

DIPLOMARBEIT

**Ein paralleler, dreidimensionaler Navier-Stokes-Löser
für inkompressible Zweiphasenströmungen
mit Oberflächenspannung, Hindernissen
und dynamischen Kontaktflächen**

Angefertigt am Institut für Angewandte Mathematik

Vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

APRIL 2002

VON

ROBERTO CROCE

AUS

ESSEN

DIPLOMARBEIT

**Ein paralleler, dreidimensionaler Navier-Stokes-Löser
für inkompressible Zweiphasenströmungen
mit Oberflächenspannung, Hindernissen
und dynamischen Kontaktflächen**

Angefertigt am Institut für Angewandte Mathematik

Vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

APRIL 2002

VON

ROBERTO CROCE

AUS

ESSEN

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Zweiphasensysteme mit freien Oberflächen	1
1.2	Numerische Simulation freier Oberflächen	3
1.3	Zu dieser Arbeit	4
1.4	Kurzer Überblick	7
2	Das physikalische Modell	8
2.1	Die Navier-Stokes-Gleichungen	8
2.1.1	Die Erhaltung der Masse	9
2.1.2	Die Erhaltung des Impulses	10
2.2	Darstellung des Zweiphasensystems	11
2.3	Randbedingungen an der freien Oberfläche	11
2.4	Vollständige Modellierung	13
2.5	Randbedingungen an festen Rändern	14
3	Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen	16
3.1	Die Projektionsmethode	16
3.2	Das versetzte Diskretisierungsgitter	17
3.3	Viskoser Teil des Spannungstensors	19
3.4	Diskretisierung höherer Ordnung der konvektiven Terme	19
3.4.1	Einfache Upwind-Methoden: FOU und QUICK	21
3.4.2	Universal-Limiter-Methoden: SMART und VONOS	25
3.4.3	Adaptive-Stencil-Methoden: ENO und WENO	31
3.4.4	Randbehandlung	37
3.5	Der Löser für die Poissongleichung	37
3.6	Die Zeitschrittweitensteuerung	41
4	Level-Set-Approximation der freien Oberfläche	43
4.1	Traditionelle Techniken für freie Oberflächen	43
4.2	Die Level-Set-Technik	48
4.3	Vorteile der Level-Set-Methode	51
4.4	Approximation des Zweiphasenmodells mit Oberflächenspannung	51

4.5	Dimensionslose Formulierung	53
4.6	Die Level-Set-Reinitialisierung	54
4.7	Zweiphasenströmung mit Hindernissen	55
5	Diskretisierung des Zweiphasenmodells mit Oberflächenspannung	57
5.1	Erweiterte Projektionsmethode	57
5.2	Numerische Behandlung der freien Oberfläche	58
5.2.1	Viskositäts- und Dichtefunktion	59
5.2.2	Normalenvektor, Krümmung und Oberflächenspannung	60
5.3	Interpolationsregeln	61
5.4	Erweiterter viskoser Teil des Spannungstensors	63
5.5	Der Löser für die Poissongleichung mit nichtkonstanter Dichte	64
5.6	Die erweiterte Zeitschrittweitensteuerung	66
5.7	Diskretisierung der Transportgleichung	67
5.8	Diskretisierung der Reinitialisierungsfunktion	71
5.9	Verbesserte Massenerhaltung	75
6	Parallelisierung	80
6.1	Gebietszerlegung als Parallelisierungsstrategie	80
6.2	Parallelisierung des Strömungsprogramms und Leistungsmessung	81
7	Konvergenzanalysen und Simulationsergebnisse	85
7.1	Konvergenzanalyse der Krümmung am Beispiel einer diagonal transportierten Einheitssphäre	85
7.2	Konvergenzanalyse des gesamten Verfahrens am Beispiel einer aufsteigenden Blase	89
7.3	Analyse der Oberflächenspannung am Beispiel eines Fluidwürfels	95
7.4	Gasblasendynamik: Zwei-Blasen-Wechselwirkung mit Topologieveränderung	100
7.5	Tröpfchendynamik: Simulation einer Kronencharakteristik mit Topologieveränderung	103
7.6	Zweiphasen-Festkörper-Systeme: Wasserströmung um ein Hindernis	106
7.7	Zweiphasen-Festkörper-Systeme mit dynamischer Kontaktfläche: Simulation einer Vorhangbeschichtung	108
8	Zusammenfassung und Ausblick	116
8.1	Zusammenfassung	116
8.2	Ausblick	118

Symbolverzeichnis

Es werden jeweils die Bezeichnungen für den dreidimensionalen Fall angegeben:

$\vec{a} \cdot \vec{b}$	$= \sum_{i=1}^3 a_i b_i$ ist das Skalarprodukt der beiden Vektoren $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ und $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$
$\vec{a} \otimes \vec{b}$	Tensorprodukt zweier Vektoren ist definiert als 3×3 Matrix mit den Komponenten $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{i,j} := a_i b_j$ für $i, j = 1, 2, 3$
\vec{n}	$= (n_1, n_2, n_3)^T$ ist der nach außen gerichtete Einheitsnormalenvektor
\vec{t}, \vec{s}	sind zwei zueinander orthogonal stehende Einheitstangentialvektoren
$\partial_x f; f_x$	erste partielle Ableitung der Funktion f nach x
$\partial_{xx} f; f_{xx}$	zweite partielle Ableitung der Funktion f nach x
∇f	$= \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right)$ ist der Gradient von f
$\partial_{\vec{n}} f$	$= (\nabla f) \cdot \vec{n}$ ist die Ableitung von f in Richtung der äußeren Normalen der freien Oberfläche oder eines Hindernisgebietes
$\partial_{\vec{t}} f$	$= (\nabla f) \cdot \vec{t}$ ist die Ableitung von f in Richtung des Tangentialvektors \vec{t} der freien Oberfläche oder eines Hindernisgebietes
Δf	$= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$ ist der Laplace-Operator von f
\vec{x}	$= (x, y, z)^T$ ist der Ortsvektor
\vec{u}	$= (u, v, w)^T$ ist der Geschwindigkeitsvektor
u, v, w	Geschwindigkeitskomponenten in x -, y - und z -Richtung

$\nabla \cdot \vec{u}$	$= \operatorname{div} \vec{u} := \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$ ist die Divergenz von \vec{u}
$\Omega \subset \mathbb{R}^3$	bezeichnet das Fluidgebiet
$\delta x, \delta y, \delta z$	Schrittweiten in x -, y - und z -Richtung
h	äquidistante Raumgittermaschenweite $h = \delta x = \delta y = \delta z$
Ω_h	diskretes Gitter über Ω mit Maschenweite h
$\Omega_h^1, \dots, \Omega_h^P$	Aufteilung des diskreten Gesamtgitters in P Teilblöcke
p	Druck
ρ_i	Dichte der Phase $i = l, g$ (Liquid oder Gas)
μ_i	Viskosität der Phase $i = l, g$ (Liquid oder Gas)
\vec{g}	$= (g_1, g_2, g_3)^T$ sind Volumenkräfte
\mathbf{D}	$= \nabla \vec{u} + \{\nabla \vec{u}\}^T$ ist der Deformationstensor
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
\mathbf{T}	$= -p\mathbf{I} + \mu\mathbf{D}$ ist der Spannungstensor
Re	$= \frac{\rho_l LU}{\mu}$ ist die Reynoldszahl (siehe (4.17))
Fr	$= \frac{U^2}{\ \vec{g}\ L}$ ist die Froudezahl (siehe (4.18))
We	$= \frac{\rho_l LU^2}{\sigma}$ ist die Weberzahl (siehe (4.19))
σ	Oberflächenspannungskoeffizient
$p_{i,j,k}$	Druck im Zellmittelpunkt $((i - \frac{1}{2})\delta x, (j - \frac{1}{2})\delta y, (k - \frac{1}{2})\delta z)$
$u_{i,j,k}$	Geschwindigkeit in x -Richtung im Zellmittelpunkt (analog für die Geschwindigkeiten in y - und z -Richtung)
$\phi_{i,j,k}$	Level-Set-Funktion im Zellmittelpunkt
δt	Zeitschrittweite
t_n	$= t_{n-1} + \delta t$ ist die Zeit nach dem n -ten Zeitschritt
p^n	Druck zum Zeitpunkt t_n , analog für \vec{u} und ϕ

$\delta\tau$	künstliche Zeitschrittweite in der Reinitialisierungsfunktion
$\delta(\phi)$	Deltafunktional in Abhängigkeit von der Level-Set-Funktion
$H(\phi)$	Heavyside'sche Gewichtsfunktion in Abhängigkeit von der Level-Set-Funktion
$\delta^\epsilon(\phi), H^\epsilon(\phi)$	regularisierte Deltafunktion und regularisierte Heavyside-Funktion
$G_{i,j,k}$	Gewichte für Upwind-Diskretisierungsmethoden
$S(\phi), \text{sign}(\phi)$	signum-Funktion in Abhängigkeit von der Level-Set-Funktion
$S_h(\phi)$	regularisierte signum-Funktion
N	Anzahl der Diskretisierungspunkte
α	Parameter für das Maß der Regularisierung am freien Rand
ϵ	$= \alpha h$, Maß für die Regularisierung der freien Oberfläche

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Zweiphasensysteme mit freien Oberflächen

Ein Schwerpunkt in der natur- und ingenieurwissenschaftlichen Forschung ist die Analyse der strömungsdynamischen Phänomene von Flüssigkeiten und Gasen, welche zusammengefasst als *Fluide* bezeichnet werden. Dabei wird ein Fluid üblicherweise als *Kontinuum*, also als eine kontinuierliche Substanz, aufgefaßt.

Fluidströmungen werden durch den Einfluß externer Kräfte, wie zum Beispiel der Gravitation oder der Scher- und Oberflächenspannung, erzeugt. Hierbei besteht ein enger Zusammenhang zwischen der Strömungsgeschwindigkeit und der Kompressibilität, das heißt der Dichtevariation innerhalb eines Fluids. Über die *Mach Zahl* (Ma), die das Verhältnis zwischen Strömungs- und Schallgeschwindigkeit angibt, kann bestimmt werden, ob die kinetische Bewegungsenergie des Fluids einen Einfluß auf interne Freiheitsgrade, wie zum Beispiel die Dichte, ausübt. Für kleine Mach Zahlen, $Ma < 0.3$, können Fluide als *inkompressibel* betrachtet werden.

Fluidströmungen lassen sich, abhängig von der Anzahl der beteiligten Fluide, in Einphasen-, Zweiphasen- und Mehrphasenströmungen unterteilen. Einphasensysteme modellieren das Strömungsverhalten von genau einem Fluid. In Zweiphasensystemen werden die Wechselwirkungen von zwei unterschiedlichen Phasen, wie zum Beispiel Wasser und Öl, untersucht. Analog dazu beschreiben Mehrphasensysteme die Wechselwirkungen von mehr als zwei verschiedenen Fluiden.

Den Schwerpunkt dieser Arbeit bilden inkompressible Zweiphasenströmungen. Dabei wird angenommen, daß beide Phasen sich nicht miteinander vermischen können. Zwei nicht mischbare Fluide enthalten immer eine gemeinsame Grenzschicht an der sie sich berühren. Diese Kontaktfläche wird als *freier Rand* oder auch als *freie Oberfläche* bezeichnet. Charakteristisch für freie Ränder ist, daß sie sich zeitabhängig verändern.

Viele physikalisch interessante Vorgänge stehen in direktem Zusammenhang mit freien Oberflächen. Ein Bereich ist die Untersuchung der Oberflächendynamik in Beschichtungsprozessen [62, 68], wie im Fall der Vorhang- und Rollbeschichtung: Überall, wo Gegenstände mit einem sehr dünnen Fluidfilm beschichtet werden, treten in der Regel auch Gaseinschlüsse, Ungleichmäßigkeiten und Frakturen in der Filmschicht auf, die das Endprodukt unbrauchbar machen. Schon eine geringe Verbesserung des Pro-

duktionsverfahrens führt zu einer deutlichen Effizienzsteigerung. Erforscht werden auch Prozesse der Tröpfchendynamik [25, 59], wie zum Beispiel Aerosole aus der Sprühdose oder das Kraftstoff-Luft-Gemisch im Vergaser eines Ottomotors: Überall, wo Tropfen in hoher Konzentration in nicht zu regelmäßiger Bewegung sind, stoßen sie auch zusammen. Dabei vereinigen sie sich oder zerfallen in zahlreiche kleinere Tröpfchen. Das beeinflußt die Gesamtoberfläche der Flüssigkeit und damit – zum Beispiel im Verbrennungsmotor – entscheidend den weiteren Verlauf des Geschehens.

Diese Beispiele zeigen nur einen kleinen Teil der breiten Anwendungsmöglichkeiten freier Oberflächen. Zahlreiche weitere Phänomene, in denen freie Ränder eine wichtige Rolle spielen, stammen aus den Bereichen des Schiffbaus, der Ozeanologie, der Gasblasendynamik und der Klimatologie.

Die Modellierung der physikalischen Abläufe stellt große Herausforderungen an Ingenieure, Physiker und angewandte Mathematiker. Denn fluiddynamische Instabilitäten, wie zum Beispiel Kelvin-Helmholtz- und Rayleigh-Taylor-Instabilitäten [8], führen zu sehr komplizierten topologischen Strukturen des freien Randes. Zusätzlich ist der Einfluß von regularisierenden Effekten, wie der Oberflächenspannung, zu beachten. Diese haben in vielen Anwendungen aus dem Mikrobereich der Fluiddynamik (Druckerdüsen, Aerosolgemische, Mikropumpen, . . .) eine wesentliche Wirkung auf die Oberflächenbewegung.

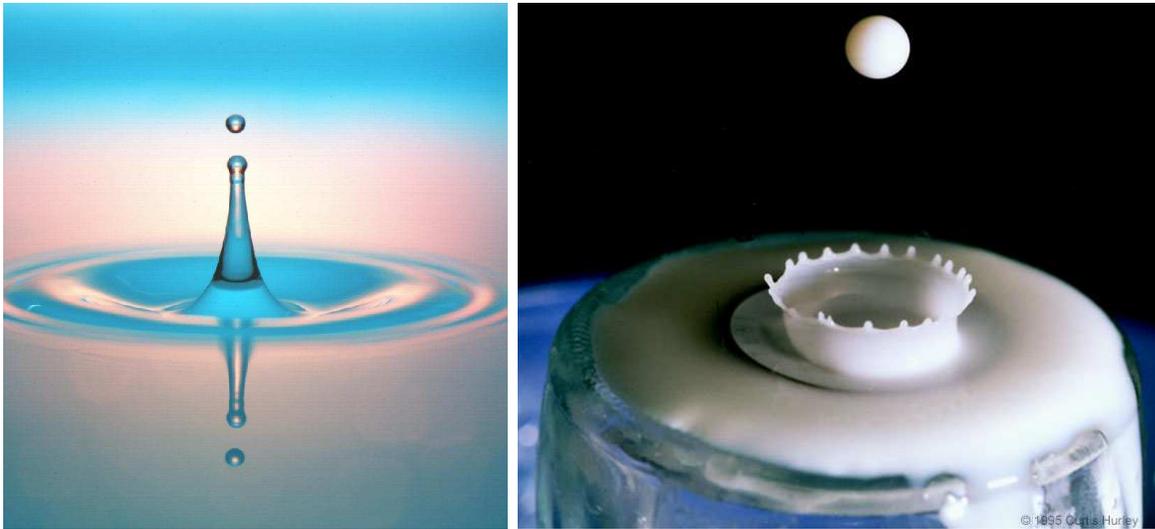


Abbildung 1.1: Eintauchender Regentropfen und eintauchender Milchtropfen

So demonstrieren die Photos in Abbildung 1.1¹, wie unterschiedlich sich der Fall eines Tropfens auf die Oberflächendynamik auswirken kann, wenn verschiedene physikalische Eigenschaften (Viskosität, Dichte, Oberflächenspannung, Pfützen- oder Beckentiefe . . .) gegeben sind. Das linke Photo zeigt eine Wassersäule (*Rayleigh-Jet*), die

¹Das linke Photo stammt von Andrew Davidhazy, das rechte von Curtis Hurley und Loren Winters.

nach Eintauchen eines frei fallenden Wassertropfens entstanden ist und bei der sich schließlich die Säulenspitze absplattet. Auf dem rechten Photo ist eine Krone (*Corona*) zu sehen, die nach Eintauchen eines frei fallenden Milchtropfens entstanden ist. Man beachte, daß der obere Bildabschnitt den nächsten fallenden Tropfen zeigt.

