_i \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial \vec{u}}$ hat m paarweise verschiedene Eigenwerte und einen kompletten Satz an rechten und linken Eigenvektoren.

Ziel ist es, Gleichung (3.31) auch für stark diskontinuierliche Variablen \vec{u} mit möglichst hoher Ordnung zu lösen. Dazu sind in der Literatur viele Konzepte verfolgt worden, siehe hierzu z.B. Hirsch [40]. Verschiedene Beispielrechnungen von Hirsch (siehe [40]) legen die allgemein bekannte Problematik von Verfahren höherer Ordnung offen. An Diskontinuitäten werden, bedingt durch zu geringe Diffusion, Oszillationen erzeugt. Es kommt zu sogenannten Überschwingern, und die Flanken der Sprungstellen werden nicht exakt aufgelöst. Zur Umgehung dieses Problems wurden Verfahren mit zusätzlicher numerischer Diffusion erstellt, die die Oszillationen mit Dissipationstermen wegämpfen.

Ein anderer Weg wurde bei den Total-Variation-Diminishing-Verfahren (TVD-Verfahren) eingeschlagen, wo durch Einführung sogenannter nichtlinearer Limiter der Flußanteil, der

für eine höhere Ordnung als eins sorgt, entsprechend angepaßt wird. Problem der räumlichen TVD-Verfahren ist, daß an Diskontinuitäten zur Vermeidung von Überschwüngen und Oszillationen die Ordnung des Verfahrens auf eins herabgesetzt wird.

Eine andere Klasse von hochauflösenden Verfahren bilden die kompakten oder auch Padé-Verfahren [22]. Lele [51] erweiterte diese Verfahren in Anlehnung an Spektralverfahren zu einer besseren Auflösung möglichst vieler Skalen. Adams und Shariff [2] kombinierten ein kompaktes Verfahren mit einem sogenannten ENO-Verfahren. Dabei ergeben sich Schwierigkeiten im Koppelungsbereich beider Verfahren und zusätzliche Algorithmen zur Detektion von Unstetigkeiten müssen eingesetzt werden. Insgesamt bieten all diese Verfahren höchste Auflösungen, ihre Effizienz bezüglich Anwendungsrechnungen läßt aber sehr zu wünschen übrig.

In dieser Arbeit soll nur das Konzept der hochauflösenden *Essentially-Non-Oscillatory*-Verfahren (ENO, siehe [36]) erläutert werden, welches den Vorteil bietet, auch an den Diskontinuitäten bei einem vertretbaren Rechenaufwand hohe Auflösungen zu erzielen. ENO-Verfahren bieten einen guten Kompromiß zwischen Genauigkeitsanforderungen und Effizienzüberlegungen.

Als *stencil* wird die Menge, bestehend aus den Stützstellen eines Diskretisierungsverfahrens, bezeichnet. Bei klassischen Verfahren wie z.B. zentralen Differenzen, wird immer ohne irgendeine Auswahlmöglichkeit ein fester *stencil* für die Diskretisierung verwendet.

In einem ersten Abschnitt wird das Konzept von ENO-Verfahren erläutert. Dabei wird gezeigt, daß durch das Konzept der beweglichen Stützstellenauswahl ('moving stencil') hohe Genauigkeit an Diskontinuitäten erzielt werden und dies bei einer möglichst geringen Erzeugung von Oszillationen. Danach wird auf das Konzept der gewichteten ENO-Verfahren (Weighted-ENO, W-ENO) eingegangen, das in glatten Gebieten die bestmögliche Approximation durch Einbeziehung aller möglichen Stützstellen vornimmt.

3.3.1 ENO

In diesem Abschnitt wird die Darstellung des Verfahrens E-ENO ('Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory') an den Ausführungen von Shu und Osher ([83] und [84]) angelehnt.

Gleichung (3.31) ergibt im eindimensionalen Fall ($m = d = 1$):

$$u_t + f(u)_x = 0 . \quad (3.32)$$

Daraus wird bei einem konservativen Schema:

$$u_t + \frac{\hat{f}_{j+1/2} - \hat{f}_{j-1/2}}{\Delta x} = 0 \quad (3.33)$$

mit dem konsistenten Fluß ($k, l \in \mathbb{N}$, $k + l + 1$ Stützstellen)

$$\hat{f}_{j+1/2} = \hat{f}(u_{j-l}, \dots, u_{j+k}) \text{ und } \hat{f}(u, \dots, u) = f(u) \quad (3.34)$$

gelöst.

Für eine Approximation von \hat{f} , die von hoher Ordnung ist, wird eine Funktion $h(x)$ so definiert, daß ihr Mittelwert in $[x - \Delta x/2, x + \Delta x/2]$ dem Fluß $f(u(x))$ entspricht:

$$f(u(x)) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} h(\xi) d\xi . \quad (3.35)$$

Dann gilt:

$$f(u(x))_x = \frac{h(x + \Delta x/2) - h(x - \Delta x/2)}{\Delta x} . \quad (3.36)$$

$\hat{f}_{j+1/2}$ sollte somit $h(x_j + \Delta x/2)$ in hoher Ordnung approximieren.

h wird über eine Rekonstruktion via Stammfunktionen gewonnen [36]. Als Stammfunktion wird H folgendermaßen eingeführt:

$$H(x) = \int_{-\infty}^x h(\xi) d\xi . \quad (3.37)$$

Somit gilt:

$$\begin{aligned} H(x_{j+1/2}) &= \int_{-\infty}^{x_{j+1/2}} h(\xi) d\xi \\ &= \sum_{k=-\infty}^j \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} h(\xi) d\xi = \Delta x \sum_{k=-\infty}^j f(u(x_k)) . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Es wird eine Newton-Interpolation von H auf den Stützstellen $x_{m_{r-1}-1/2}, \dots, x_{m_{r-1}+r-1/2}$ durchgeführt mit x_{m_i} , $i \in \{1, \dots, r\}$ jeweils der äußerst linken Stützstelle:

$$\begin{aligned} R_{j+1/2}(x) &= H(x_{j+1/2}) + H[x_{m_1-1/2}, x_{m_1+1/2}](x - x_{m_1-1/2}) + \dots \\ &\quad + H[x_{m_{r-1}-1/2}, \dots, x_{m_{r-1}+r-1/2}](x - x_{m_{r-1}-1/2}) \dots (x - x_{m_{r-1}+r-3/2}) , \end{aligned} \quad (3.39)$$

wobei $H[\cdot]$ die dividierte Differenz von H ist (vergleiche dazu Anhang C).

$R_{j+1/2}(x)$ wird mit $r + 1$ benachbarten, nicht äquidistanten Stützstellen konstruiert. Durch die Wahl der m_i ergeben sich somit $r + 1$ Wahlmöglichkeiten für den *stencil*. Bei den ENO-Verfahren werden die Stützstellen so ausgewählt, daß die dividierten Differenzen möglichst kleine Werte aufweisen, somit die Ableitungen klein sind (vgl. Anhang C).

Die dividierten Differenzen von H können auf das Differenzschema von f zurückgeführt werden. Es gilt nämlich:

$$H[x_{l-1/2}, x_{l+1/2}] = f[u(x_l)] \quad (3.40)$$

$$H[x_{l-1/2}, \dots, x_{l+k+1/2}] = \frac{1}{k+1} f[u(x_l), \dots, u(x_{l+k})] . \quad (3.41)$$

Somit läßt sich schreiben:

$$\begin{aligned} R_{j+1/2}(x) &= \Delta x \sum_{k=-\infty}^j f(u(x_k)) + f[u(x_{m_1})](x - x_{m_1-1/2}) + \dots \\ &\quad + \frac{1}{r} f[u(x_{m_{r-1}}), \dots, u(x_{m_{r-1}+r-1})](x - x_{m_{r-1}-1/2}) \dots (x - x_{m_{r-1}+r-3/2}) . \end{aligned} \quad (3.42)$$

Der Fluß ergibt sich damit in $(r + 1)$ ter Ordnung Genauigkeit zu:

$$\begin{aligned} \hat{f}_{j+1/2} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} R_{j+1/2}(x) \right)_{x=x_{j+1/2}} = f[u(x_{m_1})] \\ &+ \sum_{k=1}^{r-1} \frac{1}{k+1} f[u(x_{m_k}), \dots, u(x_{m_{k+k}})] \\ &\times \sum_{l=0}^k \prod_{i=0, i \neq l}^k (x_{j+1/2} - x_{m_{k+i-1/2}}), \end{aligned} \quad (3.43)$$

wobei die letzte Summe nur einen Term enthält.

Die Auswahl der m_i stellt den eigentlichen Algorithmus dar. Die erste Stützstelle wird stromauf genommen, wobei die Roe-Geschwindigkeit $\hat{a}_{j+1/2}$ als Kriterium benutzt wird:

$$\hat{a}_{j+1/2} = \frac{f(u_{j+1}) - f(u_j)}{u_{j+1} - u_j}. \quad (3.44)$$

Damit ergibt sich für die erste Stützstelle:

$$m_1 = \begin{cases} j & \text{für } \hat{a}_{j+1/2} \geq 0 \\ j + 1 & \text{für } \hat{a}_{j+1/2} < 0. \end{cases} \quad (3.45)$$

Wie schon oben erwähnt, werden die weiteren Stützstellen unter Berücksichtigung minimaler dividierter Differenzen gewählt. Dazu werden die Größen a^i und b^i eingeführt:

$$a^i = f[u(x_{m_i}), \dots, u(x_{m_{i+i}})] \quad (3.46)$$

$$b^i = f[u(x_{m_{i-1}}), \dots, u(x_{m_{i+i-1}})] . \quad (3.47)$$

m_{i+1} wird dann folgendermaßen bestimmt:

$$m_{i+1} = \begin{cases} m_i - 1 & \text{für } |a^i| \geq |b^i| \\ m_i & \text{für } |a^i| < |b^i|. \end{cases} \quad (3.48)$$

Das ENO-Verfahren vermeidet somit eine Approximation über starke Gradienten hinweg, indem die Richtung, in welche neue Stützpunkte dynamisch zum *stencil* hinzugefügt werden, entsprechend gewählt wird. Gerade die Dynamik der Wahl der Stützstellen bedeutet aber programmtechnisch einen sehr hohen Aufwand, deshalb ist dieses Konzept weiterentwickelt worden zu den sogenannten Weighted-ENO-Verfahren.

3.3.2 Weighted-ENO

Im Gegensatz zum klassischen ENO-Verfahren, das im letzten Abschnitt vorgestellt wurde, werden beim sogenannten gewichteten ('weighted') ENO (siehe Liu et al. [52]) alle *stencils* gemittelt, die aufgrund der Anzahl der Punkte an Stützstellen möglich sind ($r + 1$ Wahlmöglichkeiten). Die Gewichtungsfaktoren dieser Mittelung werden so angepaßt, daß an Diskontinuitäten nur *stencils* in die Gewichtung eingehen, die in glatten Gebieten liegen, während in vollständig glatten Gebieten alle *stencils* so kombiniert werden, daß die Differenzenformel höchstmögliche Ordnung besitzt.

Der *stencil* S_j der Länge r enthalte folgende Stützstellen:

$$S_j = (x_{j-r+1}, x_{j-r+2}, \dots, x_j) . \quad (3.49)$$

Die Polynome p_j werden so eingeführt, daß sie die Stammfunktion H interpolieren:

$$p_j(x_{l+1/2}) = H(x_{l+1/2}) \text{ mit } l = j-r, \dots, j . \quad (3.50)$$

Bei dem im vorherigen Unterabschnitt beschriebenen ENO-Verfahren wird nur ein Polynom p_j für die Interpolation von H ausgewählt und zwar so, daß p_j nur Stützstellen in möglichst glatten Bereichen hat. Das W-ENO-Verfahren geht anders vor. Es wird folgende, die Stammfunktion approximierende Funktion R_j als konvexe Linearkombination der Polynome p_j gebildet:

$$R_j(x) = \sum_{k=0}^r \frac{\alpha_k^j}{\sum_{l=0}^r \alpha_l^j} p_{j+k}(x) , \quad (3.51)$$

mit den α_k^j als positiven Konstanten. Der numerische Fluß ergibt sich wie beim ENO-Verfahren zu:

$$\hat{f}_{j+1/2} = \left(\frac{\partial}{\partial x} R_j(x) \right)_{x=x_{j+1/2}} . \quad (3.52)$$

Um sogenannte ENO-Eigenschaften der Funktion R_j zu erhalten, wird für die Wahl der $\{\alpha_k^j\}$, $k = 0, 1, \dots, r$ gefordert:

- Wenn der *stencil* S_{j+k} in glatten Gebieten liegt, dann muß für die dazugehörigen α_k^j gelten:

$$\frac{\alpha_k^j}{\sum_{l=0}^r \alpha_l^j} = O(1) , \quad (3.53)$$

d.h. diese *stencil* tragen zur Differenzenformel bei.

- Enthält der *stencil* S_{j+k} diskontinuierliches Gebiet, dann muß für die dazugehörigen α_k^j gelten:

$$\frac{\alpha_k^j}{\sum_{l=0}^r \alpha_l^j} \leq O(h^{r+1}) , \quad (3.54)$$

d.h. diese *stencil* tragen nur in sehr geringem Maße zur Differenzenformel bei.

Wie aus den vorherigen Bedingungen zu ersehen ist, muß also zur Bestimmung der Gewichte α_k^j ein Maß für die 'Glätte' des zu interpolierenden Flusses eingeführt werden. Dafür wird eine Tabelle von Differenzen angelegt:

$$\Delta[u_l] = u_{l+1} - u_l \quad (3.55)$$

$$\Delta^k[u_l] = \Delta^{k-1}[u_{l+1}] - \Delta^{k-1}[u_l] , \quad (3.56)$$

mit denen das Maß IS_j gebildet wird:

$$IS_j = \sum_{l=1}^r \frac{1}{l} \left[\sum_{k=1}^l (\Delta^{r-l} [u_{j-r+k}])^2 \right]. \quad (3.57)$$

Es kann nun gezeigt werden, daß die Bedingungen (3.53) und (3.54) von folgendem Ansatz erfüllt werden:

$$\alpha_k^j = \frac{C_k^j}{(\varepsilon + IS_{j+k})^p} \text{ mit } k = 0, \dots, r, \quad (3.58)$$

wobei ε eine kleine Konstante ist (üblicherweise $\varepsilon = 10^{-5}$), die die Division durch Null verhindert und die C_k^j positive Konstanten sind. Die C_k^j sind die sogenannten optimalen Gewichte, bei denen in glatten Gebieten höchstmögliche Interpolationsordnung erzielt wird.

3.4 Zeitintegration

In diesem Abschnitt wird die Zeitintegration dargestellt. Dazu wird zuerst auf ein TVD-Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren näher eingegangen, welches in TURBIT-VoF implementiert wurde. Danach wird die Zeitschrittweitenrestriktion behandelt.

3.4.1 TVD-Runge-Kutta-Verfahren

Für die Zeitintegration wurde in der Literatur eine Vielzahl an numerischen Verfahren entwickelt. Hier wird ein Runge-Kutta-Verfahren vorgestellt. Als explizite Verfahren, welche nur eine Zeitebene berücksichtigen, bieten sich Runge-Kutta-Verfahren für eine effektive Implementierung an.

Gleichung (3.31) läßt sich durch Einführung eines Differentialoperators \mathcal{L} für die räumlichen Ableitungen folgendermaßen umschreiben:

$$\vec{u}_t = \mathcal{L}(\vec{u}). \quad (3.59)$$

Der Operator $\hat{\mathcal{L}}$ sei der räumliche W-ENO-Operator mit folgender Eigenschaft:

$$\hat{\mathcal{L}}(\vec{u}) = \mathcal{L}(\vec{u}) + O(h^r), \quad (3.60)$$

wobei h die größte Maschenweite ist. Der Euler-Vorwärtsoperator zur Lösung von Gleichung (3.59) sei:

$$T(\vec{u}) = (I + \Delta t \hat{\mathcal{L}})(\vec{u}). \quad (3.61)$$

Gleichung (3.61) sei TVD (*total variation diminishing*; siehe hierzu [40] oder [74], Kapitel 4.2) unter einer CFL-Bedingung

$$\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \lambda_0. \quad (3.62)$$

Ein zeitliches Diskretisierungsverfahren S sei TVD, wenn gilt:

$$TV(S(\vec{u}^n)) \leq TV(T(\vec{u}^n)) \quad (3.63)$$

unter der Bedingung:

$$\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq c_r \lambda_0 . \quad (3.64)$$

Shu und Osher ([83], [84]) leiten eine ganze Reihe von TVD-Runge-Kutta-Verfahren her, die folgende Form haben:

$$\vec{u}^{(i)} = \sum_{k=0}^{i-1} \left[\alpha_{ik} \vec{u}^{(k)} + \beta_{ik} \Delta t \hat{\mathcal{L}}(\vec{u}^{(k)}) \right] \quad \text{für } i = 1, \dots, r \quad (3.65)$$

$$\vec{u}^{(0)} = \vec{u}^n \quad \text{und} \quad \vec{u}^{(r)} = \vec{u}^{n+1} . \quad (3.66)$$

Die Koeffizienten lassen sich aus Tabelle 3.3 entnehmen.

Ordnung	α_{ik}	β_{ik}	c_r
2	1 1/2 1/2	1 0 1/2	1
3	1 3/4 1/4 1/3 0 2/3	1 0 1/4 0 0 2/3	1
4	1 1/2 1/2 1/9 2/9 2/3 0 1/3 1/3 1/3	1/2 -1/4 1/2 -1/9 -1/3 1 0 1/6 0 1/6	2/3

Tabelle 3.3: Koeffizienten zum Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren

Bei negativen Werten von β_{ik} , wie sie im Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung vorkommen, muß der Operator $\hat{\mathcal{L}}$ gegen $\tilde{\mathcal{L}}$ ausgetauscht werden, wobei $\tilde{\mathcal{L}}$ den Operator \mathcal{L} in der adjungierten Gleichung $\vec{u}_t = -\mathcal{L}(\vec{u})$ approximiert.

3.4.2 Zeitschrittweitenkriterien

Da es sich um ein explizites Lösungsverfahren handelt, müssen Zeitschrittweitenkriterien zur Einhaltung numerischer Stabilität entwickelt werden. In TURBIT-VoF werden drei verschiedene Restriktionen in der Zeitschrittweite Δt betrachtet. Diese sind durch die Kapillarkräfte, durch die Konvektion und durch die Diffusion bedingt.

In der Literatur findet sich bei Brackbill et al. [11] oder Kothe et al. [47] folgendes Kriterium für die Zeitschrittweitenrestriktion aufgrund von Kapillarkräften

$$\Delta t_\sigma \leq \sqrt{\frac{\bar{\rho} (\Delta x)^3}{2\pi\sigma}} \quad (3.67)$$

mit $\bar{\rho} = 1/2(\langle \rho_1 \rangle_1 + \langle \rho_2 \rangle_2)$ und $\Delta x = \max_{i,j,k}(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)$. Dies bedeutet, daß für Zeitschritte

$$\Delta t \leq \Delta t_\sigma \quad (3.68)$$

das Fortschreiten von Kapillarwellen bei der Rechnung durch das explizite Zeitintegrationsverfahren numerisch stabil ist.

Das klassische Zeitschrittweitenkriterium für reine Konvektion wird nach Courant-Friedrichs-Lewy CFL-Kriterium genannt. Es besagt, daß innerhalb eines Zeitschrittes der konvektive Transport des Fluids weniger als eine Maschenweite betragen muß

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \frac{\Delta x}{u} \quad (3.69)$$

mit $\Delta x = \max_{i,j,k}(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)$ und $u = \max_\Omega(|u|)$.

Damit der diffusive Transport der Fluide numerisch stabil bleibt, muß gelten

$$\Delta t_\nu \leq \frac{(\Delta x)^2}{4\nu} \quad (3.70)$$

mit

$$\nu = \frac{1}{Re_{ref}} \max \left(1, \frac{\mu_2 \rho_1}{\mu_1 \rho_2} \right) \quad (3.71)$$

als Maximum der dimensionslosen, kinematischen Viskositäten der beiden Fluide und $\Delta x = \max_{i,j,k}(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)$.

Zur Erfüllung aller drei Restriktionen ergibt sich insgesamt folgende Bedingung:

$$\Delta t \leq \text{CDTKOR} \min(\Delta t_\sigma, \Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_\nu) \quad , \quad (3.72)$$

wobei CDTKOR ein Sicherheitsfaktor ist, der in den Simulationen zu 0,8 gewählt wurde.

3.5 Lösungsstrategie

Dieser Abschnitt stellt die generelle Lösungsstrategie, wie sie im Rechenprogramm TURBIT-VoF verwirklicht wurde, vor. Er gliedert sich in zwei Unterabschnitte, zum einen wird das Projektionsverfahren zur Koppelung des Druckfeldes mit dem Geschwindigkeitsfeld erläutert, danach wird der Berechnungsablauf für einen Zeitschritt zusammengefaßt.

3.5.1 Projektionsmethode

In diesem Abschnitt wird darauf eingegangen, wie Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung (Gleichung (2.84) und (2.86)) numerisch im Rechenprogramm behandelt werden. Dazu wird ein sogenanntes Projektionsverfahren nach Chorin [20] angewendet, welches die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes in diskreter Formulierung gewährleistet.

Es werden folgende Abkürzungen eingeführt

$$\mathcal{K} := \nabla \cdot \rho_m \vec{u}_m \otimes \vec{u}_m \quad (3.73)$$

$$\mathcal{D} := \frac{1}{Re_{ref}} \nabla \cdot \underline{\mathcal{T}}_m \quad (3.74)$$

$$\mathcal{Q} := (1 - f) \frac{E_{o_{ref}}}{W_{e_{ref}}} \vec{e}_3 \quad (3.75)$$

$$\mathcal{I} := \frac{1}{Re_{ref}} \nabla \cdot \underline{\mathcal{T}}_{int} - \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}_{int} \quad (3.76)$$

$$\mathcal{O} := \frac{1}{W_{e_{ref}}} \kappa a_{int} \vec{n} . \quad (3.77)$$

In einem ersten Schritt wird die Navier-Stokes-Gleichung (2.86) ohne die Druckabhängigkeit, ohne Zwischenphasen-Schließungsterme \mathcal{I} und ohne Oberflächenspannungsterm \mathcal{O} gelöst:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m|^* = \underbrace{-\mathcal{K} + \mathcal{D} + \mathcal{Q}}_{\mathcal{L}} , \quad (3.78)$$

wobei der Index $*$ für das so abgeschätzte Geschwindigkeitsfeld steht. Gleichung (3.78) wird mit dem in Abschnitt 3.4 beschriebenen TVD-Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung gelöst:

$$\rho_m^{n+1} \vec{u}_m^{(1)} = \rho_m \vec{u}_m|^n + \Delta t \mathcal{L}(\vec{u}_m^n) \quad (3.79)$$

$$\rho_m^{n+1} \vec{u}_m^{(2)} = \frac{3}{4} \rho_m \vec{u}_m|^n + \frac{1}{4} \rho_m^{n+1} \vec{u}_m^{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t \mathcal{L}(\vec{u}_m^{(1)}) \quad (3.80)$$

$$\rho_m^{n+1} \vec{u}_m^* = \frac{1}{3} \rho_m \vec{u}_m|^n + \frac{2}{3} \rho_m^{n+1} \vec{u}_m^{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t \mathcal{L}(\vec{u}_m^{(2)}) , \quad (3.81)$$

wobei n und $n + 1$ die Ebenen der zeitlichen Diskretisierung sind mit

$$t^n = \sum_{i=1}^{NTIM} \Delta t_i \quad (3.82)$$

und $NTIM$ der Anzahl der Zeitschritte (Δt_i können unterschiedlich sein). Die Geschwindigkeitsfelder $\vec{u}_m^{(1)}$, $\vec{u}_m^{(2)}$ und \vec{u}_m^* sind Hilfgeschwindigkeitsfelder, die zum neuen Zeitpunkt $n + 1$ gehören, deshalb steht in Gleichung (3.79) bis (3.81) die neue Dichte bei diesen Geschwindigkeitsfeldern. Auf die konvektiven Terme \mathcal{K} im Operator \mathcal{L} wird das in Abschnitt 3.3 und im Anhang D beschriebene W-ENO-Verfahren zur räumlichen Diskretisierung angewendet. Die diffusiven Terme \mathcal{D} aus \mathcal{L} werden mit zentralen Differenzen approximiert. Im Quellterm \mathcal{Q} ist keine partielle Ableitung enthalten, deshalb kann dieser direkt diskretisiert werden.

Aus dem in Gleichung (3.81) berechneten Schätzzgeschwindigkeitsfeld \vec{u}_m^* muß nun das Geschwindigkeitsfeld zum neuen Zeitpunkt \vec{u}_m^{n+1} berechnet werden. Ein Vergleich der Navier-Stokes-Gleichung (2.86) mit der Bestimmungsgleichung von \vec{u}_m^* ergibt

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m|^* = \frac{\partial}{\partial t} \rho_m \vec{u}_m + \nabla p - \mathcal{I} - \mathcal{O} \quad (3.83)$$

bzw. in diskretisierter Form bei impliziter Behandlung des Druckes

$$\frac{\rho_m \vec{u}_m|^{n+1} - \rho_m^{n+1} \vec{u}_m^*}{\Delta t} = -\nabla p_m^{n+1} + \mathcal{I}^n + \mathcal{O}^{n+1}. \quad (3.84)$$

Nachdem Gleichung (3.84) durch die Gemischdichte zum Zeitpunkt $n+1$ dividiert wurde, ergibt sich nach Anwendung des Nabla-Operators ∇ unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung (2.84) folgende Poissongleichung für den Druck p_m :

$$\nabla \left[\frac{\Delta t}{\rho_m^{n+1}} \nabla p_m^{n+1} \right] = \nabla \cdot \vec{u}_m^* + \nabla \cdot \left[\frac{\Delta t}{\rho_m^{n+1}} (\mathcal{I}^n + \mathcal{O}^{n+1}) \right]. \quad (3.85)$$

Gleichung (3.85) ist keine klassische Poissongleichung ($\nabla^2 p_m = \dots$), da die räumlich variable Dichte ρ_m^{n+1} zwischen den beiden Nabla-Operatoren steht. Die Divergenzbedingung des Geschwindigkeitsfeldes in der Kontinuitätsgleichung kann aber nur in der angegebenen Form erfüllt werden. Die Quellterme auf der rechten Seite von Gleichung (3.85) sind folgende. Zuerst kommt die Divergenz des Schätzgeschwindigkeitsfeldes \vec{u}_m^* . Dieser Term ergibt sich auch in der klassischen Projektionsmethode nach Chorin [20]. Die folgenden zwei Terme sind zum einen die Oberflächenspannung \mathcal{O} , zum anderen die Zwischenphasenschließungsterme \mathcal{I} . Für Rechnungen mit dem homogenen Strömungsmodell, wie es aus der Literatur bekannt ist (vgl. [15]), muß der Schließungsterm \mathcal{I} weggelassen werden.

3.5.2 Berechnungsablauf für einen Zeitschritt

Der Ablauf zur Berechnung von Druck und Geschwindigkeitsfeld in einem Zeitschritt erfolgt folgendermaßen:

- Lösung der Gleichung für die Volumenfraktionen (2.85) unter Verwendung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt n mittels EPIRA
 $\Rightarrow f^{n+1}, \rho_m^{n+1}$
- Lösung der Navier-Stokes-Gleichung (2.86) ohne Berücksichtigung von Druck, Oberflächenspannung, $\underline{\mathcal{T}}_{int}$ und $\underline{\mathcal{D}}_{int}$
 $\Rightarrow \vec{u}_m^*$
- Lösung der Poissongleichung (3.85) iterativ mit Gleichungslöser LINSOL, siehe dazu Abschnitt 4.2
 $\Rightarrow p_m^{n+1}$
- Lösung von Gleichung (3.84) zur Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt $n+1$
 $\Rightarrow \vec{u}_m^{n+1}$

Der Berechnungsablauf ist in Abbildung 3.9 zusammenfassend dargestellt.

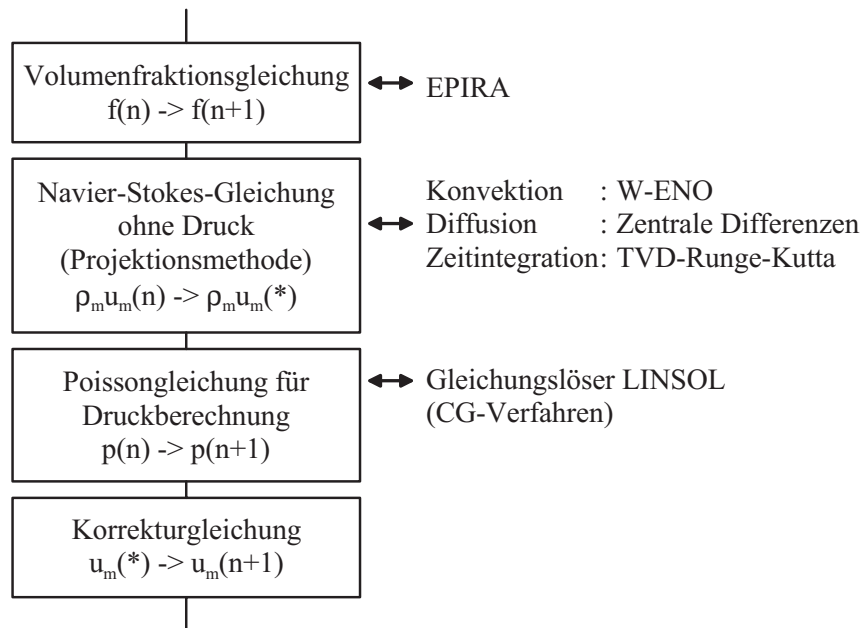


Abbildung 3.9: Berechnungsablauf für einen Zeitschritt

Kapitel 4

Implementierung in TURBIT

Dieses Kapitel beschreibt, wie das zuvor dargestellte mathematische Konzept zur Direkten Numerischen Simulation von Einzelblasen im Computerprogramm TURBIT umgesetzt wurde. Dabei ergibt sich folgende Gliederung. In einem ersten Abschnitt wird die bisherige TURBIT-Version mit den numerisch eingesetzten Verfahren beschrieben. Danach wird auf TURBIT-VoF eingegangen.

4.1 Bisherige Version von TURBIT

Als Basis für die Entwicklung eines Rechenprogramms für die Direkte Numerische Simulation (DNS) von Einzelblasen und Blasenschwärmen dient das Rechenprogramm TURBIT (Turbulenter Impuls Transport, vgl. Schumann [82], Grötzbach [32]). Dieses hat die Methoden der Direkten Numerischen Simulation (DNS) und der Grobstruktursimulation für einphasig turbulente Strömungen implementiert. Bei einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) werden alle physikalischen Effekte durch das Rechengitter erfaßt. Deshalb ist hierbei keine Modellierung der Turbulenz notwendig. Klein- und großskalige Wirbel, sowie thermische und viskose Grenzschichten werden durch das Gitter aufgelöst, was zum einen bedeutet, daß diese Methode exakt, aber zum anderen dafür sehr rechenaufwendig ist. Somit besteht meist eine Beschränkung bezüglich der Turbulenzintensität auf nur schwache Turbulenz. Im allgemeinen können nur einfache Geometrien behandelt werden.

Bei einer Grobstruktursimulation hingegen muß die durch Mittelung über das Maschenvolumen ausgefilterte Information mittels sogenannter Feinstrukturmodelle erfaßt werden. Dadurch wird der Rechenaufwand verkleinert und höhere Turbulenzintensitäten sind der numerischen Simulation zugänglich. Bei einer ausreichenden Verfeinerung der Maschenweite geht eine Grobstruktursimulation in eine Direkte Numerische Simulation über.

TURBIT löst die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie unter Annahme eines einphasigen, inkompressiblen Fluids mit konstanten Stoffwerten. Als Geometrien können Plattenkanäle und Ringspalte behandelt werden. Für die Bezeichnungen beim in dieser Arbeit betrachteten Plattenkanal siehe Abbildung 4.1. Senkrecht zur z -Richtung befinden sich die undurchlässigen Wände, in den beiden anderen Koordinatenrichtungen werden periodische Randbedingungen mit Periodenlängen X_1 und X_2 betrachtet.

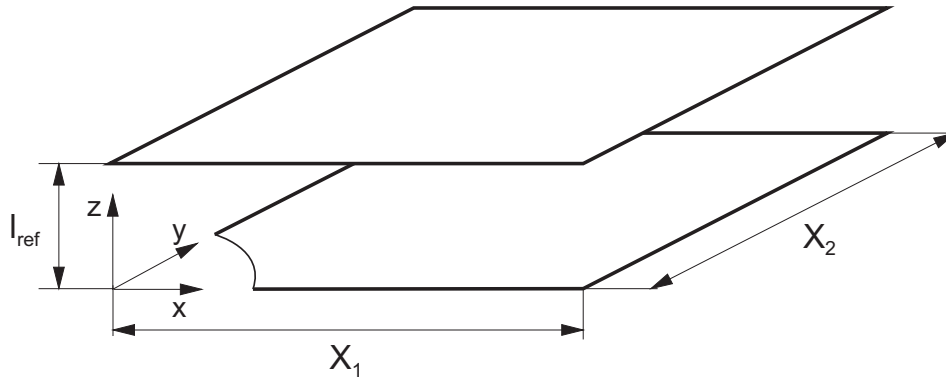


Abbildung 4.1: Geometrie in TURBIT

Massen- und Impulserhaltungsgleichungen werden mit expliziten Zeitintegrationsverfahren behandelt, bei der Energieerhaltung kann zwischen expliziter und halbimpliziter Behandlung gewählt werden (vgl. Wörner [101]). Zu den numerischen Verfahren in TURBIT siehe auch Tabelle 4.1. Es wird die Projektionsmethode von Chorin [20] verwendet und die dadurch entstehende Poissongleichung für den Druck mittels eines direkten Poissönlösers gelöst. Das Verfahren ist ein Finites Volumenverfahren, wobei ein versetztes Gitter benutzt wird. Dies heißt, daß skalare Größen (Druck, Temperatur) als volumenge-mittelte Werte in den Maschenmittelpunkten gespeichert werden und vektorielle Größen (Geschwindigkeit) als Flächenmittelwerte auf den Rändern. Es zeigt sich somit, daß TURBIT nicht ohne weiteres für die Simulation von Einzelblasen und Blasenschwärmen eingesetzt werden kann.

	räumlich	zeitlich
Impulsgleichung	zentrale Differenzen 2. Ordnung	Euler-Leapfrog explizit Diffusion 1., Konvektion 2. Ord.
Energiegleichung	zentrale Differenzen 2. Ordnung	Euler-Leapfrog explizit Diffusion 1., Konvektion 2. Ord.
		Adams-Bashforth Crank- Nicolson (ABCN) halbimplizit, 2. Ordnung
		Leapfrog Crank-Nicolson (LFCN) halbimplizit, 2. Ordnung

Tabelle 4.1: Bisherige numerische Verfahren in TURBIT

4.2 TURBIT-VoF

In diesem Abschnitt wird auf die Implementierung der beschriebenen numerischen Verfahren in TURBIT eingegangen. Zur Beschreibung der Phasengrenzfläche zwischen den Fluiden wurde der neu entwickelte EPIRA-Algorithmus aus Abschnitt 3.1 implementiert, der auf der Volume-of-Fluid-Methode basiert. Diese Methode bildet das Kernstück zur

Berechnung von zweiphasigen Strömungen, deshalb wurde das neue Rechenprogramm TURBIT-VoF genannt. Die Volumenfraktion von Phase 1 (flüssige Phase) wird hierbei als zusätzliche Transportgröße eingeführt. Als skalare Größe wird sie zellzentriert in den Maschenmittelpunkten berechnet ($f_{i,j,k}$) und auch so zusätzlich zu den bisherigen Größen abgespeichert.