Verantwortlich für diese faszinierenden Strukturen sind die miteinander konkurrierenden Mechanismen von fluiddynamischen Instabilitäten und physikalisch regularisierenden Oberflächenspannungseffekten. Weil diese Probleme meist stark nichtlinear und nichtlokal sind, ist es bisher nicht gelungen, ein umfassendes Verständnis dieser Vorgänge mit ausschließlich analytischen Methoden zu erlangen. Aus diesem Grund wird versucht, die Phänomene der Zweiphasenströmungen mit Hilfe von numerischen Simulationen zu analysieren. Seitdem Hochleistungsrechner, insbesondere Parallelrechner, die hierfür erforderlichen und umfangreichen Berechnungen ermöglichen, ist die Simulation von Zweiphasenströmungen zu einem festen Bestandteil der numerischen Strömungsdynamik (engl. *Computational Fluid Dynamics (CFD)*) geworden.

Ein beträchtliches Problem besteht darin, Diskretisierungsmethoden für die beschreibenden nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zu entwickeln, die eine feste Konvergenzordnung besitzen und keine unphysikalischen Oszillationen produzieren. Die Schwierigkeiten liegen im physikalischen System: Dieses ist wegen der Nichtlinearität sehr empfindlich gegenüber kleinen Störungen und kann zusätzlich Singularitäten enthalten wie zum Beispiel im Kontaktpunkt von zwei sich berührenden Oberflächen.

1.2 Numerische Simulation freier Oberflächen

Die Geschwindigkeit der Rechner hat sich in den letzten vierzig Jahren in jedem Jahrzehnt ver Hundertfacht. Immer schneller werdende Prozessoren und vor allem das Parallelitätsprinzip haben demonstriert, daß kostengünstig Höchstleistungen in der numerischen Simulation erzielt werden können. Zusammen mit der Entwicklung effizienter Algorithmen zur Lösung von ständig umfangreicher werdenden physikalischen Modellgleichungen lassen sich immer realistischere Simulationen erzeugen. Diese ersetzen mehr und mehr die teuren und zeitaufwendigen physikalischen Experimente. Zusätzlich ermöglichen Simulationen die Erforschung vieler Bereiche, in denen sich bislang aus Sicherheitsgründen, wie zum Beispiel bei der Untersuchung eines Reaktorunfalls, oder auch aus Maßstabsgründen, wie in der Sternen- und Galaxienforschung, oft keine experimentellen Nachbauten realisieren lassen.

Erste Versuche, aussagekräftige Simulationen von Strömungsproblemen mit freien Rändern zu berechnen, sind in den **60er Jahren** unternommen worden. Die sehr populäre *Marker-and-Cell-Methode* (MAC) wurde von Harlow und Welch [33] im Jahr 1965 entwickelt. Dabei wird die Lage eines Fluides mit freiem Rand durch masselose Partikel dargestellt. Daly [17] erweiterte diese Methode im Jahr 1967 für echte Zweiphasenströmungen. Seitdem bauen viele andere Entwicklungen darauf auf wie zum Beispiel Daly [18, 19], Amsdon und Harlow [2] und Griebel et. al [29]. Anstelle von Partikeln haben Hirt und Nichols [35] in den **70er Jahren** mit der *Volume-of-Fluid-Methode* (VOF) eine Volumenanteilsfunktion zur Darstellung der freien Oberfläche verwendet.

Aus dieser skalaren Funktion, die in jeder Gitterzelle den prozentualen Volumenanteil des Fluids zum Gesamtzellvolumen angibt, wird der freie Rand im zweidimensionalen Fall durch Liniensegmente rekonstruiert (siehe Abbildung 4.3). Die erste von Noh und Woodward [51] entwickelte *SLIC* Rekonstruktion approximiert die Oberfläche mittels horizontaler und vertikaler Liniensegmente. Diese wurde in [35] durch das *PLIC* Verfahren verbessert, welches Liniensegmente mit einer beliebigen Steigung verwendet. In den **80er Jahren** ist die *Level-Set-Methode* von Osher und Sethian [52] entwickelt worden. Hierbei wird der freie Rand mit der Nullniveaumenge einer höherdimensionalen skalaren Funktion identifiziert. Erste Anwendungen der Level-Set-Methode im Bereich der Fluidodynamik sind von Mulder, Osher und Sethian [49] unternommen worden. Sie simulierten das Verhalten von aufsteigenden Gasblasen. In den **90er Jahren** wurde erstmals die Modellierung von Zweiphasenströmungen um die Oberflächenspannung erweitert. Dabei haben Brackbill, Kothe und Zemnach [7] die *Continuous-Surface-Force-Methode* (CSF) entwickelt. Diese beschreibt die Oberflächenspannungskraft als einen Quellterm, der über ein in der Nähe der freien Oberfläche definiertes Deltafunktional aktiviert wird. Lafaurie, Nardonne, Scardovelli, Zaleski und Zanetti [42] lieferten mit der *Continuous-Surface-Stress-Methode* (CSS) ein ähnliches Modell, das sie mit dem VOF-Verfahren koppelten.

Viele der vorgestellten Verfahren und Artikel sind Pionierarbeiten, die sich ausschließlich auf zweidimensionale Simulationen beschränken und einige Probleme, wie beispielsweise die Massenerhaltung, Topologieveränderungen oder auch die Konvergenzordnung der Krümmung und der Oberflächenspannung, unbeachtet lassen. Auch auf eine effiziente Nutzung der Rechnerressourcen durch parallel ablaufende Algorithmen wird nicht eingegangen. Daraus ergeben sich eine Reihe interessanter Fragestellungen und Verbesserungsmöglichkeiten, die den Ausgangspunkt dieser Arbeit bilden.

1.3 Zu dieser Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein physikalisches Modell für inkompressible Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen inklusive Oberflächenspannung vorgestellt. Dabei werden Zweiphasenströmungen betrachtet, die an der Phasengrenze einen Dichte- und Viskositätssprung enthalten. Die Diskretisierung des dreidimensionalen Modells enthält mehrere Schwierigkeiten. So ist zum Beispiel eine möglichst gute Darstellung der freien Oberfläche wichtig für eine genaue Berechnung ihrer Krümmung, die wiederum zur Beschreibung der Oberflächenspannungskräfte benötigt wird. Hierbei ist die Level-Set-Methode zur Approximation der freien Oberfläche eingesetzt worden. Sie betrachtet den freien Rand im Allgemeinen als die Nullniveaumenge einer höherdimensionalen skalaren (Lipschitz-stetigen) Level-Set-Funktion. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Level-Set-Funktion derart gewählt, dass sie in jedem diskreten Punkt des gesamten Rechengebietes den Abstand zum freien Rand angibt. Damit können der Normalenvektor und die Krümmung auf effiziente Weise implizit aus der Level-Set-Funktion bestimmt werden. Ein grundsätzlicher Vorteil dieser Methode ist die einfache Handhabung von topologischen Änderungen wie zum Beispiel das Zusammentreffen

oder Abspalten von Tröpfchen.

Die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche wird über den Transport der Level-Set-Funktion mit den Strömungsgeschwindigkeiten ermittelt. Deshalb ist es notwendig, dieses Geschwindigkeitsfeld möglichst gut zu approximieren. Bei der Berechnung der Geschwindigkeiten müssen unphysikalische Oszillationen verhindert werden, die insbesondere im Fall konvektionsdominanter Strömungen auftreten können. Solche Oszillationen übertragen sich auf den freien Rand und führen zu unbrauchbaren Ergebnissen. Diskretisierungsmethoden erster Ordnung führen nicht zu unerwünschten Oszillationen, aufgrund ihrer numerischen Diffusion jedoch kommt es zu einem künstlichen Verschwimmen der freien Oberfläche. Naive Verfahren höherer Ordnung, wie beispielsweise zentrale Differenzen, zeigen ein deutlich geringeres diffusives Verhalten, erzeugen aber bei konvektionsdominanten Problemen starke Oszillationen. Aus diesem Grund werden verschiedene ausgefeiltere Verfahren höherer Ordnung zur Diskretisierung der konvektiven Terme hinsichtlich ihrer Diffusion und ihrer Stabilität getestet.

Die Oberflächenspannung wird durch einen zusätzlichen Quellterm in den Navier-Stokes-Impulsgleichungen modelliert. Die Wirkung des Quelltermes muß dabei auf die freie Oberfläche eingeschränkt werden. Dies geschieht über ein Deltafunktional, welches in einer kleinen Umgebung des freien Randes die Kräfte des Quelltermes aktiviert. Weiterhin erfordert die Oberflächenspannung die Berechnung des Normalenvektors und der Krümmung der freien Oberfläche. Diese können über die Level-Set-Funktion ermittelt werden. Zum Beispiel berechnet sich die Krümmung über zweimaliges Differenzieren der Level-Set-Funktion, bei dem im ungünstigsten Fall zwei Ordnungen verloren gehen. Deshalb ist es notwendig, die Level-Set-Funktion mit mindestens dritter Ordnung zu diskretisieren, um eine Konvergenz erster Ordnung für die Krümmung zu erhalten. Dies ist in den Pionierarbeiten [70, 10] unbeachtet geblieben. Zur Problemlösung ist im Rahmen dieser Arbeit die Transportgleichung für die Level-Set-Funktion im Raum mit einem WENO-Schema fünfter Ordnung und in der Zeit mit einem Runge-Kutta-Schema [65, 28] dritter Ordnung diskretisiert worden. Ein Vergleich der Krümmungsberechnung zwischen diesem Verfahren und herkömmlichen Methoden zweiter Ordnung zeigt eine deutliche Verbesserung.

Das wohl bekannteste Problem der Level-Set-Methode ist die Erhaltung der Masse. Eigene Untersuchungen ergaben, daß diese umso mehr verletzt wird, je größer die Oberflächenspannungskräfte sind, denn durch den Transportschritt werden in einer kleinen Umgebung der freien Oberfläche die Niveaumengen aufgrund der Oberflächenkräfte komprimiert oder auch gestreckt. Dadurch entstehen sehr große oder sehr kleine Gradienten in der Level-Set-Funktion, die ihrerseits dann keine Abstandsfunktion mehr ist. Über einen sogenannten Reinitialisierungsprozeß wird die Level-Set-Funktion wieder zu einer Abstandsfunktion transformiert. Dieser Prozeß induziert aber auch ein künstliche Bewegung des freien Randes, wodurch die Erhaltung der Masse nicht mehr garantiert werden kann. Da die Reinitialisierung auf einer nichtlinearen Differentialgleichung beruht, hat auch hier der Einsatz eines WENO Schemas fünfter Ordnung zu einer Verbesserung der Massenerhaltung geführt. Zusätzlich konnte durch eine modifizierte Approximation der in dieser Differentialgleichung vorkommenden Vorzeichenfunktion der Reinitialisierungsprozeß nochmals günstig beeinflusst werden.

Bisher unbehandelt, aber von großem Interesse, sind Zweiphasenströmungen mit Hindernissen. So wird zum Beispiel im Schiffsbau die Wasserverdrängung eines Schiffsrumpfs untersucht oder im Brückenbau der Wasserwiderstand der vom Flußwasser umströmten Brückenpfeiler gemessen. Um Simulationen dieser Art zu ermöglichen, wurde zusätzlich eine Flag-Feld-Technik verwendet. Damit können beliebig geformte Hindernisse durch Ausblenden einzelner Gitterzellen approximiert werden.

Die Navier-Stokes-Gleichungen werden nach der Chorin'schen Projektionsmethode [12] gelöst. Ein Teilschritt dieser Methode erfordert das Lösen eines großen linearen Gleichungssystems. Hierzu ist ein stabilisiertes BiCGSTAB-Verfahren [73] implementiert worden, welches das Gleichungssystem iterativ löst. Da zusätzlich der Dichtesprung der beiden Phasen in das lineare Gleichungssystem eingeht, entsteht folglich bei hohen Dichteunterschieden ein schlecht konditioniertes Problem, das zu einem langsamen Konvergenzverhalten des BiCGSTAB-Lösers führt. Eine Konvergenzbeschleunigung kann durch Vorkonditionierer erzielt werden. Deshalb wurde zusätzlich zu dem BiCGSTAB-Verfahren ein Jacobi-Vorkonditionierer [48] eingebaut und seine Leistungssteigerung am Beispiel einer Zweiphasenströmung mit einem Dichtesprung von eins zu tausend belegt.

Der Algorithmus ist in *C++* programmiert und mit der Kommunikationsbibliothek *Message-Passing-Interface* (MPI) [31] parallelisiert worden, um dreidimensionale Probleme mit hoher Auflösung schneller berechnen zu können. Als Strategie für die Parallelisierung wurde hierbei die Gebietszerlegungsmethode [37] eingesetzt, durch die das gesamte räumliche Rechengebiet in Blöcke eingeteilt und dann auf einzelne Prozessoren verteilt wird. Die Leistung der Parallelisierung wurde durch Speed-Up Tests gemessen.

Am Beispiel einer aufsteigenden Blase mit Oberflächenspannung wird gezeigt, daß das gesamte gekoppelte numerische Verfahren konvergiert. Schließlich demonstrieren Simulationen aus den Bereichen

1. Gasblasendynamik
2. Tröpfchendynamik
3. Zweiphasen-Festkörper-Systeme
4. Zweiphasen-Festkörper-Systeme mit dynamischer Kontaktfläche

die breiten Anwendungsmöglichkeiten des Endprodukts. Die angesprochenen Simulationen aus den Bereichen 1), 3) und 4) wurden in dieser Arbeit — soweit dem Verfasser bekannt — erstmalig überhaupt in drei Raumdimensionen und aus dem Bereich 2) erstmalig mit der Level-Set-Methode durchgeführt. Dabei sind die aus physikalischen Gründen zu erwartenden Topologieveränderungen erfaßt worden.

Eine solche Vielzahl an Simulationsergebnissen war nur unter intensiven Einsatz des Parallelrechners *Parnass2* [30] der Abteilung Wissenschaftliches Rechnen der Universität Bonn möglich.

An dieser Stelle bedanke ich mich bei meinen Betreuern Prof. Dr. Michael Griebel und Dr. Frank Koster für ihre zahlreichen Anregungen.

1.4 Kurzer Überblick

Diese Arbeit hat folgenden Aufbau:

Kapitel 2 erklärt die physikalischen/mathematischen Gleichungen, die zur Modellierung verwendet werden. Dabei wird, nach einer kurzen Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen, ausführlich auf die Modellierung von Zweiphasenströmungen mit Oberflächenspannung eingegangen.

Kapitel 3 beschreibt die Diskretisierung der Strömungsgleichungen für eine Fluidphase. Sie beruht auf der Chorin'schen Projektionsmethode [12]. Den Schwerpunkt dieses Kapitels bildet ein Vergleich von stabilen Diskretisierungstechniken für die konvektiven Terme, die aus dem Bereich der Numerik für hyperbolische Erhaltungsgleichungen stammen.

Kapitel 4 gibt einen Überblick über aktuelle numerische Techniken zur Diskretisierung von freien Oberflächen. Dabei wird insbesondere die Level-Set-Methode [57] erklärt, über die die Oberflächenspannungskräfte mit den Impulsgleichungen gekoppelt werden. Diese Kopplung erfordert eine Reinitialisierung der Level-Set-Funktion. Am Ende des Kapitels wird kurz die Handhabung der Level-Set-Funktion für den Fall allgemeiner Hindernisse beschrieben.