Die zeitliche Diskretisierung wurde entsprechend Abschnitt 3.4 mittels eines expliziten TVD-Runge-Kutta-Verfahrens dritter Ordnung vorgenommen. Zur Abspeicherung der drei benötigten Geschwindigkeitsfelder konnte die in TURBIT schon vorhandene Struktur genutzt werden. Die diffusiven Terme wurden analog zu TURBIT mittels zentraler Differenzen approximiert. Für die konvektiven Terme wurde ein W-ENO-Verfahren (siehe Abschnitt 3.3 und Anhang D) entwickelt, welches nichtäquidistante Maschenverteilungen in der Koordinatenrichtung senkrecht zu den Wänden (z) berücksichtigt. Die Differenzenverfahren sind in glatten Bereichen von dritter und an starken Gradienten von zweiter Ordnung. An den Wänden, die sich senkrecht zur z -Richtung befinden, gilt die Haftbedingung, was bedeutet, daß die Geschwindigkeiten u_z dort verschwinden

$$u_z|_{Wand} = 0 . \quad (4.1)$$

Da den Berechnungen ein versetztes Gitter zugrunde liegt, bedeutet dies, daß jede Geschwindigkeitskomponente ein anderes Kontrollvolumen hat. So ist z.B. für die Komponente in x -Richtung das Kontrollvolumen $K_1|_{i+1/2,j,k}$ folgendes:

$$K_1|_{i+1/2,j,k} = \{(x, y, x) | x_i \leq x < x_{i+1} \wedge y_{i-1/2} \leq y < y_{i+1/2} \wedge z_{i-1/2} \leq z < z_{i+1/2}\} . \quad (4.2)$$

Entsprechendes gilt für die Kontrollvolumina in den anderen beiden Koordinatenrichtungen $K_2|_{i,j+1/2,k}$ und $K_3|_{i,j,k+1/2}$. In der Navier-Stokes-Gleichung sind die Dichten sowie die Koeffizienten der dynamischen Viskosität enthalten. Bei der zellzentrierten Schreibweise, die beispielsweise für die Berechnung der diffusiven Terme benötigt wird, ergibt sich für die beiden Größen:

$$\rho_m|_{i,j,k} = f_{i,j,k} + (1 - f_{i,j,k}) \Phi_\rho \quad (4.3)$$

$$\mu_m|_{i,j,k} = f_{i,j,k} + (1 - f_{i,j,k}) \Phi_\mu , \quad (4.4)$$

wobei das Dichteverhältnis $\Phi_\rho := \frac{\rho_2}{\rho_1}$ und das Viskositätsverhältnis $\Phi_\mu := \frac{\mu_2}{\mu_1}$ benutzerseitig vorgegeben werden. Hier können also die vorhandenen und abgespeicherten Volumenfraktionen $f_{i,j,k}$ genommen werden. Desweiteren werden aber Dichte und Viskosität ebenso in den versetzten Kontrollvolumina $K_1|_{i+1/2,j,k}$, $K_2|_{i,j+1/2,k}$ und $K_3|_{i,j,k+1/2}$ benötigt. Am Beispiel der x -Koordinatenrichtung bedeutet dies:

$$\rho_m|_{i+1/2,j,k} = f_{i+1/2,j,k} + (1 - f_{i+1/2,j,k}) \Phi_\rho \quad (4.5)$$

$$\mu_m|_{i+1/2,j,k} = f_{i+1/2,j,k} + (1 - f_{i+1/2,j,k}) \Phi_\mu . \quad (4.6)$$

$f_{i+1/2,j,k}$ kann nicht direkt aus den zellzentrierten Volumenfraktionen $f_{i,j,k}$ berechnet werden. An Abbildung 4.2 kann aus einem einfachen Beispiel mit $f_{i,j,k} = \frac{2}{3}$ und $f_{i+1,j,k} = \frac{1}{2}$ ersehen werden, daß der Ansatz

$$f_{i+1/2,j,k} \doteq \frac{1}{2} (f_{i,j,k} + f_{i+1,j,k}) \quad (4.7)$$

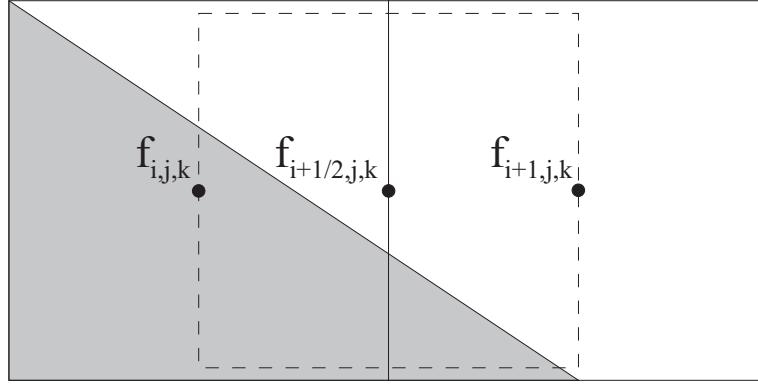


Abbildung 4.2: Mittelwert vom Feld der Volumenfraktionen $f_{i,j,k}$

ergeben würde

$$\frac{1}{4} + \frac{1}{12} \neq \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{12} \right) . \quad (4.8)$$

Wie nicht anders zu erwarten, kann Gleichung (4.7) nicht zur Interpolation des Volumenfraktionen auf den versetzten Kontrollvolumina herangezogen werden.

In TURBIT-VoF werden deshalb die versetzten Felder der Volumenfraktionen $f_{i+1/2,j,k}$, $f_{i,j+1/2,k}$ und $f_{i,j,k+1/2}$ vor dem Runge-Kutta-Verfahren folgendermaßen berechnet. Aus der Rekonstruktion des EPIRA-Algorithmus sind die Normalenvektoren $\vec{n}_{i,j,k}$ und Punkte in den Ebenen $\vec{b}_{i,j,k}$ für jede Zelle, in der sich beide Phasen befinden, bekannt. Mittels des Integrationsoperators \mathcal{V} , der in Abschnitt 3.1 für die Advektion des EPIRA-Algorithmus eingeführt worden ist, können die Volumenanteile beider Halbzellen, aus denen sich die versetzten Kontrollvolumina zusammensetzen, bestimmt werden. Für das Kontrollvolumen $K_1|_{i+1/2,j,k}$ bedeutet dies, daß der Integrationsoperator auf folgende Halbzellen angewendet wird:

$$\{(x, y, z) \mid x_i \leq x < x_{i+1/2} \wedge y_{i-1/2} \leq y < y_{i+1/2} \wedge z_{i-1/2} \leq z < z_{i+1/2}\} \quad (4.9)$$

und

$$\{(x, y, z) \mid x_{i+1/2} \leq x < x_{i+1} \wedge y_{i-1/2} \leq y < y_{i+1/2} \wedge z_{i-1/2} \leq z < z_{i+1/2}\} . \quad (4.10)$$

Danach werden die Volumenanteile, die sich aus der Auswertung der Integrale über die beiden obigen Halbzellen ergeben, zusammengezählt. Da diese versetzten Werte für die Volumenfraktionen in allen drei Runge-Kutta-Schritten bekannt sein müssen, werden zusätzliche dreidimensionale Felder in TURBIT-VoF zur Abspeicherung angelegt.

Auf die Behandlung der Oberflächenspannung wurde in Abschnitt 3.2 näher eingegangen. Hier ist ebenso zu beachten, daß der Oberflächenspannungsterm auf dem versetzten Gitter zu berechnen ist. Dies bedeutet, daß die Krümmungswerte auf dem versetzten Gitter berechnet werden, wozu es notwendig ist, einen Teil der Normalenvektoren $\vec{n}_{i,j,k}$ auf die Mittelpunkte der versetzten Kontrollvolumina zu interpolieren. Diese Interpolationen

sind zulässig aufgrund der hohen Genauigkeit bei der Bestimmung der Normalenvektoren $\vec{n}_{i,j,k}$.

In Abschnitt 3.5.1 wurde für den Druck eine Poissongleichung (3.85) hergeleitet. Folgende Randbedingungen werden für Gleichung (3.85) vorgegeben. In x - und y -Richtung gelten periodische Randbedingungen. Senkrecht zur z -Richtung befinden sich die festen Wände. Dort gelten für den Druck homogene Neumann'sche Randbedingungen

$$\left. \frac{\partial p_m}{\partial z} \right|_{wand} = 0 . \quad (4.11)$$

In TURBIT ist der direkter Löser H3DCY2 zur Lösung einer Poissongleichung vorhanden. Dieser führt die Gleichung mittels Fourier-Transformationen auf ein tridiagonales System zurück, welches einfach und effektiv mittels des Thomas-Algorithmus gelöst wird. Der direkte Löser H3DCY2 kann aber nicht zur Lösung von Gleichung (3.85) verwendet werden, da bei ihm als Voraussetzung eingeht, daß die Koeffizienten der z -Ebenen konstant sind, was hier aber wegen

$$\nabla \left[\frac{\Delta t}{\rho_m^{n+1}} \nabla p_m^{n+1} \right] = \dots \quad (4.12)$$

nicht der Fall ist (ρ_m^{n+1} ist veränderlich in jeder Raumrichtung).

Zur iterativen Lösung der Poissongleichung stehen in der Literatur mehrere Verfahren zur Verfügung (vgl. z.B. Ferziger und Perić [28]). Es handelt sich um iterative Löser, die zum einen mit dem Konjugierten-Gradienten-Verfahren arbeiten (wie z.B. ICCG, CG-STAB, Bi-CGSTAB) und zum anderen auf einem Gauß-Seidel-Multigrid-Verfahren beruhen. Wichtige Auswahlkriterien sind die Rechenzeit und der Speicherbedarf. Für den Siemens VPP 300 Hochleistungsrechner, auf dem die TURBIT-VoF Rechnungen durchgeführt werden, steht das Programmpaket LINSOL (siehe Weiss et al. [98]), welches von der Universität Karlsruhe entwickelt wurde, zur Verfügung. LINSOL ist auf die Architektur des VPP 300 optimiert und fast vollständig vektorisiert. In LINSOL sind mehrere Konjugierte-Gradienten-Verfahren enthalten, deren Effektivität an einem Testbeispiel untersucht wurde. Es hat sich gezeigt, daß ein Kombinationsalgorithmus, zusammengesetzt aus verschiedenen Konjugierten-Gradienten-Verfahren, sehr effektiv Gleichung (3.85) zu lösen vermag. Dieser Kombinationsalgorithmus wird deshalb in TURBIT-VoF verwendet. Als Residuum wurde für die Rechnungen gewählt: $EP\text{SLIN} = 10^{-6}$.

Kapitel 5

Verifikation

In diesem Kapitel werden Nachrechnungen von physikalischen Problemstellungen dargestellt, die zur Verifikation von TURBIT-VoF und der darin angewendeten Modelle, wie z.B. das der Oberflächenspannung, dienen. Das Kapitel zur Verifikation gliedert sich folgendermaßen: Es werden zuerst Simulationen von Strömungen einer Phase dargestellt. Diese Rechnungen dienen der Verifikation der Implementierung von konvektiven und diffusiven Termen, des Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahrens und der generellen Anwendung der Projektionsmethode für den Druck. Die numerischen Ergebnisse werden mit Ergebnissen der ursprünglichen Version von TURBIT verglichen. In einem zweiten Abschnitt werden Strömungen, bestehend aus zwei Phasen, behandelt. Haben beide Phasen gleiche Dichte und wirkt als einzige äußere Kraft die Oberflächenspannung, so kann die Implementierung des Oberflächenspannungsmodells verifiziert werden. Bei unterschiedlicher Dichte und vernachlässigbarer Oberflächenspannung wird die Implementierung des Auftriebs als einziger äußere Kraft verifiziert. Die numerischen Lösungen werden mit aus der Literatur bekannten analytischen Lösungen oder Daten aus der Literatur verglichen.

5.1 Strömungen einer Phase

Mit TURBIT-VoF wurden Simulationen von Strömungen einer Phase durchgeführt. Diese Simulationen werden mit Simulationen der ursprünglichen TURBIT-Version verglichen, wobei davon ausgegangen wird, daß die ursprüngliche TURBIT-Version vollständig verifiziert ist. Es handelt sich somit um erste Tests, die die numerischen Verfahren wie Projektionsmethode, Berechnung der konvektiven und diffusiven Terme und Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren verifizieren. Die diffusiven Terme wurden mit Simulationen einer Zwangskonvektionsströmung im Plattenkanal mit bewegten Wänden verifiziert. Zur Verifikation der konvektiven Terme wurden Simulationen mit sogenannten Taylor-Green-Wirbeln durchgeführt.

5.1.1 Strömung im Kanal mit bewegten Wänden

Zur Verifizierung der Implementierung der diffusiven Terme wurde eine Zwangskonvektionsströmung im Plattenkanal mit bewegten Wänden nachgerechnet. Es liegt ein Druckgradient in x -Richtung an, die Wände werden in y -Richtung mit konstanter Geschwin-

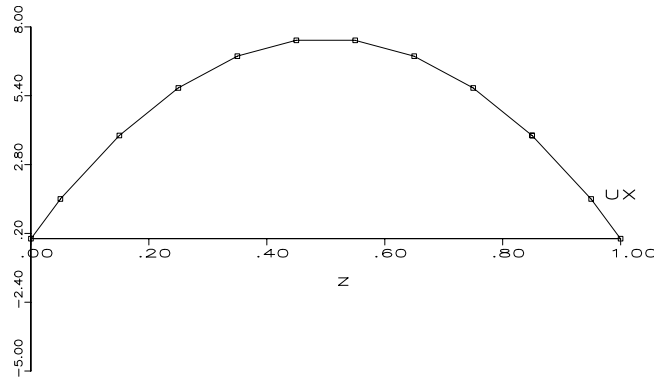


Abbildung 5.1: Strömung im Kanal mit bewegten Rändern: Profil der mittleren Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung (x -Richtung)

digkeit gegeneinander verschoben. Die Wandgeschwindigkeit ist so gewählt, daß sich ein laminares Geschwindigkeitsprofil im Fluid ausbilden soll. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sind alle Geschwindigkeiten Null. Dadurch, daß die auf die Strömung wirkende Kräfte senkrecht zueinander stehen, stellt sich ein überlagertes Geschwindigkeitsfeld ein. In der Geschwindigkeitskomponente in Richtung des Druckgradienten bildet sich ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil zwischen den Wänden aus (siehe Abbildung 5.1). Dies ist in Übereinstimmung mit der Theorie von Hagen-Poiseuille (vgl. [67], [104]). In der $y-z$ -Ebene bildet sich eine Scherströmung mit linearem Verlauf der Geschwindigkeitskomponente parallel zur Scherrichtung aus (siehe Abbildung 5.2). An den Wänden hat das Fluid aufgrund der Wandhaftung gleiche Geschwindigkeit wie die entsprechende Wand selber, der Profilverlauf zwischen den Wänden ist linear, wie theoretisch zu erwarten ist.

Die Zwangskonvektionsströmung im Kanal mit bewegten Wänden zeigt in der Simulation mit TURBIT-VoF das theoretisch zu erwartende Verhalten. Rechnungen mit der ursprünglichen Version von TURBIT ergaben gleiche Ergebnisse, so daß auch quantitativ die Implementierung der diffusiven Terme in TURBIT-VoF verifiziert wird.

5.1.2 Taylor-Green-Wirbel

Ein Test für das numerische Verfahren, speziell der konvektiven Terme, sind die sogenannten Taylor-Green-Wirbel. In der Literatur wird die zeitliche Entwicklung dieser dreidimensionalen Wirbelströmung häufig numerisch untersucht (z.B. Brachet et al. [10]). Dabei steht aber meist die Generierung kleinskaliger Wirbel durch dreidimensionale Wirbelstreckung im Vordergrund. Hier dient das Modell der Taylor-Green-Wirbel dem Vergleich von TURBIT-VoF und der ursprünglichen Version von TURBIT. Dabei wird nicht im turbulenten Bereich gerechnet, sondern es wird für beide Rechnungen eine Referenz-Reynolds-Zahl von 30 benützt. Dies bedeutet, daß es nicht zur Bildung kleinskaliger Wirbel kommt, sondern die anfänglichen Wirbel gedämpft werden. Gezeigt werden soll, daß das neue numerische Verfahren qualitativ die gleichen Ergebnisse liefert und daß keine zusätzlichen Frequenzen im Ortsspektrum der physikalischen Einflußgrößen erzeugt werden.

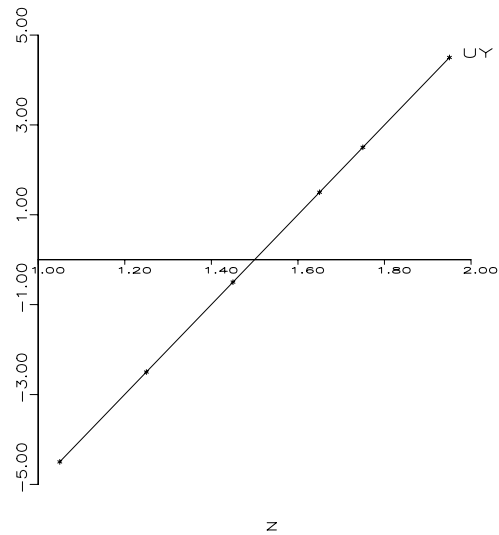


Abbildung 5.2: Strömung im Kanal mit bewegten Rändern: Lokales Profil in z -Richtung der Geschwindigkeitskomponente in y -Richtung an $x = 0,05$ und $y = 0,45$

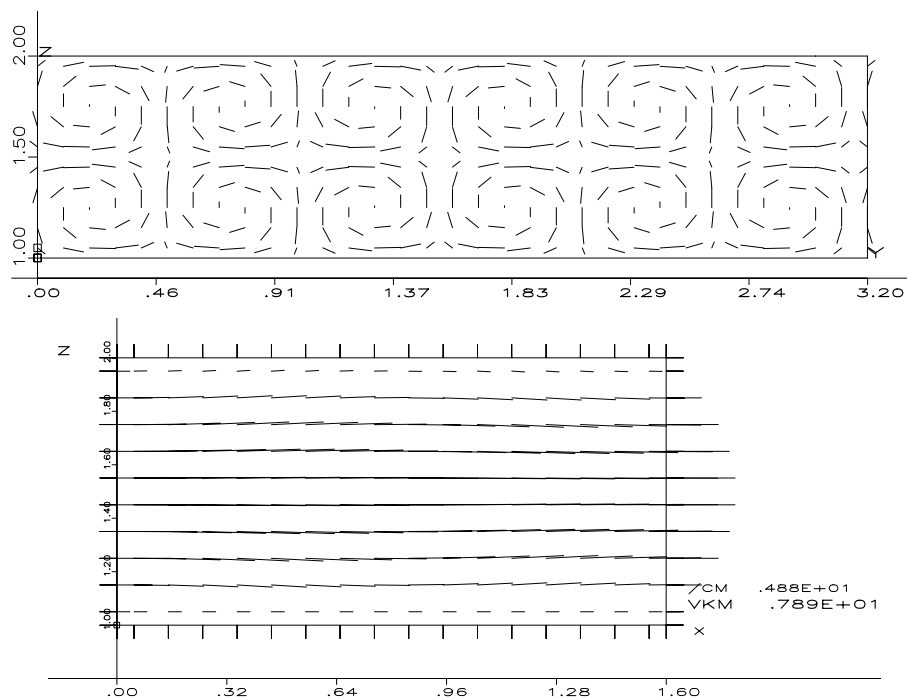


Abbildung 5.3: Taylor-Green-Wirbel: Geschwindigkeit senkrecht (maximale Geschwindigkeit: $0,0829$) und in Strömungsrichtung (x -Richtung) zum Zeitpunkt $t = 0$, Gitter: $16 \times 32 \times 10$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird folgendes Geschwindigkeitsfeld vorgegeben (A_{xy} , A_{xz} und A_{yz} sind die Flächeninhalte der Seitenflächen einer Zelle)

$$u_x = \frac{1}{A_{yz}} \iint_{y,z} (az^2 + bz + c) dydz \quad (5.1)$$

$$u_y = \frac{1}{A_{xz}} \iint_{x,z} \left(\frac{A}{\Delta z} \sin \frac{x}{L_1} \sin \frac{y}{L_2} \cos \frac{z}{L_3} \right) dx dz \quad (5.2)$$

$$u_z = \frac{1}{A_{xy}} \iint_{x,y} \left(-\frac{A}{\Delta y} \sin \frac{x}{L_1} \cos \frac{y}{L_2} \sin \frac{z}{L_3} \right) dx dy \quad (5.3)$$

Gleichungen (5.1)-(5.3) sind von der Struktur her ähnlich dem ursprünglich in der Literatur diskutiertem System (vgl. hierzu [23], Anmerkung zu Zitat [11]). Für das Finite-Volumenverfahren mit versetztem Maschengitter sind die Flächenintegrale über den Seitenflächen notwendig. Das System ist so gewählt, daß die diskrete Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld erfüllt ist:

$$\begin{aligned} & \left[u_x|_{i+1/2,j,k} - u_x|_{i-1/2,j,k} \right] / \Delta x + \left[u_y|_{i,j+1/2,k} - u_y|_{i,j-1/2,k} \right] / \Delta y \\ & + \left[u_z|_{i,j,k+1/2} - u_z|_{i,j,k-1/2} \right] / \Delta z = 0 \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die simulierte Strömung ist eine Zwangskonvektionsströmung mit äußerem Druckgradienten in x -Richtung. Aus diesem Grund wird in Gleichung (5.1) ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil vorgegeben.

Folgende Parameter wurden für die Simulationen gewählt (R_1 ist die Wandposition der unteren Wand, hier $R_1 = 1$ und die Periodenlängen in x - und y -Richtung betragen jeweils 1)

$$\begin{aligned} a &= -4 \cdot u_{\max} & , & \quad L_1 = \frac{1M \cdot \Delta x}{2\pi} \\ b &= 4 \cdot u_{\max} (1 + 2R_1) & , & \quad L_2 = 3 \cdot \frac{JM \cdot \Delta y}{2\pi} \\ c &= -4 \cdot u_{\max} (R_1 + (R_1)^2) & , & \quad L_3 = \frac{1}{2\pi} \\ A &= 0,06 & , & \quad u_{\max} = 8 \end{aligned} \quad (5.5)$$

a, b, c sind so bestimmt, daß die Haftbedingung an den Wänden erfüllt ist und in Kanalmitte die maximale Geschwindigkeit u_{\max} auftritt. Das so vorgegebene Geschwindigkeitsfeld ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Oben sind die Wirbel in der $y - z$ -Ebene zu sehen, unten das parabolische Geschwindigkeitsprofil in Strömungsrichtung.

Das durch Gleichungen (5.1)-(5.3) vorgegebene Geschwindigkeitsfeld zum Zeitpunkt $t = 0$ wird als Ausgangszustand einer Strömung benutzt, die der Navier-Stokes-Gleichung unterliegt. Abbildung 5.4 zeigt links die rms-Werte der Geschwindigkeitskomponenten über dem Kanalquerschnitt zum Zeitpunkt $t = 0$. Da u_x nicht in Ebenen parallel zu den Wänden variiert (vgl. Gleichung (5.1)), sind die rms-Werte identisch Null. Die rms-Werte der beiden anderen Komponenten sind durch die sinus- bzw. cosinus-Modulationen vorgegeben. In Abbildung 5.4 rechts sind die Ortsspektren für den Wandabstand $z = 0,6$ zum Zeitpunkt $t = 0$ logarithmisch aufgetragen. Da keine Fluktuationen in Strömungsrichtung bei der Geschwindigkeitskomponente u_x vorliegt, ist das Ortsspektrum hier Null. In den

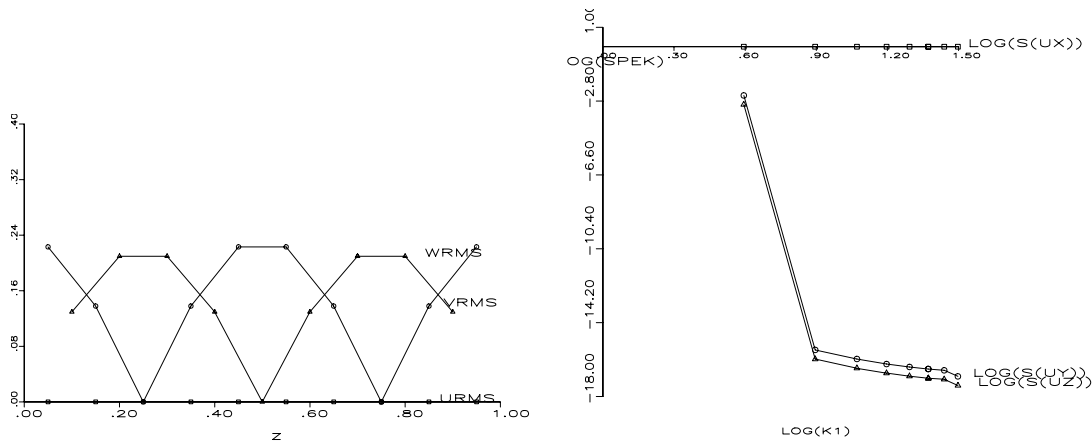


Abbildung 5.4: Taylor-Green-Wirbel: rms-Werte über dem Kanalquerschnitt (URMS entspricht u_x^{rms} , VRMS u_y^{rms} und WRMS u_z^{rms}) und Ortsspektren der Geschwindigkeitskomponenten für den Wandabstand $z = 0,6$ zum Zeitpunkt $t = 0$, Gitter: $16 \times 32 \times 10$

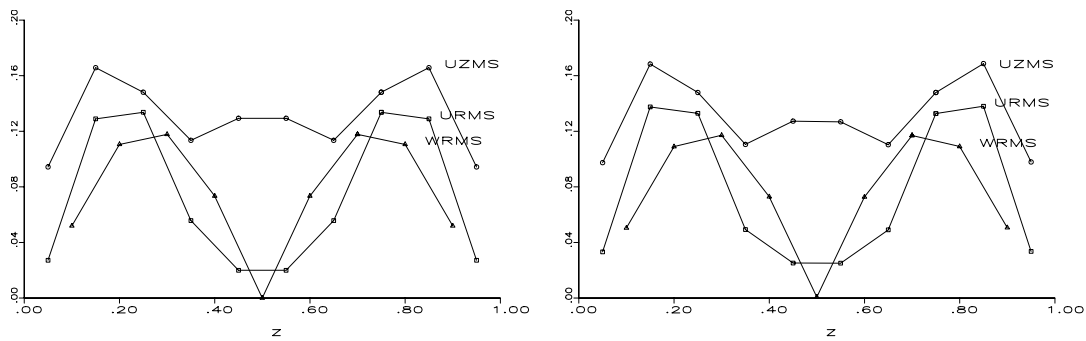


Abbildung 5.5: Taylor-Green-Wirbel: rms-Werte der Geschwindigkeitskomponenten über dem Kanalquerschnitt zum Zeitpunkt $t = 0,12$ (ursprüngliche TURBIT-Version links, TURBIT-VoF rechts), Gitter: $16 \times 32 \times 10$

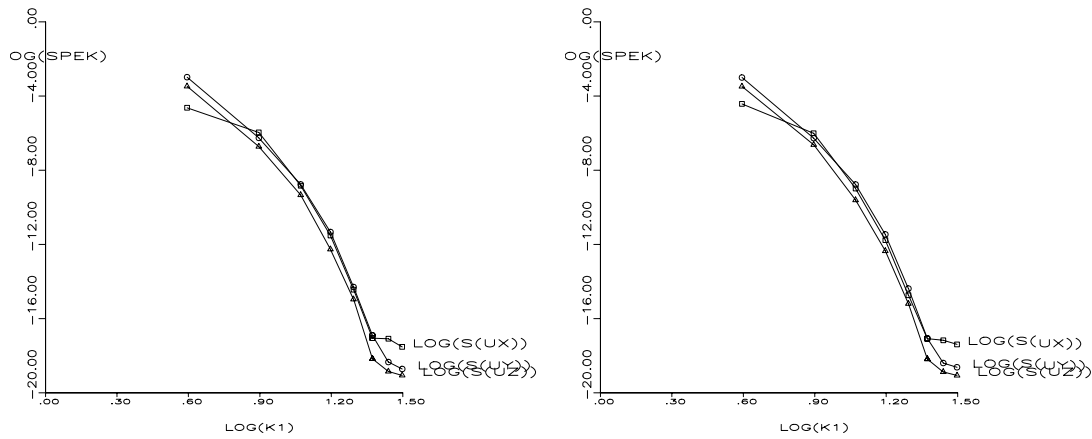


Abbildung 5.6: Taylor-Green-Wirbel: Ortsspektren für den Wandabstand $z = 0,6$ der Geschwindigkeitskomponenten zum Zeitpunkt $t = 0, 12$ (ursprüngliche TURBIT-Version links, TURBIT-VoF rechts), Gitter: $16 \times 32 \times 10$

anderen beiden Komponenten überwiegt der langwellige Anteil und es ist ein schneller Abfall des Spektrums zu großen Wellenzahlen hin zu beobachten.

In Abbildung 5.5 sind die rms-Werte nach einer Problemzeit von $t = 0, 12$ dargestellt. Links sind die rms-Werte über dem Kanalquerschnitt, berechnet mit der ursprünglichen Version von TURBIT, aufgetragen, rechts die rms-Werte berechnet mit TURBIT-VoF. Es kommt zu einem Anwachsen der rms-Werte der Geschwindigkeitskomponenten in Strömungsrichtung, die anderen beiden Komponenten werden gedämpft. Es ist eine gute Übereinstimmung zwischen der ursprünglichen TURBIT-Version und TURBIT-VoF festzustellen.

Abbildung 5.6 zeigt die Ortsspektren für den Wandabstand $z = 0,6$ zur Problemzeit $t = 0, 12$. Hier läßt sich das Verhalten der Anregung der rms-Werte der Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung erkennen. Die Spektren der anderen beiden Geschwindigkeitskomponenten weisen einen nicht mehr so starken Abfall auf. Die Fluktuationen in diesen Komponenten sind gedämpft. Auch hier läßt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der ursprünglichen TURBIT-Version und TURBIT-VoF feststellen.

Auch im Langzeitverhalten ergibt sich für die ursprüngliche Version von TURBIT und TURBIT-VoF das gleiche Verhalten. Die Wirbel werden vollständig ausgedämpft und das parabolische Geschwindigkeitsprofil der Geschwindigkeitskomponenten in Strömungsrichtung bleibt als einzige Geschwindigkeit von Null verschieden.

TURBIT und TURBIT-VoF haben ein weitgehend vergleichbares Dämpfungsverhalten, was eine ähnlich gute Eignung für die Turbulenzsimulation bedeutet.

5.2 Strömungen zweier Phasen

Zur Verifikation der numerischen Verfahren in Strömungen mit zwei Phasen wurden verschiedene Tests durchgeführt. Diese lassen sich in einer ersten Unterscheidung in Strömungen gleicher Dichte und Strömungen unterschiedlicher Dichte unterteilen.

Bei Strömungen mit gleichen Dichten wird das Verhalten des Oberflächenspannungsmodells verifiziert. Als einzige Kraft zwischen den beiden Fluiden wird die Kapillarkraft als von Null verschieden angenommen. Zum einen werden Kapillarwellen untersucht, d.h. das Schwingverhalten einer anfänglich sinusförmig ausgelenkten Oberfläche. Ein weiterer Test beschäftigt sich mit den sogenannten artifiziellen Strömungen ('spurious currents'), also von Geschwindigkeiten, die, bedingt durch die Diskretisierung, entlang einer Phasengrenzfläche induziert werden.

Bei Strömungen unterschiedlicher Dichte wirkt in den Rechnungen als einzige Kraft die Auftriebskraft aufgrund des Dichteunterschiedes. Es wurden zum einen Schwerewellen untersucht, d.h. das Schwingverhalten einer anfänglich sinusförmig ausgelenkten Grenzfläche zwischen zwei Fluiden, die stabil geschichtet sind. Bei instabiler Schichtung wird die Anfangsstörung immer weiter verstärkt. Dieses Verhalten wird Rayleigh-Taylor-Instabilität genannt und wird in weiteren Abschnitten für zwei- und dreidimensionale Fälle untersucht.

5.2.1 Gleiche Dichte

Bei diesen Untersuchungen wirkt als einzige Kraft zwischen den beiden Phasen die Kapillarkraft. Somit können das Oberflächenspannungsmodell bzw. die Berechnung der Normalenvektoren getestet werden. Es werden Kapillarwellen und die sogenannten artifiziellen Strömungen ('spurious currents') untersucht.

Kapillarwellen

Zwei viskose Flüssigkeiten seien zum Zeitpunkt $t = 0$ geschichtet angeordnet und die Phasengrenzfläche sei sinusförmig in einer Raumrichtung ausgelenkt. Das Problem sei zweidimensional formuliert. Dies wird in TURBIT-VoF dadurch realisiert, daß für die eigentlich nicht zu berücksichtigende Raumrichtung (x) 4 Maschen verwendet werden und diese 4 Ebenen identisch gewählt werden (vgl. Abbildung 5.7, Gitter: $4 \times 80 \times 80$). Das Geschwindigkeitsfeld sei zum Zeitpunkt $t = 0$ im ganzen Rechengebiet Null. In Abbildung 5.7 und den folgenden Abbildungen mit Phasengrenzfläche geben die Striche an den Koordinatenachsen die Zellmittelpunkte an.

Aufgrund der zwischen den beiden Phasen wirkenden Oberflächenspannung kommt es zu einer Schwingung, die durch die viskose Reibung gedämpft wird. Diese Schwingung wurde mit TURBIT-VoF zur Verifikation der Oberflächenspannungsmodelle nachgerechnet. Dabei wurden die numerischen Ergebnisse mit der analytischen Lösung dieser gedämpften Schwingung (siehe [68]) verglichen. Folgende Parameter wurden für die Simulationen benutzt ($\Phi_\rho = \rho_2 / \rho_1$ und $\Phi_\mu = \mu_2 / \mu_1$):

Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ	l_{ref}/m	$u_{ref}/\frac{m}{s}$
1	2,6996	1	1	0,004	0,1

(5.6)

Unter der Voraussetzung kleiner Anfangsamplituden a_0 und bei unendlich ausgedehnten Fluiden berechnet Prosperetti [68] für die Amplitude $a(t)$ ($a(0) = a_0$) folgende zeitliche

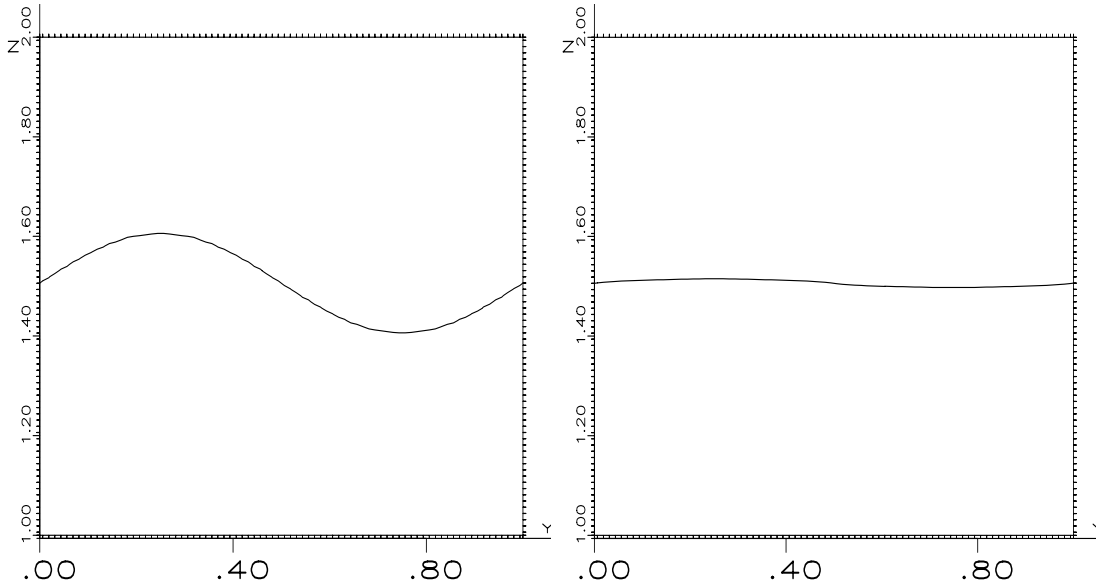


Abbildung 5.7: Kapillarwellen: Ausgangsposition zum Zeitpunkt $t = 0$, links: Anfangsamplitude 10%, rechts: Anfangsamplitude 1%, jeweils auf den Wandabstand bezogen; Gitter: $4 \times 80 \times 80$

Entwicklung

$$a(t) = \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \frac{\omega^2 a_0}{(z_i)^2 - \nu k^2} \times \exp \left[\left((z_i)^2 - \nu k^2 \right) t \right] \operatorname{erfc} \left(z_i \sqrt{t} \right) , \quad (5.7)$$

wobei z_i die vier Wurzeln folgender algebraischen Gleichung sind

$$z^4 - k\sqrt{\nu}z^3 - k^2\nu z^2 + k^3\nu^{3/2}z + \omega^2 = 0 , \quad (5.8)$$

$Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$ (Z_2, Z_3, Z_4 entsprechend durch zyklische Permutation), k die Wellenzahl ist und $\omega = \frac{\sigma}{2\rho}k^3$ die 'natürliche nicht-viskose Frequenz'. Gleichung (5.7) beschreibt eine gedämpfte Schwingung, vgl. Abbildung 5.8 und 5.9, durchgezogene Linien.