Kapitel 5 befaßt sich mit der Diskretisierung des vollständigen Zweiphasenmodells. Hierbei werden alle Erweiterungen zum einphasigen Modell aus Kapitel 3 beschrieben, wie zum Beispiel der Dichte- und Viskositätssprung und die Krümmungsberechnung. Die Diskretisierung der Transportgleichung und die der Reinitialisierungsfunktion kommen hinzu, wobei ihr Einfluß bezüglich der Massenerhaltung untersucht wird. Ferner werden verbesserte Methoden zur Massenerhaltung und der eingesetzte Jacobi-Vorkonditionierer getestet.

Kapitel 6 beschreibt die Parallelisierung des entwickelten Algorithmus. Sie beruht auf der Gebietszerlegungsmethode [37], die das räumliche Rechengebiet in viele sich überlappende Teilgebiete aufteilt. Das Maß der Überlappung für die verschiedenen physikalischen Variablen wird jeweils durch eine bestimmte Anzahl an Randzellenschichten festgesetzt. Dabei werden die Werte in den Randzellenschichten durch Datenaustausch (Kommunikation) ständig aktualisiert. In dieser Arbeit ist der Austausch von Daten, die sich in der Nähe von Ecken und Kanten befinden, besonders vorsichtig zu behandeln. Leistungsmessungen durch Speed-Up Tests werden durchgeführt.

Kapitel 7 zeigt zunächst die verbesserte Ordnung der Approximation für die Krümmung im Vergleich zu herkömmlichen Methoden. Danach wird am Beispiel einer aufsteigenden Blase mit Oberflächenspannung die numerische Konvergenzordnung des gesamten Verfahrens bestimmt. Schließlich demonstrieren zahlreiche dreidimensionale Simulationen aus den Bereichen der Gasblasendynamik, der Tröpfchendynamik und der Zweiphasen-Festkörpersysteme mit und ohne dynamischer Kontaktfläche, die breiten Einsatzmöglichkeiten des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationsprogramms.

Kapitel 8 beendet diese Arbeit mit einer kurzen Zusammenfassung der Ergebnisse und einem Ausblick auf mögliche Weiterentwicklungen für das Simulationsprogramm.

Kapitel 2

Das physikalische Modell

In diesem Kapitel werden die dem Modell zugrundeliegenden physikalischen Gleichungen behandelt. Nach einer kurzen Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen [43], wird ausführlich auf die Modellierung von inkompressiblen Zweiphasenströmungen mit Oberflächenspannung eingegangen, wobei zusätzlich die Randbedingungen an der freien Oberfläche und an den festen Rändern beschrieben werden.

2.1 Die Navier-Stokes-Gleichungen

Mit den Navier-Stokes-Gleichungen läßt sich das Verhalten instationärer Strömungen von viskosen, inkompressiblen Fluiden beschreiben. Sie leiten sich aus den Erhaltungssätzen für Masse und Impuls her.

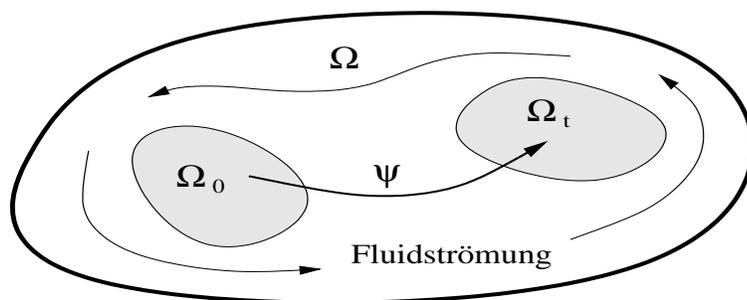


Abbildung 2.1: Zeitliche Entwicklung von Ω_0 nach Ω_t

Im Folgenden sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein festes Gebiet, welches mit einem Fluid gefüllt ist. Für $\vec{x} \in \Omega$ beschreibt die Abbildung $\vec{\psi}_{\vec{x}} : t \mapsto \vec{\psi}(\vec{x}, t)$ mit $\vec{\psi}(\vec{x}, t) : \Omega \times [0, t_{end}] \mapsto \Omega$ die Trajektorie des Partikels \vec{x} . Mit $\vec{\psi}_t : \vec{x} \mapsto \vec{\psi}(\vec{x}, t)$ wird die Position \vec{x} eines Partikels auf seine Position zur Zeit t abgebildet. Die Abbildung $\vec{\psi}$ wird *Fluidströmungsabbildung* genannt. Hier und im Folgenden sei vorausgesetzt, daß $\vec{\psi}$ die jeweils benötigten Regularitätsbedingungen erfüllt, und daß $\vec{\psi}_t$ für alle $t \geq 0$ invertierbar ist. Ein beliebiges

Teilgebiet $\Omega_0 \subset \Omega$ wird so durch die Fluidströmung in das Teilgebiet $\vec{\psi}_t(\Omega_0) =: \Omega_t \subset \Omega$ transportiert (siehe Abb.2.1). Die zugehörige Geschwindigkeit \vec{u} des Fluids an einem festen Ort $\vec{x} \in \Omega_t$ zum Zeitpunkt t folgt aus der Fluidströmungsabbildung über zeitliches Differenzieren

$$\vec{u}(\vec{x}, t) := \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t}(\vec{a}, t) \quad \text{mit} \quad \vec{a} := \vec{\psi}_t^{-1}(\vec{x}) \in \Omega_0. \quad (2.1)$$

Die Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen benötigt das Transporttheorem. Aus diesem geht hervor, wie die Zeitableitung eines Integrals über ein zeitabhängiges Gebiet berechnet werden kann.

Theorem: (Transporttheorem) Für eine differenzierbare, skalare Funktion $f : \Omega \times [0, t_{end}] \longrightarrow \mathbb{R}$, $(\vec{x}, t) \longmapsto f(\vec{x}, t)$ gilt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} f(\vec{x}, t) d\vec{x} = \int_{\Omega_t} \{ \partial_t f + \nabla \cdot (f\vec{u}) \}(\vec{x}, t) d\vec{x}. \quad (2.2)$$

Beweis:

siehe Chorin & Marsden [13]. □

Mit Hilfe dieses Theorems kann die Kontinuitätsgleichung aus der Massenerhaltung gefolgert werden.

2.1.1 Die Erhaltung der Masse

Die Masse eines Fluids, welches zum Zeitpunkt t das Volumen Ω_t einnimmt, ist gleich dem Integral über seine Dichte $\rho(\vec{x}, t)$. Die Massenerhaltung besagt dann, daß die Ableitung der Masse nach der Zeit gleich Null sein muß. Zusammen mit dem Transporttheorem folgt

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho(\vec{x}, t) d\vec{x} = \int_{\Omega_t} (\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}))(\vec{x}, t) d\vec{x} \quad \forall \Omega_t, t \geq 0.$$

Weil Ω_0 , und deshalb auch Ω_t , beliebig gewählt werden darf und die Integranden stetig sind, lautet die Kontinuitätsgleichung für kompressible Fluide in differentieller Form

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0. \quad (2.3)$$

Für inkompressible Fluide, deren Dichte unabhängig von Ort und Zeit ist, reduziert sich die Kontinuitätsgleichung zu

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.4)$$

Vorweggenommen sei, daß die Beschreibung von inkompressiblen Zweiphasenströmungen darauf beruhen wird, daß für jede Phase Gleichung (2.4) erfüllt sein muß, aber die freie Oberfläche analog zu (2.3) transportiert wird.

2.1.2 Die Erhaltung des Impulses

Der Impuls eines festen Körpers ist gleich dem Produkt seiner Masse mit seiner Geschwindigkeit. Im Falle eines Fluidsystems kann die Geschwindigkeit ortsabhängig sein. Deshalb läßt sich der Impuls eines Fluids mit dem Anfangsvolumen Ω_0 zur Zeit t darstellen als

$$\mathbf{m}(\Omega_0, t) := \int_{\Omega_t} \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) d\vec{x} .$$

Newtons zweites Gesetz besagt, daß die zeitliche Änderung des Impulses gleich der Summe der Kräfte ist, die auf das Fluid wirken, also

$$\frac{d}{dt} \mathbf{m}(\Omega_0, t) = \sum \text{Kräfte} . \quad (2.5)$$

Hierbei setzen sich die Kräfte aus verschiedenen Kraftarten zusammen:

- *Volumenkräfte* (zum Beispiel Gravitation, Coriolis-Kraft, magnetische Kraft, ...), die sich in der Form $\int_{\Omega_t} \rho(\vec{x}, t) \vec{g}(\vec{x}, t) d\vec{x}$ ausdrücken lassen, mit einer gegebenen Kraftdichte \vec{g} (Kraft pro Einheitsvolumen).
- *Oberflächenkräfte* (zum Beispiel Druck, innere Reibung, ...), die sich in der Form $\int_{\partial\Omega_t} \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n} dF$ ausdrücken lassen, mit $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ als dreidimensionaler Spannungstensor.

Das Newtonsche Gesetz (2.5) lautet somit

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) d\vec{x} = \int_{\Omega_t} \rho(\vec{x}, t) \vec{g}(\vec{x}, t) d\vec{x} + \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n} dF .$$

Nach Anwendung des Transporttheorems (2.2) gilt

$$\int_{\Omega_t} (\partial_t(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes (\rho \vec{u}))) d\vec{x} = \int_{\Omega_t} \rho \vec{g} d\vec{x} + \int_{\Omega_t} \nabla \cdot \mathbf{T} d\vec{x} ,$$

wobei zusätzlich das Randintegral auf der rechten Seite nach dem Satz von Gauß in ein Volumenintegral umgewandelt wurde. Da dies für beliebige Ω_t gilt, lautet die Impulsgleichung in differentieller Form

$$\partial_t(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes (\rho \vec{u})) - \rho \vec{g} - \nabla \cdot \mathbf{T} = 0 .$$

Der Spannungstensor \mathbf{T} modelliert die inneren Reibungskräfte. Für *viskose Newtonsche Fluide* hat er die Form

$$\mathbf{T} := (-p + \underbrace{\lambda(\nabla \cdot \vec{u})}_{=0, \text{ nach (2.4)}}) \mathbf{I} + \mu \mathbf{D} = -p \mathbf{I} + \mu \mathbf{D} , \quad (2.6)$$

mit p als Druck, \mathbf{I} als Einheitsmatrix, μ und λ als Viskositätskonstanten und mit dem *Deformationstensor*

$$\mathbf{D} = \nabla \vec{u} + \{\nabla \vec{u}\}^T. \quad (2.7)$$

Die Annahme der Inkompressibilität reduziert \mathbf{T} in (2.6) um den Term $\lambda(\nabla \cdot \vec{u})$. Wird schließlich die dynamische Viskosität μ als konstant angenommen, so überführt der Spannungstensor (2.6) die Gleichung (2.6) in ein System partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\rho(\partial_t(\vec{u}) + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes (\vec{u}))) + \nabla p = \nabla \cdot \mu \mathbf{D} + \rho \vec{g}, \quad \text{mit } \rho = \text{konstant}. \quad (2.8)$$

Für die nun folgende Beschreibung des Zweiphasensystems wird das gekoppelte Gleichungssystem aus (2.4) und (2.8) verwendet.

2.2 Darstellung des Zweiphasensystems

Das Modell des inkompressiblen Zweiphasensystems enthält einen Sprung in der Dichte und in der Viskosität. In den meisten Fällen bildet der freie Rand eine Trennfläche zwischen Wasser und Luft (oder zwei anderen Liquid/Gas Phasen). Dabei werden die Materialeigenschaften innerhalb jeder Phase als konstant angenommen. Somit ergibt sich in getrennter Darstellung

$$\begin{aligned} \rho_i \frac{D\vec{u}_i}{Dt} &= \nabla \cdot \mathbf{T}_i + \rho_i \vec{g} \\ \nabla \cdot \vec{u}_i &= 0, \quad \text{für } i = l, g \end{aligned} \quad (2.9)$$

Die Indizes g und l geben an, zu welcher Phase (Gas oder Liquid) die zugehörige physikalische Größe zuzuordnen ist, und $\frac{D(\vec{u})}{Dt} := \partial_t(\vec{u}) + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes (\vec{u}))$ ist die Materialableitung.

Eine zweidimensionale Skizze des Modells ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Es stellt ein zum Teil mit Wasser gefülltes Becken dar, über dem sich ein Wassertropfen befindet. Ω_g ist das mit Luft gefüllte und Ω_l das mit Wasser gefüllte Volumen. Die freie Oberfläche ist Γ_f ; der stationäre Rand des gesamten Gebietes wird mit Γ bezeichnet. Über die Oberflächenspannung werden die Gleichungssysteme für die Gas- und Liquidphase in (2.9) miteinander gekoppelt. Doch dazu werden zunächst die physikalischen Randbedingungen an der freien Oberfläche benötigt.

2.3 Randbedingungen an der freien Oberfläche

In Wirklichkeit ist die Trennfläche zwischen zwei kontinuierlichen Medien (Phasen) eine sehr dünne dreidimensionale Übergangsschicht. Aber wegen der geringen Schichtdicke wird der freie Rand im Allgemeinen als Fläche modelliert. Dabei gilt auf der freien Oberfläche Γ_f zwischen zwei unmischbaren Fluiden, daß die Netto-Spannungen, die auf die (massenlose) Grenzfläche wirken, sich gegenseitig aufheben. Weiterhin sind für

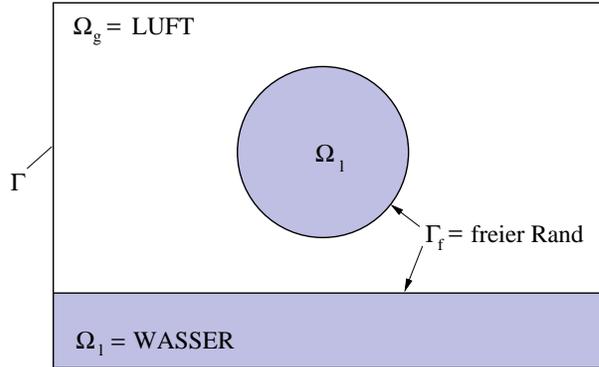


Abbildung 2.2: Zweiphasenmodellierung

viskose Fluide die Strömungsgeschwindigkeiten stetig, also insbesondere auch auf Γ_f . Falls Wechsel des Aggregatzustandes, wie z.B. Gefrier- oder Kondensationsprozesse, ignoriert werden können, so sind folgende Bedingungen am freien Rand zu erfüllen

- *Kinematische Bedingung:* Die freie Oberfläche bildet eine scharfe Trennfläche, durch die keine Masse fließt.
- *Dynamische Bedingung:* An der Grenzfläche zwischen zwei sich bewegenden Fluiden ohne Oberflächenspannung ist die Sprung-Randbedingung durch

$$(\mathbf{T}_l - \mathbf{T}_g) \cdot \vec{n} = 0 \quad (2.10)$$

gegeben [43]. Diese beschreibt die Bilanzierung der viskosen Reibungskräfte entlang des freien Randes. Wenn die Oberflächenspannung miteinbezogen wird, so tritt auf der rechten Seite von Gleichung (2.10) ein zusätzlicher Quellterm auf

$$[\mathbf{T}] \cdot \vec{n} = \sigma \kappa \vec{n}, \quad (2.11)$$

mit σ als Koeffizient der Oberflächenspannungskraft, welcher eine Materialkonstante ist, und mit $[\mathbf{T}] := (\mathbf{T}_l - \mathbf{T}_g)$. Weiterhin ist κ die lokale Krümmung

$$\kappa = \frac{1}{R_t} + \frac{1}{R_s} \quad (2.12)$$

mit R_t und R_s als Hauptkrümmungsradien der Grenzfläche entlang der lokalen orthogonalen Koordinaten t und s . Abbildung 2.3 beschreibt die geometrischen Größen R_t und R_s , dabei sind \vec{n}, \vec{t} und \vec{s} die Einheitsvektoren des lokalen orthogonalen Koordinatensystem (n, t, s) . Gleichung (2.11) besagt, daß auf dem freien Rand die viskosen Spannungskräfte in Normalenrichtung proportional zur mittleren Krümmung sind.