In Abbildung 5.8 ist als Diagramm die Amplitude der Oberflächenauslenkung über der Zeit aufgetragen, die durchgezogene Linie ist die analytische Lösung (Gleichung (5.7)). Es wurde mit einer Anfangsamplitude von 10%, bezogen auf den Abstand zwischen beiden Wänden, gerechnet, die Parameter der Simulation sind wie in Tabelle (5.6) angegeben. Beim gewählten Gitter bedeutet 10% bezogen auf den Abstand zwischen beiden Wänden, daß die Amplitude mit acht Maschen aufgelöst wird. Zur Veranschaulichung ist die Maschenweite zusätzlich im Diagramm eingezeichnet. Wie in TURBIT-VoF implementiert, wird an den Wänden jeweils die Haftbedingung angenommen. Dadurch lassen sich die Abweichungen der numerischen Ergebnisse von der analytischen Form erklären. Desweiteren ist die Voraussetzung kleiner Amplituden in dieser Simulation nicht erfüllt. Zur Untersuchung des Einflusses der Zeitschrittweite wurde die gleiche Simulation mit halber Zeitschrittweite wiederholt (CDTKOR wurde von 0,8 auf 0,4 verkleinert), dieses Ergebnis ist

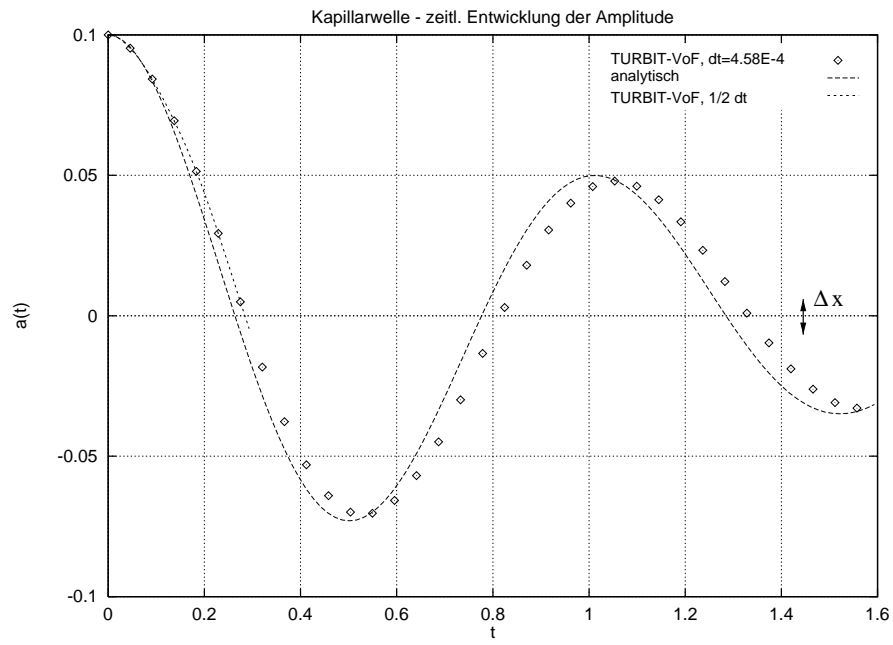


Abbildung 5.8: Kapillarwellen: Vergleich von analytischer und numerischer Lösung, Anfangsamplitude 10% bezogen auf den Wandabstand

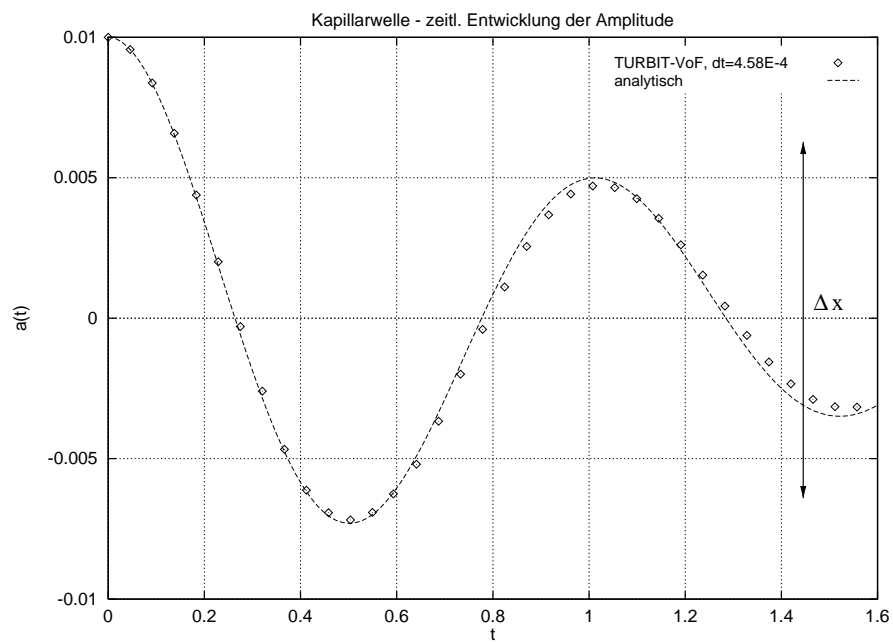


Abbildung 5.9: Kapillarwellen: Vergleich von analytischer und numerischer Lösung, Anfangsamplitude 1% bezogen auf den Wandabstand

in gestrichelter Form im Diagramm enthalten. Hier läßt sich erkennen, daß die gewählte Zeitschrittweite keinen Einfluß auf das Ergebnis hat.

In Abbildung 5.9 wurden die Simulationsergebnisse für eine Anfangsamplitude a_0 von 1%, bezogen auf den Abstand zwischen beiden Wänden, aufgetragen. Dadurch sind die Voraussetzungen für die analytische Lösung besser erfüllt, die Auslenkung ist klein und der Wandabstand nimmt zu. Es wird eine sehr gute Übereinstimmung zwischen numerischer und analytischer Lösung erzielt. Zu beachten ist, daß die Anfangsamplitude von nur 0,8 Zellen in z -Richtung aufgelöst wird, und daß sich nach dem Zeitpunkt $t = 0,648$ die gesamte Phasengrenzfläche innerhalb nur einer Zelle in z -Richtung befindet, siehe hierzu die eingezeichnete Maschenweite.

Artifizielle Strömungen ('Spurious Currents')

Alle Volume-of-Fluid-Methoden erzeugen sogenannte artifizielle Strömungen ('spurious currents' oder auch 'parasite currents'), die in der Literatur viel diskutiert werden (vgl. hierzu [49],[33],[57]). Veranschaulicht werden diese Strömungen in Abbildung 5.10. Mit TURBIT-VoF wurde eine Konfiguration, bestehend aus zwei Fluiden gleicher Dichte, berechnet. Es handelt sich um eine zylindrische Phasengrenzfläche, die in TURBIT-VoF mit vier Maschen in y -Richtung abgebildet wurde. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird die zylindrische Phasengrenzfläche vorgegeben, das Geschwindigkeitsfeld ist Null. Physikalisch bleibt ein Tropfen oder eine Blase in Ruhe. Bei numerischen Simulationen geschieht das, was in Abbildung 5.10 beobachtet wird, es werden Strömungen induziert. Dabei ist auffällig, daß die Stärke der Strömungen von der Orientierung der Phasengrenzfläche zum numerischen Gitter abhängt. Ist die Phasengrenzfläche parallel zum Gitter, verschwinden die artifiziellen Ströme fast vollständig, beträgt der Winkel zwischen Gitter und Phasengrenzfläche 45° , werden die Strömungen maximal.

Zur Untersuchung dieses Phänomens wurden verschiedene Simulationen mit folgenden Parametern durchgeführt

Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ
20	siehe Tabelle 5.1	1	1

(5.9)

Zur Realisierung unterschiedlicher Drucksprünge wurde die Referenz-Weber-Zahl zwischen 0,4, 4 und 40 variiert. Dabei resultiert zu einer vorgegeben Referenz-Weber-Zahl über die Laplace' sche Formel

$$\Delta p_{ref} = \frac{\sigma \kappa}{\rho_1 (u_{ref})^2} \quad (5.10)$$

eindeutig ein Drucksprung Δp_{ref} . In Tabelle 5.1 sind diese Drucksprünge Δp_{ref} angegeben. Zusätzlich sind in Tabelle 5.1 die auf Viskosität und Dichte bezogene Referenz-Geschwindigkeit ($u_{ref} \mu_1 / \rho_1$) und die Ohnesorge-Zahl (Oh) aufgelistet. Die Ohnesorge-Zahl charakterisiert die relative Bedeutung von Reibungskräften zu Oberflächenspannungskräften (vgl. [67]):

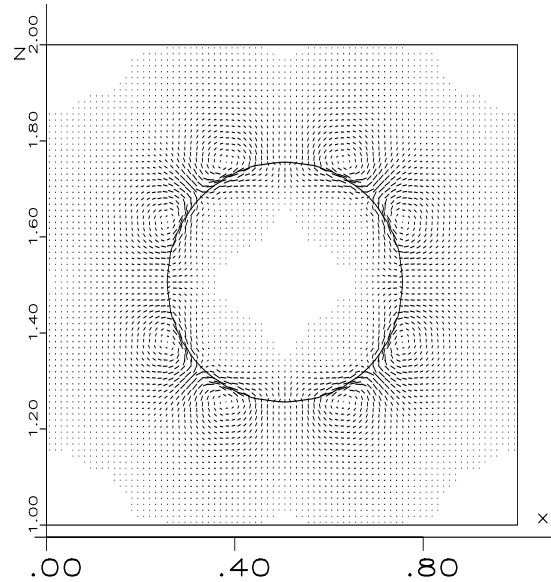


Abbildung 5.10: Artificielle Strömungen an einer zylindrischen Phasengrenzfläche, maximale Geschwindigkeit: 0,154; Gitter: $80 \times 4 \times 80$

We_{ref}	Δp_{ref}	$We/Re = u_{ref}\mu_1/\rho_1$	$Oh = \sqrt{We}/Re$
0,4	10	0,02	1000
4	1	0,2	100
40	0,1	2	10

Tabelle 5.1: Artificielle Strömungen: Simulationsparameter und Kennzahlen

In TURBIT-VoF ist der Term der Oberflächenspannungskraft folgendermaßen implementiert

$$\vec{m}_{int}^\sigma = \frac{1}{We_{ref}} a_{int} \kappa \vec{n} \quad \text{mit } a_{int} \propto 1/\Delta x, \quad (5.11)$$

wobei a_{int} die Phasengrenzflächenkonzentration ist. Durch die Berücksichtigung der Phasengrenzflächenkonzentration wird der exakte Wert für den Drucksprung zwischen den beiden Phasen nach Gleichung (5.10) erhalten. Von TURBIT-VoF wurden die theoretischen, nach Gleichung (5.10) zu erzielenden Werte für Δp_{ref} aus Tabelle 5.1 korrekt wiedergegeben. Der Fehler im Drucksprung Δp_{ref} betrug dabei in allen Fällen weniger als ein Prozent.

In Abbildungen 5.11 (oben) und (unten) und 5.12 (oben) sind die im Rechengebiet maximalen Geschwindigkeiten u_{max} über den Zeitschritten aufgetragen. Dabei wurden drei verschiedene Gitter von $20 \times 4 \times 20$, $40 \times 4 \times 40$ und $80 \times 4 \times 80$ benützt, wodurch der Zylinder mit 10, 20 bzw. 40 Maschen im Durchmesser aufgelöst wird. Es läßt sich folgender Trend ablesen. Die Konfiguration zum Zeitpunkt $t = 0$ mit dem Geschwindigkeitsfeld in Ruhe ist keine numerisch stabile Lösung. Es werden Geschwindigkeiten induziert, nach einer Einlaufzeit kommt es zu einem stationären Zustand mit u_{max} unterhalb der zwischenzeitlichen höheren Maximalgeschwindigkeiten. Je größer der Drucksprung aufgrund

der Oberflächenspannung zwischen den beiden Phasen ist, desto größer sind die induzierten Geschwindigkeiten.

Abbildung 5.11 (oben) zeigt für die Referenz-Weber-Zahl $We_{ref} = 40$ die erzielten Maximalgeschwindigkeiten über den Zeitschritten. Die gepunkteten Linien geben die Verläufe für die verschiedenen Gitter wieder ohne Berücksichtigung der in Abschnitt 2.3 eingeführten Terme, die mit der Phasenrelativgeschwindigkeit gebildet werden. Bei Berücksichtigung der Terme aus Abschnitt 2.3 ergeben sich die Verläufe der durchgezogenen Linien. Durch die Schließungsterme aus 2.3 sind die maximalen Werte von u_{max} fast um den Faktor zwei geringer als ohne ihre Berücksichtigung. Es deutet sich an, daß im stationären Zustand die Unterschiede geringer werden. Auf dem feineren Gitter mit einer besseren Auflösung des Zylinders ist u_{max} geringer. Im stationären Zustand gibt es keine großen Unterschiede zwischen u_{max} für unterschiedliche Gitterauflösungen des Zylinders, was durch Gleichung (5.11) erklärt werden kann. Die Phasengrenzflächenkonzentration a_{int} ist proportional zur Maschenweite, wodurch a_{int} bei feinerer Auflösung des Zylinders wächst. Dadurch wird die bessere Approximation der Krümmung κ bei höherer Gitterauflösung wieder kompensiert. u_{max} ist im stationären Zustand, wie auch durch die numerische Studie gezeigt, fast unabhängig von der Auflösung des Zylinders im Gitter.

In Abbildung 5.11 (unten) und Abbildung 5.12 (oben) sind die verschiedenen u_{max} -Werte ebenso über den Zeitschritten aufgetragen. Es sind die gleichen Gitter verwendet worden und es wurden Simulationen mit und ohne Schließungstermen nach Abschnitt 2.3 durchgeführt. Es kann aus den Diagrammen entnommen werden, daß die Werte für u_{max} mit dem Drucksprung steigen. Für die Drucksprünge von $\Delta p_{ref} = 1$ und $\Delta p_{ref} = 10$ ergeben sich für das grobe Gitter von $20 \times 4 \times 20$ keine kontinuierlichen Verläufe, erst eine bessere Auflösung des Zylinders sorgt für stabile Simulationen. Die Maximalgeschwindigkeiten im stationären Zustand scheinen proportional mit dem Drucksprung zu wachsen.

Wird die dimensionslose Größe der artifiziellen Strömungen mit der auf Viskosität und Dichte bezogene Referenz-Geschwindigkeit ($u_{ref}\mu_1/\rho_1$) aus Tabelle 5.1 berechnet

$$K = u_{max}u_{ref}\mu_1/\rho_1, \quad (5.12)$$

dann ergeben sich annähernd gleiche Werte für alle Simulationen. Dies wurde auch schon von LaFaurie et al. [49] und Popinet und Zaleski [66] beobachtet. Die in den Simulationen mit TURBIT-VoF errechneten Werte für K liegen unterhalb von den in [49] angegebenen, wobei in [49] Glättungsoperatoren über das Feld der Volumenfraktionen eingeführt wurden und mit diesen geglätteten Feldern die Oberflächenspannung berechnet wurde. Hier wird vollständig auf solche Operatoren verzichtet.

Abbildung 5.12 (unten) zeigt die Maximalgeschwindigkeiten u_{max} über der Zeit aufgetragen, aber unter Vernachlässigung der Phasengrenzflächenkonzentration a_{int} in Gleichung (5.11). Es wurde mit einer Referenz-Weber-Zahl von $We_{ref} = 0,4$ gerechnet, was jetzt nicht mehr einem Drucksprung von $\Delta p_{ref} = 10$ entspricht. Es wurden Simulationen bis zu dem Zeitpunkt $t = 0,2$ für folgende Gitter durchgeführt: $20 \times 4 \times 20$, $40 \times 4 \times 40$, $50 \times 4 \times 50$, $80 \times 4 \times 80$ und $160 \times 4 \times 160$. Da $a_{int} \propto 1/\Delta x$ nicht berücksichtigt wird, fällt u_{max} mit zunehmender Gitterauflösung des Zylinders.

Die Herkunft der artifiziellen Strömungen wird häufig in einer ungenügenden Genauigkeit der Berechnung der Krümmung gesehen (vgl. [66]). Deshalb wurde eine Simulation durchgeführt über einen einzelnen Zeitschritt, bei der der analytische Wert der Krümmung

κ und die Normalenvektoren $\vec{n}_{i,j,k}$ vorgegeben wurden. Dabei wurden trotz der exakten Werte für κ und \vec{n} artifizielle Strömungen beobachtet (vgl. hierzu auch [57]). Dies bedeutet, daß allein durch höhere Ordnungen für die Berechnung des Normalenvektors und der Krümmung die artifiziellen Strömungen nicht zu beseitigen sind. Diese Strömungen sind vielmehr der Volume-of-Fluid-Methode inhärent und können nur auf ein gewisses Maß reduziert werden (vgl. hierzu [33]). Dies wird auch von Scardovelli und Zaleski [79] bestätigt, die für die Entstehung der artifiziellen Strömungen das Fehlen externer Kräfte in Phasengrenzflächennähe verantwortlich machen. Anders ausgedrückt bedeutet dies, daß die diskrete Form der Oberflächenspannung die artifiziellen Strömungen induziert. Durch das Einführen der Oberflächenspannung als Volumenkraft, wie in Abschnitt 3.2 gezeigt, und/oder durch Einführung von Mittelungsoperatoren, die ein geglättetes, oder auch verschmiertes, Volumenfraktionsfeld zur Berechnung der Oberflächenspannung heranziehen, können die artifiziellen Strömungen reduziert werden. Die in diesem Abschnitt durchgeführten Untersuchungen führen zu der Abschätzung, daß für das System Luftblasen in Wasser die artifiziellen Strömungsgeschwindigkeiten ungefähr 1% der Aufstiegs geschwindigkeit einer Blase betragen.

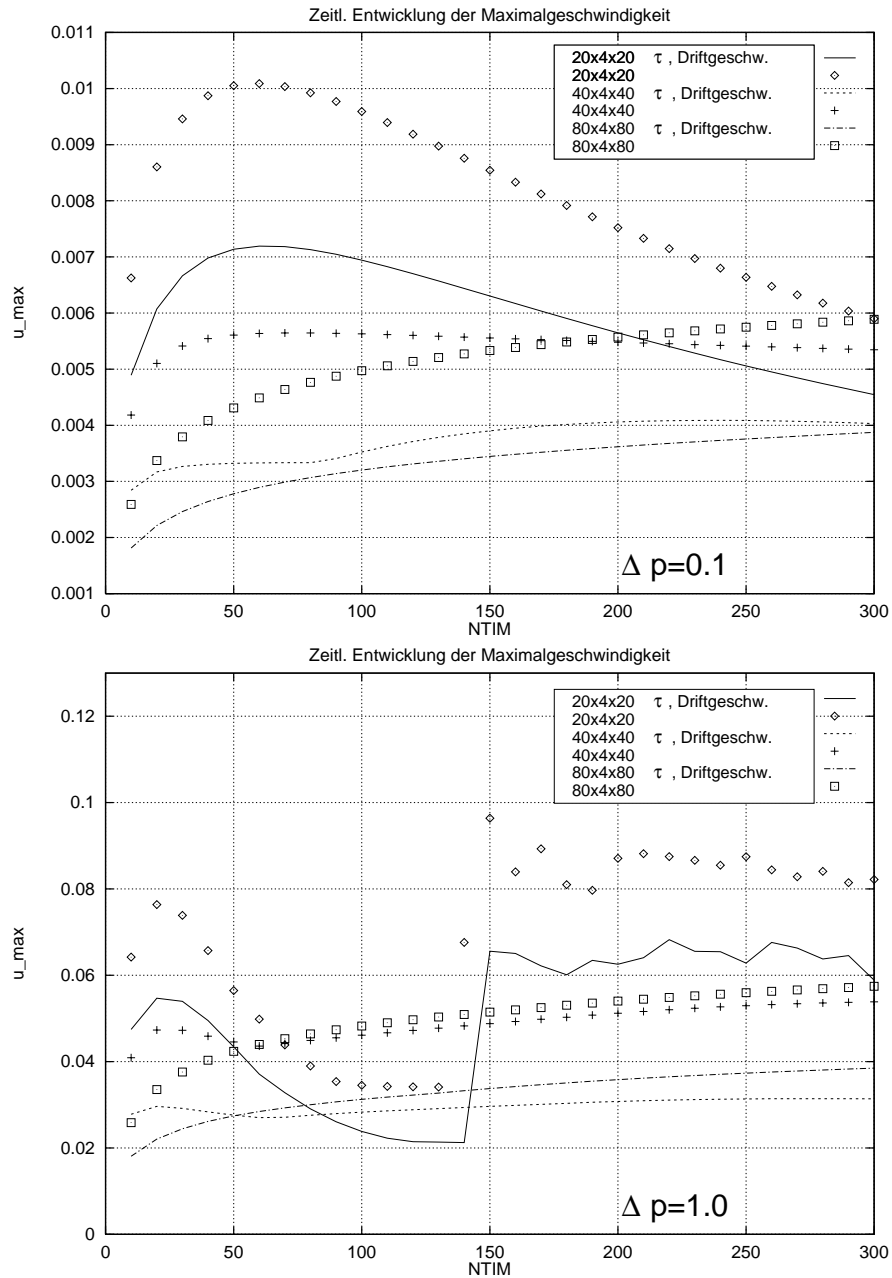


Abbildung 5.11: Artificielle Strömungen: Maximaler Geschwindigkeitsbetrag über Anzahl der Zeitschritte für $\Delta p_{ref} = 0,1$ (oben) und $\Delta p_{ref} = 1$ (unten); Rechnungen für verschiedene Gitter und mit und ohne Berücksichtigung der Schließungsterme; Phasengrenzflächenkonzentration in beiden Fällen berücksichtigt

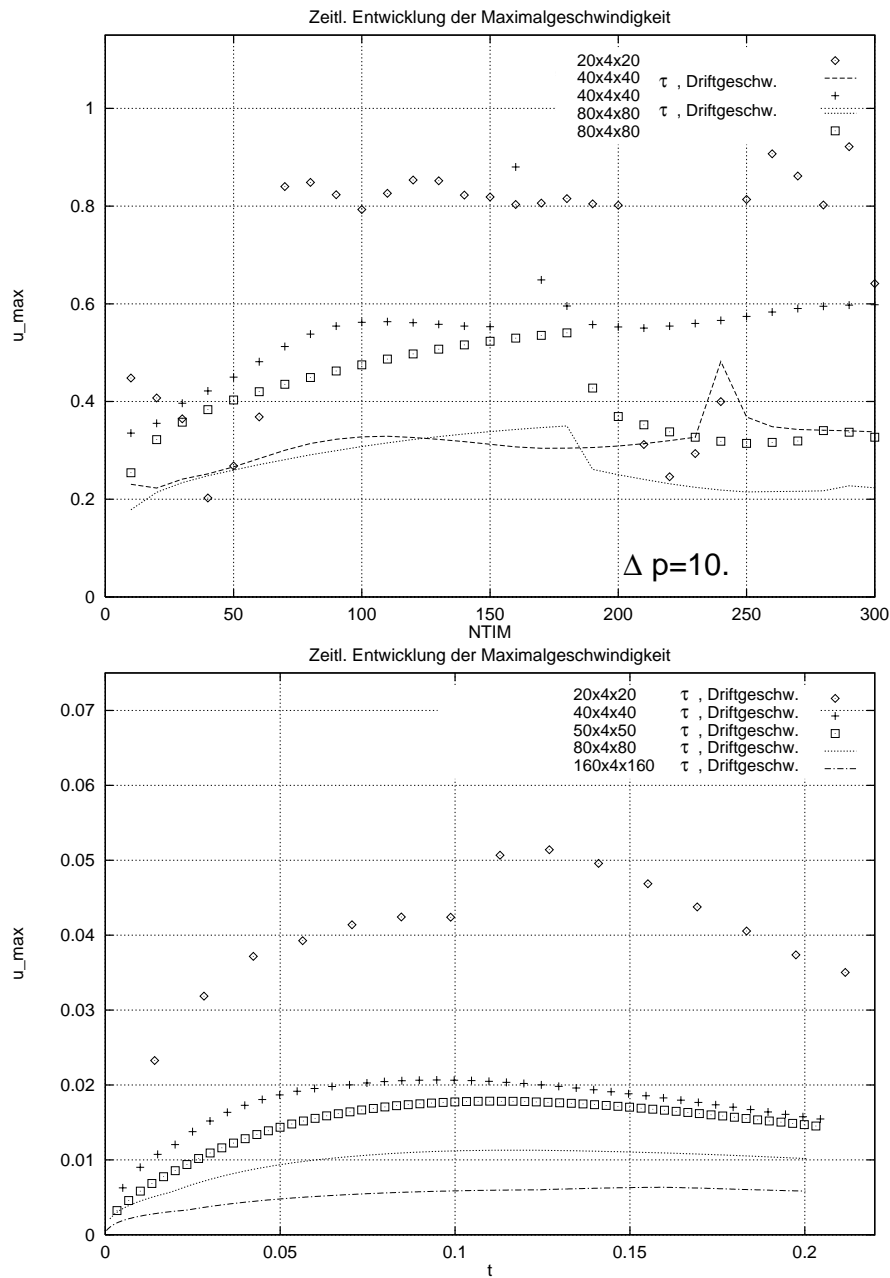


Abbildung 5.12: Artifizelle Strömungen: Maximaler Geschwindigkeitsbetrag über Anzahl der Zeitschritte für $\Delta p_{ref} = 10$ (oben, Phasengrenzflächenkonzentration berücksichtigt) und $W_{eref} = 0,4$ (unten, ohne Berücksichtigung der Phasengrenzflächenkonzentration); Rechnungen für verschiedene Gitter und mit und ohne Berücksichtigung der Schließungsterme

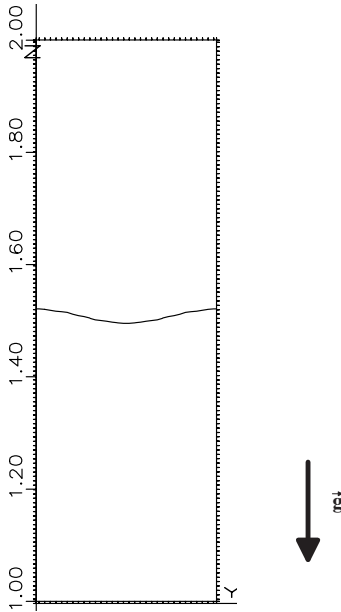


Abbildung 5.13: Anfangsbedingung für Schwerewelle und Rayleigh-Taylor-Instabilität

5.2.2 Unterschiedliche Dichte

Zwei physikalische Systeme mit unterschiedlicher Dichte wurden für die Verifikation der Implementierung des Auftriebes berechnet. In beiden Fällen wurde die Oberflächenspannung vernachlässigt, somit wirkt als einzige Kraft der Auftrieb, bedingt durch den Dichteunterschied der beiden Fluide.

In beiden Fällen ist zum Zeitpunkt $t = 0$ die horizontale Phasengrenzfläche zwischen den beiden geschichteten Fluiden cosinusförmig ausgelenkt und das Geschwindigkeitsfeld Null (vgl. Abbildung 5.13). Das Verhältnis von Amplitude zu Wandabstand beträgt 1,25%. Es werden zweidimensionale Konfigurationen betrachtet (vgl. Abschnitt 5.2.1). Dadurch entsteht ein $4 \times 32 \times 128$ Gitter anstatt eines 32×128 Gitters. Das Verhältnis von Höhe zu Breite beträgt vier, d.h. $1 \leq z \leq 2$ und $0 \leq y \leq 1/4$. Es befinden sich Wände an den Stellen $z = 1$ und $z = 2$, in y - und x -Richtung werden periodische Randbedingungen gesetzt. Bei der Schwerewelle handelt es sich um eine stabile Schichtung der Fluide, bei der Rayleigh-Taylor-Instabilität um eine instabile. Der Schwerevektor zeige jeweils in negative z -Richtung.

Schwerewellen

Die in Abbildung 5.13 gezeigte Fluidkombination wird in stabiler Schichtung gerechnet, d.h. das leichtere Fluid ist über dem schwereren angeordnet. Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist die Grenzfläche cosinusförmig ausgelenkt. Es kommt aufgrund der Schwerkraft zu einer Schwingung der Phasengrenzfläche, die durch viskose Reibungskräfte gedämpft wird. Diese Schwingung wurde mit TURBIT-VoF zur Verifikation der Implementierung des Auf-

triebes nachgerechnet. Dabei wurden folgende Parameter gewählt:

Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ	l_{ref}/m	$u_{ref}/\frac{m}{s}$	$\rho_1/\frac{kg}{m^3}$	$\mu_1/\frac{kg}{ms}$
1565	∞	0,5	0,5	4	1	1,225	$3,1305 \cdot 10^{-3}$

(5.13)

Chandrasekhar [14] gibt für eine Schichtung von unendlich ausgedehnten Fluiden folgende analytische Lösung für die Amplitude $a(t)$ bei horizontaler Phasengrenze und bei $\nu_2 = \frac{\rho_2}{\mu_2} = \frac{\rho_1}{\mu_1} = \nu_1$ an:

$$a(t) \propto \exp(nt) \quad (5.14)$$

$$n = k^2 \nu (z^2 - 1) \quad (5.15)$$

wobei k die Wellenzahl, ν die kinematische Viskosität und z aus folgender Gleichung (5.16) berechnet wird:

$$z^4 + 4\alpha_1\alpha_2 z^3 + 2(1 - 6\alpha_1\alpha_2)z^2 - 4(1 - 3\alpha_1\alpha_2)z + (1 - 4\alpha_1\alpha_2) + Q(\alpha_1 - \alpha_2) = 0 \quad (5.16)$$

mit $Q = \frac{g}{k^3 \nu^2}$, $\alpha_1 = \frac{\rho_1}{\rho_1 + \rho_2}$ und $\alpha_2 = \frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2}$.

In Abbildung 5.14 ist die mit TURBIT-VoF berechnete Amplitude der Schwingung (gepunktet) zusammen mit der analytischen Lösung nach Chandrasekhar aufgetragen. Dabei wurde die Amplitude jeweils am Rand ($y = 0$ oder $y = 1/4$) und in der Mitte ($y = 1/8$) bestimmt. Aufgrund der unterschiedlichen Befüllung der Zellen, in denen sich die Extrema befinden, kommt es zu einer Unsymmetrie bezüglich dieser Extrema, d.h. die Extremwerte liegen unterschiedlich weit von der horizontalen Gleichgewichtslage entfernt. Die Periode der Schwingung wird recht gut wiedergegeben. Dabei ist zu beachten, daß die Anfangsauslenkung nur durch 1,6 Maschenweiten aufgelöst wird (vergleiche eingezeichnete Maschenweite in Abbildung 5.14). Ferner gilt die analytische Lösung für unendlich ausgedehnte Fluide; diese Annahme ist in TURBIT-VoF nicht zu verwirklichen, da senkrecht zur z -Richtung stets Wände vorgegeben werden müssen.

Die Simulation der Schwerewelle wurde mit vertauschten f -Werten nochmals durchgeführt. Dies bedeutet, daß die leichtere Phase, die sich im oberen Bereich des Rechengebietes befindet, mit $f = 1$ anstatt $f = 0$ gekennzeichnet wurde, entsprechend wurde mit der schwereren Phase vorgegangen. Damit wiederum das leichtere Fluid über dem schwereren geschichtet ist, wurde abweichend von den Parametern (5.13) gesetzt

$$\Phi_\rho = 2 \quad \text{und} \quad \Phi_\mu = 2 \quad . \quad (5.17)$$

Der Verlauf der Amplitude bei dieser Simulation stimmt exakt überein mit den in Abbildung 5.14 gezeigten Verläufen. Damit ist gezeigt, daß in TURBIT-VoF kein Fluid gegenüber dem anderen ausgezeichnet ist.

Zweidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität

Die zeitliche Entwicklung einer horizontalen Schichtung zweier Fluide unterschiedlicher Dichte im Schwerfeld, wobei das schwerere über dem leichteren Fluid angeordnet ist,

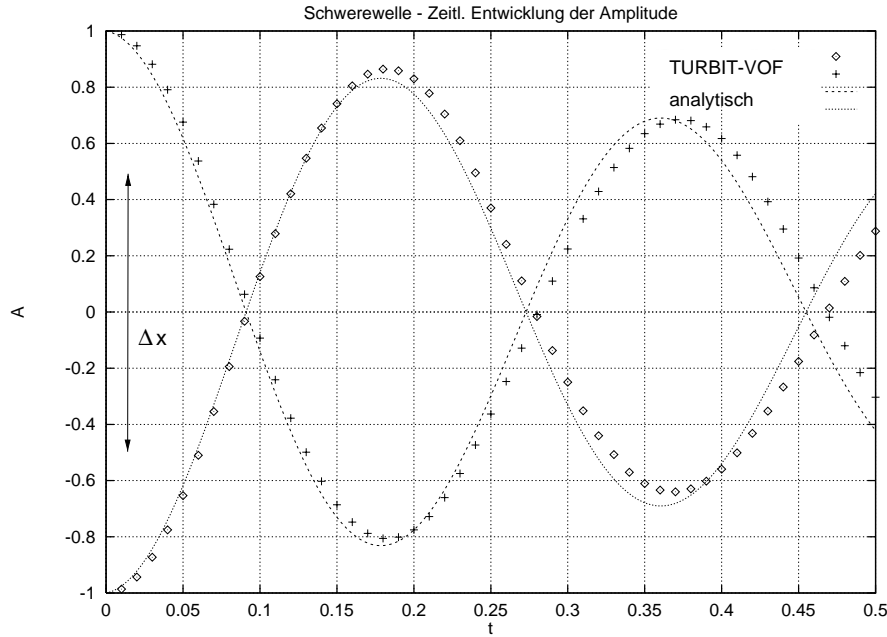


Abbildung 5.14: Schwerewelle: Vergleich der Amplitude der Schwingung von analytischer und numerischer Lösung

wird Rayleigh-Taylor-Instabilität genannt (vgl. hierzu [14]). Hier wird folgendes zweidimensionale System betrachtet. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei das System in Ruhe und die Phasengrenzfläche zwischen den Fluiden sei cosinusförmig ausgelenkt, vgl. Abbildung 5.13. Es wird also nur eine Mode angeregt ('single mode'). Das System wird wie oben beschrieben zweidimensional numerisch realisiert. Als äußere Kraft wirkt nur die Gravitation, die Oberflächenspannung zwischen den Fluiden wird vernachlässigt. Bedingt durch die instabile Schichtung und die Anfangsauslenkung kommt es zu einem Herabfallen des schwereren Fluids in der Mitte ($y = 1/8$) und zu einem Aufsteigen des leichteren an den Rändern ($y = 0, y = 1/4$). Das herabfallende Fluid wird aufgrund der Form als Finger bezeichnet (im englischen auch 'spike'), das aufsteigende Fluid Blase ('bubble').

Folgende Simulationsparameter wurden in TURBIT-VoF realisiert:

Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ	l_{ref}/m	$u_{ref}/\frac{m}{s}$	$\rho_1/\frac{kg}{m^3}$	$\mu_1/\frac{kg}{ms}$
1565	∞	0,1383	1	4	1	1,225	$3,1305 \cdot 10^{-3}$

(5.18)

Abbildungen 5.15 bis 5.17 geben momentane Verläufe der Phasengrenzfläche und die momentanen Geschwindigkeitsfelder wieder. Deutlich ist das erwartete Herabfallen des Fingers in der Mitte und das Aufsteigen der Blase am Rand zu erkennen. Aufgrund der Kelvin-Helmholtz-Instabilität kommt es zu einem Abrollen des Fluids an der Spitze des Fingers. Diese Simulation wurde nur bis zum Zeitpunkt $t = 0,145$ durchgeführt, da das gewählte Gitter die Simulation feinerer Strukturen, die sich im weiteren Verlauf aus der Kelvin-Helmholtz-Instabilität herausbilden würden, nicht zulässt. Qualitativ stimmen die Ergebnisse in den Abbildungen 5.15 bis 5.17 gut mit den Simulationen von Popinet und Zaleski [66] überein. Zu beachten ist, daß in Popinet und Zaleski [66] mit einem

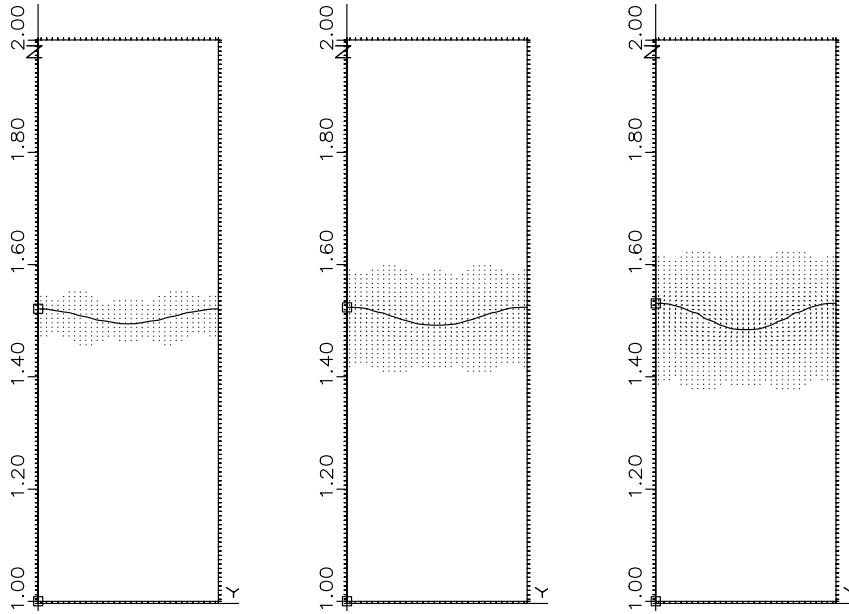


Abbildung 5.15: Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,01$, $t = 0,03$ und $t = 0,05$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$

Markierungsteilchen Verfahren (Marker-Partikel) ein vollständig anderes Verfahren zur Beschreibung der Phasengrenze benutzt wurde.