- *Regularitätsbedingung:* Weil viskose Fluide betrachtet werden, müssen die Geschwindigkeiten stetig sein. Also gilt insbesondere

$$\vec{u}_l = \vec{u}_g \quad \text{auf } \Gamma_f \quad (2.13)$$

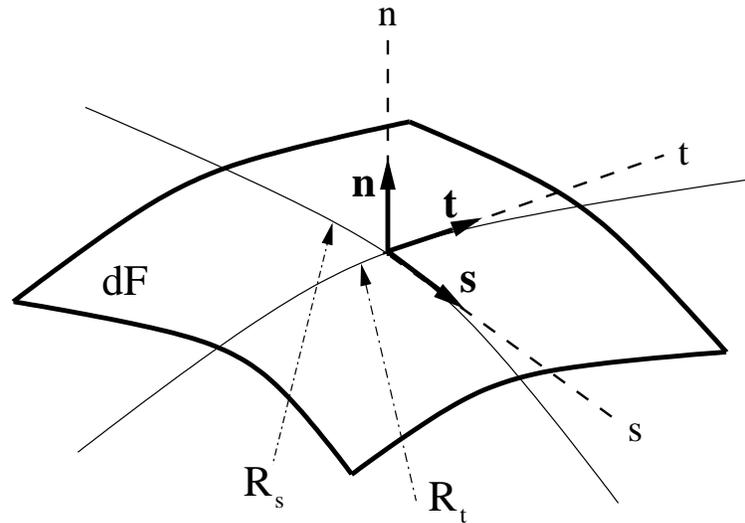


Abbildung 2.3: Zur Beschreibung der Oberflächenspannungskraft

Die physikalischen Modelle vieler Simulationsprogramme vernachlässigen in der Regel die Effekte der Oberflächenspannung. Anders in dieser Arbeit: Hier werden die freien Randbedingungen (2.11) und (2.13) in die Impulsgleichungen miteinbezogen, wodurch sich Oberflächenspannungskräfte berechnen lassen. Dadurch lassen sich insbesondere im Mikrobereich der Fluidodynamik, wie zum Beispiel kleine Aerosole aus Druckerdüsen oder Sprühdosen, deutlich realistischere Simulationen berechnen. Denn mit kleiner werdendem Volumen wird der Einfluß der Oberflächenspannung auf die Oberflächendynamik immer wichtiger.

Die numerische Implementierung ist dabei wesentlich komplexer als sie zunächst erscheint. Das Problem ist, daß weder die Form noch die Lage des freien Randes bekannt ist. Methoden zur Lokalisierung freier Oberflächen müssen entwickelt werden, so daß die freien Randbedingungen an den richtigen Positionen gesetzt werden.

2.4 Vollständige Modellierung

Das Ziel ist, die beiden Gleichungssysteme in (2.9) miteinander zu koppeln. Dies geschieht mit Hilfe der freien Randbedingungen (2.11), die sich implizit als singulärer Quellterm in den Impulsgleichungen darstellen lassen. Ausgangspunkt ist die Integralform von Gleichung (2.9):

$$\int_{\Omega_i} \rho_i \frac{D(\vec{u}_i)}{Dt} d\vec{x} = \int_{\partial\Omega_i} \mathbf{T}_i \cdot \vec{n} dF + \int_{\Omega_i} \rho_i \vec{g} d\vec{x}, \quad i \in \{g, l\}. \quad (2.14)$$

Für eine indexunabhängige Schreibweise wird die Größe \mathbf{T} und analog \vec{u}, ρ auf beiden Phasen definiert

$$\mathbf{T} := \begin{cases} \mathbf{T}_l & \text{falls } \vec{x} \in \{\text{Liquidphase}\} \\ \mathbf{T}_g & \text{falls } \vec{x} \in \{\text{Gasphase}\} \end{cases}. \quad (2.15)$$

Addition der beiden Impulsgleichungen (2.14) führt dann zu

$$\begin{aligned} & \rho_l \int_{\Omega_l} \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} + \rho_g \int_{\Omega_g} \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} \\ &= \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \vec{n} dF - \int_{\Gamma_f} \underbrace{[\mathbf{T}] \cdot \vec{n}}_{=\sigma\kappa\vec{n}} dF + \rho_l \int_{\Omega_l} \vec{g} d\vec{x} + \rho_g \int_{\Omega_g} \vec{g} d\vec{x} . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Nach dem Satz von Gauß gilt

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \vec{n} dF = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} d\vec{x} . \quad (2.17)$$

Diese Umwandlung ist im distributionellen Sinne aufzufassen, weil der Spannungstensor, bedingt durch den Sprung in der Viskosität μ , über Γ_f unstetig ist.

Wegen $\vec{u}_l|_{\Gamma_f} = \vec{u}_g|_{\Gamma_f}$ (2.13) ist das Geschwindigkeitsvektorfeld \vec{u} auf ganz Ω stetig. Somit gilt zusammen mit der indexunabhängigen Definition (2.15) für \vec{u} und ρ die Beziehung

$$\rho_l \int_{\Omega_l} \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} + \rho_g \int_{\Omega_g} \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} = \int_{\Omega} \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} . \quad (2.18)$$

Mit (2.17) und (2.18) ergibt sich die integrale Darstellung der Impulsgleichung für zwei Phasen zu

$$\int_{\Omega} \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} d\vec{x} - \int_{\Gamma_f} \sigma\kappa\vec{n} dF + \int_{\Omega} \rho\vec{g} d\vec{x} . \quad (2.19)$$

Der Vorteil dieser Beschreibung liegt darin, daß sie die Randbedingungen der freien Oberfläche implizit enthält. Das läßt sich später dahingehend ausnutzen, daß ohne explizite Rekonstruktion der freien Oberfläche die freien Randbedingungen implizit bei der Diskretisierung der Impulsgleichungen erfüllt werden. Dies stellt im Gegensatz zu Methoden, die eine explizite Rekonstruktion der Oberfläche erfordern, eine effizientere Lösung dar, die darüber hinaus numerisch weniger anfällig ist und sich gut parallelisieren läßt.

2.5 Randbedingungen an festen Rändern

Um das System von partiellen Differentialgleichungen zu schließen, sind noch Randbedingungen für die Geschwindigkeiten an den Gebietsrändern notwendig. Im Folgenden bezeichne \vec{n} den Einheitsnormalenvektor, der vom festen Rand ins Fluidgebiet zeigt, und \vec{t} und \vec{s} sind zwei linear unabhängige Tangentialvektoren. Üblicherweise wird eine Variable am Rand entweder auf einen vorgegebenen Wert gesetzt (Dirichlet-Randbedingungen), oder ihr Gradient wird in eine bestimmte Richtung festgesetzt (Neumann Randbedingungen). Insgesamt lassen sich damit folgende physikalische Randeigenschaften modellieren:

1. *Haftbedingungen (no-slip)*: Das Fluid haftet auf diesem Rand Γ_H , also muß dort der Geschwindigkeitsvektor verschwinden: $\vec{u}|_{\Gamma_H} = 0$.
2. *Fixe Ein-/Ausströmbedingungen (in-/outflow)*: Das Fluid strömt mit einer fest vorgegebenen Geschwindigkeit \vec{u}_o ein/aus, also gilt auf diesem Rand Γ_{EA} für den Geschwindigkeitsvektor: $\vec{u}|_{\Gamma_{EA}} = \vec{u}_o$.
3. *Rutschbedingungen (free-slip)*: Das Fluid gleitet ohne Reibungsverluste auf diesem Rand Γ_R , das heißt nur die tangentialen Geschwindigkeiten, die keine Änderung in Richtung des Normalenvektors haben, bleiben erhalten:

$$(\vec{u} \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = 0 \quad , \quad (\partial_{\vec{n}}(\vec{u} \cdot \vec{t}))|_{\Gamma_R} = 0 \quad , \quad (\partial_{\vec{n}}(\vec{u} \cdot \vec{s}))|_{\Gamma_R} = 0 \quad .$$

4. *Natürliche Ausströmbedingungen (outflow)*: Die Fluidgeschwindigkeit ändert sich nicht in Normalenrichtung, somit gilt auf diesem Rand Γ_A : $(\partial_{\vec{n}}\vec{u})|_{\Gamma_A} = 0$.

Beim Setzen der Randbedingungen muß darauf geachtet werden, daß das Randintegral über die Geschwindigkeiten senkrecht zum festen Rand Null ist, denn aus der Kontinuitätsgleichung zusammen mit dem Satz von Gauß folgt:

$$0 = \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{u} \, d\vec{x} = \int_{\partial\Omega} \vec{u} \cdot \vec{n} \, dF \quad . \quad (2.20)$$

Eine Verletzung dieser Bedingung führt zu Fehlern in der Inkompressibilität und dadurch zu Problemen in der Massenerhaltung. Insbesondere wenn Ausflußrandbedingungen gegeben sind, wird in der Regel die Kompatibilitätsbedingung (2.20) verletzt. Hierzu müssen die extrapolierten Geschwindigkeiten so korrigiert werden, daß der Massenfluß am Ausströmrand gleich dem Massenfluß am Einströmrand ist.

Die Randbedingungen für den Druck werden zusammen mit der in dieser Arbeit eingesetzten Projektionsmethode zur Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen in Kapitel 3.1 erklärt.

Kapitel 3

Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen

In diesem Kapitel wird ausschließlich die Diskretisierung der Strömungsgleichungen behandelt, ohne auf die numerische Darstellung der freien Oberfläche einzugehen. Nach einer kurzen Beschreibung der verwendeten Projektionsmethode, wird das Diskretisierungsgitter vorgestellt. Da die Qualität der freien Oberfläche stark mit der Diskretisierung der konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichungen zusammenhängt, werden verschiedene numerische Methoden für diese Terme untersucht. Weiterhin erfordert ein Teilschritt der Projektionsmethode das Lösen großer linearer Gleichungssysteme. Dabei sind effiziente Lösungsverfahren unerlässlich. Hierzu ist ein BiCGSTAB-Löser [73] implementiert worden, der im Vergleich zum sonst üblichen Red-Black-(SOR)-Verfahren [32] deutlich schneller konvergiert. Desweiteren läßt er sich gut parallelisieren und ist für allgemeine Geometrien einsetzbar.

3.1 Die Projektionsmethode

Es werden vorerst die einphasigen Navier-Stokes-Gleichungen aus (2.8) betrachtet. Die Geschwindigkeiten und der Druck für den neuen Zeitschritt $n+1$ ermitteln sich auf folgende Weise: Zuerst werden Schätzgeschwindigkeiten \vec{u}^* ohne Druckgradient berechnet über

$$\vec{u}^* = \vec{u}^n + \delta t(-\nabla \cdot (\vec{u}^n \otimes \vec{u}^n) + \vec{g} + \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot (\mu D^n)) , \quad (3.1)$$

\vec{u}^{n+1} geht dann hervor aus dem System

$$\frac{\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^*}{\delta t} + \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} = 0 , \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u}^{n+1} = 0 . \quad (3.3)$$

Nachdem in Gleichung (3.2) die Divergenz gebildet wurde, folgt aus (3.3)

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \frac{\vec{u}^*}{\delta t} . \quad (3.4)$$

Dabei wird der neue Druck p^{n+1} auf implizite Weise über das Lösen der Poissongleichung (3.4) bestimmt. Schließlich ergeben sich die neuen Geschwindigkeiten \vec{u}^{n+1} über eine Druckkorrektur für \vec{u}^*

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^* - \frac{\delta t}{\rho} \nabla p . \quad (3.5)$$

Damit (3.4) zu keinem unterbestimmten Gleichungssystem führt, sind noch Randbedingungen für den Druck notwendig. Dazu wird (3.2) auf die äußere Einheitsnormale des Gebietsrandes projiziert, also

$$\left. \frac{\partial p^{n+1}}{\partial \vec{n}} \right|_{\Gamma} = \frac{\rho}{\delta t} (\vec{u}_{\Gamma}^* - u_{\Gamma}^{n+1}) \cdot \vec{n} . \quad (3.6)$$

Falls nun am Rand für die Schätzgeschwindigkeiten $u_{\Gamma}^* = u_{\Gamma}^{n+1}$ gesetzt wird, dann ergeben sich homogene Neumann-Randbedingungen für den Druck, also

$$\left. \frac{\partial p^{n+1}}{\partial \vec{n}} \right|_{\Gamma} = 0 . \quad (3.7)$$

Im Fall konstanter Dichte läßt sich ein skaliertes Druck $\hat{p}^{n+1} := \frac{p \Delta t}{\rho}$ definieren. Damit vereinfacht sich die Poissongleichung (3.4) zu

$$\Delta \hat{p}^{n+1} = \nabla \cdot \vec{u}^* . \quad (3.8)$$

Desweiteren ist der Druck mit diesem Verfahren nur bis auf eine Konstante genau bestimmt. Diese kann fixiert werden, indem zusätzlich die Nebenbedingung

$$\int_{\Omega} p^{n+1} = 0$$

gefordert wird. Damit ist es möglich, Druckergebnisse aus unterschiedlichen Zeitpunkten miteinander zu vergleichen.

Die Idee, das nicht divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld \vec{u}^* mit Hilfe des Druckes in den Raum der divergenzfreien Geschwindigkeiten zu projizieren, geht auf A. J. Chorin [12] zurück. Diese Methode benutzt als Zeitdiskretisierung das explizite Euler-Verfahren erster Ordnung. Eine höhere Diskretisierungsordnung in der Zeit kann mit Runge-Kutta-Methoden [65, 28], die aus Konvexkombinationen von Euler-Schritten bestehen, konstruiert werden oder auch mit Adams-Bashfort-Methoden [40]. In Kapitel 5.7 werden beide Verfahren näher beschrieben.

3.2 Das versetzte Diskretisierungsgitter

Oft ist es nicht notwendig, daß alle Variablen auf demselben Gitter liegen; andere Anordnungen können vorteilhafter sein. Auf Kartesischen Koordinaten ist die Verwendung eines versetzten Gitters (engl. *staggered grid*) im Vergleich zu einem nichtversetzten

Gitter (engl. *collocated grids*) besser. So lassen sich verschiedene Terme, die auf angeordneten Gittern eine Interpolation erfordern, unter einem versetzten Gitter direkt berechnen; das spart Rechenzeit und verringert numerische Rundungsfehler. Aber der wichtigste Vorteil einer versetzten Anordnung der Unbekannten ist die starke Kopplung zwischen den Geschwindigkeiten und dem Druck. Dadurch werden Oszillationen in den Geschwindigkeiten und im Druck verhindert, die bei nichtversetzten Variablen das Ergebnis oft unbrauchbar machen.

Deshalb ist in dieser Arbeit ein versetztes Diskretisierungsgitter verwendet worden, das den Druck $p_{i,j,k}$, die Dichte $\rho_{i,j,k}$, die Viskosität $\mu_{i,j,k}$ und andere skalare Werte $\phi_{i,j,k}$ (Temperatur, Chemikalien, später: Level-Set-Funktion) im Zellmittelpunkt enthält (siehe Abbildung 3.1). Die Komponenten $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$, $v_{i,j+\frac{1}{2},k}$ und $w_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ des Geschwindigkeitsfeldes sind in den Mittelpunkten der Zellseitenflächen definiert. Allgemein wird

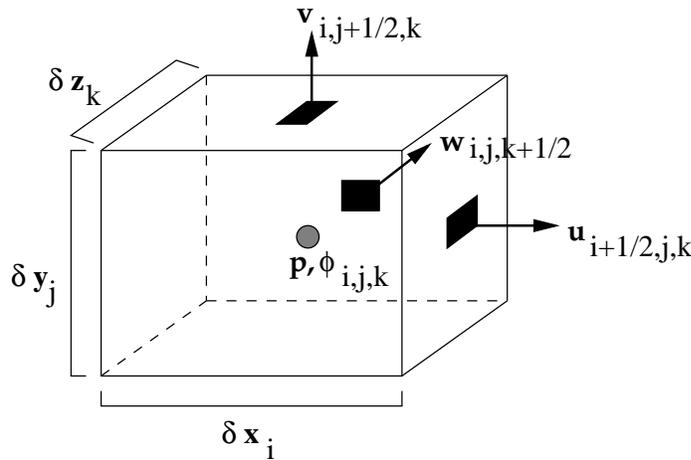


Abbildung 3.1: Das dreidimensionale, versetzte Gitter

ein äquidistantes Gitter eingesetzt, für das gilt $\delta x_i := \delta x$, $\delta y_j := \delta y$ und $\delta z_k := \delta z$ für $i = 1, \dots, I$; $j = 1, \dots, J$; $k = 1, \dots, K$; (I, J, K) = Anzahl der Gitterzellen pro Raumdimension. Eine Erweiterung auf nichtäquidistante (glatt variierende) Gitter ist leicht möglich. Die Diskretisierung der konvektiven Terme muß dann aber auf Universal-Limiter-Methoden eingeschränkt werden (siehe Kapitel 3.4.2).