Für eine quantitative Aussage zur Rayleigh-Taylor-Instabilität müssen entweder analytische Lösungen, numerische oder experimentelle Vergleichsarbeiten aus der Literatur herangezogen werden. Analytische Lösungen sind nicht in ausreichendem Detail vorhanden, weshalb in der Literatur wenig auf sie eingegangen wird. Dafür wird in der Literatur oft die Blasenaufstiegsgeschwindigkeit v_{Blase} und die Fallbeschleunigung des Fingers a_{Finger} angegeben.

Nach einem anfänglich exponentiellen Wachstum der Blasenaufstiegsgeschwindigkeit nimmt diese einen konstanten Wert an. In Tabelle 5.2 sind verschiedene Werte für die auf \sqrt{AgW} (A : Atwood-Zahl, g : Erdbeschleunigung, W : Breite des Rechengebietes) bezogene Aufstiegsgeschwindigkeit aus der Literatur zusammengestellt. Dabei ist die Atwood-Zahl folgendermaßen definiert

$$A = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} . \quad (5.19)$$

Hier beträgt die Atwood-Zahl: $A = 0,757$. Emmons et al. [27] haben die Aufstiegsgeschwindigkeit experimentell ermittelt. Es wurden für die Experimente Systeme aus Methanol oder Kohlenstoffchlorid und Luft untersucht. Die Erdbeschleunigung wurde mit einer Apparatur simuliert, die die Fluide in horizontaler Richtung beschleunigte. Die Anfangsauslenkung wurde über einen Rührer realisiert. Die Blasenaufstiegsgeschwindigkeit bestimmten sie aus Fotografien. Birkhoff [7] bestimmt die Aufstiegsgeschwindigkeit einer zweidimensionalen Blase aus einer einfachen analytischen Lösung. Baker et al. [4] berechneten v_{Blase} mit einer erweiterten klassischen Punkt-Wirbel-Methode, bei der die

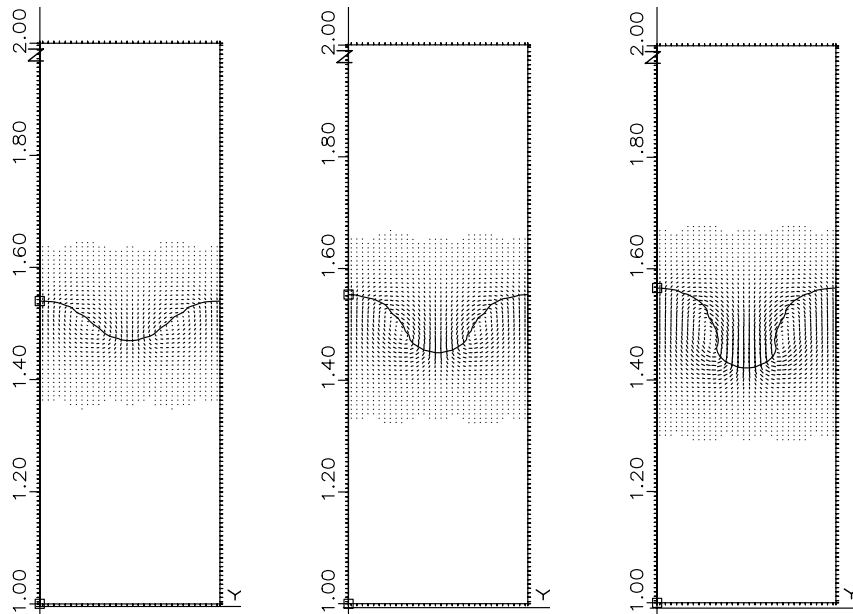


Abbildung 5.16: Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,07$, $t = 0,09$ und $t = 0,11$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$

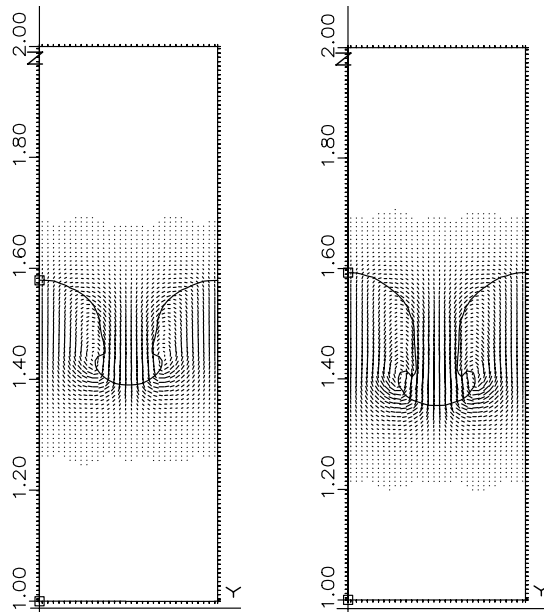


Abbildung 5.17: Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = 0,138$, $t = 0,13$ und $t = 0,15$, maximale Geschwindigkeit: 2,84; Gitter: $4 \times 32 \times 128$

Phasengrenzfläche als Wirbelblatt beschrieben wird. Es wird also der zeitliche Verlauf der Phasengrenzfläche numerisch berechnet, wobei nur ein Fluid betrachtet wird. Tryggvason [92] simuliert die Phasengrenzfläche mit einer Lagrange-Euler-Wirbel-Methode, welche die Eigenschaften beider Fluide beinhaltet. Beide Verfahren berücksichtigen die Reibung nicht. He et al. [37] verwenden ein Gitter-Boltzmann-Verfahren, welches auch die Reibung beinhaltet. Zu beachten ist, daß He et al. [37] trotz der Reibung zu höheren Werten für die Aufstiegsgeschwindigkeit der Blase kommen als Tryggvason [92]. Dies entspricht nicht den physikalischen Erwartungen (vgl. hierzu auch [27]) und wird leider von den Autoren nicht kommentiert.

Literatur	$v_{\text{Blase}}/\sqrt{AgW}$
Birkhoff [7]	0,25
Emmons et al. [27]	0,2...0,3
Baker et al. [4]	0,225
Tryggvason [92]	0,265
He et al. [37]	0,270...0,275
diese Arbeit	0,243

Tabelle 5.2: Literaturvergleich der Aufstiegsgeschwindigkeit der Blase v_{Blase} bei der zweidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität

Die theoretische Fallbeschleunigung des Fingers a_{Finger} ergibt sich aus der Ort-Zeit-Abhängigkeit des freien Falls zu Ag .

Aus den Simulationen wurden die Positionen der Front der Blase und der Front des Fingers bestimmt und über der Zeit in Abbildung 5.18 aufgetragen. Es lassen sich folgende Beziehungen für die zeitliche Entwicklung der Frontpositionen gewinnen:

$$z(0; t)_{\text{Finger}} \doteq -0,00574\text{m} + 0,16733\frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot t - 1,86048\frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot t^2 \quad (5.20)$$

$$z\left(\frac{1}{8}; t\right)_{\text{Blase}} \doteq -0,01054\text{m} + 0,66334\frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot t \quad (5.21)$$

Aus Gleichung (5.20) folgt:

$$\frac{a_{\text{Finger}}}{Ag} = 0,5011 \quad (5.22)$$

Gleichung (5.22) besagt, daß nur 50,1% der theoretisch zu erwartenden Beschleunigung des Fingers erreicht wird. Dieses Ergebnis stimmt mit den Anmerkungen von Tryggvason [92] überein, daß die Beschleunigung sehr stark von der Gitterauflösung abhängig ist. Vergleiche mit der Beschleunigung aus Abbildung 9 in [92] für ein 32×128 Gitter ergeben einen ungefähr gleichen Wert wie in Gleichung (5.22) mit TURBIT-VoF berechnet.

Aus Gleichung (5.21) folgt für die normierte Blasenaufstiegsgeschwindigkeit:

$$\frac{v_{\text{Blase}}}{\sqrt{AgW}} = 0,243 \quad (5.23)$$

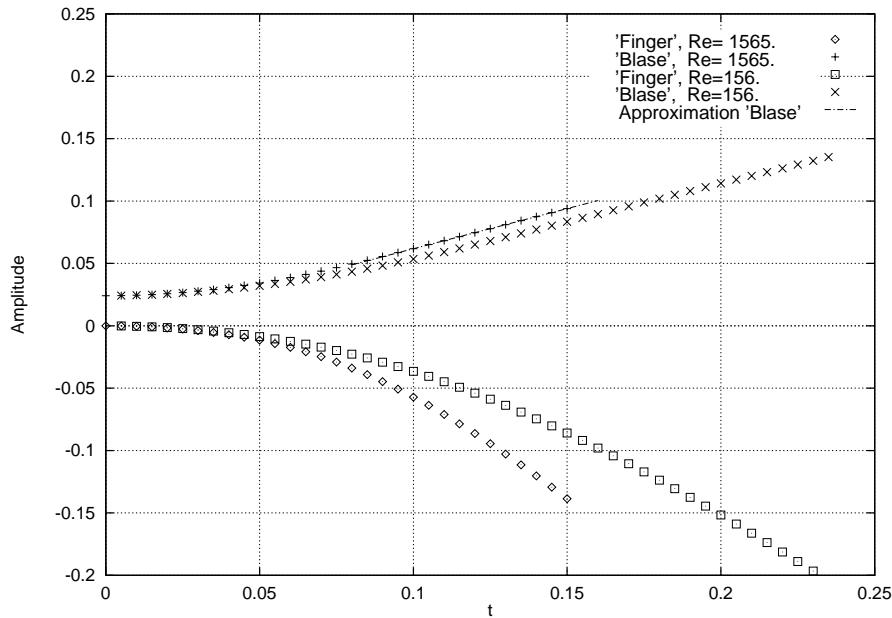


Abbildung 5.18: Rayleigh-Taylor-Instabilität für $Re = 1565$ und $Re = 156$: Position von Blase und Finger, lineare Approximation der Aufstiegs geschwindigkeit der Blase

Dieser Wert aus (5.23) paßt sehr gut zu den in Tabelle 5.2 in anderen Literaturstellen angegebenen Werten. Die Aufstiegs geschwindigkeit ist kleiner als bei Tryggvason [92], was dadurch zu erklären ist, daß in TURBIT-VoF die Reibung berücksichtigt wird. Gleichung (5.23) liegt im Bereich der in [27] experimentell bestimmten Aufstiegs geschwindigkeit.

Zusätzlich zu den Simulationen mit dem Parametersatz aus (5.18) wurde die Rayleigh-Taylor-Instabilität mit $Re_{ref} = 156$ und sonst gleichen Parametern nochmals durchgeführt. Die Positionen von Blase und Finger sind in Abbildung 5.18 ebenso über der Zeit aufgetragen. Aufgrund der höheren Reibung dauert es länger als bei der Simulation mit $Re_{ref} = 1565$, bis die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase konstant ist. Die Aufstiegs geschwindigkeiten für beide Referenz-Reynolds-Zahlen sind nahezu gleich, was in [37] ebenso beobachtet wurde.

Abschließend läßt sich feststellen, daß TURBIT-VoF die zeitliche Entwicklung einer Rayleigh-Taylor-Instabilität numerisch sehr gut nachrechnen kann. Qualitativ ergibt sich das richtige zeitliche Ausbilden einer aufsteigenden Blase und eines herabfallenden Fingers. Die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase stimmt mit den in der Literatur angegebenen Werten sehr gut überein. Die Fallbeschleunigung des schwereren Fluids stimmt, im Rahmen der bei der Gitterauflösung zu erwartenden Beschleunigung, gut mit der theoretischen überein.

Dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität

Im Gegensatz zum vorherigen Abschnitt wird in diesem Abschnitt eine dreidimensionale Anfangsauslenkung $z(x, y; t = 0)$ der Schichtung betrachtet mit $(0 \leq x \leq 1/4$ und $0 \leq$

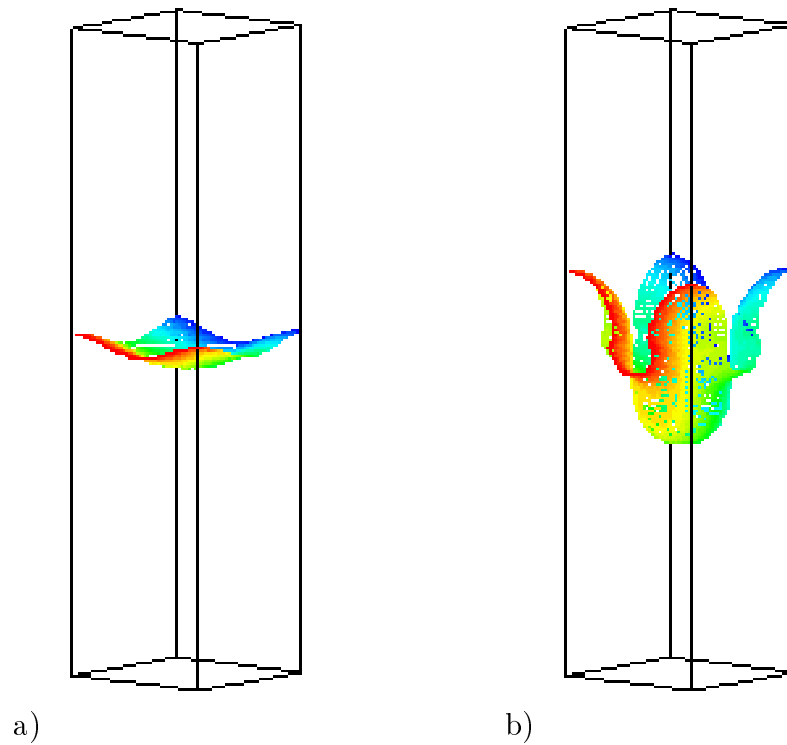


Abbildung 5.19: Dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität: $\Phi_\rho = \frac{1}{3}$, a) $t = 0$ und b) $t = 0,45$; Gitter: $32 \times 32 \times 128$

$y \leq 1/4$, vgl. Abbildung 5.19 a)):

$$z(x, y; t = 0) = 1.5 + 0.0125 [\cos(8\pi x) + \cos(8\pi y)] . \quad (5.24)$$

Folgende Parameter wurden in der Simulation realisiert:

Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ	l_{ref}/m	$u_{ref}/\frac{m}{s}$
4096	∞	$\frac{1}{3}$	1	4	3, 1321

(5.25)

Somit beträgt die Atwood-Zahl $A = 0,5$. In Abbildung 5.19 b) ist die berechnete Phasengrenzfläche zum Zeitpunkt $t = 0,45$ dargestellt. Ebenso wie bei der zweidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität kommt es im zeitlichen Verlauf zu einem Herausbilden einer aufsteigenden Blase an den Rändern und zum Herabfallen vom schwereren Fluid in der Mitte, d.h. zur Ausbildung des sogenannten Fingers. Aufgrund der anders gewählten Parameter sind die Zeitskalen von hier berechneter zweidimensionaler und dreidimensionaler Rayleigh-Taylor-Instabilität nicht zu vergleichen. Wird der Schnitt von Phasengrenzfläche und Randfläche auf der linken Seite betrachtet, so kann wieder die Kelvin-Helmholtz-Instabilität beobachtet werden, die für das Abrollen des schwereren Fluids verantwortlich ist.

Analog zur zweidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität wurden für eine Quantifizierung der Simulationsergebnisse in Abbildung 5.20 die Positionen von Blase und Finger

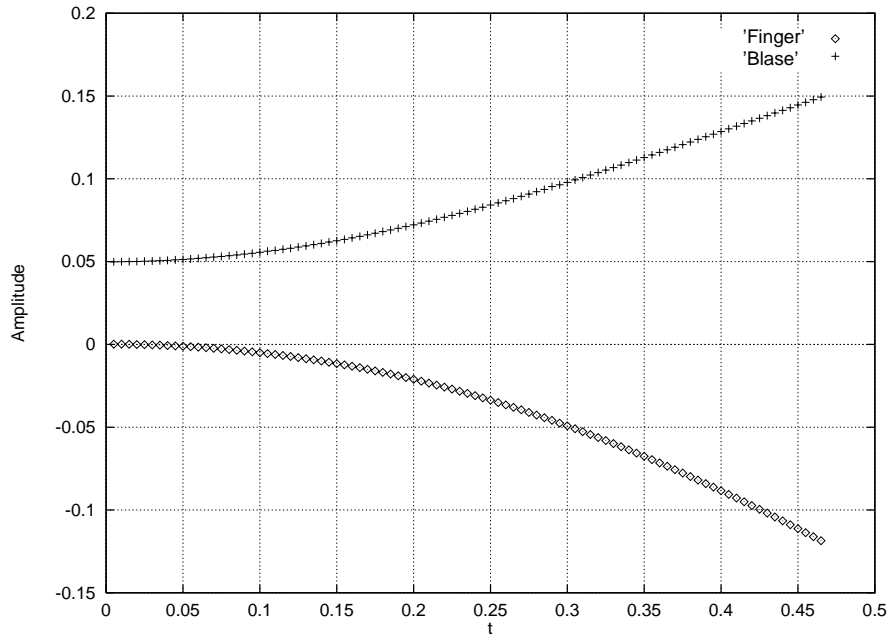


Abbildung 5.20: Dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität für $Re = 4096$: Position von Blase und Finger

aufgezeichnet. Da die gleichen physikalischen Mechanismen wie im Zweidimensionalen auf das System wirken, ist wiederum ein lineares Aufstiegsverhalten der Blase und ein nach dem Fallgesetz bestimmtes Herabfallen des Fingers zu beobachten.

In Tabelle 5.3 sind verschiedene Werte für die auf $\sqrt{AgW/2}$ normierte Aufstiegs- geschwindigkeit bei der dreidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität zusammengefaßt. Glimm et al. [30] verwenden für ihre Simulationen ein numerisches Verfahren, welches die Phasengrenzfläche mit einem zusätzlichen Oberflächengitter auflöst ('interface tracking'). He et al. [38] verwenden, wie schon vorher erwähnt, ein Gitter-Boltzmann-Verfahren. Somit sind beide aus der Literatur entnommenen Werte mit vollständig anderen numerischen Methoden berechnet als die mit TURBIT-VoF erzielte normierte Blasenaufstiegsgeschwindigkeit.

Literatur	$v_{\text{Blase}}/\sqrt{AgW/2}$
Glimm et al. [30]	0,62
He et al. [38]	0,61
diese Arbeit	0,64

Tabelle 5.3: Literaturvergleich der Aufstiegsgeschwindigkeit der Blase v_{Blase} bei der dreidimensionalen Rayleigh-Taylor-Instabilität

Folgende Beziehungen lassen sich aus den Frontpositionen gewinnen:

$$z(0, 0; t)_{\text{Finger}} \doteq 0,00068\text{m} + 0,01616 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot t - 1,3844 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot t^2 \quad (5.26)$$

$$z\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}; t\right)_{\text{Blase}} \doteq 0,00232\text{m} + 1,00221 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot t . \quad (5.27)$$

Aus Gleichung (5.26) folgt:

$$\left. \frac{a_{\text{Finger}}}{Ag} \right|_{3D} = 0,5645 . \quad (5.28)$$

Ebenso wie im Zweidimensionalen wird der theoretisch zu erwartende Wert der Beschleunigung nicht erreicht. Dies ist wiederum auf die Wahl des Gitters zurückzuführen. Der Wert der Fallbeschleunigung von 56,5% in Bezug auf den theoretisch zu erwartenden ist etwas besser als im zweidimensionalen Fall.

Aus Gleichung (5.27) folgt für die normierte Blasenauftiegs geschwindigkeit:

$$\frac{v_{\text{Blase}}}{\sqrt{AgW/2}} = 0,640 . \quad (5.29)$$

Dieser Wert stimmt sehr gut mit den in der Literatur dokumentierten Aufstiegs geschwindigkeiten überein (vgl. Tabelle 5.3), wobei dort mit völlig unterschiedlichen Methoden gearbeitet wurde.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß mit TURBIT-VoF der zeitliche Verlauf von verschiedenen Rayleigh-Taylor-Instabilitäten sehr gut nachgerechnet wird. Sowohl die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase als auch die Fallbeschleunigung des schwereren Fluids stimmen sehr gut mit anderen aus der Literatur herangezogenen Vergleichswerten überein. Dies gilt für die zweidimensionale wie dreidimensionale Rayleigh-Taylor-Instabilität.

Kapitel 6

Anwendungsrechnungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der numerischen Simulationen für Blasen und Schwärme von Blasen dargestellt. In einem ersten Abschnitt werden die durchgeführten Simulationen klassifiziert, wobei auf die unterschiedlichen Simulationsführungen eingegangen wird.

In den weiteren Abschnitten werden Simulationsergebnisse für die folgenden Blasentypen vorgestellt. Zum einen werden ellipsen- und kappenförmige Blasen betrachtet, die geradlinig mit laminarer Strömung im Nachlauf aufsteigen. Es stellt sich ein stationärer Zustand mit einer konstanten Aufstiegs geschwindigkeit ein. Zum anderen werden taumelnde ('wobbling') Blasen besprochen, zu denen es in der Literatur bisher keine detaillierten numerischen Untersuchungen gibt. Bei diesem Blasentyp ist die Phasengrenzfläche der Blase sehr instabil und durch die Trägheitskräfte droht sie auseinanderzureißen. Dies spiegelt sich in der Dynamik der Verformung wieder. Die Bahn der Blase ist nicht geradlinig, sondern spiralförmig, was in den Simulationen auch gezeigt wird. Abschließend wird eine numerische Simulation von fünf aufsteigenden Blasen behandelt.

6.1 Übersicht über Simulationen von Blasen

In Tabelle 6.1 sind die Parameter der in diesem Kapitel erläuterten Simulationen von Blasen aufgeführt:

Bez.	$E_{O_{Bl}}$	$\log M_{Bl}$	Gitter	Rechengebiet	d_{Bl}/l_{ref}	Anf.-Werte
1BLa	3,07	-5,51	$64 \times 64 \times 64$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	$\vec{u} = 0$
1BLaa	3,07	-5,51	$64 \times 64 \times 128$	$1 \times 1 \times 2$	1/8	$\vec{u} = 0$
1BLab	3,07	-5,51	$128 \times 64 \times 64$	$2 \times 1 \times 1$	1/4	$\vec{u} = 0$
1BLac	3,07	-5,51	$128 \times 128 \times 128$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	$\vec{u} = 0$
1BLb	243	2,42	$64 \times 64 \times 64$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	1BLa
1BLc	0,20	-10,6	$64 \times 64 \times 64$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	1BLa
1BLd	3,07	-9,60	$64 \times 64 \times 64$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	1BLa
5BL	3,07	-5,51	$64 \times 64 \times 64$	$1 \times 1 \times 1$	1/4	$\vec{u} = 0$

Tabelle 6.1: Durchgeführte Simulationen von Blasen

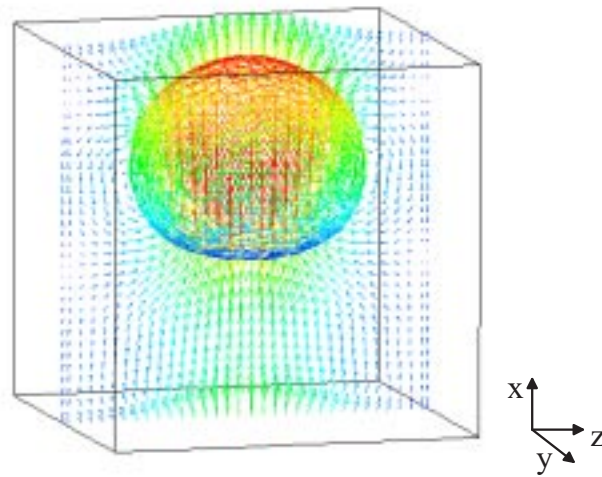


Abbildung 6.1: Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0$, 5: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,6$, $EO_{Bl} = 17,658$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; Gitter: $32 \times 32 \times 32$

Die Realisierungen der Kennzahlen für die Simulationen aus Tabelle 6.1 in TURBIT-VoF läßt sich aus Tabelle A.10 (Anhang A) entnehmen.

Die Simulationen 1BLaa bis 1BLac bilden zusammen mit 1BLa eine Gitterstudie, mit der der Einfluß der Wände und der Periodenlänge auf die Aufstiegs geschwindigkeit abgeschätzt wird. Zur Illustration der Problematik dient Abbildung 6.1. In Aufstiegsrichtung der Blase (x -Richtung) sind periodische Randbedingungen vorgegeben. Deshalb kann im strengen Sinne nicht von aufsteigenden Einzelblasen gesprochen werden, sondern von hintereinander aufsteigenden Blasen. Im Rechengebiet ist die Phasengrenzfläche der aufsteigenden Blase und ein Schnitt durch das Geschwindigkeitsfeld eingezeichnet. Aufgrund der periodischen Randbedingungen ist das Geschwindigkeitsfeld im Vorlauf der Blase an der oberen Austrittsfläche gleich dem Geschwindigkeitsfeld an der unteren Eintrittsfläche. Im weiteren Verlauf der Simulation wird die Blase das Rechengebiet oben verlassen und gleichzeitig unten eintreten. Die Periodenlänge des Rechengebietes ist in diesem Beispiel so klein gewählt worden, daß eine deutliche Beeinflussung von Vor- und Nachlauf besteht. Zusätzlich kommt die Blase den Wänden, die sich an den rechten und linken Seitenflächen des Rechengebietes befinden ($z = 1$ und $z = 2$), sehr nahe. Dadurch bildet sich im weiteren Verlauf der Simulation eine sogenannte Taylor Blase aus mit einer Gegenströmung zwischen Blase und Wand. In der verbleibenden Koordinatenrichtung (y) in Abbildung 6.1 (vorne und hinten) gelten wiederum periodische Randbedingungen.

Bei den Simulationen 1BLa, 1BLaa und 1BLab wurde als Anfangszustand jeweils von einer kugelförmigen Blase in Ruhe ausgegangen. Die Blase war mit 16 Maschen je Raumrichtung im Gitter aufgelöst. Bei der mit 1BLac bezeichneten Simulation wurde die kugelförmige Blase mit 32 Maschen je Raumrichtung aufgelöst, das Geschwindigkeitsfeld am Anfang war ebenfalls in Ruhe. Die Simulation, die mit 1BLa bezeichnet ist, dient als Basis für eine ganze Reihe daran anschließender Simulationen. Dabei wird der stationäre Zustand der Simulation 1BLa als Anfangswert für Simulationen mit veränderten Kennzahlen genommen. Es wird so vorgegangen, um lange Transienten zu vermeiden und damit

Rechenzeit zu sparen.

In Abbildung 1.2 ist das Diagramm aus Clift et al. [21] abgebildet, welches die grundlegenden Zusammenhänge zwischen Blasen-Reynolds-, Blasen-Eötvös- und Blasen-Morton-Zahl wiedergibt. Die Morton-Zahl als Größe, die nur von den Stoffparametern abhängt, bestimmt Linien, entlang derer die Reynolds- und Eötvös-Zahl des entsprechenden Regimes abzulesen ist. Zusätzlich sind die unterschiedlichen Blasenformen, die sich aus der Gewichtung von Trägheits-, Reibungs-, Auftriebs- und Oberflächenkräften ergeben, eingezeichnet. Aus dieser Abbildung läßt sich für jede gerechnete Kennzahlenkombination bei Einzelblasen das zu erwartende, experimentell bestimmte Aufstiegsverhalten ablesen.

Bei der Simulation mit fünf Blasen (5BL) wurden fünf kugelförmige Blasen in Ruhe vorgegeben. Jede Kugel wird mit 16 Maschen pro Raumrichtung aufgelöst.

6.2 Blase mit $Eo_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$

In diesem Abschnitt wird die numerische Simulation einer aufsteigenden Einzelblase im ruhenden Fluid mit den Kennzahlen

$$Eo_{Bl} = 3,07 \quad (6.1)$$

$$\log M_{Bl} = -5,51 \quad (6.2)$$

dargestellt (Simulationen mit Bezeichnungen 1BLa und 1BLaa bis 1BLac). Als Anfangszustand wird eine kugelförmige Phasenverteilung mit Geschwindigkeitsfeld in Ruhe vorgegeben. Im Verlauf der numerischen Simulation stellt sich ein Gleichgewichtszustand ein. Nach Abbildung 1.2 ergibt sich experimentell als Blasenform ein Ellipsoid.

Im ersten Unterabschnitt wird eine Gitterstudie dokumentiert, deren Ziel die Untersuchung des Einflusses des Wandabstandes und der Periodenlänge auf die terminale Aufstiegs geschwindigkeit der Blase ist. Danach wird aus den Simulationen für diese ellipsenförmigen Blasen das Halbachsenverhältnis ausgewertet und mit empirischen Korrelationen aus der Literatur verglichen. Abgeschlossen wird der Abschnitt mit einer Studie zum Dichteverhältnis, die die Leistungsfähigkeit des numerischen Verfahrens aufzeigen soll.

Abbildung 6.2 zeigt den momentanen Zustand der simulierten Blase für den Fall 1BLa. In Aufstiegsrichtung liegen wiederum periodische Randbedingungen vor, genauso wie am vorderen und hinteren Rand. Rechts und links befinden sich die festen Wände. Es sind drei Größen in Abbildung 6.2 dargestellt:

1. Phasengrenzfläche: Die Phasengrenzfläche wird über eine Triangulierung der Oberfläche der Phasengrenze dargestellt, nicht als Isofläche des Volumenfraktionsfeldes f . Dazu wurde ein Auswerteprogramm entwickelt, welches mittels des EPIRA-Algorithmus die Lage der Phasengrenzfläche aus dem Volumenfraktionsfeld bestimmt und dann eine Triangulierung vornimmt. Die Farbgebung hat keine physikalische Bedeutung sondern ist zu einer besseren visuellen Erfassung der x -Richtung (Aufstiegsrichtung) zugeordnet.

2. Geschwindigkeit: Für eine mittlere Schnittebene durch die Blase ist das Feld der Geschwindigkeitsvektoren eingezeichnet, die Farbgebung ist dem Betrag der Vektoren zugeordnet. Dabei ist die Aufstiegs geschwindigkeit der Blase vom Geschwindigkeitsprofil abgezogen worden, die Blase gleicht dadurch einer in Gegenströmung in Schwebe gehaltenen Blase im Experiment.
3. Wirbelstärke: Der Betrag der Komponente des Wirbelstärkevektors $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u}$ in Richtung senkrecht zur eingezeichneten Ebene der Geschwindigkeitsvektoren ist als Konturlinie eingezeichnet.

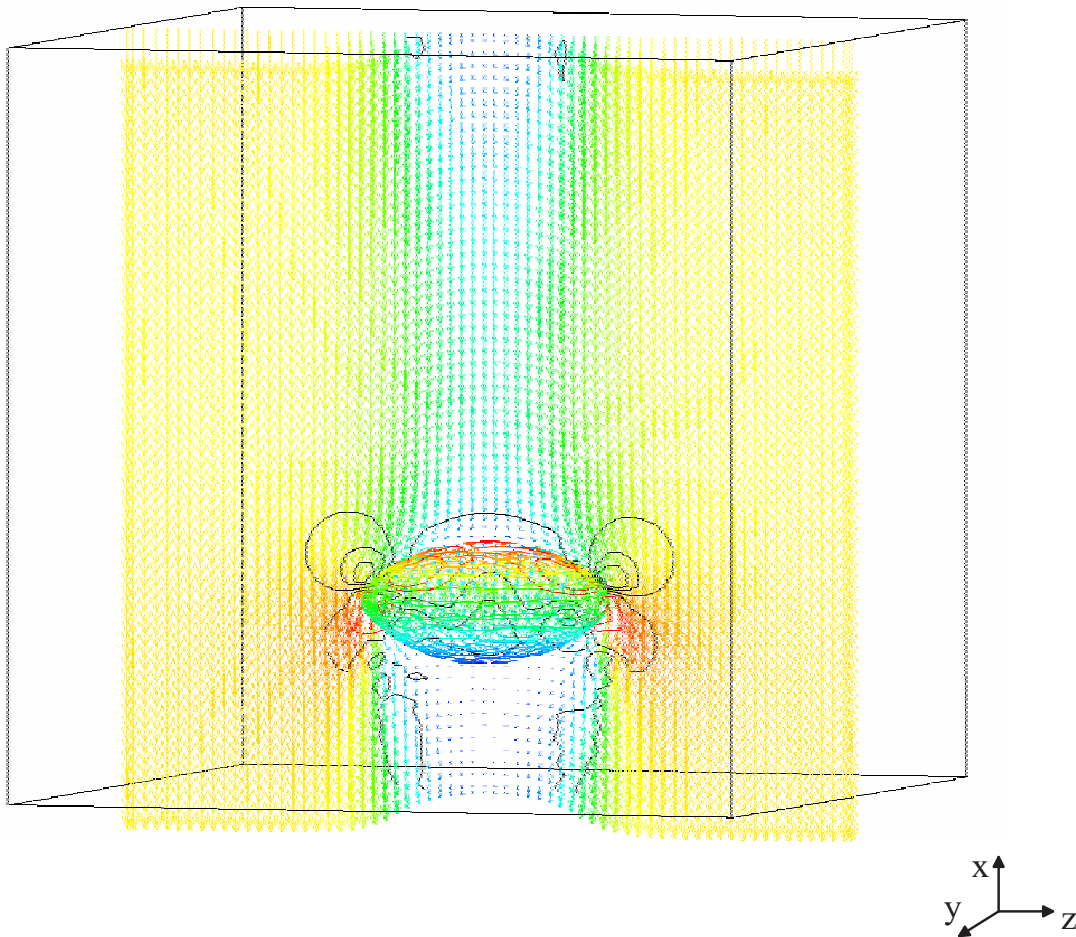


Abbildung 6.2: Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$; $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$; $Eo_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$ (Fall 1BLa)

Wie von den Experimenten her zu erwarten, stellt sich in der numerischen Simulation eine ellipsenförmige Blasenoberfläche ein. Die Blase ist rotationssymmetrisch zur Aufstiegsrichtung und nicht rotationssymmetrisch zur Achse senkrecht zur Aufstiegsrichtung. Der Staupunkt vor der Blase zerteilt die Strömung. Der Nachlauf wird geschlossen umströmt. Im Bereich des Nachlaufes ist mit dem Übergang von Nachlauf zur äußeren

Umströmung ein Geschwindigkeitsgradient zu beobachten, der für einen hohen Wert der Wirbelstärke verantwortlich ist.

Abbildung 6.3 zeigt das momentane Profil der Geschwindigkeitskomponente in Aufstiegsrichtung zwischen den Wänden für den Fall 1BLa. Dabei ist auf der Ordinate die Koordinate senkrecht zur Wand (z) aufgetragen, die Positionen der Wände sind somit bei $z = 0$ und $z = 1$. Das Profil ist durch den Durchmesser der Blase gelegt. Aus diesem Grund sind in der Mitte höhere Geschwindigkeiten, die der leichteren Gasphase zuzuordnen sind, ausgebildet.

In Abbildung 6.4 a) ist der Mittelwert der Geschwindigkeit in Aufstiegsrichtung und in b) sind die rms-Werte der Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung aufgetragen, die folgendermaßen bestimmt sind:

$$u_1^{rms}(k) := \sqrt{\frac{1}{N_1} \sum_{i,j=1}^{IM \cdot JM} \left(u_x|_{i,j,k} - \overline{u_x}|_1(k) \right)^2 \cdot [f_{i,j,k}]} \quad (6.3)$$

$$u_2^{rms}(k) := \sqrt{\frac{1}{N_2} \sum_{i,j=1}^{IM \cdot JM} \left(u_x|_{i,j,k} - \overline{u_x}|_2(k) \right)^2 \cdot [1 - f_{i,j,k}]} \quad (6.4)$$

mit

$$\overline{u_x}|_1(k) := \frac{1}{N_1} \sum_{i,j=1}^{IM \cdot JM} u_x|_{i,j,k} \cdot [f_{i,j,k}] \text{ falls } N_1 > 0 \quad (6.5)$$

$$\overline{u_x}|_2(k) := \frac{1}{N_2} \sum_{i,j=1}^{IM \cdot JM} u_x|_{i,j,k} \cdot [1 - f_{i,j,k}] \text{ falls } N_2 > 0, \quad (6.6)$$

$[\cdot]$ Stufenfunktion (schneidet Nachkommastellen ab), N_1 bzw. N_2 Anzahl an Zellen mit rein einer Phase (1 bzw. 2) und IM bzw. JM Anzahl der Maschen in x - bzw. y -Richtung. Die mit Kreisen gekennzeichnete Kurve gehört zur Gasphase. Sie erstreckt sich bis zur Phasengrenzfläche, während sich die rms-Werte der flüssigen Phase (mit Quadraten gekennzeichnet) aufgrund der räumlichen Verteilung bis zum Rand erstrecken.