Während der Diskretisierung ist grundsätzlich darauf zu achten, daß alle partiellen Ableitungen an der richtigen Stelle berechnet werden. Der Ort der Auswertung wird auf folgende Weise angegeben:

- $[\dots]_{i,j,k}$: Im Zellmittelpunkt,
- $[\dots]_{i\pm\frac{1}{2},j,k}$: Im Mittelpunkt der rechten/linken Seitenfläche,
- $[\dots]_{i,j,\pm\frac{1}{2},k}$: Im Mittelpunkt der oberen/unteren Seitenfläche,
- $[\dots]_{i,j,k\pm\frac{1}{2}}$: Im Mittelpunkt der hinteren/vorderen Seitenfläche.

Falls Werte an Stellen benötigt werden, wo sie nicht vorgegeben sind, so werden diese

in Abhängigkeit von der Diskretisierungsordnung der konvektiven Terme über passende Polynominterpolation ermittelt. So wird zum Beispiel bei einer Behandlung der konvektiven Terme zweiter Ordnung eine lineare Polynominterpolation eingesetzt. Polynominterpolationen höherer Ordnung werden in Kapitel 5.3 genauer beschrieben.

3.3 Viskoser Teil des Spannungstensors

Der viskose Anteil $\nabla \cdot \mu \mathbf{D}$ des Spannungstensors \mathbf{T} läßt sich ohne zusätzliche Interpolationen direkt an den Zellseitenflächen berechnen. So werden zum Beispiel für konstante Viskosität μ die Terme der x -Komponente von $\nabla \cdot \mu \mathbf{D}$

$$2(\mu u_x)_x + (\mu(u_y + v_x))_y + (\mu(u_z + w_x))_z \quad (3.9)$$

an der Stelle $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ auf folgende Weise diskretisiert:

$$\begin{aligned} [(\mu u_x)_x]_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\mu(u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}) - \mu(u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k})}{(\delta x)^2} \\ [(\mu(u_y + v_x))_y]_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{1}{\delta y} \left(\mu \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\delta x} \right) \right. \\ &\quad \left. - \mu \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{1}{2},j-1,k}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j-\frac{1}{2},k} - v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta x} \right) \right) \\ [(\mu(u_z + w_x))_z]_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{1}{\delta z} \left(\mu \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta z} + \frac{w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\delta x} \right) \right. \\ &\quad \left. - \mu \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k-1}}{\delta z} + \frac{w_{i+1,j,k-\frac{1}{2}} - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta x} \right) \right). \end{aligned}$$

Die Terme der y - und z -Komponente werden auf analoge Weise diskretisiert. Eine besondere Randbehandlung ist dabei nicht notwendig, da der Diskretisierungstern nur 3 Gitterpunkte breit ist. Der Konvergenzfehler bleibt von zweiter Ordnung, solange die Gitterweiten lokal äquidistant sind (siehe [32]).

3.4 Diskretisierung höherer Ordnung der konvektiven Terme

Wenn Diskretisierungs-, Abbruch- und Rundungsfehler während eines Rechenprozesses nicht unbeschränkt wachsen, dann wird die numerische Lösung als *stabil* bezeichnet. Im Fall konvektionsdominanter Probleme treten bei der Diskretisierung mit zentralen Differenzen Stabilitätsprobleme auf. Es werden unphysikalische Oszillationen in der Lösung erzeugt, die das Ergebnis unbrauchbar machen. Dies liegt daran, daß die diskrete Gleichung bestimmte Eigenschaften der kontinuierlichen Gleichung nicht mehr widerspiegelt (siehe [32]).

Aus diesem Grund müssen alternative Diskretisierungsmethoden für die konvektiven Terme konstruiert werden, die für beliebige Gitterschrittweiten zu beschränkten

Lösungen führen. Insbesondere im Hinblick auf die Behandlung der freien Oberfläche mit der Level-Set-Technik ist sowohl die Stabilität als auch eine möglichst hohe Approximationsordnung der Raumdiskretisierung notwendig. Denn einerseits würden sich Instabilitäten sofort auf die freie Oberfläche übertragen und andererseits würde eine zu geringe Ordnung der Raumdiskretisierung, wegen des größeren Abbruchfehlers, einen durch numerische Diffusion verfälschten freien Rand ergeben.

Die stabile Diskretisierung der konvektiven Terme ist ein Schwerpunkt aus dem Bereich der Numerik von hyperbolischen Erhaltungsgleichungen, wo mit sogenannten *Upwind-Verfahren* effiziente Techniken entwickelt werden. Die Upwind-Methoden lassen sich in drei Klassen einteilen:

1. Einfache Upwind-Methoden
2. Universal-Limiter-Verfahren
3. Adaptive-Stencil-Techniken.

Dabei werden nun aus diesen drei Klassen jeweils einige Methoden vorgestellt und am Beispiel einer im Rahmen dieser Arbeit diskretisierten eindimensionalen skalaren Erhaltungsgleichung getestet. Die Gegenüberstellung der Ergebnisse zeigt deutlich ihre Stärken und Schwächen auf. Hierbei ist insbesondere bei der Analyse des VONOS-Schemas in Kapitel 3.4.2 ein numerisches Verhalten festgestellt worden, das bislang nicht erkannt wurde.

Der konvektive Term der Navier-Stokes-Gleichungen $\nabla(\vec{u} \otimes \vec{u})$ lautet in Komponentenschreibweise

$$\nabla(\vec{u} \otimes \vec{u}) = \begin{pmatrix} (uu)_x + (vu)_y + (wu)_z \\ (uv)_x + (vv)_y + (wv)_z \\ (uw)_x + (vw)_y + (ww)_z \end{pmatrix}.$$

Im Folgenden bezieht sich die Finite-Differenzen-Diskretisierung nur auf die Komponente in x -Richtung

$$(uu)_x + (vu)_y + (wu)_z, \quad (3.10)$$

die y - und z -Komponenten berechnen sich auf analoge Weise.

Um einen praktischen Einblick in die numerischen Eigenschaften (Oszillationen, numerische Diffusion) der verschiedenen Upwind-Methoden zu geben, wird die eindimensionale skalare Erhaltungsgleichung

$$\phi_t(x, t) + \phi_x(x, t) = 0 \quad \text{für } 0 < x < 6 \quad (3.11)$$

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) \quad \text{mit periodischen Rändern} \quad (3.12)$$

betrachtet. Hierbei ist als Anfangsbedingung

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } 0.5 \leq x \leq 1.5 \\ 1 - |2(x - 3)| & \text{für } 2.5 \leq x \leq 3.5 \\ \sin((x - 4.5)\pi) & \text{für } 4.5 \leq x \leq 5.5 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.13)$$

verwendet worden. Wie in Abbildung 3.2 zu sehen ist, enthält dieses skalare Anfangsprofil ϕ_0 lokale Unstetigkeiten in der Stufenfunktion, ein lokal lipschitzstetiges Maximum in der Dreiecksfunktion und ein lokal glattes Maximum in der Sinusfunktion.

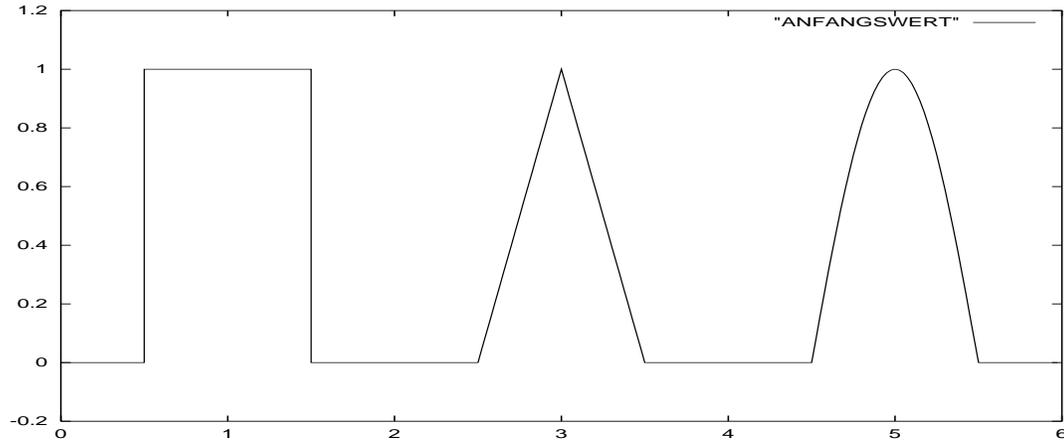


Abbildung 3.2: Anfangsbedingung ϕ_0

Die Gleichung (3.11) ist in der Zeit mit dem expliziten Euler-Verfahren und im Ort mit dem jeweils zu betrachtenden Upwind-Schema diskretisiert worden. Als Zeitschrittweite wurde $\delta t = \frac{1}{2}(\delta x)^r$ (r =Ordnung des Upwind-Verfahrens) verwendet und das Gebietsintervall $[0; 6]$ ist mit $N = 120$ Gitterpunkten aufgelöst worden. Insgesamt wurden je zwei Testrechnungen, einmal bis $t = 6$ und einmal bis $t = 12$, gerechnet. Dabei wird das skalare Anfangsprofil (Abbildung 3.2) eine beziehungsweise zwei Perioden weit in x -Richtung transportiert, so daß es sich schließlich wieder am Ausgangspunkt befindet.

Anhand dieser Testrechnungen läßt sich erkennen, wie gut das verwendete Upwind-Verfahren das Anfangsprofil erhält. Insbesondere können numerische Diffusionseffekte, die durch den Abbruchfehler der Diskretisierung entstehen, und Oszillationen, die vor allem an den lokalen Sprungstellen der Stufenfunktion entstehen, sehr gut abgelesen werden.

3.4.1 Einfache Upwind-Methoden: FOU und QUICK

Wie beschrieben befinden sich die x -Komponenten auf dem dreidimensionalen versetzten Gitter in den rechtsseitigen Zellflächenmittelpunkten $(i + \frac{1}{2}, j, k)$, damit läßt sich die diskrete Form von Gleichung (3.10) im Punkt $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ schreiben als

$$[(uu)_x + (vu)_y + (wu)_z]_{i+\frac{1}{2},j,k} = [(uu)_x]_{i+\frac{1}{2},j,k} + [(vu)_y]_{i+\frac{1}{2},j,k} + [(wu)_z]_{i+\frac{1}{2},j,k} .$$

Dabei werden die einzelnen Terme jeweils approximiert durch

$$[(uu)_x]_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{\delta x} (\tilde{u}_{i+1,j,k} u_{i+1,j,k} - \tilde{u}_{i,j,k} u_{i,j,k}) , \quad (3.14)$$

$$[(vu)_y]_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{\delta y} (\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} - \tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}), \quad (3.15)$$

$$[(wu)_z]_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{\delta z} (\tilde{w}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{w}_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}). \quad (3.16)$$

Die Konvektionsgeschwindigkeiten werden hierbei durch einfache Mittelung berechnet:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,j,k} &= \frac{1}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i-\frac{1}{2},j,k}), \\ \tilde{u}_{i+1,j,k} &= \frac{1}{2} (u_{i+\frac{3}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k}), \\ \tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} &= \frac{1}{2} (v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i+1,j+\frac{1}{2},k}), \\ \tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} &= \frac{1}{2} (v_{i,j-\frac{1}{2},k} + v_{i+1,j-\frac{1}{2},k}), \\ \tilde{w}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} (w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}), \\ \tilde{w}_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} (w_{i,j,k-\frac{1}{2}} + w_{i+1,j,k-\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Die Schwierigkeit besteht nun darin, in (3.14)–(3.16) Approximationen für die Knotenwerte der Geschwindigkeiten ohne Tildemarkierung zu finden, so daß die finiten Differenzen nicht zu unphysikalischen Oszillationen führen. Für alle folgenden Upwind-Methoden wird nur die Berechnung der Gitterknotenwerte $u_{i+1,j,k}$ und $u_{i,j,k}$ aus (3.14) gezeigt. Die anderen Terme aus (3.15) und (3.16) gehen auf analoge Weise hervor. Zur Beschreibung einiger Upwind-Methoden werden zusätzlich Gewichte benötigt, die von der Flußrichtung \tilde{u} abhängen:

$$G_{i+1,j,k} := \begin{cases} 0 & \text{falls } \tilde{u}_{i+1,j,k} \geq 0 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}, \quad G_{i,j,k} := \begin{cases} 0 & \text{falls } \tilde{u}_{i,j,k} \geq 0 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.17)$$

Eine oft verwendete Diskretisierung ist das einfache Upwind-Differenzen-Schema. Dieses ist einerseits sehr stabil, aber andererseits enthält die Lösung starke numerische Diffusion, weil die Approximation der Lösung nur von erster Ordnung ist.

First-Order-Upwind (FOU)

Das Upwind-Verfahren erster Ordnung ist eine linksseitige beziehungsweise rechtsseitige Differenzen-Methode, je nachdem, aus welcher Richtung der *Fluß* \tilde{u} kommt. In der Literatur wird der Fluß auch als *Information* bezeichnet. Die Geschwindigkeiten $u_{i+1,j,k}$ und $u_{i,j,k}$ werden dabei folgenderweise berechnet:

$$u_{i+1,j,k} = (1 - G_{i+1,j,k}) u_{i+\frac{1}{2},j,k} + G_{i+1,j,k} u_{i+\frac{3}{2},j,k}, \quad (3.18)$$

$$u_{i,j,k} = (1 - G_{i,j,k}) u_{i-\frac{1}{2},j,k} + G_{i,j,k} u_{i+\frac{1}{2},j,k}. \quad (3.19)$$

Damit ist eine bezüglich der Maximumsnorm stabile Diskretisierung gegeben (siehe Großmann/Roos [32], S. 348), aber sie ist numerisch diffusiv, denn die Taylorreihen-

entwicklung um $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ (für ein äquidistantes Kartesisches Gitter und $\tilde{u}_{i+1,j,k} \geq 0$)

$$u_{i+1,j,k} = u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{\delta x}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{(\delta x)^2}{8} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right]_{i+\frac{1}{2},j,k} + H ,$$

$H =$ Terme höherer Ordnung ,

zeigt, daß nur der erste Term auf der rechten Seite von diesem Verfahren beibehalten wird. Damit ist es ein Schema erster Ordnung, denn das Restglied der Taylorreihe induziert eine numerische Diffusion der Größenordnung $O(\delta x)$. Diese vergrößert sich sogar im mehrdimensionalen Fall, falls der Fluß diagonal zum Gitter verläuft.

Das Ergebnis der Testrechnungen für das Upwind-Verfahren erster Ordnung ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Die approximierten Lösungen der beiden berechneten Peri-

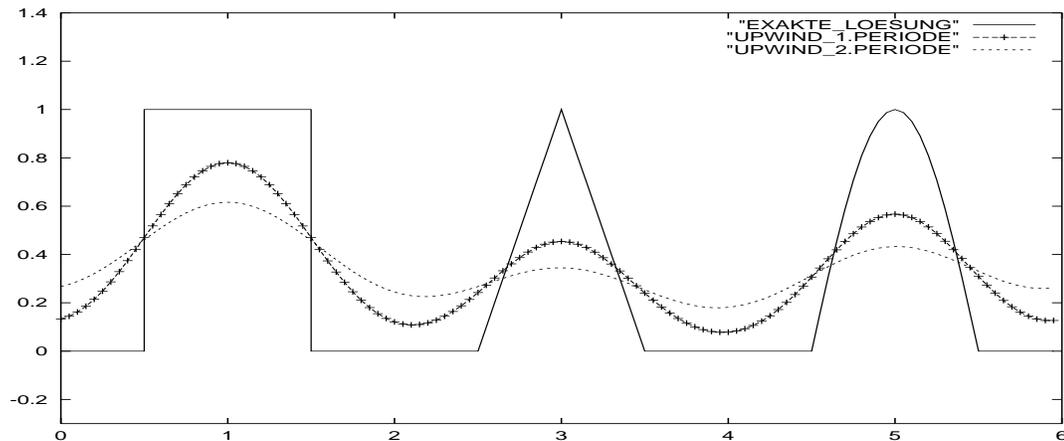


Abbildung 3.3: Upwind erster Ordnung, $N=120$.

oden sind im Vergleich zu der exakten Lösung stark verschmiert. Sowohl die Sprungstellen in der Stufenfunktion, als auch die Höhe aller lokalen Maxima werden durch dieses Upwind-Verfahren nicht erhalten. Das gesamte Anfangsprofil ist durch die numerische Diffusion so intensiv regularisiert worden, das sich über dessen ursprüngliche Form kaum Rückschlüsse ziehen lassen.

Das Ergebnis der zweiten Periode ist desweiteren wesentlich glatter als das Ergebnis der ersten Periode. Wenn wenige zusätzliche Perioden gerechnet werden, dann entsteht ein stationärer Zustand in Form einer horizontalen Linie.

Trotz dieses Nachteils, ist der Vorteil gegeben, daß das Upwind erster Ordnung sowohl an Sprungstellen als auch an Ecken zu keinen instabilen Lösungen führt, also keine unphysikalischen Oszillationen produziert. Dies ist eine wichtige Eigenschaft, die später bei den Universal-Limiter-Methoden eine entscheidende Rolle spielt.

Die im Folgenden beschriebene QUICK-Methode reduziert die numerische Diffusion durch Auswertung höherer Terme in der Taylorreihenentwicklung.

Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics (QUICK)

Eine Verbesserung des einfachen Upwind-Differenzen-Schemas ist das von B.P. Leonard [44] entwickelte QUICK-Verfahren. Er konstruierte eine Methode mittels einer Polynominterpolation zweiten Grades. Zur Auswertung der Polynominterpolation benötigt man drei Stützstellenwerte, dabei wird neben den gegebenen Nachbarwerten von $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$, nämlich $u_{i,j,k}$ und $u_{i+1,j,k}$, der dritte Wert aus der Richtung gewählt, aus der der Fluß \tilde{u} kommt.

Das Quick-Schema besitzt die folgende Form:

$$\begin{aligned}
 u_{i+1,j,k} &:= (1 - G_{i+1,j,k}) \left(\frac{3u_{i+\frac{3}{2},j,k} + 6u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{8} \right) + \\
 &\quad G_{i+1,j,k} \left(\frac{3u_{i+\frac{1}{2},j,k} + 6u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}}{8} \right), \\
 u_{i,j,k} &:= (1 - G_{i,j,k}) \left(\frac{3u_{i+\frac{1}{2},j,k} + 6u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}}{8} \right) + \\
 &\quad G_{i,j,k} \left(\frac{3u_{i-\frac{1}{2},j,k} + 6u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{8} \right),
 \end{aligned}$$

wobei $G_{i+1,j,k}$ und $G_{i,j,k}$ die Gewichte aus (3.17) sind.

Mit Hilfe der Taylorreihenentwicklung läßt sich wie im vorigen Abschnitt zeigen, daß diese quadratische Interpolation einen lokalen Abbruchfehler der Ordnung $O(\delta x^3)$ besitzt. Mit dem Vorteil des kleineren Abbruchfehlers und somit einer geringeren numerischen Diffusion im Vergleich zum einfachen Upwind Schema, geht aber der Nachteil von oszillativen Verhalten einher.

Die Ergebnisse der Testrechnungen mit der linearen Transportgleichung in Abbildung 3.4 belegen die Behauptungen. Das Quick-Schema erzeugt Ober- und Unter-

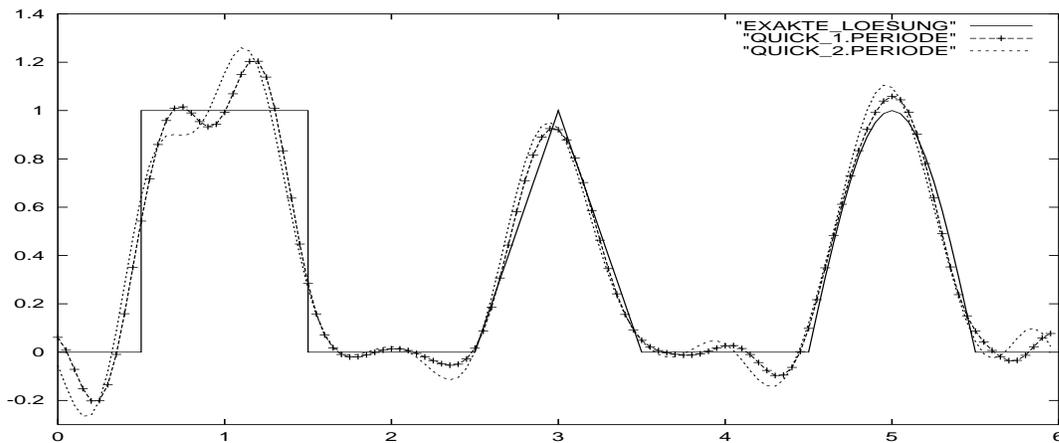


Abbildung 3.4: QUICK-Verfahren, N=120.

schwingungen, aber andererseits werden die Sprungstellen der Stufenfunktion besser

aufgelöst als mit der Upwind-Methode erster Ordnung. Zusätzlich wird die Höhe der lokalen Maxima deutlich besser erhalten. Der qualitative Unterschied zwischen dem Ergebnis der ersten Periode und dem der zweiten Periode ist gering. Folglich ist der zeitliche Zuwachs an numerischer Diffusion stark reduziert im Vergleich zum Upwind-Verfahren erster Ordnung.

Entscheidend ist, daß die Oszillationen im Rahmen der Navier-Stokes-Gleichungen nicht auftreten, wenn ausreichend viskose Fluide modelliert werden. Das ist der Grund, weshalb die QUICK-Methode in vielen Ingenieursanwendungen erfolgreich eingesetzt wurde und schnell an Popularität gewann.

3.4.2 Universal-Limiter-Methoden: SMART und VONOS

Die Ober- und Unterschwingungen beim Quick-Schema können zu Konvergenzproblemen führen. Eine Möglichkeit, diese zu beheben, besteht darin, die Quick-Methode zu beschränken. Mit anderen Worten: Überall dort, wo Ober- und Unterschwingungen entstehen, wird das Upwind-Verfahren erster Ordnung eingeblendet, das aufgrund seiner besseren Stabilität die Entstehung von Oszillationen verhindert.

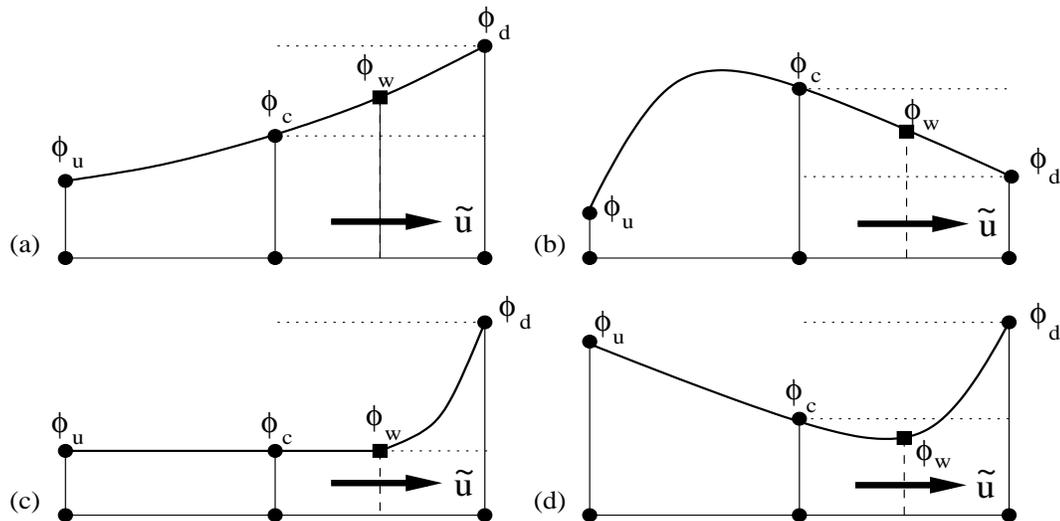


Abbildung 3.5: Transport des Zellwandwertes ϕ_w in Abhängigkeit des lokalen Verhaltens von ϕ : (a) und (c) lokal monoton; (b) und (d) lokal nicht monoton

Diese Idee ist in den Universal-Limiter-Methoden [45, 72, 27] umgesetzt worden. Zur Erklärung wird Abbildung 3.5 verwendet: Sie zeigt einen Querschnitt des Graphen einer transportierten skalaren Größe $\phi(x, y, z)$ in x -Richtung. In Abhängigkeit der Flußrichtung \tilde{u} (hier nach rechts) werden drei Funktionswerte ausgewählt

1. ϕ_u als upwind-Wert,
2. ϕ_c als zentraler Wert,

3. ϕ_d als downwind-Wert.

Die Größe ϕ_w wird durch quadratische Polynominterpolation aus ϕ_u , ϕ_c und ϕ_d berechnet. Dabei kann die Amplitude der skalaren Funktion ϕ nicht zunehmen, also Ober- und Unterschwingungen können nicht entstehen, wenn $\phi_w \in [\phi_c, \phi_d]$ gefordert wird.

Bild (a) für lokal monotones ϕ und Bild (b) für lokal nicht monotones ϕ erfüllen diese Bedingung. Bild (c) zeigt den gültigen Grenzfall $\phi_w = \phi_c$, wohingegen Bild (d), für lokal nicht monotones ϕ , die Bedingung $\phi_w \in [\phi_c, \phi_d]$ verletzt. In Situationen analog zu Bild (d) wird das Upwind-Verfahren erster Ordnung eingeblendet, welches einfach $\phi_w = \phi_c$ setzt.

Um ein allgemeineres Verständnis der Beschränkungskriterien von Universal-Limiter-Methoden zu geben, wird ein Diagramm mit normalisierten Variablen eingeführt: Dabei ist die normalisierte Variable $\tilde{\phi}$ definiert als

$$\tilde{\phi}(x, y, z) = \frac{\phi(x, y, z) - \phi_u}{\phi_d - \phi_u} .$$

Für diese neue Variable gilt insbesondere $\tilde{\phi}_u = 0$ und $\tilde{\phi}_d = 1$. Sämtliche Upwind-Interpolationen, wie zum Beispiel die konstante Interpolation bei dem Upwind-Verfahren erster Ordnung oder die quadratische Interpolation bei dem QUICK-Verfahren, werden im Folgenden durch eine Interpolationsfunktion f dargestellt. Das linke Bild aus Abbildung 3.6 zeigt die $(\tilde{\phi}_c, \tilde{\phi}_w)$ -Ebene, wobei der Wert $\tilde{\phi}_w$ über die jeweils eingesetzte Upwind-Interpolationsfunktion f bestimmt wird, also $\tilde{\phi}_w = f(\tilde{\phi}_c)$.

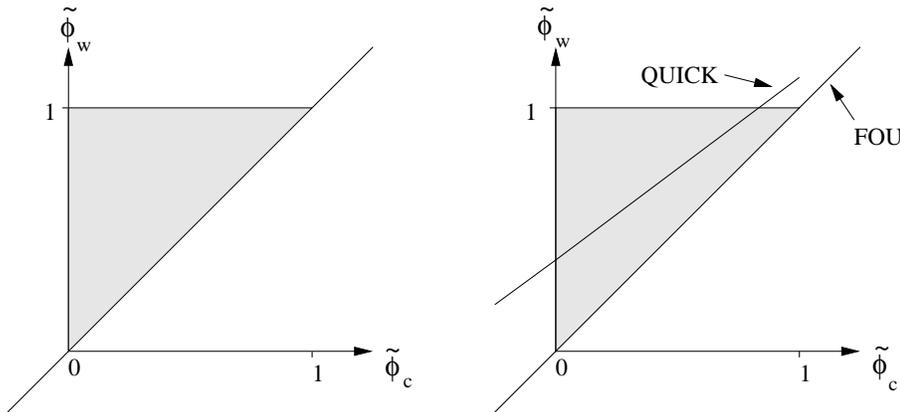


Abbildung 3.6: Links: Beschränktheitsbereich im Diagramm der normalisierten Variablen. Rechts: Verlauf der Geraden von FOU bzw. QUICK

Die Beschränkungskriterien der Universal-Limiter-Verfahren lassen sich nun durch Beschränkungsbedingungen an f folgendermaßen formulieren: Die Interpolationsfunktion f ist beschränkt, wenn gilt

1. Für $\tilde{\phi}_c \in [0, 1]$: $\tilde{\phi}_c \leq f(\tilde{\phi}_c) \leq 1$, $f(0) = 0$ und $f(1) = 1$
2. Für $\tilde{\phi}_c \notin [0, 1]$: $f(\tilde{\phi}_c) = \tilde{\phi}_c$.

Der schattierte Bereich in Abbildung 3.6 (Bild links) zusammen mit der Diagonalen $\tilde{\phi}_w = \tilde{\phi}_c$, zeigt den Beschränktheitsbereich von f . Im Rahmen dieses Diagramms hat die Funktion f für das FOU-Verfahren und die QUICK-Methode folgende Form

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_w^{FOU} &= \tilde{\phi}_c \\ \tilde{\phi}_w^{QUICK} &= \frac{3}{8}(1 + 2\tilde{\phi}_c) .\end{aligned}$$

Beide Graphen sind im rechten Bild von Abbildung 3.6 eingezeichnet. Mit dieser graphischen Darstellung läßt sich schnell erkennen, daß $\tilde{\phi}_w^{FOU}$ die Beschränktheitsbedingung erfüllt und $\tilde{\phi}_w^{QUICK}$ nicht.

Basierend auf der Darstellung mit normalisierten Variablen läßt sich ein QUICK-Verfahren konstruieren, welches die Beschränktheitsbedingungen erfüllt und somit keine Oszillationen mehr produziert.

Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport (SMART)

Das SMART-Verfahren ist ein beschränktes QUICK-Schema, welches das Problem der Ober- und Unterschwingungen behebt. Es wurde von P.H. Gaskell und A.K.C. Lau [27] im Jahre 1988 entwickelt. Der entscheidende Unterschied der SMART-Methode ist, das diese im Gegensatz zur QUICK-Methode die Interpolationsfunktion f nun stückweise so definiert, daß dessen Graph innerhalb des Beschränktheitsbereichs verläuft.

In Abbildung 3.6 verläßt das QUICK-Schema im Punkt $(\tilde{\phi}_c = \frac{5}{6}, \tilde{\phi}_w = 1)$ den Beschränktheitsbereich. Dieser wird nun linear mit dem Punkt $(1,1)$ verbunden und verläuft dann für $\tilde{\phi} > 1$ weiter entlang der Diagonalen. Desweiteren wird der Punkt $(0,0)$ mit der QUICK-Geraden verbunden durch eine Gerade mit der Steigung 10. Schließlich wird für $\tilde{\phi}_c < 0$ wieder $\tilde{\phi}_w = \tilde{\phi}_c$ gesetzt.