Da die gewählte Blasen-Reynolds-Zahl im laminaren Bereich liegt, sind die Verläufe sehr glatt. Das Geschwindigkeitsmaximum in Aufstiegsrichtung ist eng auf den Bereich der Gasphase beschränkt. Der Verlauf der rms-Werte der flüssigen Phase ähnelt einer gaußförmigen Verteilung, der der Gasphase ist streng begrenzt. Allgemein ist anzumerken, daß der Verlauf der Phasengrenzfläche deutlich an den abrupten Übergängen in den Diagrammen abzulesen ist.

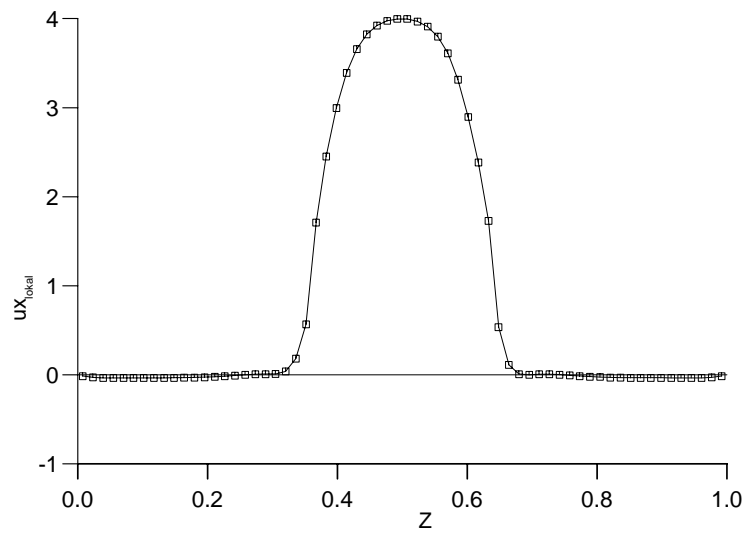


Abbildung 6.3: Fall 1BLa: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $EO_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; lokales Profil von u_x an $x = 0,49$ und $y = 0,32$ für $t = 1,04$

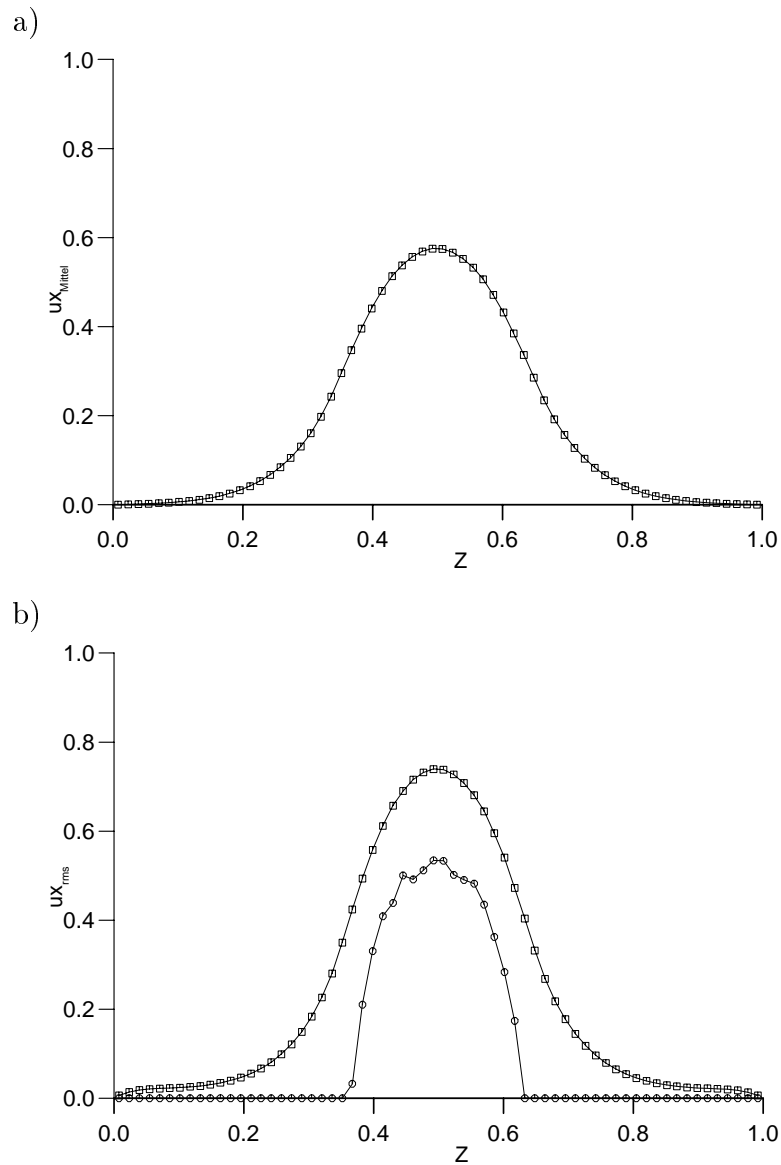


Abbildung 6.4: Fall 1BLa: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $Eo_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; a) $\overline{u_x}|_1$: Mittelwert der Geschwindigkeit u_x der flüssigen Phase, gemittelt über 13 Zeitpunkte von $t = 1,04$ bis $t = 1,36$; b) rms-Werte flüssige Phase (\square) und Gasphase (\circ), gemittelt wie unter a)

6.2.1 Gitterstudie

Es wurde eine Gitterstudie durchgeführt, um abzuschätzen, wie die festen Wände und wie die Wahl der Periodenlänge die terminale Aufstiegs geschwindigkeit U_T beeinflusst. Ausgegangen wurde von einer Simulation auf einem $64 \times 64 \times 64$ Gitter (Fall 1BLa). Durch die Verdoppelung der Maschenanzahl in Strömungsrichtung (Vergrößerung der Periodenlänge, Gitter: $128 \times 64 \times 64$, Fall 1BLab) ist der Einfluß des Nachlaufes auf den Vorlauf der Blase, der durch die periodischen Randbedingungen in Aufstiegsrichtung bedingt ist, quantitativ abzuschätzen. Durch die Verdoppelung der Maschenanzahl zwischen den Wänden (Gitter: $64 \times 64 \times 128$, Fall 1BLaa) bei gleichbleibenden Bedingungen in Strömungsrichtung wird der Wandeinfluß bestimmt.

Es werden folgende Größen aus den numerischen Simulationen entnommen

$$\overline{u_x}|_1 := \frac{1}{\sum_{k=1}^{KM} \Delta x_k \cdot \text{Ind}_1(k)} \sum_{k=1}^{KM} \overline{u_x}|_1(k) \cdot \Delta z_k \cdot \text{Ind}_1(k) \quad (6.7)$$

$$\overline{u_x}|_2 := \frac{1}{\sum_{k=1}^{KM} \Delta x_k \cdot \text{Ind}_2(k)} \sum_{k=1}^{KM} \overline{u_x}|_2(k) \cdot \Delta z_k \cdot \text{Ind}_2(k) \quad (6.8)$$

mit

$$\text{Ind}_1(k) := \begin{cases} 1 & \exists (i, j) : f_{i,j,k} = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.9)$$

$$\text{Ind}_2(k) := \begin{cases} 1 & \exists (i, j) : f_{i,j,k} = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.10)$$

und KM Anzahl der Maschen in z -Richtung. $\overline{u_x}|_1$ bzw. $\overline{u_x}|_2$ sind die gemittelten Geschwindigkeiten der flüssigen bzw. gasförmigen Phase. Als Aufstiegs geschwindigkeit können diese Werte nicht direkt interpretiert werden, da sie nichts über das Fortschreiten der Phasengrenzfläche aussagen. Deshalb wurde desweiteren aus der graphischen Ausgabe der Wert für die Aufstiegs geschwindigkeit U_T abgeschätzt. Dazu wurde eine zeitliche Abfolge von zweidimensionalen Schnitten durch die Mittelebene der Blase graphisch ausgegeben und daraus die Aufstiegs geschwindigkeit U_T bestimmt.

In Tabelle 6.2 sind die Ergebnisse der numerischen Simulationen zusammengefaßt. Die Werte wurden für $t = 0, 58$ den Simulationen entnommen.

Bez.	untersuchter Einfluß	$\overline{u_x} _1$	$\overline{u_x} _2$	$\overline{u_x} _2 - \overline{u_x} _1$	U_T	Re_{Bl}	We_{Bl}
1BLa	-	0,086	2,469	2,383	2,70	67,5	1,69
1BLaa	Wandabstand	0,043	2,420	2,377	2,68	67,0	1,68
1BLab	Periodenlänge	0,042	2,188	2,146	2,46	61,5	1,54
1BLac	Maschenweite	0,086	2,391	2,305	2,64	66,0	1,65

Tabelle 6.2: Gitterstudie zum Wandeinfluß und zum Einfluß der Periodenlänge

Bei dieser Kennzahlkombination ist der Einfluß des Wandabstandes auf die Aufstiegs geschwindigkeit minimal. Erstaunlich ist, daß bei der graphisch bestimmten Aufstiegs geschwindigkeit U_T im schmaleren Kanal höhere Werte auftreten. Dies kann mittels der

numerisch gemittelten Werte $\overline{u_x}|_1$ bzw. $\overline{u_x}|_2$ erklärt werden. Im schmaleren Kanal wird eine Strömung in der flüssigen Phase bedingt durch die Blasenstraße erzeugt, deren Geschwindigkeit im Mittel ($\overline{u_x}|_1$) doppelt so hoch ist wie bei der Simulation mit den weiter entfernten Wänden. Wird die Differenz der mittleren Geschwindigkeit in der Gasphase und der flüssigen Phase gebildet, dann ergeben sich annähernd gleiche Werte.

Die Untersuchung des Einflusses der Periodenlänge auf die Aufstiegs geschwindigkeit zeigt, daß bei vergrößerter Periodenlänge in Aufstiegsrichtung die Aufstiegs geschwindigkeit um ca. 9% abnimmt. Die Blase läuft nicht mehr in den eigenen Nachlauf hinein, sondern findet eine fast ruhende Flüssigkeit vor. Zu beachten ist, daß die mittlere Geschwindigkeit in der flüssigen Phase wiederum um den Faktor zwei kleiner ist als im Ausgangsfall auf dem $64 \times 64 \times 64$ Gitter.

Wird die Blasen-Reynolds-Zahl mit der numerisch bestimmten Aufstiegs geschwindigkeit U_T auf dem $128 \times 64 \times 64$ Gitter gebildet, so ergibt sich (vgl. Tabelle 6.2):

$$(Re_{Bl})_{num} = 61,5 . \quad (6.11)$$

Dieser Wert, verglichen mit dem experimentellen nach Clift et al. [21],

$$(Re_{Bl})_{exp} = 50 \dots 70 \quad (6.12)$$

zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen numerischen und experimentellen Ergebnissen.

Zusätzlich wurde eine Simulation auf einem im Vergleich zu Simulation 1BLa doppelt so feinen Gitter durchgeführt (Bezeichnung der Simulation: 1BLac). Damit wurde der Einfluß der Diskretisierung auf das Aufstiegsverhalten der Blase bestimmt. Die Blase ist im Anfangszustand mit der doppelten Anzahl an Maschen pro Raumrichtung aufgelöst. Aus Tabelle 6.2 lassen sich die Ergebnisse entnehmen. Es zeigt sich, daß nur ein sehr geringer Einfluß der Diskretisierung existiert. Die Werte für die gemittelten Geschwindigkeiten $\overline{u_x}|_1$ und $\overline{u_x}|_2$ stimmen gut mit den Werten von Fall 1BLa überein. Die Aufstiegs geschwindigkeiten der Blasen in den Fällen 1BLa und 1BLac unterscheiden sich nur geringfügig.

Für den Fall 1BLab ist in Abbildung 6.5 die maximale Geschwindigkeit u_{max} im Rechengebiet über der Zeit aufgetragen. Mit dieser Art der Darstellung wird beurteilt, ob die Simulation stationär ist oder nicht. In Abbildung 6.5 wird der stationäre Zustand ungefähr bei $t = 0,45$ erreicht.

6.2.2 Korrelation zum Halbachsenverhältnis

In der Literatur existieren für Blasen verschiedene Korrelationen zwischen dem Halbachsenverhältnis und einer Blasen kennzahl. Dabei ist diese Kennzahl entweder die Blasen-Weber-Zahl oder die Blasen-Eötvös-Zahl. Allgemein bewährt hat sich die Korrelation von Wellek et al. (vgl. [99]), die hier als Grundlage für einen Vergleich zwischen experimentellen Daten und der numerischen Simulation dienen soll.

Nach der Korrelation von Wellek et al. [99] für ellipsenförmige Blasen ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen Blasen-Eötvös-Zahl und dem Verhältnis der Halbachsen (b kleine und a große Halbachse des Ellipsoids):

$$E_{Wellek} = \left(\frac{b}{a}\right)_{Wellek} = \frac{1}{1 + 0,163 (EO_{Bl})^{0,757}} . \quad (6.13)$$

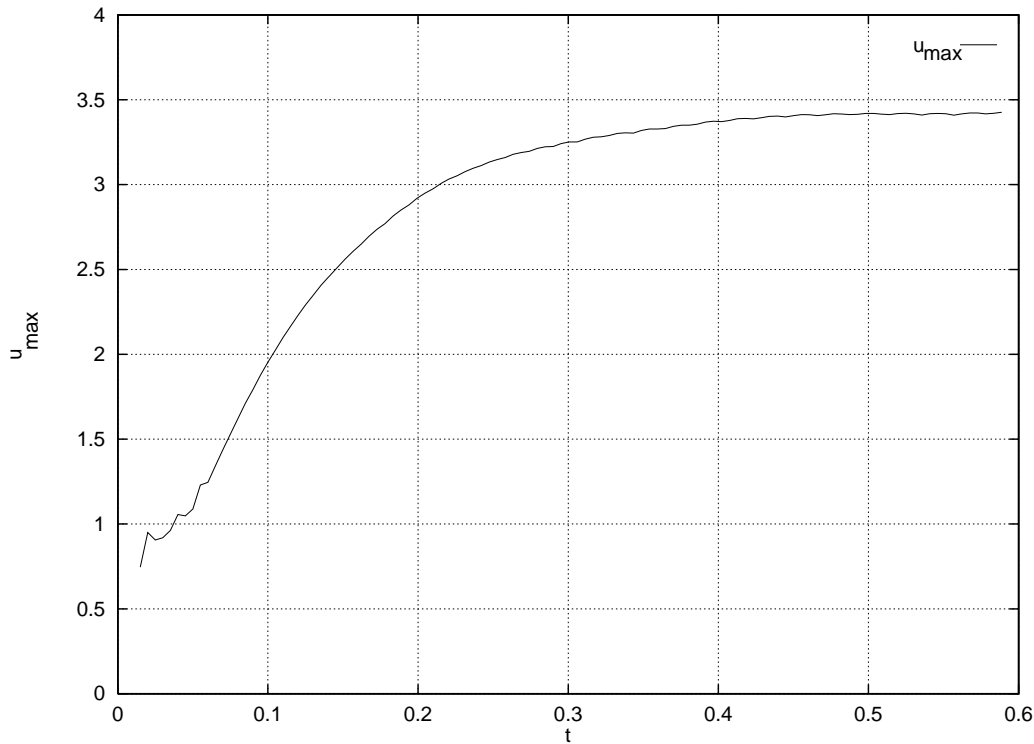


Abbildung 6.5: Fall 1BLab: Maximale Geschwindigkeit u_{max} im Rechengebiet über der Zeit

Diese Korrelation ist aus einer großen Anzahl experimenteller Daten mit unterschiedlichsten Stoffsystemen gebildet worden.

Für die in diesem Abschnitt betrachtete Blase in einem $128 \times 64 \times 64$ Gitter bei $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$ (1BLab) ergibt sich folgender Vergleich:

$$E_{Wellek} = 0,7243 \quad (6.14)$$

$$E_{num} = 0,7117 \quad (6.15)$$

Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit der aus experimentellen Daten abgeleiteten Korrelation.

6.2.3 Studie zum Dichteverhältnis

In diesem Abschnitt wird eine Studie zum Dichteverhältnis Φ_ρ durchgeführt. Ziel ist es zu zeigen, bis zu welchem Verhältnis Simulationen möglich sind. Dabei gibt Gleichung (3.72) die zu wählende Zeitschrittweite in Abhängigkeit der Strömungsgrößen und Kennzahlen an. Es wurden Simulationen für unterschiedliche Φ_ρ durchgeführt. Zweckmäßig ist die Einführung eines Faktors CDTK1, der folgendermaßen definiert ist

$$CDTK1 = \frac{\Delta t_{\Phi_\rho}}{\Delta t_{\Phi_\rho=0,5}} . \quad (6.16)$$

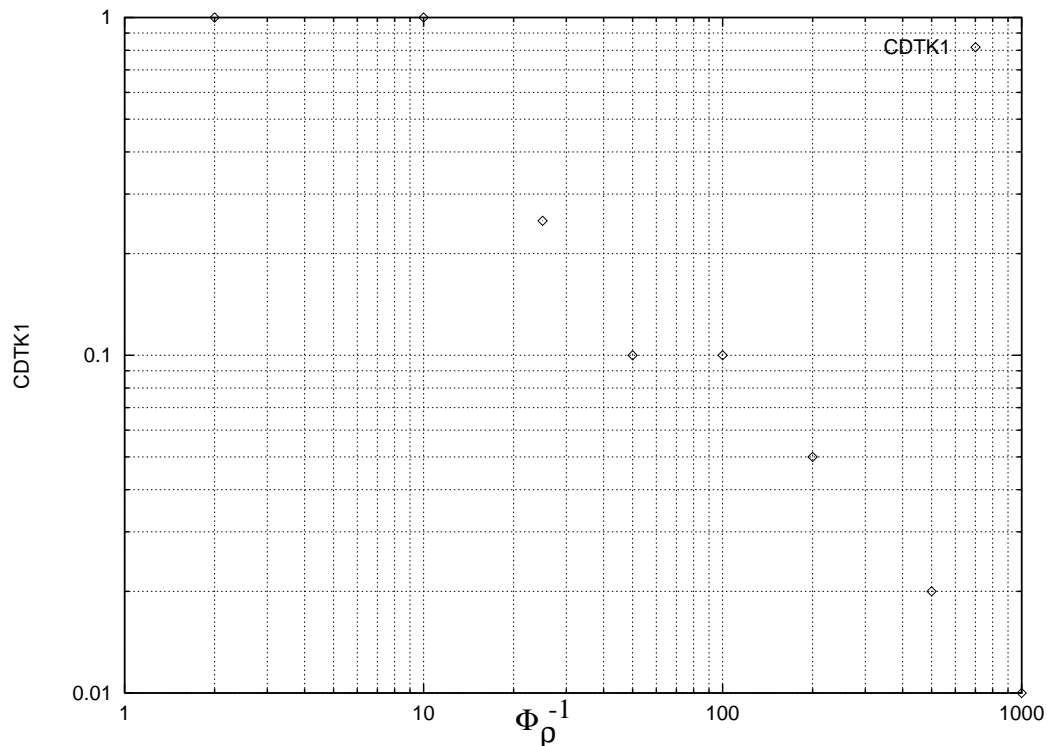


Abbildung 6.6: Faktor CDTK1 für verschiedene Dichteverhältnisse Φ_ρ

Stabile Simulationen bis zu $\Phi_\rho = 0,001$ wurden durchgeführt. Dies bedeutet, daß das numerische Verfahren bei diesem extremen Dichteverhältnis, das dem System Luftblasen in Wasser entspricht, stabil bleibt. Der Faktor CDTK1 ist in Abbildung 6.6 über dem inversen Dichteverhältnis ($(\Phi_\rho)^{-1}$) doppellogarithmisch aufgetragen. Der lineare Abfall der Zeitschrittweite in Abhängigkeit vom Dichteverhältnis, wie er aus Abbildung 6.6 entnommen werden kann, läßt sich folgendermaßen erklären. Gleichung (3.72) berücksichtigt im Anteil für den diffusiven Transport (Δt_ν) die Stoffwerte beider Phasen. Aus Gleichung (3.70) ergibt sich somit

$$\Delta t_\nu \propto \Phi_\rho, \quad (6.17)$$

womit der lineare Abfall zu erklären ist.

Obwohl Dichteverhältnisse bis zu 0,001 in den Simulationen möglich sind, wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit mit dem Dichteverhältnis 0,5 gerechnet. Dies hat den Vorteil, daß die Zeitschrittweite nicht zu klein wird und der numerische Aufwand an Rechenzeit im vertretbaren Maß bleibt. Auf die Physik ergeben sich keine Auswirkungen, da anhand der dimensionslosen Kennzahlen das Dichteverhältnis in der Simulation frei gewählt werden kann.

6.3 Fall 1BLb: $E_{OBl} = 243$ und $\log M_{Bl} = 2,42$

Die Simulationen im letzten Abschnitt wurden von einer sphärischen Blase aus mit Geschwindigkeitsfeld in Ruhe gestartet. In der Simulation dauert es einige Zeit, bis sich ein stationärer Zustand eingestellt hat. Um Rechenzeit bei einer Simulation mit anderen Stoffwerten einzusparen, wurde eine stationäre Simulation mit den Parametern des letzten Abschnitts genommen und dann die Stoffwerte neu angepaßt zu (Bezeichnung der Simulation: 1BLb)

$$E_{OBl} = 243 \quad (6.18)$$

$$\log M_{Bl} = 2,42 . \quad (6.19)$$

Diese Stoffwerte sind nach Bhaga und Weber (siehe [5]) gewählt. Nach dem Diagramm von Clift et al. [21] ergibt sich eine kappenförmige Blase.

Die Simulationsergebnisse sind in den Abbildungen 6.7 a) bis f) und 6.8 dargestellt. In den Abbildungen 6.7 a) bis f) ist der zeitliche Verlauf der Verformung der Phasengrenzfläche dokumentiert. Es sind jeweils zweidimensionale $x - z$ -Schnittebenen durch den Mittelpunkt der Blase dargestellt. Der Schwerevektor verläuft von links nach rechts, deshalb steigt die Blase in dieser Richtung auf. Das erste Diagramm zeigt den stationären Zustand, wie er mit den Simulationsparametern des letzten Abschnitts erhalten wurde. Die Blase verformt sich, durch eine stärkere Gewichtung des Auftriebes wird die dem Nachlauf zugewandte Seite eingedrückt. Im letzten Bild wird wiederum ein stationärer Zustand erreicht.

Abbildung 6.8 (links) zeigt den neuen stationären Zustand der Blase. Aufgrund der anderen Gewichtung von Auftriebs- zu Oberflächenkräften ist die Blase im Nachlauf nach innen verformt. Die Blasenform aus der numerischen Simulation stimmt gut mit der experimentell bestimmten überein, die in Abbildung 6.8 (rechts) aus der Arbeit von Bhaga und Weber [5] entnommen wurde.

6.4 Fall 1BLc: $E_{OBl} = 0,20$ und $\log M_{Bl} = -10,60$

Dieser Simulation liegt wiederum der stationäre Zustand aus Abschnitt 6.2 zugrunde. Es wurden folgende Kennzahlen realisiert (Bezeichnung der Simulation: 1BLc)

$$E_{OBl} = 0,20 \quad (6.20)$$

$$\log M_{Bl} = -10,60 . \quad (6.21)$$

Die Blasen-Morton-Zahl ist dem Stoffsystem Luftblasen in Wasser angepaßt. Nach dem Diagramm von Clift et al. [21] ergibt sich eine ellipsenförmige Blase.

Experimentell ergibt sich folgendes Verhalten (Sauter und Heinzl [78]). Abbildung 6.9 zeigt eine Schlierenaufnahme in der Hellfeldtechnik. Die Aufnahme ist folgendermaßen entstanden. Eine Luftblase steigt in einer Kochsalzlösung (NaCl-Lösung) auf. Über der Kochsalzlösung ist Wasser geschichtet. Wenn die Blase in den Bereich des Wassers gelangt, nimmt sie in ihrem Nachlauf eingeschlossene Kochsalzlösung mit. Der Dichteunterschied zwischen Wasser und der Kochsalzlösung führt zu dem Kontrast in Abbildung

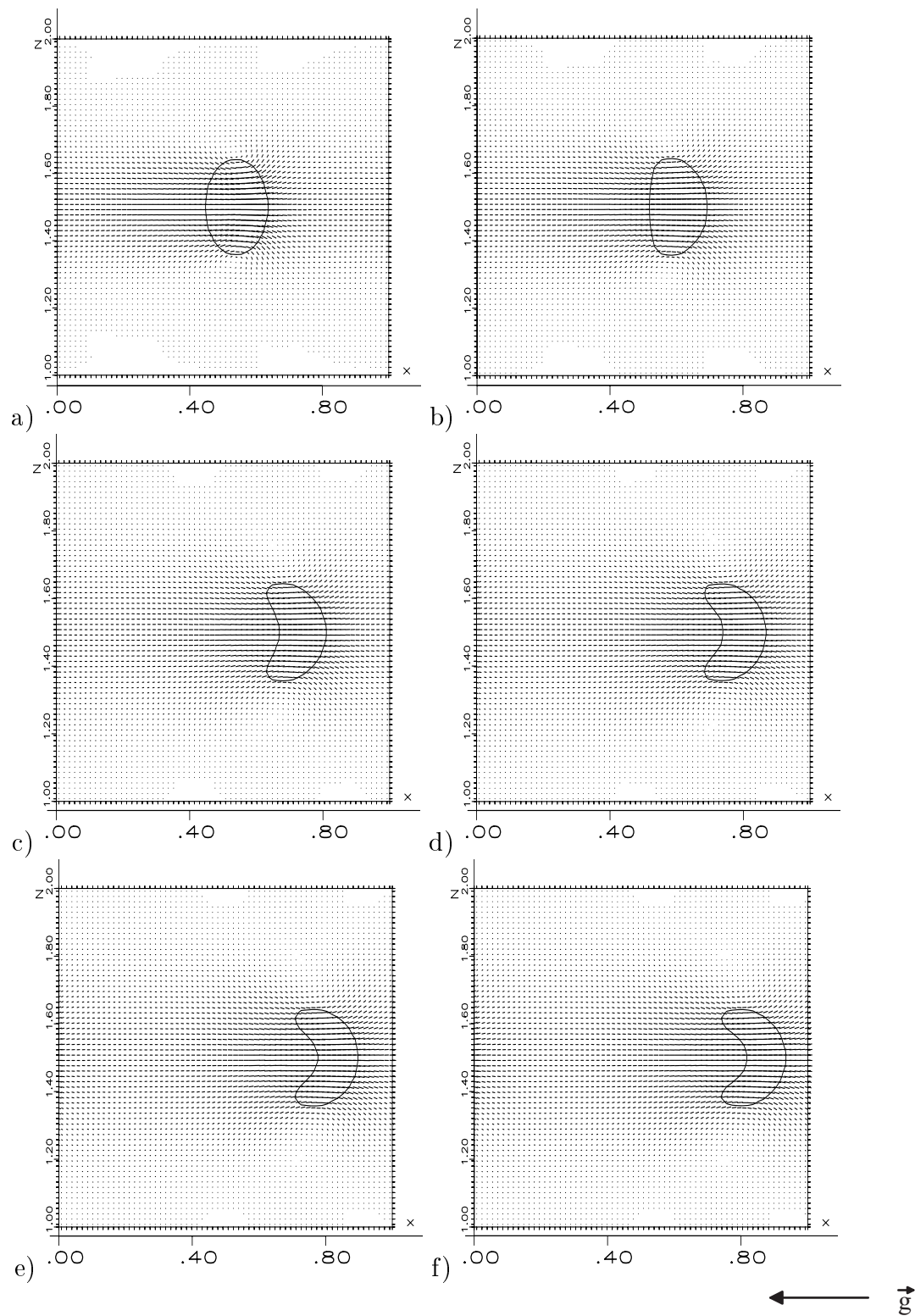


Abbildung 6.7: Zeitliche Entwicklung der Blasenform beim Übergang von Fall 1BLa zu Fall 1BLb; a) $t = 0,58$, b) $t = 0,60$, c) $t = 0,65$, d) $t = 0,68$, e) $t = 0,69$ und f) $t = 0,70$; maximale Geschwindigkeit: 3,54

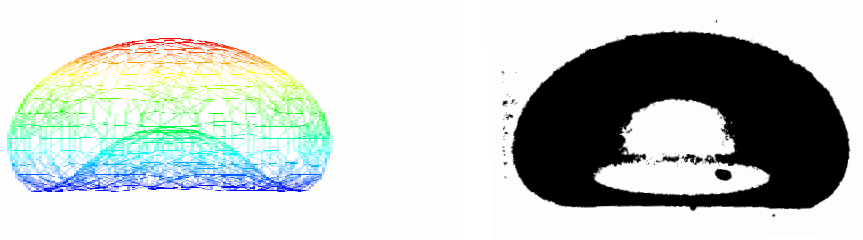


Abbildung 6.8: Stationäre Form der Blase mit Stoffwerten aus Bhaga und Weber (vgl. [5]), Fall d) (1BLb); (links) numerisch, (rechts) experimentell

6.9. Im Experiment stellt sich eine kugelförmige Blase mit geschlossenem Nachlaufverhalten ein. Die Blasen-Eötvös-Zahl kann grob aus Abbildung 6.9 zu $EO_{Bl} \approx 0,13$ abgeschätzt werden. Dabei wurde das Stoffsystem Luftblasen in Wasser angenommen und der Blasen-durchmesser zu $d_{Bl} \approx 1$ mm. Somit ist der Wert für die Blasen-Eötvös-Zahl unter der Unsicherheit der Bestimmung der realen Stoffwerte und des realen Blasendurchmessers als grober Anhaltswert zu sehen.

Abbildung 6.10 (oben) zeigt eine Visualisierung der numerischen Simulationsergebnisse. Es sind wiederum die drei Größen Phasengrenzfläche, Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene und Wirbelstärkeverteilung eingezeichnet (vgl. hierzu Abschnitt 6.2). Die Randbedingungen sind ebenfalls wie in Abschnitt 6.2 erläutert. In der numerischen Simulation ist die Blase nicht kugelförmig sondern ellipsenförmig. Dies läßt sich folgendermaßen erklären. Zum einen wurde bei den Experimenten mit einer Kochsalzlösung und Wasser gearbeitet. Somit ergeben sich andere Stoffeigenschaften zu dem numerisch simulierten System aus Luftblasen in reinem Wasser. Zum anderen waren beim Experiment Verunreinigungen in der kontinuierlichen Phase enthalten. Es ist aus der Literatur bekannt, daß sich diese Verunreinigungen an der Phasengrenzfläche ablagern und für eine Verringerung ihrer Mobilität sorgen. Blasen verhalten sich dann wie starre Körper. Somit ist zu erklären, daß aufgrund dieser Verunreinigungen die Blase kugelförmige Gestalt hat. Wie bei der experimentellen Beobachtung ist der Nachlauf auch in der Simulation geschlossen. Wird vom Nachlauf aus in Richtung der Wände rechts und links gegangen, dann ergeben sich hohe Gradienten im Geschwindigkeitsfeld. In dieser Region ist ebenso die Wirbelstärkeverteilung mit hohen Werten behaftet. Dies korrespondiert mit der experimentellen Beobachtung des Dichteunterschiedes und der Verwirbelung in diesem Bereich (vgl. Abbildung 6.9). Abbildung 6.10 (unten) stellt einen vergrößerten Ausschnitt von Abbildung 6.10 (oben) dar. Dabei wurde die Phasengrenzfläche nicht eingezeichnet,



Abbildung 6.9: Einzelblase: Stoffsystem Luftblasen in Wasser und NaCl-Lösung, Schlieraufnahme (Sauter und Heinzl [78])

damit die Zirkulation innerhalb der Blase sichtbar wird. Es bilden sich in der Gasphase zwei Wirbel, die durch die Umströmung der Phasengrenzfläche induziert werden.

Im weiteren Verlauf der Simulation bewegt sich die Blase in Richtung einer Wand. Der EPIRA-Algorithmus ist derzeit so ausgelegt, daß dann, wenn die Gasphase die wandnächste Masche erreicht, die Simulation abgebrochen wird, da die Eindeutigkeit der Rekonstruktion in so einem Falle nicht gewährleistet ist. Die Bewegung in Richtung Wand ist durch die Lift-Kraft (auch Kutta-Joukowski-Kraft genannt) zu erklären. Die aufsteigende Blase erzeugt ein mittleres Geschwindigkeitsprofil im Plattenkanal (siehe hierzu Abbildung 6.4 a)). Aufgrund der Haftbedingung ist die Geschwindigkeit an den Wänden Null. Die Blase erfährt somit in der Strömung an der Seite zur Wand im Vergleich zur wandabgewandten Seite unterschiedliche Relativgeschwindigkeiten. Dies führt zu unterschiedlichen Druckverläufen und zur Bildung eines Unterdruckes in Richtung Wand, der die Blase dorthin treibt.

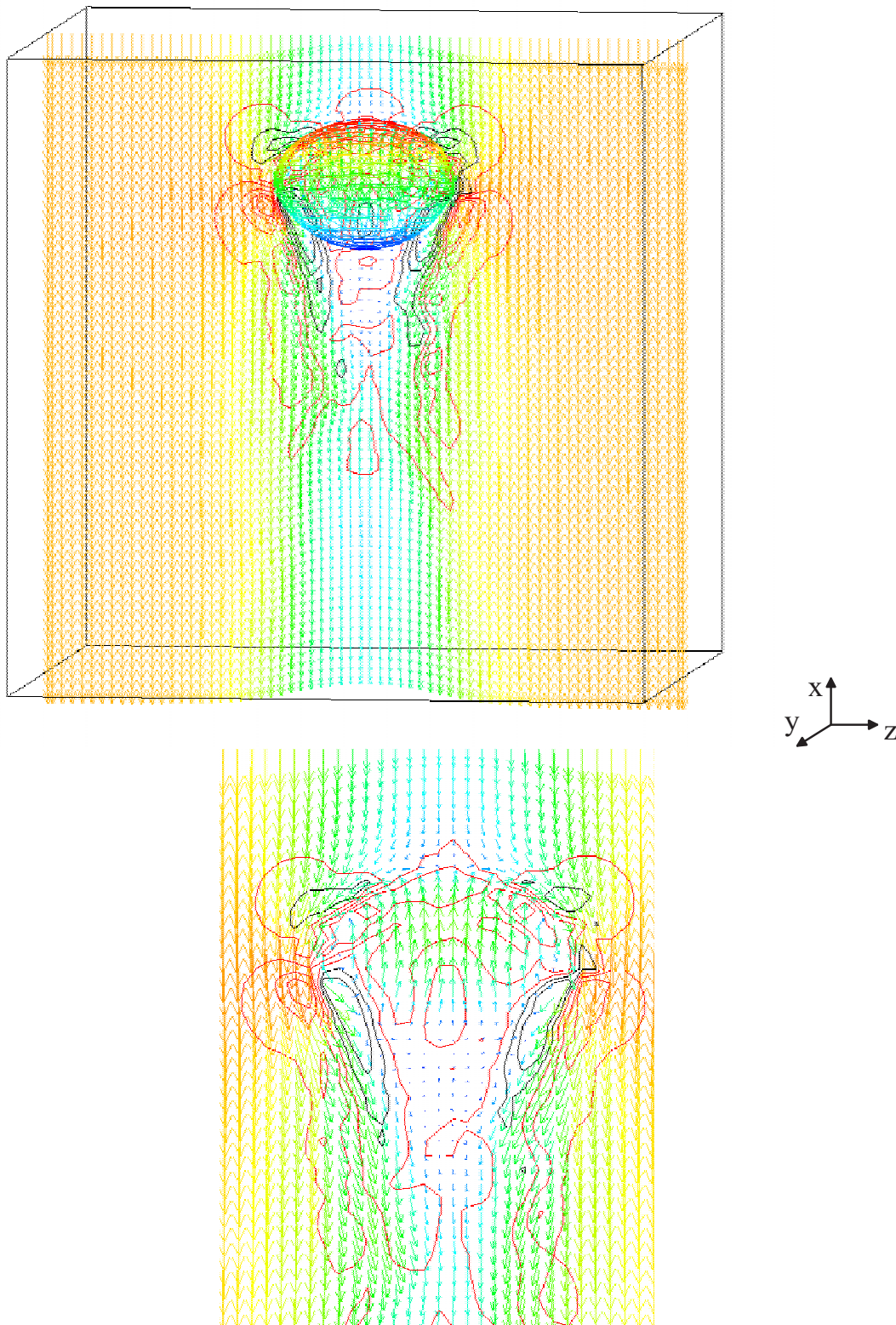


Abbildung 6.10: Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $Eo_{Bl} = 0,20$ und $\log M_{Bl} = -10,60$ (Fall 1BLc); $t = 1,06$; (oben) Totale Ansicht, (unten) Ausschnitt ohne Phasengrenze

6.5 Fall 1BLd: $Eo_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$

Es wird wiederum von der stationären Lösung aus Abschnitt 6.2 eine Simulation gestartet, jetzt mit den Kennzahlen (Bezeichnung der Simulation: 1BLd)

$$Eo_{Bl} = 3,07 \quad (6.22)$$

$$\log M_{Bl} = -9,60 . \quad (6.23)$$

Laut dem Diagramm aus Clift et al. [21] handelt es sich bei dieser Kennzahlenwahl um den Strömungsbereich der taumelnden Blasen ('wobbling').

In Abbildung 6.11 werden zwei Momentaufnahmen solcher taumelnder, nicht formbeständiger Blasen gezeigt. Dabei handelt es sich um Fotografien von in Wasser aufsteigenden Luftblasen (Cherdron [17]). Es ist eine deutliche Dynamik der Phasengrenzfläche zu erkennen. Dabei ist die Blase extrem abgeflacht und bildet einen langgestreckten Körper. Auftriebs- und Trägheitskräfte verformen die Phasengrenze, sind aber nicht stark genug, eine Zerteilung der Blase herbeizuführen.

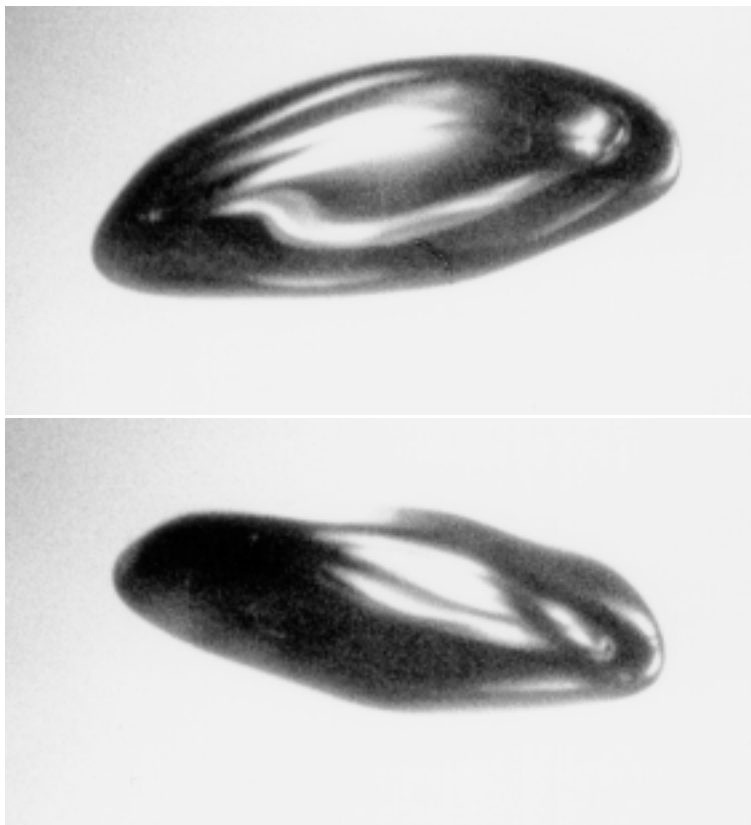


Abbildung 6.11: Einzelblase: Stoffsystem Luftblasen in Wasser, Fotografien, Cherdron [17]

Die numerische Simulation wurde in einem zu den Experimenten von Cherdron [17] ähnlichen Kennzahlenbereich durchgeführt. Die zeitliche Verformung der Phasengrenze wird in den Abbildungen 6.12 a) bis d) verdeutlicht. Es sind zweidimensionale Schnitte

durch die Phasengrenzfläche der Blase mit dem jeweiligen Geschwindigkeitsfeld dargestellt. Dabei ist der Schwerevektor wieder von links nach rechts orientiert. Die Blasenoberfläche zeigt das aus den Experimenten bekannte zeitlich stark veränderliche Verhalten.

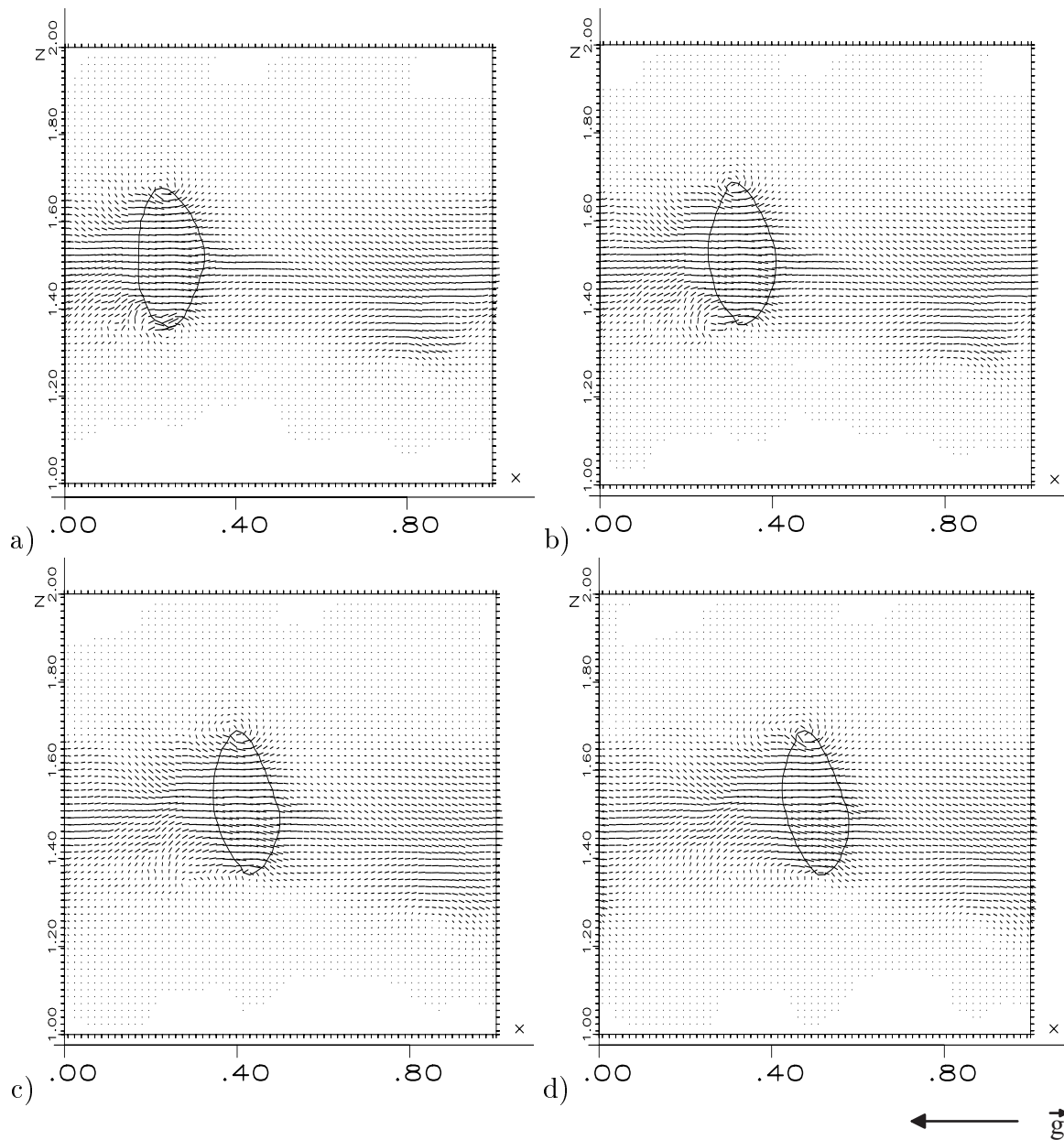


Abbildung 6.12: Fall 1BLd: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) $t = 1,39$, b) $t = 1,41$, c) $t = 1,43$ und d) $t = 1,46$; maximale Geschwindigkeit: 6,24

Abbildung 6.13 zeigt die dreidimensionale Visualisierung der taumelnden Blase. Es sind entsprechend Abschnitt 6.2 die Phasengrenzfläche, eine Schnittebene des Geschwindigkeitsfeldes (hier ohne Transformation mit der Aufstiegs geschwindigkeit) und die Wirbelstärkeverteilung eingezeichnet. Der turbulente Charakter der Strömung wird sichtbar. Dabei ist zu bedenken, daß es sich aufgrund der periodischen Randbedingung in Aufstiegs-

richtung um eine Blasenstraße handelt. Vor allem in der Wirbelstärkeverteilung wird die durch die Verdrängungswirkung der aufsteigenden Blase erzeugte Turbulenz deutlich.

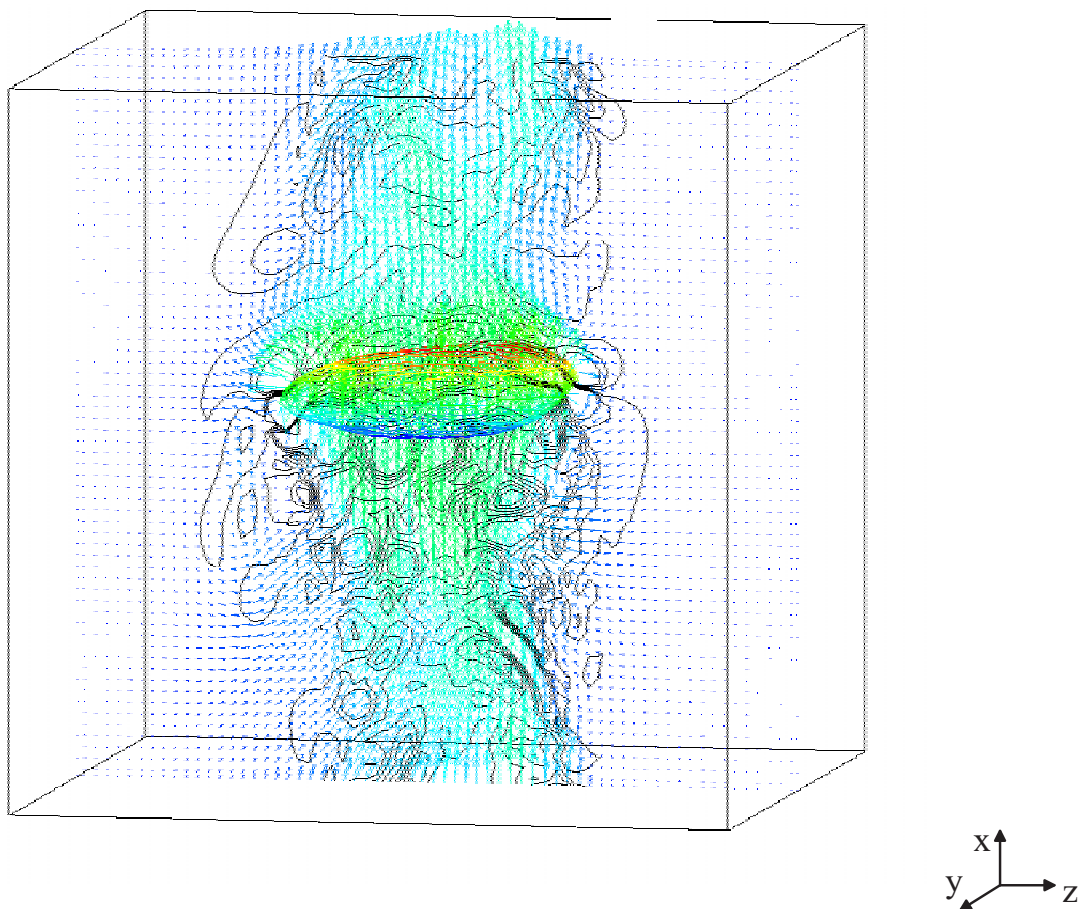


Abbildung 6.13: Einzelblase mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $y = 0,5$: $EO_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$ (Fall 1BLd)

Der Aufstiegsweg des Blasenschwerpunktes ist in den Abbildungen 6.14 a) bis d) dargestellt. Dabei ist in der Abbildung a) der dreidimensionale Verlauf aufgezeichnet. Die anderen drei Abbildungen sind Projektionen der Abbildung a). Abbildungen 6.14 b) und c) zeigen die Projektionen, wenn der Beobachter seitlich zur Aufstiegsrichtung blickt. Es wird in diesen Projektionen eine näherungsweise sinusförmige Bewegung ausgeführt. Die Abbildung d) ist die Projektion entlang der Aufstiegsrichtung. Die Blase läuft in dieser Projektion auf den Beobachter zu. Der Aufstiegsweg der Blase ist eine gekrümmte Bahn, die an eine verzerrte Schraubenlinie erinnert. Brücker [12] hat solche Blasenschwerpunktswegungen für Schwärme von Luftblasen in einem Gemisch aus Wasser und Glycerin experimentell vermessen. In den Experimenten zeigen sich qualitativ ähnliche Aufstiegswegen.

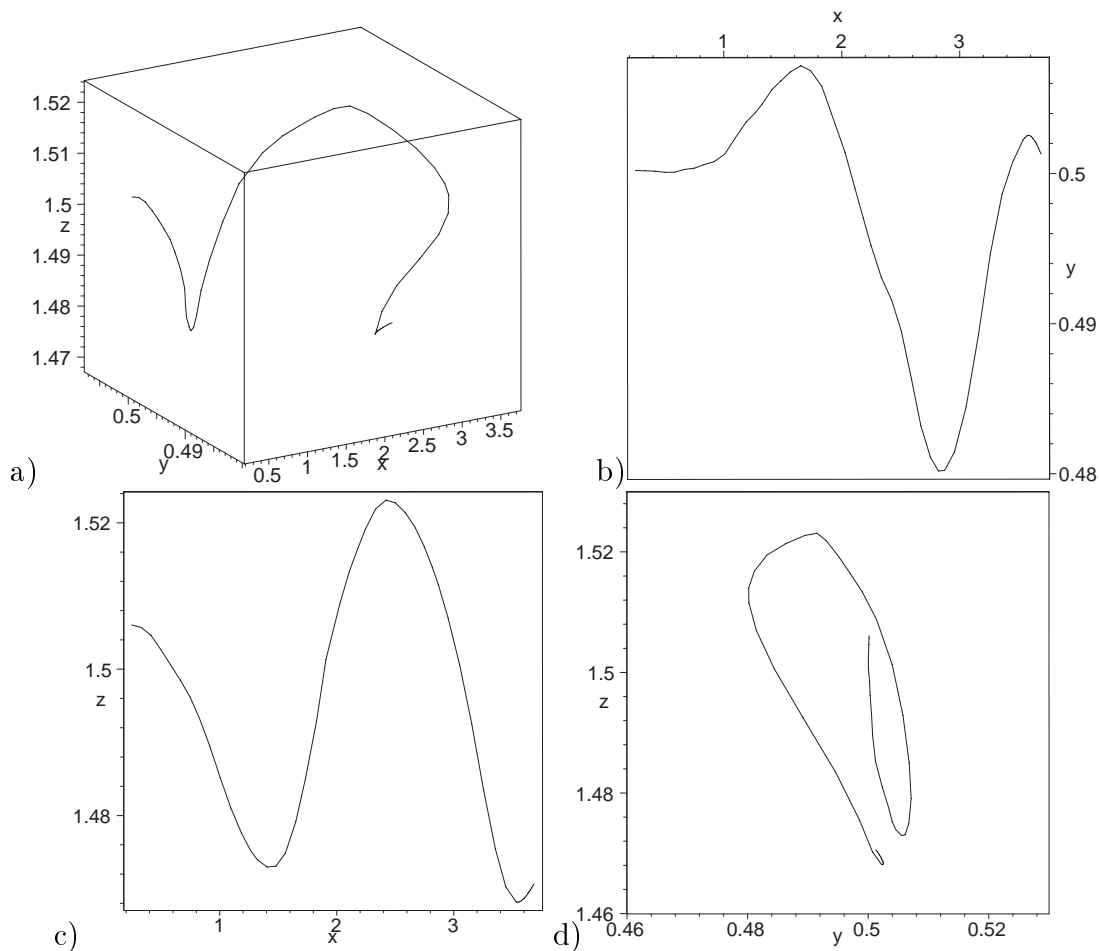


Abbildung 6.14: Fall 1BLd: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) Trajektorie des Blasen-schwerpunkt dreidimensional und b) bis d) Projektionen

In den Abbildungen 6.15 und 6.16 a) und b) sind analog zu den Abbildungen 6.3 und 6.4 a) und b) aus Abschnitt 6.2 sowohl ein lokales momentanes Profil der Geschwindigkeitskomponente in Aufstiegsrichtung als auch der Mittelwert für die Geschwindigkeit u_x der flüssigen Phase und die rms-Werte für gasförmige und flüssige Phase eingezeichnet.

Das lokale Profil ist so gewählt, daß es durch den Mittelpunkt der Blase verläuft. Im Vergleich zu Abbildung 6.3 für die stationär aufsteigende Blase aus Abschnitt 6.2 fällt auf, daß der Verlauf bei der taumelnden Blase nicht mehr so glatt und gleichförmig ist. Innerhalb der Gasphase gibt es Fluktuationen und an der Phasengrenzfläche verläuft in diesem Profil eine Gegenströmung.

Der Mittelwert der Geschwindigkeit u_x für die flüssigen Phase in Abbildung 6.16 a) ist durch eine Mittelung von 53 Zeitpunkten gewonnen worden. Der Verlauf der Kurve ist nicht mehr so symmetrisch wie in Abbildung 6.4 a), es bildet sich ein Plateau aus. Die Werte für $\overline{u_x}|_1$ sind in Abbildung 6.16 a) geringfügig höher als in Abbildung 6.4 a). Da die Blase nicht geradlinig aufsteigt und eine verzerrte Schraubenbahn beschreibt, sind die rms-Werte der Gasphase, welche durch Kreise in Abbildung 6.16 b) gekennzeichnet sind, räumlich weiter verteilt als bei der Blase aus Abschnitt 6.2. Beide Kurven für flüssige (mit

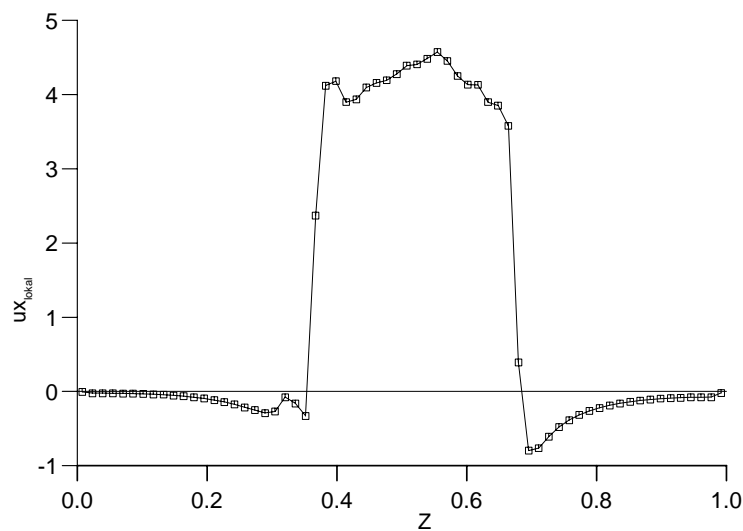


Abbildung 6.15: Fall 1BLd: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $E_{oBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; lokales Profil von u_x an $x = 0,21$, $y = 0,32$ und $t = 1,41$

Quadraten gekennzeichnet) und gasförmige Phase sind verbreitert gegenüber Abbildung 6.4 b). Die rms-Werte der flüssigen Phase in Abbildung 6.16 sind geringfügig höher im Vergleich zu Abbildung 6.4 b).

Abbildung 6.17 zeigt die Rückwirkung der turbulenten Strömung auf die Blase. Es ist die Unterseite der aufsteigenden Blase zu zwei festen Zeitpunkten dargestellt. Die Oberfläche ist unsymmetrisch und unregelmäßig. Zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Simulation ändert sich die Form, da kein stationärer Zustand erreicht wird.

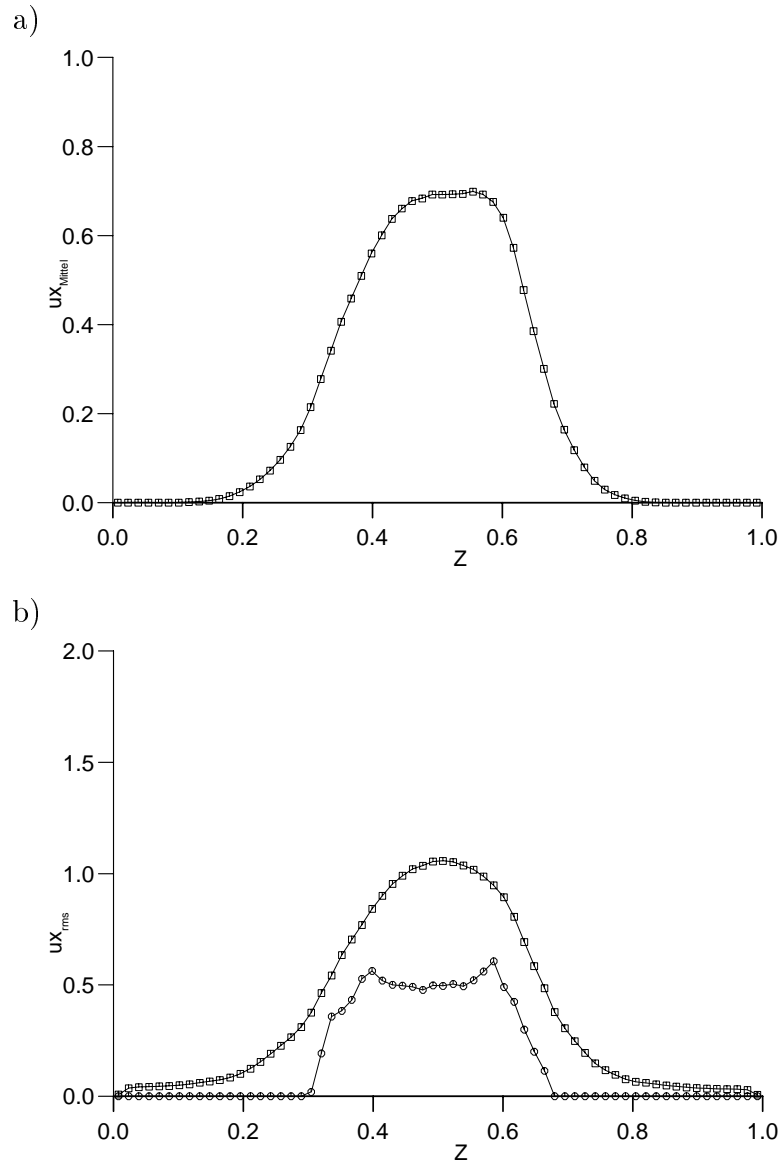


Abbildung 6.16: Fall 1BLd: $\frac{d_{Bl}}{l_{ref}} = 0,25$, $Eo_{Bl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$; a) $\overline{u_x}|_1$: Mittelwert der Geschwindigkeit u_x der flüssigen Phase, gemittelt über 53 Zeitpunkte von $t = 0,80$ bis $t = 1,79$; b) rms-Werte flüssige Phase (\square) und Gasphase (\circ), gemittelt wie unter a)

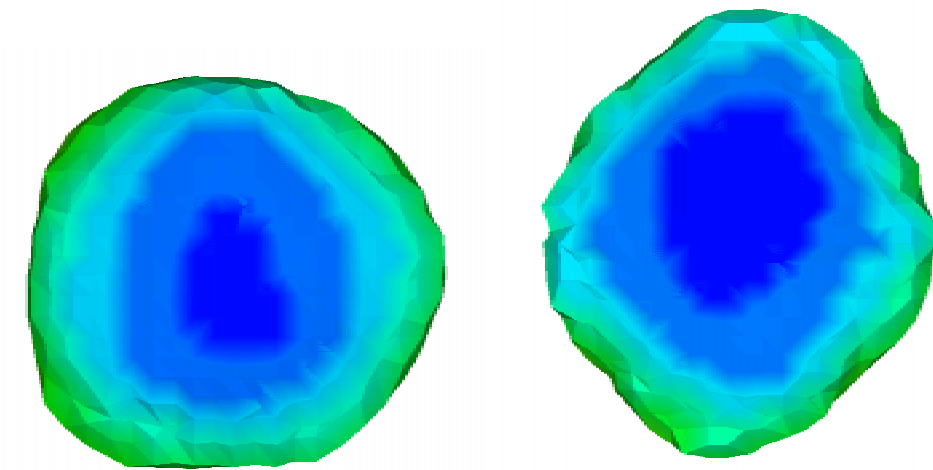


Abbildung 6.17: Unterseite der Blase $E_{O_{Bl}} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -9,60$ (Fall 1BLd), zwei unterschiedliche Zeitpunkte

6.6 Fünf aufsteigende Blasen

In diesem Abschnitt wird die Simulation von fünf aufsteigenden Blasen (Bezeichnung der Simulation: 5BL) mit den Kennzahlen

$$E_{oBl} = 3,07 \quad (6.24)$$

$$\log M_{Bl} = -5,51 \quad (6.25)$$

dargestellt. Zu Anfang der Simulation wurden fünf kugelförmige Blasen vorgegeben, deren Verteilung im Rechengebiet aus Abbildung 6.18 entnommen werden kann. Im Anfangszustand ist das Geschwindigkeitsfeld vollständig in Ruhe. Der Gasgehalt im Rechengebiet beträgt ca. 4%. Durch die Auftriebskraft werden die Blasen beschleunigt und nehmen unter der Dynamik von Aufstiegs-, Oberflächenspannungs-, Trägheits- und Reibungskräften eine stabile, ellipsenförmige Oberfläche ein. Eine Projektion in Aufsicht des Rechengebietes zum Anfangszustand ist in Abbildung 6.20 a) zu sehen. Es sind die fünf kugelförmigen Blasen in ihrer Anordnung dargestellt. Drei Blasen überlappen sich in dieser Projektion, um eine gegenseitige Beeinflussung durch die Nachläufe der Blasen zu erzwingen.

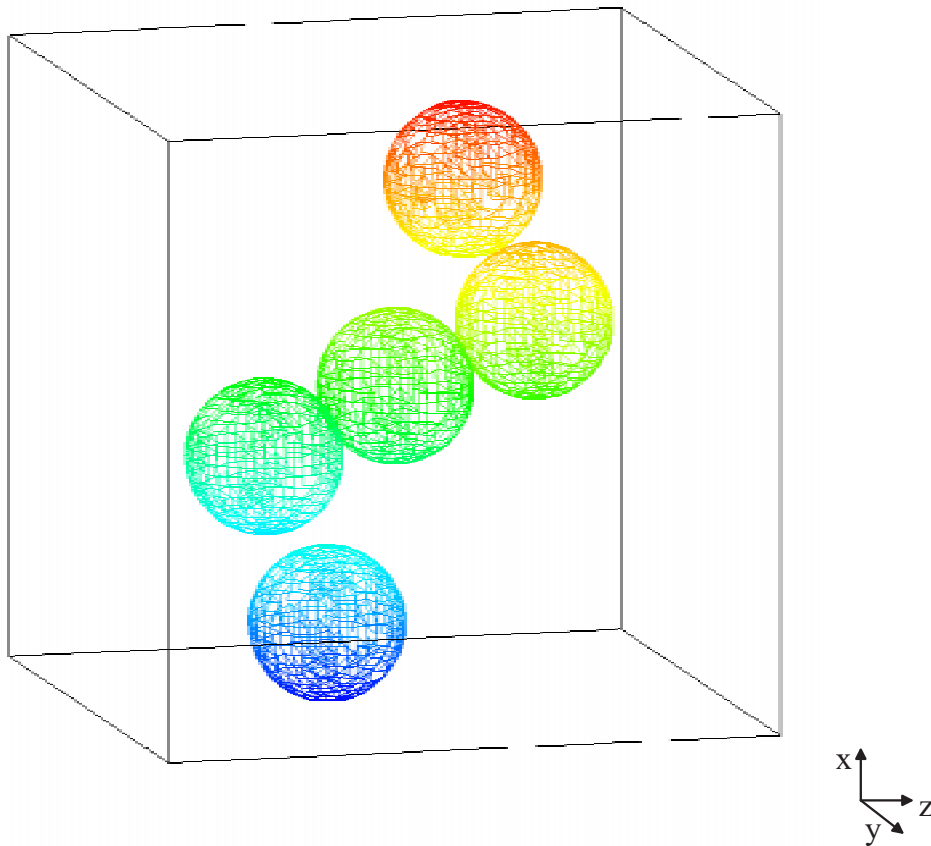


Abbildung 6.18: Fünf aufsteigende Blasen: $E_{oBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 0$

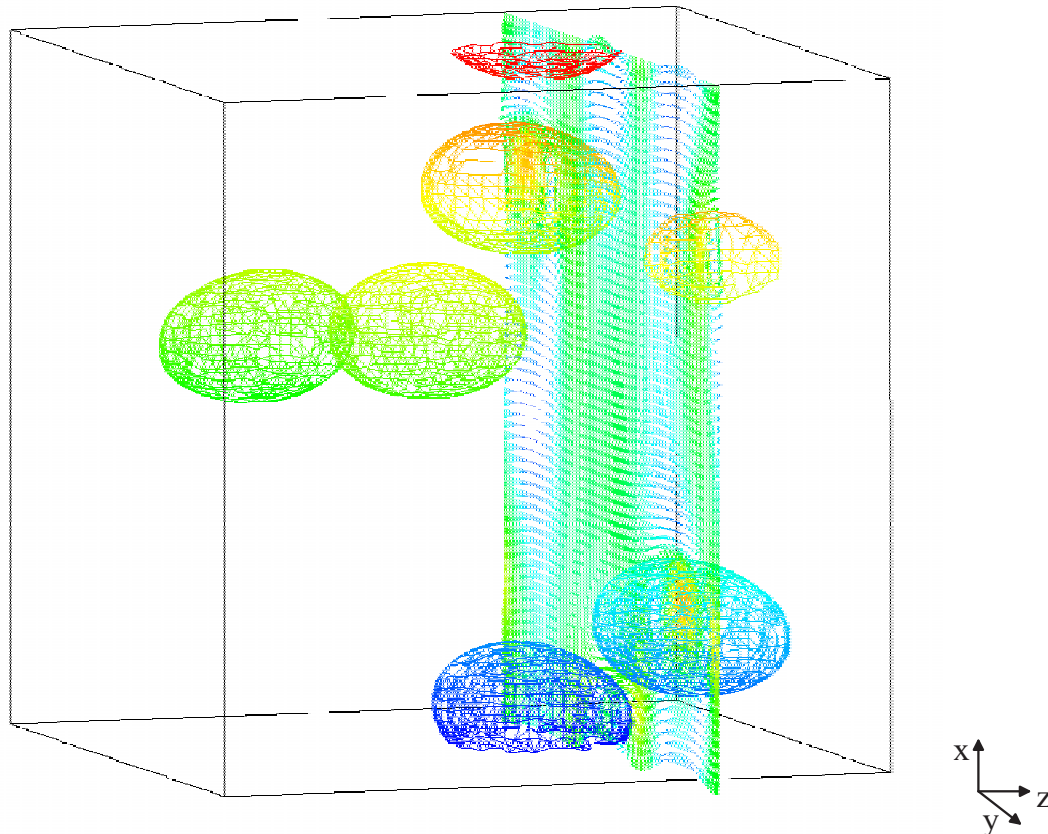


Abbildung 6.19: Fünf aufsteigende Blasen mit Geschwindigkeitsfeld in Schnittebene $z = 0,7$; $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 2,29$

Abbildung 6.19 zeigt das Rechengebiet mit den fünf Blasen. Zusätzlich zur Phasengrenzfläche ist ein Schnitt durch das Feld der Geschwindigkeitsvektoren eingezeichnet, wobei wiederum die mittlere Aufstiegsgeschwindigkeit von den Geschwindigkeiten abgezogen worden ist. In Aufstiegsrichtung liegen periodische Randbedingungen vor, was aus der zerteilten Blase unten (unten: blau, oben: rot) ersichtlich wird. Rechts und links befinden sich die festen Wände. In der Richtung vorne und hinten liegen ebenso periodische Randbedingungen vor. Dies ist an der in Aufstiegsrichtung vollständigen obersten Blase zu sehen, von der sich ein kleiner Teil vorne befindet.

Im Aufstiegsverhalten sind zwei Trends zu beobachten. Am Anfang der Simulation weichen sich die Blasen gegenseitig aus. Die Überdeckung der Nachläufe wird aufgelöst. Dieser Effekt wurde ebenso in anderen Arbeiten beobachtet, vgl. hierzu Krishna und van Baten [48]. Zum anderen wirkt aufgrund der induzierten Strömung in der flüssigen Phase auf die Blasen die sogenannte Lift-Kraft. Dies führt dazu, daß die Blasen sich in Richtung der Wände bewegen, was aus Abbildung 6.20 b) ersehen werden kann. Dort ist wie in der Abbildung a) die Projektion des Rechengebietes in Aufsicht abgebildet. Die festen Wände befinden sich rechts und links, oben und unten liegen periodische Randbedingungen vor.

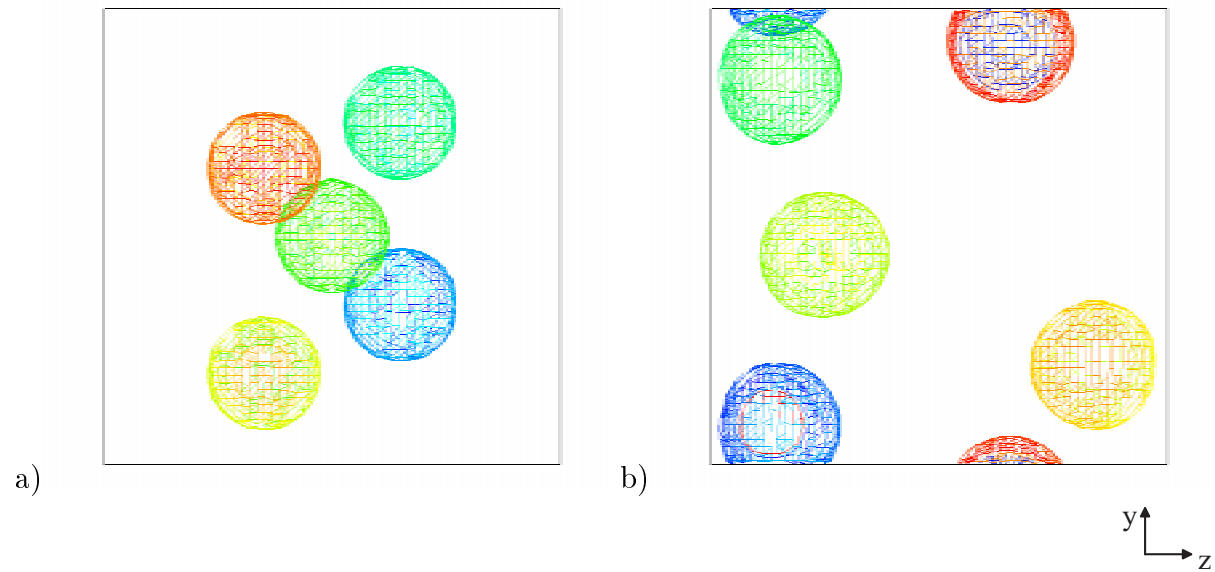


Abbildung 6.20: Fünf aufsteigende Blasen: $E_{OBl} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; a) $t = 0$ und b) $t = 2,29$; Aufsicht

Die Farbgebung der Blasen ist der Aufstiegsordinate zugeordnet, deshalb entsprechen sich in den beiden Abbildung 6.20 Blasen gleicher Farbe nicht. Alle Blasen sind im Laufe der Simulation in Richtung Wand gewandert. Beim Erreichen der wandnächsten Masche von der Gasphase wird die Simulation abgebrochen, in Abbildung 6.20 b) ist dieser Endzustand dargestellt. Die Blasen erscheinen in Abbildung b) größer als in Abbildung a), da sich eine ellipsenförmige Oberfläche eingestellt hat und somit die Projektionen größer als bei den Kugeln des Anfangszustandes sind.

An der Wand bildet sich eine Scherschicht aus. Diese beeinflusst die Form der Blase, was sich in Abbildung 6.20 b) andeutet. Die Blasen sind in der Projektion keine Kreise mehr. Deutlicher wird dieses Verhalten in Abbildung 6.21. Es ist eine seitliche Projektion des Rechengebietes mit den sich darin befindenden Blasen zu sehen. Aufgrund der festen Wände mit Haftbedingung wird der Teil der Blase, der der Wand zugewandt ist, abgebremst. Der zur Wand abgewandte Teil der Blase erfährt diese Abbremsung nicht. Daher kommt es zu einer Verformung der Blase.