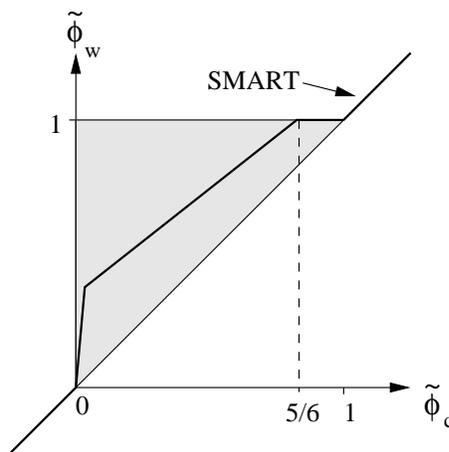


Abbildung 3.7: Das SMART-Diagramm mit normalisierten Variablen

Der Graph der auf diese Weise konstruierten Interpolationsfunktion f des SMART-Schema ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Aus dieser Funktion f lassen sich schließlich

die in den jeweiligen Intervallen eingesetzten Interpolationsfunktionen in eine Finite-Differenzen-Form umschreiben. Dabei sind vorher die normalisierten Variablen $\psi_{i+1,j,k}$ und $\psi_{i,j,k}$ zu berechnen. Insgesamt ist das SMART-Schema zur Berechnung von $u_{i+1,j,k}$ und $u_{i,j,k}$ dann folgendermaßen aufgebaut:

$$\begin{aligned} \psi_{i+1,j,k} &:= (1 - G_{i+1,j,k}) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}} \right) + G_{i+1,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}} \right), \\ u_{i+1,j,k} &:= (1 - G_{i+1,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{5}{6}[\\ u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{5}{6}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ G_{i+1,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{5}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{5}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{5}{6}[\\ u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{5}{6}, 1] \end{array} \right\} \\ \psi_{i,j,k} &:= (1 - G_{i,j,k}) \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}} \right) + G_{i,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}} \right), \\ u_{i,j,k} &:= (1 - L_{i,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{5}{6}[\\ u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{5}{6}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ G_{i,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{5}{6}[\\ u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{5}{6}, 1] \end{array} \right\}, \end{aligned}$$

wobei $G_{i+1,j,k}$ und $G_{i,j,k}$ die Gewichte aus (3.17) sind. Die numerischen Ergebnisse für die eindimensionale Erhaltungsgleichung in Abbildung 3.8 zeigen, daß die Approximation von ähnlicher Qualität ist wie die der QUICK-Methode nur ohne Ober- und Unterschwingungen. Die Lösungen der ersten Periode und der zweiten Periode sind nahezu identisch. Somit ist während der zeitlichen Entwicklung die Zunahme von numerischer Diffusion nur gering. Der größte Anteil an numerischer Diffusion entsteht in der Nähe der Sprungstellen der Stufenfunktion und an dem Maximum der Dreiecksfunktion. Die letztere wird mit dem SMART-Verfahren sogar etwas schlechter approximiert als mit dem QUICK-Schema. Der Grund hierfür ist, daß das SMART-Verfahren in der Nähe des Maximums der Dreiecksfunktion das Upwind-Verfahren erster Ordnung einsetzt, welches bekanntlich diffusiver ist als das quadratische Upwind der QUICK-Methode.

Das SMART-Verfahren kann für Fluide mit sehr geringer Viskosität und hohen Konvektionsgeschwindigkeiten eingesetzt werden, ohne unphysikalische Oszillationen

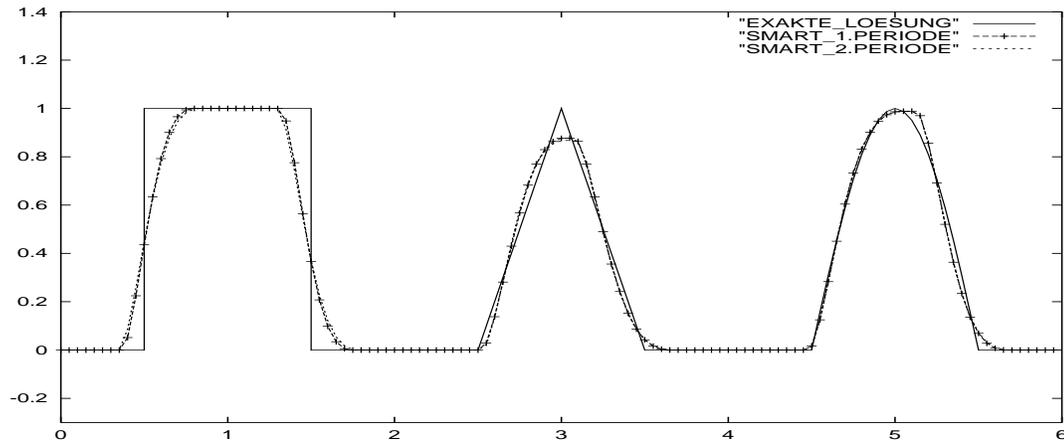


Abbildung 3.8: SMART-Verfahren, $N=120$.

zu erzeugen.

Die von dieser Methode jeweils benötigten sieben Gitterpunkte zur Auflösung der Sprungstellen kann mit dem nun folgenden VONOS-Verfahren nochmals reduziert werden.

Variable-Order Non-Oscillatory Scheme (VONOS)

Das VONOS-Schema ist eines der zuletzt entwickelten Universal-Limiter-Methoden. Es wurde von A. Varonos und G. Bergeles [72] im Jahre 1998 erfunden. Ihre Beobachtung besteht darin, daß insbesondere dort, wo die skalare Funktion ϕ Sprungstellen enthält, ein Upwind-Verfahren mit quadratischen Polynomen schlechtere Ergebnisse liefert als ein Upwind-Verfahren mit linearen Polynomen. Aus diesem Grund haben sie die Fall-

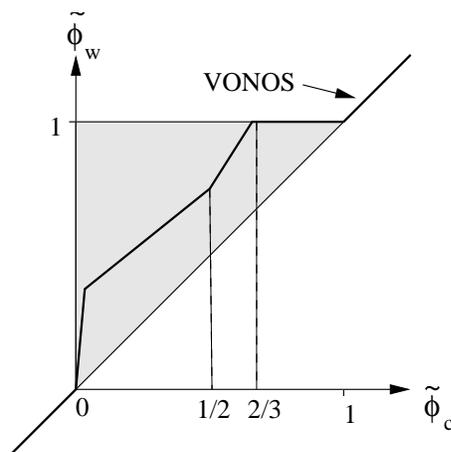


Abbildung 3.9: VONOS-Diagramm in normalisierten Variablen

unterscheidung zwischen den eingesetzten Interpolationen aus dem SMART-Verfahren zusätzlich um eine Upwind-Interpolation mit linearen Polynomen erweitert.

In Abbildung 3.9 ist das VONOS-Schema als Diagramm für normalisierte Variablen dargestellt. Darin ist zu erkennen, daß für $\tilde{\phi}_c \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}[$ ein lineares Upwind, das in normalisierter Darstellung die Form $\tilde{\phi}_w = \frac{3}{2}\tilde{\phi}_c$ hat, eingesetzt wird. Diese Änderung erzeugt eine schärfere Auflösung der Sprungstellen.

Analog zu dem SMART-Schema kann auch hier die stückweise zusammengesetzte Funktion f , die den Graphen in Abbildung 3.9 beschreibt, in eine Finite-Differenzen-Form umgeschrieben werden. Dabei sind auch hier vor der Berechnung der Geschwindigkeiten die normalisierten Variablen $\psi_{i+1,j,k}$ und $\psi_{i,j,k}$ zu bestimmen. Damit hat das VONOS-Verfahren die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned} \psi_{i+1,j,k} &:= (1 - G_{i+1,j,k}) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}} \right) + G_{i+1,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}} \right), \\ u_{i+1,j,k} &:= (1 - G_{i+1,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}[\\ 1.5u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 0.5u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}[\\ u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ G_{i+1,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{5}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{5}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}[\\ 1.5u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 0.5u_{i-\frac{5}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}[\\ u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i+1,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ \psi_{i,j,k} &:= (1 - G_{i,j,k}) \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}} \right) + G_{i,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}} \right), \\ u_{i,j,k} &:= (1 - G_{i,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}[\\ 1.5u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 0.5u_{i-\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}[\\ u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ G_{i,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}[\\ \frac{3}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}[\\ 1.5u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 0.5u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}[\\ u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{falls } \psi_{i,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\}, \end{aligned}$$

wobei $G_{i+1,j,k}$ und $G_{i,j,k}$ die Gewichte aus (3.17) sind. Das Testergebnis für die skalare Erhaltungsgleichung in Abbildung 3.10 zeigt, daß die Sprungstellen der Stufenfunktion

im Vergleich zur SMART-Methode besser aufgelöst werden. Im Gegensatz zu SMART, das sieben Gitterpunkte benötigt, benötigt VONOS nur noch vier Gitterpunkte.

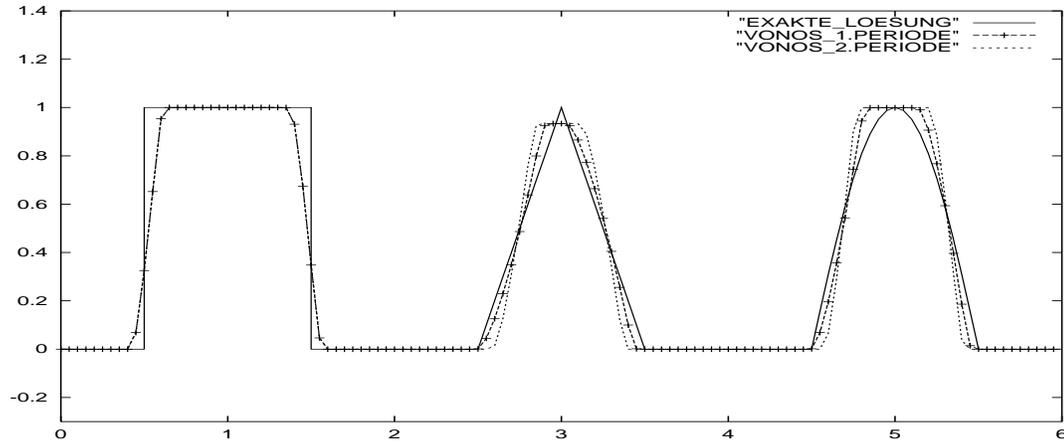


Abbildung 3.10: VONOS-Verfahren, $N=120$.

Dem Vorteil einer besseren Auflösung der Stufenfunktion steht der Nachteil gegenüber, daß dieses Schema unglücklicherweise dazu neigt, alle Profile der skalaren Funktion künstlich steiler zu berechnen. Dies führt schließlich dazu, daß sämtliche lokale Maxima mit der Zeit zu Stufenfunktionen deformieren, wodurch Konvergenzprobleme entstehen können.

Dieses Verhalten ist in dem Artikel von A. Varonos & G. Bergeles [72] nicht festgestellt worden. Sie haben die eindimensionale skalare Erhaltungsgleichung ausschließlich für die Stufenfunktion gerechnet und als nichtlineares Problem die Navier-Stokes-Gleichungen mit dem Nischenströmungstest analysiert. Dabei wurden im Vergleich zu SMART für Reynoldszahlen bis 5000 bessere Ergebnisse erzielt. Die Reynoldszahl ist ein dimensionsloses Maß für die Viskosität eines Fluids.

Für den Fall von reinen oder mit sehr kleiner Viskosität behafteten (also für sehr große Reynoldszahlen) Transportprozessen sind sowohl das SMART-Verfahren als auch die nun folgenden Methoden aus dem Bereich der Adaptive-Stencil-Schemata zu bevorzugen.

3.4.3 Adaptive-Stencil-Methoden: ENO und WENO

Die Idee der Adaptive-Stencil-Methoden unterscheidet sich deutlich von der Idee der Universal-Limiter-Methoden. Denn anstelle eines Schaltungsprozesses zwischen mehreren fest vorgegebenen Interpolationspolynomen, wie es bei den Universal-Limiter-Methoden der Fall ist, konstruieren die Adaptive-Stencil-Schemata für die skalare Funktion ϕ ein Newtoninterpolationspolynom über einen nichtlinearen adaptiven Prozeß. Aus diesem wird dann zum Beispiel für eine polynomiale Rekonstruktion in x -Richtung der Wert $\phi_x(x_{i,j,k}) = [\phi_x]_{i,j,k}$ durch Ableiten des Newtonpolynoms an der Stelle (i, j, k) berechnet.

Entscheidend hierbei ist die Eigenschaft, daß sich Newtoninterpolationspolynome hierarchisch über dividierte Differenzen konstruieren lassen. Dabei kann im Rahmen der Breite des Diskretisierungsterns aus mehreren dividierten Differenzen gewählt werden. Die Wahl der jeweils lokal glattesten dividierten Differenz verhindert, daß Unstetigkeiten den Interpolationsprozeß zu unphysikalischen Oszillationen führen.

Mit den Adaptive-Stencil-Methoden sind die konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichungen in der zu $\nabla \vec{u} \otimes \vec{u}$ äquivalenten Form

$$(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \begin{pmatrix} uu_x + vu_y + wu_z \\ uv_x + vv_y + wv_z \\ uw_x + vw_y + ww_z \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

diskretisiert worden. Denn aufgrund des versetzten Diskretisierungsgitters werden durch Gleichung (3.20) deutlich weniger Interpolationen notwendig, als wenn die Darstellung $\nabla \vec{u} \otimes \vec{u}$ diskretisiert würde. Dabei sind die Konvektionsgeschwindigkeiten an unterschiedlichen Orten zu berechnen. So verlangt die Auswertung von $uu_x + vu_y + wu_z$ die Geschwindigkeiten v und w an den Stellen $\vec{x}_{i \pm \frac{1}{2}, j, k}$. Diese werden durch Lagrangsche Polynominterpolation mit Polynomen dritten Grades ermittelt (siehe Kapitel 5.3). Im Folgenden wird gezeigt wie die Ableitung $(\phi_x)_{i,j,k}$ eines beliebigen skalaren Wertes ϕ an der Stelle (i, j, k) berechnet wird. Das Schema überträgt sich auf analoge Weise für alle konvektiven Terme aus Gleichung (3.20).

Zu den klassischen Vertretern der Adaptive-Stencil-Methoden gehören die ENO- und WENO-Schemata. Eine umfangreiche Einführung in die Methodik dieser Verfahren hat C.W. Shu in [63] veröffentlicht.

ENO (Essentially-Non-Oscillatory)

Die ersten ENO-Methoden wurden von Harten, Enquist, Osher und Chakravarthy [34] im Jahr 1987 veröffentlicht. Seitdem existieren eine Reihe von Weiterentwicklungen. Eine sehr populäre und in vielen Artikeln zitierte ENO-Methode ist die von C.W. Shu und S. Osher [65, 66].

Dort wird zur Berechnung von $[\phi_x]_{i,j,k}$ ein Interpolationspolynom in Newtonform konstruiert, das ϕ im Intervall $I = [x_{i-1}, x_i] \times y_j \times z_k$ von r -ter Ordnung approximiert, und ein weiteres Polynom, das ϕ im Intervall $I = [x_i, x_{i+1}] \times y_j \times z_k$ von r -ter Ordnung approximiert. Die Konvektionsrichtung $u_{i,j,k}$ entscheidet schließlich welches der beiden Polynome zur Bestimmung von $[\phi_x]_{i,j,k}$ eingesetzt wird.

Beispielsweise wird für eine *ENO r -ter Ordnung* Berechnung von $[\phi_x]_{i,j,k}$ zunächst das dividierte Differenzen Tableau erstellt

$$\begin{aligned} \phi[x_i, x_i] &= \phi_{i,j,k} \\ \phi[x_{i-m}, x_{i+l}] &= \frac{\phi[x_{i-m+1}, x_{i+l}] - \phi[x_{i-m}, x_{i+l-1}]}{x_{i+l} - x_{i-m}}, \end{aligned}$$

mit $l, m = 0, \dots, r$. Eine wichtige Eigenschaft von dividierten Differenzen ist

$$\phi[x_{i-m}, x_{i+l}] = \frac{\phi^{(m+l)}(\xi)}{(m+l)!}$$

für ein $\xi \in [x_{i-m}, x_{i+l}]$, solange die Funktion ϕ glatt ist in dem Diskretisierungstern. Falls aber die Funktion ϕ in einem Punkt innerhalb des Diskretisierungstern unstetig ist, so gilt

$$\phi[x_{i-m}, x_{i+l}] = O\left(\frac{1}{(\delta x)^{m+l}}\right).$$

Deshalb können die dividierten Differenzen als ein Maß für die Glattheit des Diskretisierungsterns ausgenutzt werden.