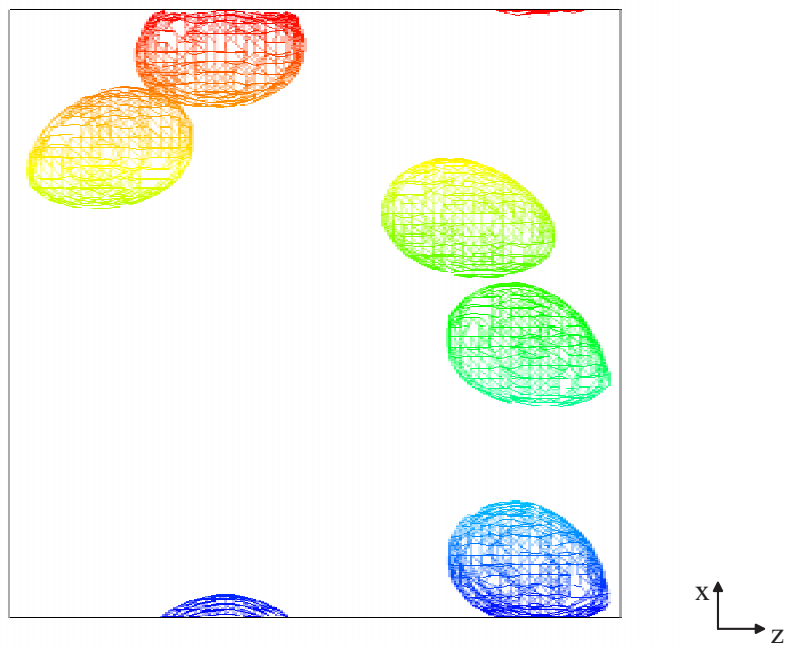


Abbildung 6.21: Fünf aufsteigende Blasen: $E_{O_{Bl}} = 3,07$ und $\log M_{Bl} = -5,51$; $t = 2,29$; Seitenansicht

Kapitel 7

Schlußfolgerungen und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines dreidimensionalen Algorithmus zur numerischen Simulation von Einzelblasen und Schwärmen von Blasen. Dabei wurde in dieser Arbeit, ausgehend von Anforderungen an das Verfahren als Ergebnis von Literaturstudien, die Volume-of-Fluid-Methode zugrunde gelegt. Diese führt eine in der Literatur postulierte Transportgleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase ein, die nicht mit einem Differenzenschema gelöst wird, sondern basierend auf einer geometrischen Rekonstruktion der Phasengrenzfläche. Ausgehend von den physikalischen Erhaltungsgleichungen für jede Phase wurde ein System aus Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung für das Gemisch hergeleitet. In dieser Formulierung ergibt sich die Volumenfraktionsgleichung natürlicherweise aus der Kontinuitätsgleichung der flüssigen Phase. In Bereichen der Strömung, in denen nur eine Phase vorliegt, reduziert sich das Gleichungssystem auf die von einphasigen, inkompressiblen Strömungen her bekannte Form. In Maschen, in denen beide Phasen vorliegen, ergeben sich Schließungsterme, die von der lokalen, momentanen Phasenrelativgeschwindigkeit abhängig sind. Bisher wurden diese Terme in der Literatur nicht betrachtet. Es wurde ein einfaches Modell zur Modellierung dieser Schließungsterme vorgestellt.

Ein neuer, dreidimensionaler Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmus (EPIRA) wurde entwickelt, der erstmals ebene Phasengrenzflächen stets exakt rekonstruiert. EPIRA wurde mit verschiedenen Testproblemen überprüft, mit denen gezeigt wurde, daß 10 bis 12 Maschen pro Raumrichtung zur Auflösung einer Blase ausreichen.

Für die Diskretisierung der physikalischen Erhaltungsgleichungen wurden hochauflösende Methoden angewendet, um auch starke Dichtegradienten auflösen zu können. Dabei wurden die konvektiven Terme mit einem W-ENO-Verfahren diskretisiert, das auch diskontinuierliche Größen mit gleichbleibend hoher Ordnung abbildet. Als Zeitintegrationsverfahren wurde ein TVD-Runge-Kutta-Verfahren angewendet. Zur Druckberechnung wurde ein Projektionsverfahren eingesetzt, wodurch eine Poissongleichung gelöst werden muß. Hierfür wurde ein iterativer Löser mit Konjugiertem-Gradienten-Verfahren verwendet. Damit wurden in dieser Arbeit erstmals hochauflösende numerische Verfahren mit einem Volume-of-Fluid-Algorithmus kombiniert.

Das mathematische und numerische Konzept wurde im Rechenprogramm TURBIT realisiert. Dabei konnte auf verschiedene Elemente wie z.B. Verwaltung der Datenstruktur oder graphische Ausgabemöglichkeiten zurückgegriffen werden. Es ergaben sich aber

auch Einschränkungen durch TURBIT wie die Begrenzung des Rechengebietes in einer Koordinatenrichtung durch Wände. Das neue Rechenprogramm wurde TURBIT-VoF genannt.

Das neue numerische Verfahren wurde mit verschiedenen Phasengrenzflächenproblemen verifiziert. Dies waren die durch viskose Reibungskräfte gedämpften Kapillarwellen und Schwerewellen sowie die Rayleigh-Taylor-Instabilität. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen wurden entweder mit analytischen Lösungen oder mit Arbeiten aus der Literatur verglichen, wobei sehr gute Übereinstimmungen erzielt wurden.

Das neue numerische Verfahren wurde für die Simulation von aufsteigenden Blasen mit unterschiedlichen Stoffwertekombinationen von Blase und umgebendem Fluid eingesetzt. Die sich in den Simulationen einstellenden Blasenformen waren ellipsen- und kappenförmig. Die anhand der dimensionslosen Kennzahlen klassifizierten Blasen zeigen das experimentell zu erwartende Verhalten bezüglich Form, Aufstiegsgeschwindigkeit und Nachlauf. Es wurde demonstriert, daß das numerische Verfahren ein Dichteverhältnis der Zweiphasenströmung von 1000 zuläßt. Durch Anwendung des numerischen Verfahrens im Kennzahlbereich des Systems Luftblasen in Wasser wurde die Leistungsfähigkeit von TURBIT-VoF an nicht formbeständigen, oszillierenden Blasen mit stark zeitabhängiger Dynamik der Phasengrenzfläche gezeigt. Es ergeben sich gekrümmte Aufstiegsbahnen mit turbulentem Nachlauf. Die Einsetzbarkeit des numerischen Verfahrens für Blasenschwärme wurde mit der Simulation von fünf aufsteigenden Blasen demonstriert.

Somit wurde mit TURBIT-VoF ein sehr leistungsstarkes Rechenprogramm zur numerischen Simulation von Einzelblasen und Schwärmen bestehend aus wenigen Blasen geschaffen.

Weiterführende Aspekte im Zusammenhang mit dieser Arbeit können folgende Themenschwerpunkte betreffen. Bisherige und weitere Simulationen für Einzelblasen und Blasenschwärme können als Datenbasis für weiterführende Analysen dienen. Die Ergebnisse dieser Analysen können in die Entwicklung von Feinstrukturmodellen für mögliche Grobstruktursimulationen eingehen. Ferner können die Analysen als Grundlage einer verbesserten Modellbildung für die statistischen Methoden in praktischen Anwendungen dienen. Die Fragmentierung und Koaleszenz von Blasen kann mit TURBIT-VoF untersucht werden. Dafür müssen Modifikationen am Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmus EPIRA vorgenommen werden, da dieser bisher für eine geschlossene Oberfläche konzipiert ist. In dieser Arbeit wurde eine isotherme Zweiphasenströmung betrachtet, zukünftig soll auch Wärmeübergang sowie Kondensation und Verdampfung an der Phasengrenzfläche in die numerische Simulation aufgenommen werden.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Aberle, W. Cherdron, G. Grötzbach, V. Heinzl, P. Philipp, H. Sauter, W. Sengpiel, M. Simon und I. Tiseanu. Experimentelle Untersuchungen von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen. In *Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998*, Kapitel 32.22.02 II., S. 507–516. FZKA 6300, 1998.
- [2] N.A. Adams und K. Shariff. A high-resolution hybrid compact-ENO scheme for shock-turbulence interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 127:27–51, 1996.
- [3] N. Ashgriz und J.Y. Poo. FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 93:449–468, 1991.
- [4] G.R. Baker, D.I. Meiron und S.A. Orszag. Vortex simulations of the Rayleigh-Taylor instability. *Physics of Fluids*, 23:1485–1490, 1980.
- [5] D. Bhaga und M.E. Weber. Bubbles in viscous liquids: Shapes, wakes and velocities. *Journal of Fluid Mechanics*, 105:61–85, 1981.
- [6] R.B. Bird, W.E. Stewart und E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, New York, 1960.
- [7] G. Birkhoff. Taylor instability and laminar mixing. Bericht LA-1862, Los Alamos Scientific Laboratory, 1954.
- [8] A. Blahak und H. Städtke. Modelling of transport of interfacial area concentration in two-phase flow systems. In *European Two-Phase Flow Group Meeting*, Grenoble, 1996.
- [9] J.P. Boris. New directions in computational fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 21:345–385, 1989.
- [10] M.E. Brachet, D.I. Meiron, S.A. Orszag, B.G. Nickel, R.H. Morf und U. Frisch. Small-scale structure of the Taylor-Green vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 130:411–452, 1983.
- [11] J.U. Brackbill, D.B. Kothe und C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100:335–354, 1992.

- [12] C. Brücker. Bubble interaction in swarms: A study of the wake structures with 3-d scanning particle image velocimetry (3-d SPIV). In *Third International Conference on Multiphase Flow, ICMF '98*, Lyon, France, 1998.
- [13] C. Brücker. Structure and dynamics of the wake of bubbles and its relevance for bubble interaction. *Physics of Fluids*, 11:1781–1796, 1999.
- [14] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Dover Publications, Inc., New York, 1981.
- [15] L. Chen, S.V. Garimella, J.A. Reizes und E. Leonardi. Motion of interacting gas bubbles in a viscous liquid including wall effects and evaporation. *Numerical Heat Transfer, Part A*, S. 629–654, 1997.
- [16] L. Chen, S.V. Garimella, J.A. Reizes und E. Leonardi. The development of a bubble rising in a viscous liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, 387:61–96, 1999.
- [17] W. Cherdron. Persönliche Mitteilung, 1999.
- [18] W. Cherdron, G. Grötzbach, M. Samstag, W. Sengpiel, M. Simon und I. Tiseanu. Experimental investigation of air/water bubbly flow in vertical pipes. In *Third International Conference on Multiphase Flow, ICMF '98*, Lyon, France, 1998.
- [19] I.L. Chern, J. Glimm, O. McBryan, B. Plohr und S. Yaniv. Front tracking for gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 62:83–110, 1986.
- [20] A.J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22:745–762, 1968.
- [21] R. Clift, J.R. Grace und M.E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, New York, 1978.
- [22] L. Collatz. *Numerische Behandlung von Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, Berlin, 1955.
- [23] S. Douady, Y. Couder und M.E. Brachet. Direct observation of the intermittency of intense vorticity filaments in turbulence. *Physical Review Letters*, 67:983–986, 1991.
- [24] D.A. Drew. Analytical modeling of multiphase flows. In R.T. Lahey Jr., Ed., *Boiling Heat Transfer*, S. 31–84. Elsevier, Amsterdam, 1992.
- [25] D.A. Drew und S.L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*, Vol. 135 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, New York, 1999.
- [26] P.C. Duineveld. The rise velocity and shape of bubbles in pure water at high Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 292:325–332, 1995.
- [27] H.W. Emmons, C.T. Chang und B.C. Watson. Taylor instability of finite surface waves. *Journal of Fluid Mechanics*, 7(2):177–193, 1959.

- [28] J.H. Ferziger und M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.
- [29] R. Gatignol. Asymptotic modelling of fluid-fluid interfaces. In A. Steinchen, Ed., *Dynamics of multiphase flows across interfaces*, S. 14–27. Springer, Heidelberg, 1996.
- [30] J. Glimm, J.W. Grove, X.L. Li und D.C. Tan. Robust computational algorithms for dynamic interface tracking in three dimensions. Bericht LA-UR-99-1780, Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [31] W.G. Gray und P.C.Y. Lee. On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 3:333–340, 1977.
- [32] G. Grötzbach. *Direkte numerische Simulation turbulenter Geschwindigkeits-, Druck- und Temperaturfelder bei Kanalströmungen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), KfK 2426, 1977.
- [33] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli und S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, 152:423–456, 1999.
- [34] F.H. Harlow und J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [35] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49:357–393, 1983.
- [36] A. Harten, B. Engquist, S. Osher und S.R. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics*, 71:231–303, 1987.
- [37] X. He, S. Chen und R. Zhang. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability. *Journal of Computational Physics*, 152:642–663, 1999.
- [38] X. He, R. Zhang, S. Chen und G.D. Doolen. On the three-dimensional Rayleigh-Taylor instability. *Physics of Fluids*, 11:1143–1152, 1999.
- [39] J.O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, New York, 1975.
- [40] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Vol. 1+2. John Wiley and Sons, Chichester, 1995.
- [41] C.W. Hirt und B.D. Nichols. Volume of fluid (VoF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39:201–225, 1981.
- [42] C.W. Hirt, B.D. Nichols und N.C. Romero. SOLA: A numerical solution algorithm for transient fluid flows. Bericht LA-5852, Los Alamos Scientific Laboratory, 1975.

- [43] R. Holtbecker. *Untersuchung physikalischer und numerischer Modelle für inhomogene Zweiphasenströmungen*. VDI Verlag, Düsseldorf, 1996.
- [44] P.G. Huang, G.N. Coleman und P. Bradshaw. Compressible turbulent channel flows: DNS results and modelling. *Journal of Fluid Mechanics*, 305:185–218, 1995.
- [45] M. Ishii. *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, Paris, 1975.
- [46] G.-S. Jiang und C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 126:202–228, 1996.
- [47] D.B. Kothe, R.C. Mjolsness und M.D. Torrey. RIPPLE: A computer program for incompressible flows with free surfaces. Bericht LA-12007-MS, Los Alamos National Laboratory, 1994.
- [48] R. Krishna und J.M. Van Baten. Rise characteristics of gas bubbles in a 2d rectangular column: VoF simulations vs experiments. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 26:965–974, 1999.
- [49] B. LaFaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zalesak und G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, 113:134–147, 1994.
- [50] R.T. Lahey und D.A. Drew. The three-dimensional time and volume averaged conservation equations of two-phase flow. *Advances in Nuclear Science and Technology*, 20:1–69, 1988.
- [51] S.K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103:16–42, 1992.
- [52] X.-D. Liu, S. Osher und T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, 115:200–212, 1994.
- [53] K. Lunde und R.J. Perkins. Shape oscillations of rising bubbles. *Applied Scientific Research*, 58:387–408, 1998.
- [54] F. Mashayek und N. Ashgriz. Advection of axisymmetric interfaces by the volume-of-fluid method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20:1337–1361, 1995.
- [55] T. Maxworthy, C. Gnann, M. Kürten und F. Durst. Experiments on the rise of air bubbles in clean viscous liquids. *Journal of Fluid Mechanics*, 321:421–441, 1996.
- [56] J.F. McKibben und C.K. Aidun. Extension of the volume-of-fluid method for analysis of free surface viscous flow in an ideal gas. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 21:1153–1170, 1995.
- [57] M. Meier, G. Yadigaroglu und B. Smith. A novel technique for including surface tension in PLIC-VOF methods. *Journal of Computational Physics*, preprint, 1999.

- [58] S.M. Mitran. Studies on the dynamics of dilute bubbly flow. Bericht FZKA 6357, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999.
- [59] D.W. Moore. The boundary layer on a spherical gas bubble. *Journal of Fluid Mechanics*, 16:161–176, 1963.
- [60] D.W. Moore. The velocity of rise of distorted gas bubbles in a liquid of small viscosity. *Journal of Fluid Mechanics*, 23:749–766, 1965.
- [61] U. Müller. Zweiphasenströmung mit Wärmeübergang. Bericht, Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik (IATF), Forschungszentrum Karlsruhe, Wintersemester 1995/96.
- [62] B.D. Nichols, C.W. Hirt und R.S. Hotchkiss. SOLA-VOF: A solution algorithm for transient fluid flow with multiple free boundaries. Bericht LA-8355, Los Alamos Scientific Laboratory, 1980.
- [63] W.F. Noh und P. Woodward. SLIC (simple line interface calculation). In A. van de Vooren und P.J. Zandbergen, Ed., *Proceedings of the 5th Int. Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, S. 330–340, Springer, New York, 1976.
- [64] S. Osher und J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79:12–49, 1988.
- [65] S.V. Patankar und D.B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972.
- [66] S. Popinet und S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6):775–793, 1999.
- [67] L. Prandtl, K. Oswatitsch und K. Wieghardt. *Führer durch die Strömungslehre*. Vieweg, Braunschweig, 1990.
- [68] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Physics of Fluids*, 24(7):1217–1223, 1981.
- [69] J.D. Ramshaw und J.A. Trapp. A numerical technique for low-speed homogeneous two-phase flow with sharp interfaces. *Journal of Computational Physics*, 21:438–453, 1976.
- [70] F. Raymond und J.-M. Rosant. A numerical and experimental study of the terminal rise velocity and shape of bubbles in viscous liquids. *Chemical Engineering Science*, 55:943–955, 2000.
- [71] W.J. Rider und D.B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, 141:112–152, 1998.

- [72] J.C. Rotta. *Turbulente Strömungen*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1972.
- [73] M. Rudman. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24:671–691, 1997.
- [74] W. Sabisch. Bericht, unveröffentlicht, Juli 1997.
- [75] P.G. Saffman. On the rise of small air bubbles in water. *Journal of Fluid Mechanics*, 1:249–275, 1956.
- [76] M. Samstag. *Experimentelle Untersuchungen von Transportphänomenen in vertikalen turbulenten Luft-Wasser Blasenströmungen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), FZKA 5662, 1996.
- [77] Y. Sato, M. Sadatomi und K. Sekoguchi. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow-I, theory. *International Journal of Multiphase Flow*, 7:167–177, 1981.
- [78] H. Sauter und V. Heinzl. Persönliche Mitteilung, 1999.
- [79] R. Scardovelli und S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 31:567–603, 1999.
- [80] H. Schatz. Programmierung eines Lösungsverfahrens zur Beschreibung eines Fluids mit bewegtem Rand. Bericht, Universität Karlsruhe (TH), 1995.
- [81] D. Schneider. *Numerische Simulation von Plasma-Zusammenbrüchen für die Berechnung der Strukturbelastung in Tokamak-Fusionsreaktoren*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), FZKA 5867, 1997.
- [82] U. Schumann. *Ein Verfahren zur direkten numerischen Simulation turbulenter Strömungen in Platten- und Ringspaltkanälen und über seine Anwendung zur Untersuchung von Turbulenzmodellen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), KfK 1854, 1973.
- [83] C.-W. Shu und S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77:439–471, 1988.
- [84] C.-W. Shu und S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *Journal of Computational Physics*, 83:32–78, 1989.
- [85] M. Sussman und P. Smereka. Axisymmetric free boundary problems. *Journal of Fluid Mechanics*, 341:269–294, 1997.
- [86] M. Sussman, P. Smereka und S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114:146–159, 1994.
- [87] A. Tomiyama, A. Sou, H. Minagawa und T. Sakaguchi. Numerical analysis of a single bubble by VoF method. *JSME International Journal Series B*, 36(1):51–56, 1993.

- [88] A. Tomiyama, A. Sou, I. Zun, N. Kanami und T. Sakaguchi. Effects of Eötvös number and dimensionless liquid volumetric flux on lateral motion of a bubble in a laminar duct flow. In *Proceedings of The 2nd Int. Conference on Multiphase Flow*, S. PD1-11 – PD1-18, Kyoto, 1995.
- [89] A. Tomiyama, A. Sou, I. Zun und T. Sakaguchi. Three-dimensional detailed numerical simulation of bubbly upflow in a vertical square duct. In *Proceedings of the German-Japanese Symposium on Multi-Phase Flow*, KfK 5389, S. 487–498, 1994.
- [90] A. Tomiyama, I. Zun, A. Sou und T. Sakaguchi. Numerical analysis of bubble motion with the VoF method. *Nuclear Engineering and Design*, 141:69–82, 1993.
- [91] M.D. Torrey, L.D. Cloutman, R.C. Mjolsness und C.W. Hirt. NASA-VoF2D: A computer program for incompressible flows with free surfaces. Bericht LA-10612-MS, Los Alamos National Laboratory, 1985.
- [92] G. Tryggvason. Numerical simulations of the Rayleigh-Taylor instability. *Journal of Computational Physics*, 75:253–282, 1988.
- [93] O. Ubbink und R.I. Issa. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *Journal of Computational Physics*, 153:26–50, 1999.
- [94] S.O. Unverdi und G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37, 1992.
- [95] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, 23:276–299, 1977.
- [96] L. Van Wijngaarden. On pseudo turbulence. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 10:449–458, 1998.
- [97] G.B. Wallis. *One-Dimensional Two-Phase Flow*. McGraw-Hill, New York, 1969.
- [98] R. Weiss, H. Häfner und W. Schönauer. LINSOL (LINear SOLver) description and user's guide for the parallelized version. Draft version 0.96, Interner Bericht Nr. 61/95, Universität Karlsruhe, 1995.
- [99] R.M. Wellek, A.K. Agrawal und A.H.P. Skelland. Shape of liquid drops moving in liquid media. *AIChE Journal*, 12:854–862, 1966.
- [100] J.R. Welty, C.E. Wicks und R.E. Wilson. *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*. John Wiley and Sons, New York, 1984.
- [101] M. Wörner. *Direkte Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), KfK 5228, 1994.
- [102] D.L. Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In K.W. Morton und M.J. Baines, Ed., *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, S. 273–285. Academic Press, 1982.

- [103] S.T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of Computational Physics*, 31:335–362, 1979.
- [104] J. Zierep. *Grundzüge der Strömungslehre*. Springer, Berlin, 1993.

Anhang A

Bestimmung der Referenz-Kennzahlen

Die Referenz-Kennzahlen und benötigten Parameter für die Simulation einer Blase (Re_{ref} , We_{ref} , $\frac{\rho_2}{\rho_1}$, l_{ref} , u_{ref}) können aus den Blasen-Kennzahlen berechnet werden. Aus Experimenten sind meist Blasen-Reynolds-, Blasen-Eötvös- und Blasen-Morton-Zahl (Re_{Bl} , Eo_{Bl} , M_{Bl}) bekannt (vgl. [5]):

$$Re_{Bl} = \frac{\rho_1 U_T d_{Bl}}{\mu_1} \quad (\text{A.1})$$

$$Eo_{Bl} = \frac{g (d_{Bl})^2 (\rho_1 - \rho_2)}{\sigma} \quad (\text{A.2})$$

$$M_{Bl} = g (\mu_1)^4 \frac{\rho_1 - \rho_2}{(\rho_1)^2 \sigma^3} . \quad (\text{A.3})$$

Daraus ergibt sich als Blasen-Weber-Zahl (We_{Bl})

$$We_{Bl} = \frac{\rho_1 (U_T)^2 d_{Bl}}{\sigma} = (Re_{Bl})^2 \sqrt{\frac{M_{Bl}}{Eo_{Bl}}} . \quad (\text{A.4})$$

Unter Zuhilfenahme der Definitionen für Referenz-Reynolds- und Referenz-Weber-Zahl (Re_{ref} , We_{ref})

$$Re_{ref} = \frac{\rho_1 u_{ref} l_{ref}}{\mu_1} \quad (\text{A.5})$$

$$We_{ref} = \frac{\rho_1 (u_{ref})^2 l_{ref}}{\sigma} \quad (\text{A.6})$$

können folgende Beziehungen zur Umrechnung benutzt werden:

$$Re_{ref} = Re_{Bl} \frac{u_{ref} l_{ref}}{U_T d_{Bl}} \quad (\text{A.7})$$

$$We_{ref} = \left(\frac{Re_{ref}}{Re_{Bl}} \right)^2 We_{Bl} \frac{d_{Bl}}{l_{ref}} \quad (\text{A.8})$$

$$\left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \frac{l_{ref}}{(u_{ref})^2} = \frac{Eo_{Bl}}{We_{ref}} \frac{1}{g} \left(\frac{l_{ref}}{d_{Bl}} \right)^2 . \quad (\text{A.9})$$

Damit ist das Problem überbestimmt, Dichteverhältnis, Referenz-Länge und Referenz-Geschwindigkeit müssen nur Gleichung (A.9) genügen. In der Praxis wird das Dichteverhältnis $\frac{\rho_2}{\rho_1}$ vorgegeben. Somit müssen noch Referenz-Länge und Referenz-Geschwindigkeit entsprechend gewählt werden.

In Tabelle A.10 sind die Simulationsparameter für die in Kapitel 6 durchgeführten Anwendungsrechnungen von Blasen wiedergegeben.

Bez.	Re_{ref}	We_{ref}	Φ_ρ	Φ_μ	l_{ref}/m	$u_{ref}/\frac{m}{s}$
1BLa	100	2,5	0,5	1	4	1
1BLaa	200	5	0,5	1	8	1
1BLab	100	2,5	0,5	1	4	1
1BLac	100	2,5	0,5	1	4	1
1BLb	13,2	45,8	0,5	1	4	0,48
1BLac	999,6	2,5	0,5	1	0,26	1
1BLad	1050	2,5	0,5	1	4	1
5BL	100	2,5	0,5	1	4	1

(A.10)

Anhang B

Die Methode FLAIR

In Abschnitt 3.1 wurde der EPIRA-Algorithmus, ein neuer Volume-of-Fluid-Rekonstruktions- und Advektionsalgorithmus, vorgestellt. Dieser berechnet für jede Grenzflächenzelle einen zellzentrierten Normalenvektor $\vec{n}_{i,j,k}$, der aus der Kombination von Tangentenvektoren an den Seitenflächen der Zelle bestimmt wird. In den meisten Fällen können diese Tangentenvektoren über exakte Integrationsformeln bestimmt werden. Wenn dies nicht möglich ist, wird die lokale Tangentensteigung mittels des FLAIR-Algorithmus (vgl. [3]) abgeschätzt, der in diesem Kapitel beschrieben wird.

B.1 Grundidee

FLAIR steht für Flux Line-Segment Model for Advection and Interface Reconstruction, die 1991 von Ashgriz und Poo [3] vorgestellt wurde. Es stellt für eine zweidimensionale Fluidverteilung eine Erweiterung der Volume-of-Fluid-Methode (VoF-Methode) nach Hirt und Nichols dar (vgl. dazu [62], [41], und [91]). Dabei wurde der Advektionsmechanismus der ursprünglichen VoF-Methode (Donor-Acceptor) verbessert. Ziel ist es, aus dem vorhandenen Volumenfraktionenfeld f die Grenzfläche zu rekonstruieren und dann die Flüsse über die Ränder der Zellen zu berechnen. Dazu wird in zwei benachbarte Zellen eine Gerade so eingeschrieben, daß sie die Einzelzellen entsprechend der Volumenfraktionen durchläuft. Steigung und y -Achsenabschnitt der Geraden seien nur von den Füllfraktionen der beiden Zellen abhängig.

Die Flüsse werden getrennt nach den Koordinatenrichtungen berechnet, wobei nach jeder Koordinatenrichtung das Volumenfraktionenfeld aktualisiert wird. Dadurch kommt es numerisch zur Schaffung zusätzlicher Quellen und Senken in der Kontinuitätsgleichung, die durch ein Ausgleichsverfahren minimiert werden können (vgl. dazu [73]).

B.2 Der Algorithmus

Im folgenden werden zwei Zellen betrachtet, wobei die linke mit der Volumenfraktion f_l und die rechte mit f_r bedeckt sei (siehe hierzu Abbildung B.1). Es sind für jede Zelle drei unterschiedliche Fluidkonfigurationen möglich ($i = l$ oder $i = r$):

- $f_i = 0$

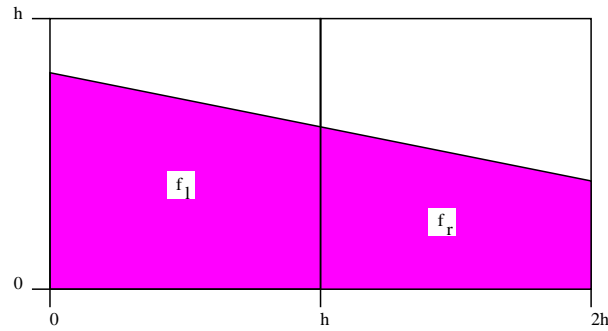


Abbildung B.1: Bezeichnung zweier benachbarter Zellen mit den Volumenfraktionen f_l und f_r , schraffierte Fläche sei von Fluid bedeckt

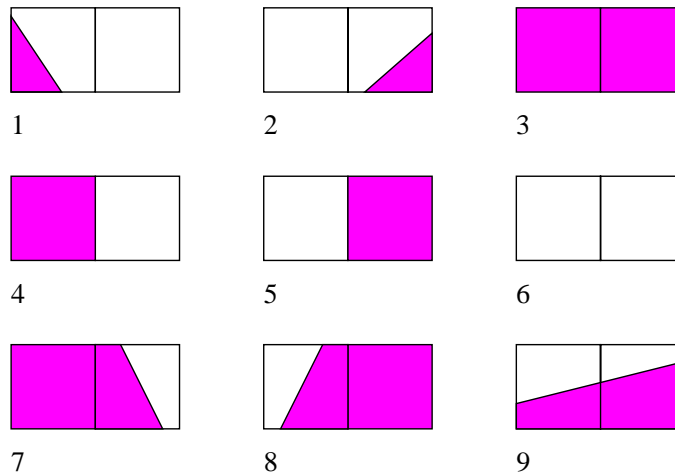


Abbildung B.2: Neun Fallunterscheidungen bei zwei benachbarten Zellen und den Fällen a) $f = 0$, b) $f = 1$ und c) $0 < f < 1$

- $f_i = 1$
- $0 < f_i < 1$.

Aus der Kombination der drei möglichen Fluidkonfigurationen pro Zelle ergeben sich bei zwei Zellen insgesamt neun Fälle, auf die jedes Zellenpaar zurückgeführt werden kann. Diese neun Fälle sind in Abbildung B.2 dargestellt. Fall 1 bedeutet also, daß die linke Zelle teils gefüllt ist ($0 < f_l < 1$) und die rechte leer ($f_r = 0$) usw.

Als erstes soll hier der Fall 9 behandelt werden, da an ihm das Verfahren am einsichtigsten darstellbar ist und viele der anderen Fälle auf ihn zurückführbar sind.

B.2.1 Neun mögliche Fluidkonfigurationen: Fall 9

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit soll gelten:

$$f_l \geq f_r . \quad (\text{B.1})$$

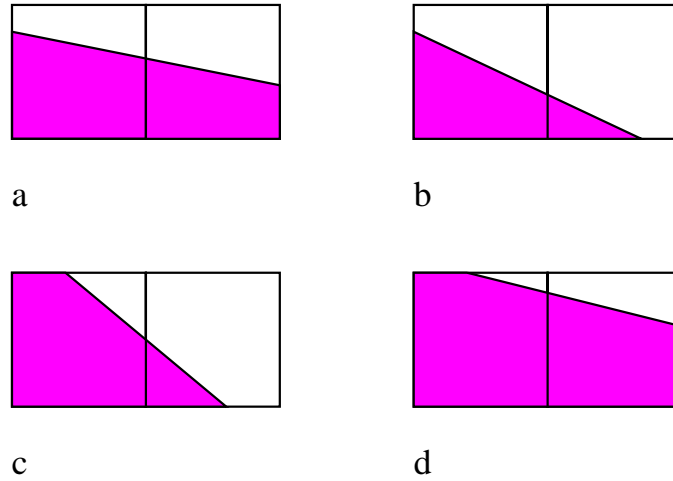


Abbildung B.3: Vier Unterfallunterscheidungen zu Fall 9 ($0 < f_l < 1$ und $0 < f_r < 1$)

Damit ergeben sich vier mögliche Strukturen der Phasengrenzfläche, die sich durch unterschiedliche Schnittpunkte der Geraden mit den Seitenflächen der Zelle unterscheiden (siehe dazu Abbildung B.3).

Unterfall a:

Die Phasengrenzfläche werde durch eine Gerade $y : [0, 2h] \rightarrow \mathbb{R}$ repräsentiert, wobei (x, y) so gewählt wird, daß der Ursprung dieses Koordinatensystems mit der linken unteren Ecke der linken Zelle zusammenfällt:

$$y(x) = \beta x + b, \quad (\text{B.2})$$

wobei die Steigung β und der y -Achsenabschnitt b eindeutig aus den Füllfraktionen f_l und f_r bestimmt werden muß. Dazu wird die Fläche unter der Geraden mittels Integration bestimmt:

$$\int_{x_u}^{x_o} (\beta x + b) dx = \frac{1}{2} \beta (x_o^2 - x_u^2) + b (x_o - x_u). \quad (\text{B.3})$$

Somit ergibt sich bei Zellen der Größe $h \times h$ und den Integrationsgrenzen gemäß Abbildung B.1:

$$\frac{1}{2} \beta h^2 + bh = f_l h^2 \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{3}{2} \beta h^2 + bh = f_r h^2 \quad (\text{B.5})$$

Nach β und b aufgelöst:

$$\beta = f_r - f_l \quad (\text{B.6})$$

und

$$b^* = \frac{b}{h} = \frac{1}{2}(3f_l - f_r) . \quad (\text{B.7})$$

Damit ist die Phasengrenzfläche rekonstruiert, und es muß noch der Fluß über die Zellgrenze berechnet werden. Dazu wird die Courant-Zahl C definiert als:

$$C := \frac{|u| \Delta t}{h} , \quad (\text{B.8})$$

mit

u Geschwindigkeit an der Phasengrenzfläche
 Δt Zeitschrittweite
 h Zellweite .

Die Courant-Zahl C gibt das Verhältnis von pro Zeitschrittweite zurückgelegtem Transport der flüssigen Phase zur Zellweite an. Dieses Verhältnis sollte zur Sicherstellung der Stabilität des numerischen Verfahrens stets kleiner eins gewählt werden. Damit ergibt sich für den Fluß in positiver Achsenrichtung ($u \geq 0$):

$$\begin{aligned} \delta f^+ h^2 &= \int_{h-Ch}^h (\beta x + b) dx = \frac{1}{2} \beta (2C - C^2) h^2 + bCh \\ &= h^2 C \left(\beta + b^* - \frac{1}{2} \beta C \right) . \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Bei negativer Geschwindigkeit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \delta f^- h^2 &= \int_h^{h+Ch} (\beta x + b) dx = \frac{1}{2} \beta (2C + C^2) h^2 + bCh \\ &= h^2 C \left(\beta + b^* + \frac{1}{2} \beta C \right) , \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

also insgesamt:

$$\delta f = C \left(\beta + b^* - \text{sign}(u) \frac{1}{2} \beta C \right) . \quad (\text{B.11})$$

Unterfall b:

Die Bezeichnungen seien so gewählt, wie in Abbildung B.4 eingeführt. Der Schnittpunkt der Geraden mit der x -Achse liege bei x_r .

Die Parameter der Geraden können wieder wie folgt berechnet werden ($x_r^* = \frac{x_r}{h}$):

$$\frac{1}{2} \beta + b^* = f_l \quad (\text{B.12})$$

und

$$\frac{1}{2} \beta ((x_r^*)^2 - 1) + b^* (x_r^* - 1) = f_r . \quad (\text{B.13})$$

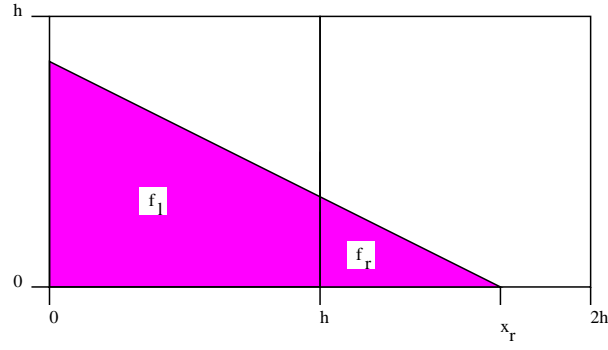


Abbildung B.4: Bezeichnung zweier benachbarter Zellen mit den Volumenfraktionen f_l und f_r , Unterfall 9b

Daraus wird mit $\beta x_r^* + b^* = 0$ (Schnittpunkt der Geraden mit der x -Achse):

$$\beta = 2(f_l - b^*) \quad (\text{B.14})$$

und

$$b^* = 2 \left[(f_l + f_r) - \sqrt{(f_r + f_l) f_r} \right] . \quad (\text{B.15})$$

Die Flüsse ergeben sich zu

$$\delta f^+ = C \left(\beta + b^* - \frac{1}{2} \beta C \right) \quad (\text{B.16})$$

$$\delta f^- = \begin{cases} C(\beta + b^* + \frac{1}{2} \beta C) & \text{für } x_r^* - 1 \geq C \\ f_r & \text{für } x_r^* - 1 < C . \end{cases} \quad (\text{B.17})$$

Unterfall d:

Der Schnittpunkt der Geraden mit dem oberen Zellrand sei x_l , der normierte Parameter laute $x_l^* = \frac{x_l}{h}$. Relativ ähnlich zu Unterfall b ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$x_l^* + \frac{1}{2} \beta (1 - (x_l^*)^2) + b^* (1 - x_l^*) = f_l \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{3}{2} \beta + b^* = f_r . \quad (\text{B.19})$$

Mit $\beta x_l^* + b^* = 1$ (Schnittpunkt der Geraden mit der Parallelen $y = h$) wird daraus:

$$\beta = \frac{2}{3} (f_r - b^*) \quad (\text{B.20})$$

und

$$b^* = 3 \left[3 - \frac{2}{3}f_r - 2f_l - 2\sqrt{(f_l - 1)(f_l + f_r - 2)} \right]. \quad (\text{B.21})$$

Die Flüsse sind dann:

$$\delta f^+ = \begin{cases} C(\beta + b^* - \frac{1}{2}\beta C) & \text{für } 1 - x_l^* \geq C \\ f_l + C - 1 & \text{für } 1 - x_l^* < C \end{cases} \quad (\text{B.22})$$

$$\delta f^- = C \left(\beta + b^* + \frac{1}{2}\beta C \right). \quad (\text{B.23})$$

Unterfall c:

Der linke Schnittpunkt der eingeschriebenen Geraden mit der Geraden $y = h$ liege bei x_l , der rechte Schnittpunkt mit der x -Achse bei x_r . Dann ergibt sich folgendes System an Gleichungen:

$$x_l^* + \frac{1}{2}\beta(1 - (x_l^*)^2) + b^*(1 - x_l^*) = f_l \quad (\text{B.24})$$

$$\frac{1}{2}\beta((x_r^*)^2 - 1) + b^*(x_r^* - 1) = f_r \quad (\text{B.25})$$

und die Bestimmungsgleichungen für die Schnittpunkte $\beta x_l^* + b^* = 1$ und $\beta x_r^* + b^* = 0$. Es ergibt sich:

$$x_r^* = 1 + 2f_r + 2\sqrt{f_r(1 - f_l)} \quad (\text{B.26})$$

$$x_l^* = 2f_l - 1 - 2\sqrt{f_r(1 - f_l)} \quad (\text{B.27})$$

$$\beta = -2\frac{f_r}{(x_r^* - 1)^2} = \frac{1}{x_l^* - x_r^*} \quad (\text{B.28})$$

$$b^* = -x_r^*\beta. \quad (\text{B.29})$$

Die Flüsse sind dann:

$$\delta f^+ = \begin{cases} C(\beta + b^* - \frac{1}{2}\beta C) & \text{für } 1 - x_l^* \geq C \\ f_l + C - 1 & \text{für } 1 - x_l^* < C \end{cases} \quad (\text{B.30})$$

und

$$\delta f^- = \begin{cases} C(\beta + b^* + \frac{1}{2}\beta C) & \text{für } x_r^* - 1 \geq C \\ f_r & \text{für } x_r^* - 1 < C. \end{cases} \quad (\text{B.31})$$

Somit können mittels der obigen Formeln die Flüsse zwischen dem benachbartem Zellenpaar berechnet werden. Es muß jetzt noch ein Entscheidungskriterium gefunden werden, welcher der vier Unterfälle vorliegt.

Unterfallerkennung für Fall 9:

Für die vier Unterfälle in Abbildung B.3 gelten die folgenden Randbedingungen:

Fall	linke Randbedingung	rechte Randbedingung
9a	$0 \leq y(0) \leq h$	$0 \leq y(2h) \leq h$
9b	$0 \leq y(0) \leq h$	$y(2h) \leq 0$
9c	$h \leq y(0)$	$y(2h) \leq 0$
9d	$h \leq y(0)$	$0 \leq y(2h) \leq h$

oder mit den entsprechenden Werten:

Fall	linke Randbedingung
9a	$0 \leq \frac{h}{2} (3f_l - f_r) \leq h$
9b	$0 \leq 2h \left[(f_l + f_r) - \sqrt{(f_r + f_l) f_r} \right] \leq h$
9c	$h \leq f_r h \frac{1+2f_r+2\sqrt{f_r(1-f_l)}}{2(f_r+\sqrt{f_r(1-f_l)})^2}$
9d	$h \leq h \left(9 - 2f_r - 6f_l - 6\sqrt{(f_l - 1)(f_l + f_r - 2)} \right)$

Fall	rechte Randbedingung
9a	$0 \leq \frac{h}{2} (3f_r - f_l) \leq h$
9b	$-2h \left(f_l + 3f_r - 3\sqrt{(f_r + f_l) f_r} \right) \leq 0$
9c	$f_r h \frac{-1+2f_r+2\sqrt{f_r(1-f_l)}}{2(f_r+\sqrt{f_r(1-f_l)})^2} \leq 0$
9d	$0 \leq 2h \left(-\frac{3}{2} + f_r + f_l + \sqrt{(f_l - 1)(f_l + f_r - 2)} \right) \leq h$

Daraus ergeben sich als Trennkurven, die in Abbildung B.5 graphisch dargestellt sind:

$$f_l = \frac{f_r - \left(\frac{1}{2} - f_r\right)^2}{f_r} \quad \text{für } \frac{1}{4} \leq f_r \leq \frac{1}{2} \quad (\text{B.32})$$

$$f_l = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}f_r + \frac{1}{2}\sqrt{(f_r)^2 + 2f_r} \quad \text{für } 0 \leq f_r \leq \frac{1}{4} \quad (\text{B.33})$$

$$f_l = 3f_r \quad \text{für } 0 \leq f_r \leq \frac{1}{4} \quad (\text{B.34})$$

$$f_l = \frac{1}{3}(f_r + 2) \quad \text{für } \frac{1}{4} \leq f_r \leq 1. \quad (\text{B.35})$$

Mittels Abbildung B.5 oder der obigen Gleichungen lassen sich aus den Volumenfraktionen f_l und f_r die Fälle a bis d unterscheiden und dadurch die richtigen Formeln für die Flüsse auswählen.

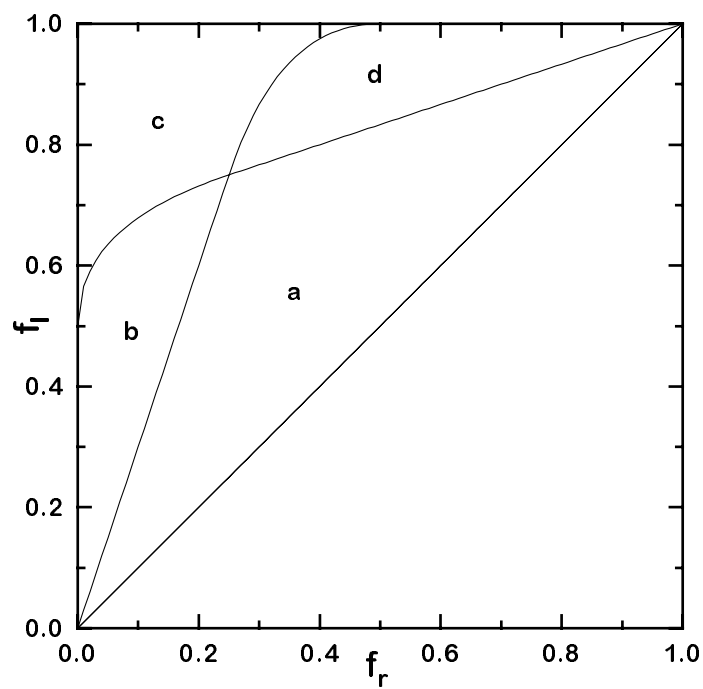


Abbildung B.5: Typerkennungsdiagramm für den Fall 9, eingezeichnete Gerade $f_l = f_r$ wegen $f_l \geq f_r$ (vgl. Gleichung (B.1))

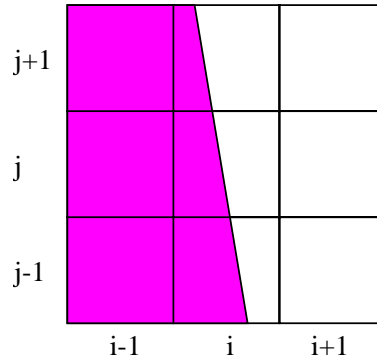


Abbildung B.6: Phasengrenzflächenkonfiguration für die Fälle 1,2,7,8

B.2.2 Neun mögliche Fluidkonfigurationen: Die restlichen acht Fälle

Relativ einfach sind die Fälle 3, 4, 5 und 6 zu bestimmen, da hier nur ganz gefüllte oder leere Zellen vorkommen. Als Flüsse ergeben sich:

$$\delta f = \begin{cases} C & \text{für } f_l = 1 \text{ und } u > 0 \\ C & \text{für } f_r = 1 \text{ und } u < 0 \\ 0 & \text{sonst .} \end{cases} \quad (\text{B.36})$$

Bleiben noch die Fälle 1, 2, 7 und 8 übrig. Hier gestaltet sich die Berechnung der Steigungen schwieriger, da ein mit Fluid gefüllter Nachbar fehlt. Exemplarisch ist das Problem in Abbildung B.6 verdeutlicht. Zelle (i, j) hat in horizontaler Richtung keinen Nachbarn, mit dessen Hilfe die Steigung bestimmt werden könnte. Deshalb werden die Nachbarn ober- und unterhalb zu Hilfe genommen. Mittels der Formeln für den Fall 9 werden die Steigungen zwischen (i, j) und $(i, j + 1)$ sowie zwischen (i, j) und $(i, j - 1)$ berechnet. Für Zelle (i, j) wird der reziproke Mittelwert als Steigung genommen.

Ist die Steigung berechnet, so ergeben sich vier mögliche Fluidkonfigurationen (siehe Abbildung B.7), die wiederum einzeln berechnet und mittels eines Typerkennungsdiagramms unterschieden werden müssen.

Fall 1 I:

Der obere Schnittpunkt der Geraden mit der Zellwand sei x_o . Dann ergibt sich:

$$fh^2 = x_o h + \frac{1}{2}\beta (h^2 - (x_o)^2) + b(h - x_o) . \quad (\text{B.37})$$

Aufgelöst nach b^* :

$$b^* = \frac{f - x_o^*}{1 - x_o^*} - \frac{1}{2}\beta (1 + x_o^*) . \quad (\text{B.38})$$

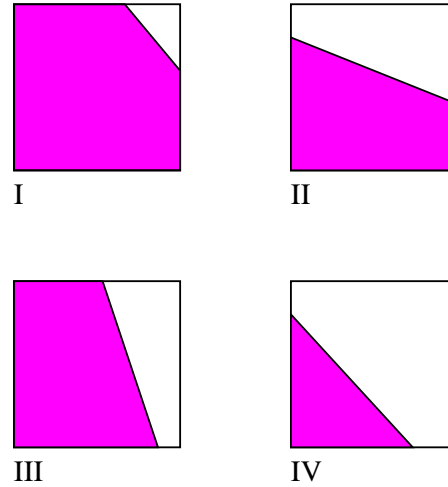


Abbildung B.7: Anordnung der Geraden innerhalb einer Zelle, Fall 1

Mit $\beta x_o^* + b^* = 1$ wird daraus:

$$x_o^* = 1 - \sqrt{2 \frac{f-1}{\beta}} \quad (\text{B.39})$$

$$b^* = 1 - \beta \left(1 - \sqrt{2 \frac{f-1}{\beta}} \right) . \quad (\text{B.40})$$

Der Fluß ist damit:

$$\delta f^+ = \begin{cases} C (\beta + b^* - \frac{1}{2}\beta C) & \text{für } 1 - x_o^* \geq C \\ f + C - 1 & \text{für } 1 - x_o^* < C . \end{cases} \quad (\text{B.41})$$

Fall 1 II:

Aus der Volumenfraktion f läßt sich mit

$$f = \frac{1}{2}\beta + b^* \quad (\text{B.42})$$

der Fluß bestimmen:

$$\delta f^+ = C \left(\beta + b^* - \frac{1}{2}\beta C \right) . \quad (\text{B.43})$$

Fall 1 III:

Der obere Schnittpunkt der Geraden mit dem Zellrand sei x_o^* , der untere x_u^* . Aus den Bestimmungsgleichungen für die Schnittpunkte

$$1 = \beta x_o^* + b^* \quad (\text{B.44})$$

$$0 = \beta x_u^* + b^* \tag{B.45}$$

und der Volumengleichung

$$f = x_o^* + \frac{1}{2}\beta ((x_u^*)^2 - (x_o^*)^2) + b^* (x_u^* - x_o^*) \tag{B.46}$$

lassen sich die Schnittpunkte berechnen zu ($b^* = \frac{1}{2} - \beta f$):

$$x_o^* = f + \frac{1}{2\beta} \tag{B.47}$$

$$x_u^* = f - \frac{1}{2\beta} . \tag{B.48}$$

Der Fluß über den Zellrand beträgt damit:

$$\delta f^+ = \begin{cases} 0 & \text{für } 1 - x_u^* \geq C \\ \frac{1}{2}\beta ((x_u^*)^2 - (1 - C)^2) + b^* (x_u^* + C - 1) & \text{für } x_o^* < 1 - C < x_u^* \\ f + C - 1 & \text{für } 1 - x_o^* < C . \end{cases} \tag{B.49}$$

Fall 1 IV:

Der untere Schnittpunkt der Geraden mit der x -Achse sei wiederum x_u mit $0 = \beta x_u^* + b^*$.
Desweiteren gilt:

$$f = \frac{1}{2}\beta (x_u^*)^2 + b^* x_u^* . \tag{B.50}$$

Damit ergibt sich:

$$b^* = \sqrt{-2f\beta} \tag{B.51}$$

$$x_u^* = \sqrt{\frac{-2f}{\beta}} . \tag{B.52}$$

Für den Fluß wird daraus:

$$\delta f^+ = \begin{cases} 0 & \text{für } 1 - x_u^* \geq C \\ \frac{1}{2}\beta ((x_u^*)^2 - (1 - C)^2) + b^* (x_u^* + C - 1) & \text{für } 1 - x_u^* < C . \end{cases} \tag{B.53}$$

Der Fall 2 ist analog zu Fall 1, nur mit negativer Geschwindigkeit u .

Für die Fallerkennung gilt folgende Tabelle:

Fall	linke Randbedingung	rechte Randbedingung
I	$-h\beta \left(1 + \sqrt{2\frac{f-1}{\beta}}\right) > h$	$h > -h\beta\sqrt{2\frac{f-1}{\beta}} > 0$
II	$h > h \left(f - \frac{1}{2}\beta\right) > 0$	$h > h \left(f + \frac{1}{2}\beta\right) > 0$
III	$h \left(\frac{1}{2} - \beta f\right) > h$	$0 > h \left(\frac{1}{2} - \beta f + \beta\right)$
IV	$h > h\sqrt{-2\beta f} > 0$	$0 > h \left(\beta + \sqrt{-2\beta f}\right)$

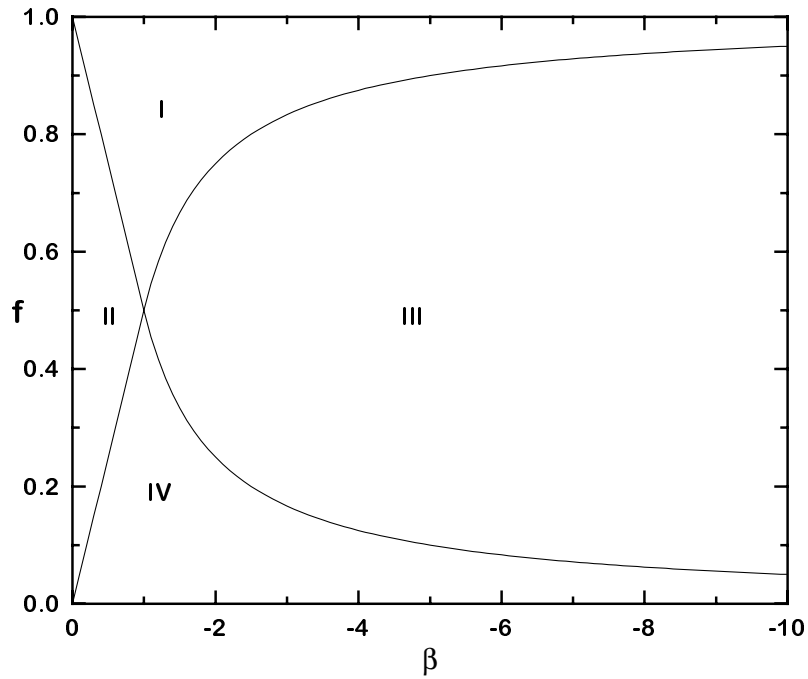


Abbildung B.8: Typerkennungsdiagramm für die restlichen Fälle

Als Trennlinien der einzelnen Fälle ergeben sich:

$$f = -\frac{1}{2\beta} \text{ für } \beta < -1 \quad (\text{B.54})$$

$$f = 1 + \frac{1}{2\beta} \text{ für } \beta < -1 \quad (\text{B.55})$$

$$f = -\frac{1}{2}\beta \text{ für } -1 \leq \beta < 0 \quad (\text{B.56})$$

$$f = 1 + \frac{1}{2}\beta \text{ für } -1 \leq \beta < 0 \text{ .} \quad (\text{B.57})$$

In Abbildung B.8 sind die Zusammenhänge graphisch dargestellt.

Anhang C

Dividierte Differenzen

Für die Diskretisierung der konvektiven Terme in der Navier-Stokes-Gleichung wird das Verfahren 'Weighted Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Schemes (WENO)' von Shu und Osher ([83],[84]) benutzt. Da dieses auf einer Flußinterpolation mittels dividierten Differenzen basiert, behandelt dieser Anhang die Theorie dieser Differenzen.

Es wird die grundlegende Idee der Newton-Interpolation erläutert, die auf eben diesen dividierten Differenzen beruht. Eine Funktion $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ läßt sich in den Stützstellen $x_i, i \in \mathbb{N}, i \in \{k, \dots, n\}$ durch das Polynom $p_{k,\dots,n}(x)$ folgendermaßen interpolieren:

$$p_{k,\dots,n}(x) = A_k + A_{k+1}(x - x_k) + A_{k+2}(x - x_k) \cdot (x - x_{k+1}) + \dots + A_n \prod_{i=k}^{n-1} (x - x_i) \quad (\text{C.1})$$

mit

$$A_i = f[x_k, \dots, x_i] . \quad (\text{C.2})$$

Die A_i sind die dividierten Differenzen, die folgendermaßen rekursiv definiert sind:

$$f[x_k] := f(x_k) \quad (\text{C.3})$$

$$f[x_k, \dots, x_n] := (f[x_{k+1}, \dots, x_n] - f[x_k, \dots, x_{n-1}]) / (x_n - x_k) . \quad (\text{C.4})$$

Die dividierten Differenzen können sehr effektiv über eine Tabelle berechnet werden:

x_k	$f(x_k)$		
		$f[x_k, x_{k+1}]$	
x_{k+1}	$f(x_{k+1})$		$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$
		$f[x_{k+1}, x_{k+2}]$	\dots
x_{k+2}	$f(x_{k+2})$		
\vdots	\vdots		
x_n	$f(x_n)$		

Für die Newton-Interpolation werden nur die oberen, eingerahmten Werte benötigt. Bei einer Erhöhung der Anzahl der Stützstellen können zusätzliche einfach zum Schema hinzugefügt werden.

Eine wichtige Eigenschaft der dividierten Differenzen ist, daß ein $\bar{x} \in [x_i, x_{i+n}]$ existiert mit ($f \in C^n$):

$$f[x_i, \dots, x_{i+n}] = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} f(\bar{x}) . \quad (\text{C.5})$$

Dies bedeutet, daß die dividierten Differenzen einer Funktion ein Maß für ihre Ableitungen sind.

Anhang D

W-ENO auf nicht-äquidistantem Gitter

Das in TURBIT-VoF implementierte *Weighted-ENO*-Verfahren beruht auf den Arbeiten von Liu et al. [52] und Jiang und Shu [46]. Es mußten aber die Gewichtungsfaktoren neu hergeleitet werden, da in TURBIT ein

- versetztes Gitter und
- in x_3 -Richtung ein nicht äquidistantes Maschennetz

verwendet wird. Dadurch ergeben sich neue Gewichte, in die zusätzlich die Maschenweiten $\Delta x_{i+1/2}, \Delta x_{i+3/2}, \dots$ eingehen (vgl. Abbildung D.1). Für ein äquidistantes Maschennetz entfällt diese Abhängigkeit, was in den Interpolationsformeln für x_1 - und x_2 -Richtung berücksichtigt wurde.

Das *Weighted-ENO*-Verfahren wird für die Berechnung der konvektiven Terme benötigt, d.h. folgende Terme werden damit ausgewertet:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} v_1 v_1, \frac{\partial}{\partial x_2} v_2 v_1, \frac{\partial}{\partial x_3} v_3 v_1, \frac{\partial}{\partial x_1} v_1 v_2, \dots$$

bzw. allgemein

$$\frac{\partial}{\partial x_l} v_l v_m .$$

Die Größen $v_l v_m$ werden wie in TURBIT üblich, durch zentrale Differenzen interpoliert, z.B.

$$v_1 v_2|_{i+1/2, j+1/2, k} = \frac{1}{4} \left(v_1|_{i+1/2, j, k} + v_1|_{i+1/2, j+1, k} \right) \left(v_2|_{i, j+1/2, k} + v_2|_{i+1, j+1/2, k} \right) .$$

Auf diese gemittelten Größen wird nun das *Weighted-ENO*-Verfahren angewendet.

D.1 Herleitung der Gewichtungsfaktoren für das W-ENO-Verfahren

Die Interpolationsformeln werden folgendermaßen hergeleitet: Φ sei die zu interpolierende Größe, welche auf den halben Maschenweiten definiert ist

$$\Phi_{i-5/2}, \Phi_{i-3/2}, \Phi_{i-1/2}, \Phi_{i+1/2}, \Phi_{i+3/2}, \Phi_{i+5/2} .$$

Folgende Ableitung soll berechnet werden:

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \Phi \right|_i \equiv \Phi_{x,i} .$$

Es werden, im Gegensatz zum *ENO*-Verfahren ([83],[84]), möglichst alle *stencils* für die Interpolation herangezogen. Durch die Verwendung aller *stencils* in glatten Bereichen kann dort eine höhere Interpolationsordnung im Vergleich zum *ENO*-Verfahren erzielt werden. Folgende *stencils* werden hier benötigt

Seite	Bezeichnung	Knotenpunkte, <i>stencils</i>
links " - "	$\Phi_{x,i}^{-,0}$	$x_{i-5/2}, x_{i-3/2}, x_{i-1/2}$
	$\Phi_{x,i}^{-,1}$	$x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}$
rechts " + "	$\Phi_{x,i}^{+,0}$	$x_{i+1/2}, x_{i+3/2}, x_{i+5/2}$
	$\Phi_{x,i}^{+,1}$	$x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}$

(vgl. Abbildung D.1). In glatten Bereichen erreicht die Interpolation dritte Ordnung, an Diskontinuitäten wird mit der zweiten Ordnung des zugrunde liegenden *ENO*-Verfahrens gerechnet.

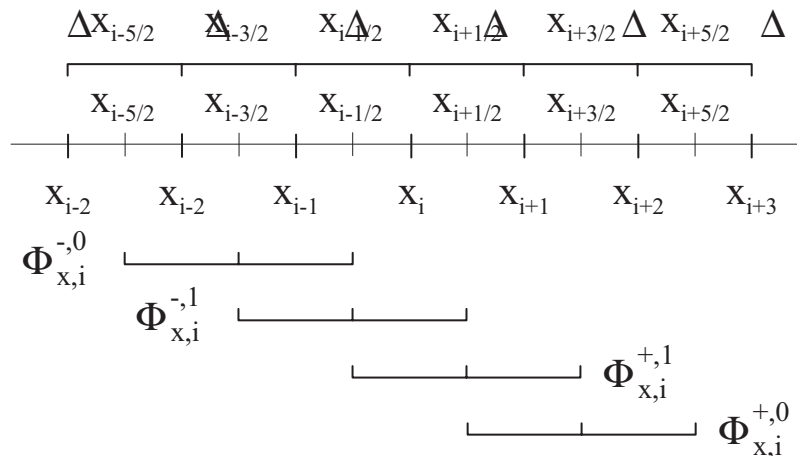


Abbildung D.1: Bezeichnungen: $\Phi_{x,i}^{-,0}, \Phi_{x,i}^{-,1}, \Phi_{x,i}^{+,0}, \Phi_{x,i}^{+,1}$ sind die vier *stencils* zur Berechnung der Ableitung von Φ an x_i

Die Herleitung der Interpolationsformeln werden an Hand der Interpolation von links ("–") erläutert. Zur Berechnung von $\Phi_{x,i}^{-,0}$ wird ein Gleichungssystem dritter Ordnung aufgestellt. $p(x)$ sei das interpolierende Polynom zweiten Grades mit $p(x) = ax^2 + bx + c$.

$$\begin{aligned} \Phi_{i-5/2} &= a \left(x_i - \Delta x_{i-1/2} - \Delta x_{i-3/2} - \frac{1}{2} \Delta x_{i-5/2} \right)^2 \\ &\quad + b \left(x_i - \Delta x_{i-1/2} - \Delta x_{i-3/2} - \frac{1}{2} \Delta x_{i-5/2} \right) + c \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

$$\Phi_{i-3/2} = a \left(x_i - \Delta x_{i-1/2} - \frac{1}{2} \Delta x_{i-3/2} \right)^2 + b \left(x_i - \Delta x_{i-1/2} - \frac{1}{2} \Delta x_{i-3/2} \right) + c \quad (\text{D.2})$$

$$\Phi_{i-1/2} = a \left(x_i - \frac{1}{2} \Delta x_{i-1/2} \right)^2 + b \left(x_i - \frac{1}{2} \Delta x_{i-1/2} \right) + c. \quad (\text{D.3})$$

Nach Lösen des Systems (D.1)-(D.3) kann aus $\frac{\partial}{\partial x} p = 2ax + b$

$$\Phi_{x,i}^{-,0} \doteq \left. \frac{\partial}{\partial x} p \right|_i$$

berechnet werden. Als Lösung ergibt sich

$$\Phi_{x,i}^{-,0} = 2 \left[\eta_{i-5/2}^{-,0} \cdot \Phi_{i-5/2} + \eta_{i-3/2}^{-,0} \cdot \Phi_{i-3/2} + \eta_{i-1/2}^{-,0} \cdot \Phi_{i-1/2} \right] / \eta^{-,0} \quad (\text{D.4})$$

$$\eta^{-,0} := (\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2})(\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-5/2})(\Delta x_{i-5/2} + 2\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2}) \quad (\text{D.5})$$

$$\eta_{i-5/2}^{-,0} := (\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2})(3\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i-3/2}) \quad (\text{D.6})$$

$$\eta_{i-3/2}^{-,0} := -(\Delta x_{i-5/2} + 2\Delta x_{i-3/2} + 3\Delta x_{i-1/2})(\Delta x_{i-5/2} + 2\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2}) \quad (\text{D.7})$$

$$\eta_{i-1/2}^{-,0} := (\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-5/2})(\Delta x_{i-5/2} + 4\Delta x_{i-1/2} + 3\Delta x_{i-3/2}). \quad (\text{D.8})$$

Analog erhält man

$$\Phi_{x,i}^{-,1} = -2 \left[\eta_{i-3/2}^{-,1} \cdot \Phi_{i-3/2} + \eta_{i-1/2}^{-,1} \cdot \Phi_{i-1/2} + \eta_{i+1/2}^{-,1} \cdot \Phi_{i+1/2} \right] / \eta^{-,1} \quad (\text{D.9})$$

$$\eta^{-,1} := (\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2})(2\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-3/2})(\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2}) \quad (\text{D.10})$$

$$\eta_{i-3/2}^{-,1} := -(\Delta x_{i-1/2} - \Delta x_{i+1/2})(\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2}) \quad (\text{D.11})$$

$$\eta_{i-1/2}^{-,1} := (2\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-3/2})(\Delta x_{i-3/2} + 2\Delta x_{i-1/2} - \Delta x_{i+1/2}) \quad (\text{D.12})$$

$$\eta_{i+1/2}^{-,1} := -(\Delta x_{i-3/2} + \Delta x_{i-1/2})(3\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i-3/2}) \quad (\text{D.13})$$

sowie

$$\Phi_{x,i}^{+,0} = -2 \left[\eta_{i+1/2}^{+,0} \cdot \Phi_{i+1/2} + \eta_{i+3/2}^{+,0} \cdot \Phi_{i+3/2} + \eta_{i+5/2}^{+,0} \cdot \Phi_{i+5/2} \right] / \eta^{+,0} \quad (\text{D.14})$$

$$\eta^{+,0} := (\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2})(\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+5/2})(2\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+5/2} + \Delta x_{i+1/2}) \quad (\text{D.15})$$

$$\eta_{i+1/2}^{+,0} := (\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+5/2})(3\Delta x_{i+3/2} + 4\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+5/2}) \quad (\text{D.16})$$

$$\eta_{i+3/2}^{+,0} := -(3\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+5/2} + 2\Delta x_{i+3/2})(2\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+5/2} + \Delta x_{i+1/2}) \quad (\text{D.17})$$

$$\eta_{i+5/2}^{+,0} := (\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2})(3\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2}) \quad (\text{D.18})$$

und

$$\Phi_{x,i}^{+,1} = 2 \left[\eta_{i-1/2}^{+,1} \cdot \Phi_{i-1/2} + \eta_{i+1/2}^{+,1} \cdot \Phi_{i+1/2} + \eta_{i+3/2}^{+,1} \cdot \Phi_{i+3/2} \right] / \eta^{+,1} \quad (\text{D.19})$$

$$\eta^{+,1} := (\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2})(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2})(\Delta x_{i-1/2} + 2\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2}) \quad (\text{D.20})$$

$$\eta_{i-1/2}^{+,1} := -(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2})(3\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2}) \quad (\text{D.21})$$

$$\eta_{i+1/2}^{+,1} := -(\Delta x_{i-1/2} + 2\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i+3/2})(-2\Delta x_{i+1/2} - \Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i-1/2}) \quad (\text{D.22})$$

$$\eta_{i+3/2}^{+,1} := (\Delta x_{i-1/2} - \Delta x_{i+1/2})(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}) . \quad (\text{D.23})$$

Entsprechend dem Vorgehen von Jiang und Shu [46] ergibt sich für die linke bzw. rechte Approximation:

$$\Phi_{x,i}^- = \Phi_{x,i}^{-,1} - \omega^- (\Phi_{x,i}^{-,1} - \Phi_{x,i}^{-,0}) \quad (\text{D.24})$$

$$\Phi_{x,i}^+ = \Phi_{x,i}^{+,1} - \omega^+ (\Phi_{x,i}^{+,1} - \Phi_{x,i}^{+,0}) . \quad (\text{D.25})$$

Für ω^- bzw. ω^+ kann gezeigt werden:

$$\omega^- = \frac{1}{1 + \kappa^- \cdot (r^-)^2} \quad (\text{D.26})$$

$$\omega^+ = \frac{1}{1 + \kappa^+ \cdot (r^+)^2} \quad (\text{D.27})$$

mit

$$\begin{aligned} \kappa^- = & -8 \left[(\Delta x_{i-1/2})^2 + 9\Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i-3/2} + 3\Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i-5/2} + 2(\Delta x_{i-3/2})^2 \right. \\ & \left. + \Delta x_{i-5/2}\Delta x_{i-3/2} \right] / \left[2(\Delta x_{i-1/2})^2 + \Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i-3/2} - 3\Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i+1/2} \right. \\ & \left. - \Delta x_{i-3/2}\Delta x_{i+1/2} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

$$\begin{aligned} \kappa^+ = & \left[8(\Delta x_{i+1/2})^2 + 9\Delta x_{i+3/2}\Delta x_{i+1/2} + 3\Delta x_{i+1/2}\Delta x_{i+5/2} + 2(\Delta x_{i+3/2})^2 \right. \\ & \left. + \Delta x_{i+3/2}\Delta x_{i+5/2} \right] / \left[3\Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}\Delta x_{i+3/2} - 2(\Delta x_{i+1/2})^2 \right. \\ & \left. - \Delta x_{i+3/2}\Delta x_{i+1/2} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

und

$$r^- = \frac{\epsilon + (\Phi_{i-5/2} - 2\Phi_{i-3/2} + \Phi_{i-1/2})^2}{\epsilon + (\Phi_{i-3/2} - 2\Phi_{i-1/2} + \Phi_{i+1/2})^2} H^- \quad (\text{D.30})$$

$$r^+ = \frac{\epsilon + (\Phi_{i+5/2} - 2\Phi_{i+3/2} + \Phi_{i+1/2})^2}{\epsilon + (\Phi_{i+3/2} - 2\Phi_{i+1/2} + \Phi_{i-1/2})^2} H^+ \quad (\text{D.31})$$

mit

$$H^- = H(\Phi_{i-5/2} - 2\Phi_{i-3/2} + \Phi_{i-1/2} - \text{FACTOR}) \cdot H(\Phi_{i-3/2} - 2\Phi_{i-1/2} + \Phi_{i+1/2} - \text{FACTOR}) \quad (\text{D.32})$$

$$H^+ = H(\Phi_{i+5/2} - 2\Phi_{i+3/2} + \Phi_{i+1/2} - \text{FACTOR}) \cdot H(\Phi_{i+3/2} - 2\Phi_{i+1/2} + \Phi_{i-1/2} - \text{FACTOR}) , \quad (\text{D.33})$$

wobei H die Heavyside Funktion ist und $\epsilon \approx 10^{-5}$ gewählt wurde. Dies bedeutet, daß die Auswahl eines speziellen *ENO stencils* nur dann geschieht, wenn die Gradienten eine bestimmte Stärke überschreiten, hier $\text{FACTOR} = 5$.

D.2 Spezialfälle

- glatte Gebiete

In glatten Gebieten gilt

$$r^- = r^+ \approx 1 . \quad (\text{D.34})$$

Dies bedeutet, daß das "optimale" Verfahren verwendet wird, also dritte Ordnung in den Interpolationen.

- äquidistant

Für

$$\Delta x_{i-5/2} = \Delta x_{i-3/2} = \Delta x_{i-1/2} = \Delta x_{i+1/2} = \Delta x_{i+3/2} = \Delta x_{i+5/2} = \Delta x \quad (\text{D.35})$$

gehen obige Formeln über in

$$\Phi_{x,i}^{-,0} = [\Phi_{i-5/2} - 3 \cdot \Phi_{i-3/2} + 2 \cdot \Phi_{i-1/2}] / \Delta x \quad (\text{D.36})$$

$$\Phi_{x,i}^{-,1} = [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}] / \Delta x \quad (\text{D.37})$$

$$\Phi_{x,i}^{+,0} = [-\Phi_{i+5/2} + 3 \cdot \Phi_{i+3/2} - 2 \cdot \Phi_{i+1/2}] / \Delta x \quad (\text{D.38})$$

$$\Phi_{x,i}^{+,1} = [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}] / \Delta x \quad (\text{D.39})$$

und

$$\kappa^- = 23 \quad (\text{D.40})$$

$$\kappa^+ = 23 . \quad (\text{D.41})$$

In glatten Gebieten ($r^- = r^+ \approx 1$) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Phi_{x,i}^- &= \frac{1}{\Delta x} [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}] \\
&\quad - \frac{1}{24} \frac{1}{\Delta x} [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2} - \Phi_{i-5/2} + 3 \cdot \Phi_{i-3/2} - 2 \cdot \Phi_{i-1/2}] \\
&= \frac{1}{24} \frac{1}{\Delta x} [23 \cdot \Phi_{i+1/2} - 21 \cdot \Phi_{i-1/2} - 3 \cdot \Phi_{i-3/2} + \Phi_{i-5/2}] \quad (D.42)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{x,i}^+ &= \frac{1}{\Delta x} [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}] \\
&\quad - \frac{1}{24} \frac{1}{\Delta x} [\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2} + \Phi_{i+5/2} - 3 \cdot \Phi_{i+3/2} + 2 \cdot \Phi_{i+1/2}] \\
&= \frac{1}{24} \frac{1}{\Delta x} [-23 \cdot \Phi_{i-1/2} + 21 \cdot \Phi_{i+1/2} + 3 \cdot \Phi_{i+3/2} - \Phi_{i+5/2}] \quad (D.43)
\end{aligned}$$

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Sabisch
Vorname	Winfried
Geburtsdatum	11. Februar 1971
Geburtsort	Hiltrup / Westf.
Adresse	Kriemhildstraße 3, 76297 Stutensee

Schule

1977 - 1981	Grundschule Theresienschule Münster
1981 - 1990	Gymnasium Paulinum Münster, Abitur

Wehrdienst

07/1990 - 06/1991	Wehrdienst im Jägerbataillon bei der Deutschen Bundeswehr in Ahlen
-------------------	--

Studium / Dissertation

09/1991	Immatrikulation an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster für das Studienfach Physik (Diplom)
07/1996	Abschluß der Diplomarbeit bei Herrn Prof. Dr. Fuchs mit dem Thema : Untersuchungen und Simulationen zum Schwingverhalten des Nadelsensors
09/1996-08/1999	Doktorand am Institut für Reaktorsicherheit des Forschungszentrums Karlsruhe
seit 08/1999	wissenschaftlicher Mitarbeiter bei der Firma Pro-Science GmbH, Ettlingen

Auslandsaufenthalt

07/1994 - 08/1994	Werkstudent bei der Firma MEMC Electronic Materials Inc., St. Peters, Missouri, USA
-------------------	---

Stipendium

04/1993 - 06/1996	Stipendiat der Bischöflichen Studienförderung Cusanuswerk
-------------------	---