Das Interpolationspolynom wird konstruiert, indem schrittweise ein diskreter Punkt zur kleineren (glatteren) dividierten Differenz hinzugefügt wird. Der zugehörige Algorithmus lautet

1. Setze $P^0 = \phi[x_i, x_i]$.

2. Berechne für $\alpha^{(1)} = i - 1, i$:

(a) $P^1(x) = \phi[x_{\alpha^{(1)}}, x_{\alpha^{(1)}+1}](x - x_i)$.

(b) Berechne für $l = 1, \dots, r - 1$:

i.

$$\begin{aligned} a^l &= \phi[x_{\alpha^{(l)}-1}, x_{\alpha^{(l)}-l}] \\ b^l &= \phi[x_{\alpha^{(l)}}, x_{\alpha^{(l)}+l+1}] \end{aligned}$$

ii.

$$\begin{aligned} c^l &= \begin{cases} a^l & \text{falls } |a^l| \leq |b^l| \\ b^l & \text{sonst} \end{cases} \\ \alpha^{(l+1)} &= \begin{cases} \alpha^{(l)} - 1 & \text{falls } |a^l| \leq |b^l| \\ \alpha^{(l)} & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

iii.

$$P^{l+1}(x) = P^l(x) + c^l \prod_{\alpha=\alpha^{(l)}}^{\alpha^{(l)}+l} (x - x_\alpha)$$

(c) Setze $[\phi_x^-]_{i,j,k} = \frac{d(P^r(x))}{dx}$ falls $\alpha^{(1)} = i - 1$.

Setze $[\phi_x^+]_{i,j,k} = \frac{d(P^r(x))}{dx}$ falls $\alpha^{(1)} = i$.

(d) Upwind:

$$[\phi_x]_{i,j,k} = \begin{cases} [\phi_x^-]_{i,j,k} & \text{falls } u_{i,j,k} > 0 \\ [\phi_x^+]_{i,j,k} & \text{falls } u_{i,j,k} < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Das ENO-Verfahren zweiter Ordnung besitzt einen Diskretisierungstern der Breite von fünf Gitterpunkten und ein ENO-Schema dritter Ordnung benötigt sieben Gitterpunkte. Je höher die Ordnung ist, umso größer wird der Diskretisierungstern. Demzufolge ist bei der Parallelisierung mittels Gebietszerlegung (siehe Kapitel 6) darauf zu achten, daß ausreichend Ghostzellenreihen zur Verfügung stehen. Beide Verfahren wurden anhand der eindimensionalen skalaren Erhaltungsgleichung getestet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.11 dargestellt.

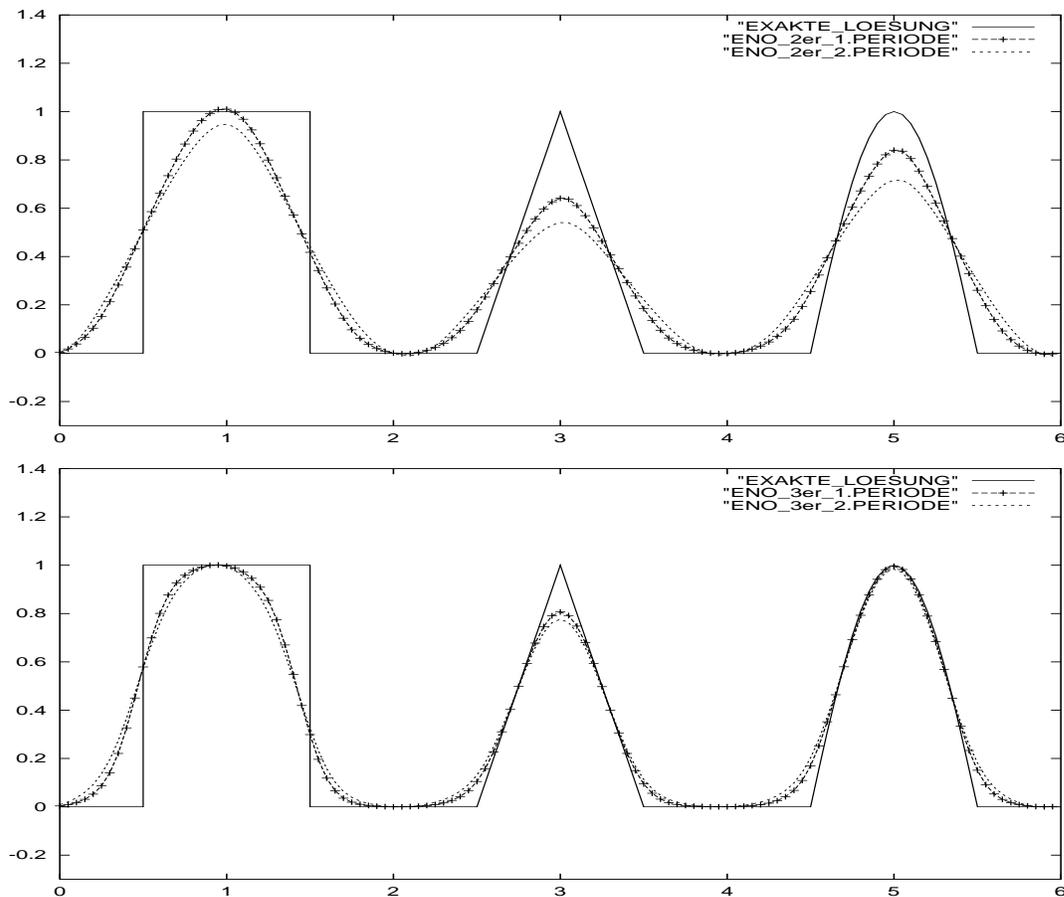


Abbildung 3.11: Oben: ENO-Schema zweiter Ordnung, $N=120$. Unten: ENO-Schema dritter Ordnung, $N=120$.

Es ist ein deutlicher Qualitätsunterschied zwischen dem ENO-Schema zweiter Ordnung und dem dritter Ordnung zu erkennen. Das ENO-Schema zweiter Ordnung enthält mehr numerische Diffusion, die Höhen der lokalen Maxima des Anfangswertprofils werden durch die berechneten Lösungen nicht erhalten. Der Unterschied zwischen der Lösung der ersten Periode und der Lösung der zweiten Periode zeigt einen starken zeitlichen Zuwachs an numerischer Diffusion. Im Vergleich dazu ist beim ENO-Verfahren dritter Ordnung der zeitliche Zuwachs an numerischer Diffusion deutlich geringer. Weiterhin wird durch dieses Schema das lokale Maximum der Sinus-Kurve besser

approximiert als bei SMART oder bei VONOS. Aber an Lipschitz-stetigen Punkten und an Sprungstellen enthält es mehr numerische Diffusion als die Universal-Limiter-Methoden.

WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory)

Die WENO-Methoden nutzen die Möglichkeiten der ENO-Schemata noch etwas besser. Ihre Idee besteht darin, in Bereichen in denen die Funktion ϕ glatt ist, ein zentrales Schema von höherer Approximationsordnung zu verwenden und in der Nähe von Sprungstellen ein ENO-Schema einzusetzen.

Dies wird mit Hilfe einer gewichteten Konvexkombination der dividierten Differenzen des ENO-Schemas erreicht. Alle Gewichte passen sich der Glattheit der jeweiligen dividierten Differenzen an. Dabei variieren diese Gewichte untereinander ebenfalls auf glatte Weise. Die Berechnung dieser Gewichte erfolgt in Abhängigkeit bestimmter Glattheitsmaße. Wie diese Glattheitsmaße bestimmt werden, ist aktuelle Forschung.

Aus einem ENO-Schema der Ordnung r läßt sich im Idealfall ein WENO-Schema der Ordnung $2r-1$ konstruieren. Ein zusätzlicher Vorteil von WENO-Verfahren ist, daß sich daraus der Normalenvektor und die Krümmung der freien Oberfläche stabiler errechnen lassen, bedingt durch die glatte Gewichtung der Differenzensterne [39].

Ein effizientes WENO-Schema fünfter Ordnung ist von Jiang und Shu [38] entwickelt worden. Die Breite des Diskretisierungssterns ist sieben Gitterpunkte. In Bereichen, wo die die Funktion ϕ glatt ist, schaltet es ein zentrales Schema fünfter Ordnung ein, und in Bereichen, wo die Funktion ϕ nicht stetig ist, wird auf ein ENO-Verfahren dritter Ordnung reduziert. Ein zusätzlicher Vorteil bezüglich der Effizienz ist, daß alle logischen Abfragen wegfallen, die beim ENO-Verfahren zu behandeln sind. Die genaue Herleitung der Verfahrens und die Transformation in die Finite-Differenzen-Darstellung ist sehr technisch, hierzu sei auf die Artikel [38, 63] verwiesen.

In Finite-Differenzen-Darstellung wird die Berechnung von $[\phi_x]_{i,j,k}$ auf folgende Weise durchgeführt:

Für die Bestimmung von ϕ_x^- setze

$$q_1 = \frac{\phi_{i-2,j,k} - \phi_{i-3,j,k}}{\delta x}, \quad q_2 = \frac{\phi_{i-1,j,k} - \phi_{i-2,j,k}}{\delta x}, \quad q_3 = \frac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{\delta x},$$

$$q_4 = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\delta x}, \quad q_5 = \frac{\phi_{i+2,j,k} - \phi_{i+1,j,k}}{\delta x}$$

und um ϕ_x^+ zu finden, setze

$$q_1 = \frac{\phi_{i+3,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{\delta x}, \quad q_2 = \frac{\phi_{i+2,j,k} - \phi_{i+1,j,k}}{\delta x}, \quad q_3 = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\delta x},$$

$$q_4 = \frac{\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{\delta x}, \quad q_5 = \frac{\phi_{i-1,j,k} - \phi_{i-2,j,k}}{\delta x}.$$

Als nächstes werden die Glattheitsmaße über

$$IS_1 = \frac{13}{12}(q_1 - 2q_2 + q_3)^2 + \frac{1}{4}(q_1 - 4q_2 + 3q_3)^2$$

$$IS_2 = \frac{13}{12}(q_2 - 2q_3 + q_4)^2 + \frac{1}{4}(q_2 - q_4)^2$$

$$IS_3 = \frac{13}{12}(q_3 - 2q_4 + q_5)^2 + \frac{1}{4}(3q_3 - 4q_4 + q_5)^2$$

und die Gewichte über

$$\omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}, \quad \omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}, \quad \omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$$

mit

$$\alpha_1 = \frac{1}{10} \frac{1}{(\tilde{\epsilon} + IS_1)^2}, \quad \alpha_2 = \frac{6}{10} \frac{1}{(\tilde{\epsilon} + IS_2)^2}, \quad \alpha_3 = \frac{3}{10} \frac{1}{(\tilde{\epsilon} + IS_3)^2}$$

berechnet. Dann wird $[\phi_x^\pm]_{i,j,k}$ ermittelt durch

$$[\phi_x^\pm]_{i,j,k} = \omega_1 \left(\frac{q_1}{3} - \frac{7q_2}{6} + \frac{11q_3}{6} \right) + \omega_2 \left(\frac{-q_2}{6} + \frac{5q_3}{6} + \frac{q_4}{3} \right) + \omega_3 \left(\frac{q_3}{3} + \frac{5q_4}{6} - \frac{q_5}{6} \right).$$

und über die Upwindschaltung wird schließlich $[\phi_x]_{i,j,k}$ bestimmt

$$[\phi_x]_{i,j,k} = \begin{cases} [\phi_x^-]_{i,j,k} & \text{falls } u_{i,j,k} > 0 \\ [\phi_x^+]_{i,j,k} & \text{falls } u_{i,j,k} < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.21)$$

Für die in dieser Arbeit mit diesem WENO-Schema durchgeführten Testrechnungen wurde in α_1, α_2 und α_3 der Wert $\tilde{\epsilon} = 10^{-6}$ verwendet. Das Ergebnis für die skalare Erhaltungsgleichung zeigt in Abbildung 3.12 eine sehr gute Erhaltung der glatten Bereiche des Anfangsprofils und ein nahezu unverändertes Verhalten der Ergebnisse aus der ersten und der zweiten Periode. Die Stufenfunktion wird etwas besser aufgelöst als mit

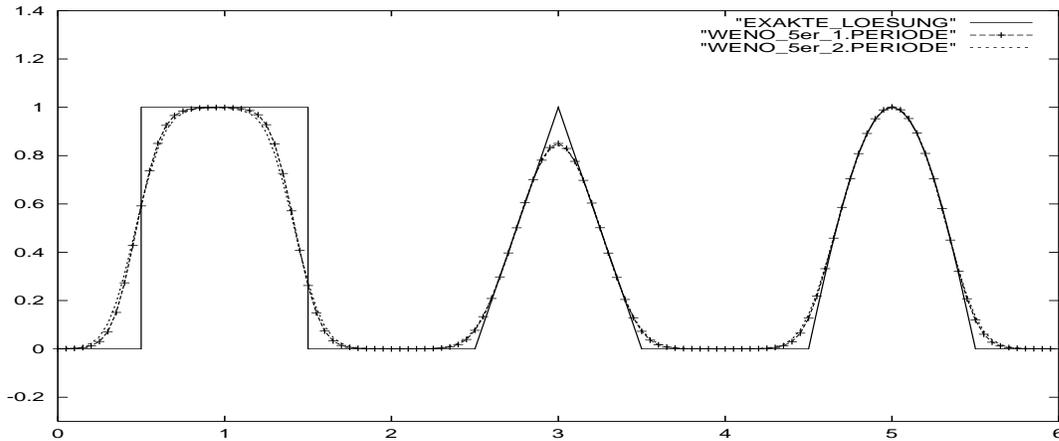


Abbildung 3.12: WENO-Schema fünfter Ordnung, $N=120$.

dem ENO-Verfahren dritter Ordnung, trotzdem verhält sich diese WENO-Methode an Sprungstellen schlechter als VONOS oder SMART, die dort mit ihren Limiter-Ansatz überlegen sind.

Hinsichtlich einer guten Konvergenzordnung für die Krümmungsberechnung (siehe Kapitel 5.2.2) ist dieses WENO-Schema fünfter Ordnung sowohl für die konvektiven

Terme der Navier-Stokes-Gleichungen, als auch für die konvektiven Terme der Transportgleichung implementiert worden. Da mit den Navier-Stokes-Gleichungen viskose Fluide betrachtet werden, treten in der Regel keine Strömungsprofile auf, die Sprungstellen besitzen. Deshalb ist die Schwachstelle des WENO-Verfahrens an Sprungstellen von geringerer Bedeutung.

3.4.4 Randbehandlung

Die Breite der Diskretisierungssterne aus den Universal-Limiter- und Adaptive-Stencil-Methoden bilden ein Problem in der Nähe von Gebietsrändern. Dort greifen sie auf Gitterzellen zu, die außerhalb des Rechengebietes liegen. Was für Werte sind in diese Gitterzellen zu setzen?

Die natürlichste Art die Ränder zu behandeln, besteht darin, nur Werte zu verwenden die innerhalb des Rechengebietes liegen. Anders formuliert, alle Teilsterne eines ENO-Schemas sollten so gewählt werden, daß sie nur auf vorhandene Gitterpunkte des Rechengebietes zugreifen. Um teure logische Operationen zu umgehen wie beispielsweise Randabfragen, werden zu Beginn einer Rechnung alle Randzellen außerhalb des Fluidgebietes mit sehr großen und stark variierenden Werten besetzt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden diese Randzellen mit den folgenden Werten belegt: $R_{-i,j,k} = (-1)^i E_{10}$ für $x_{-i,j,k}$ als Randzellenpunkte mit $j = 1, \dots, J$, $k = 1, \dots, K$ und $i = 1, 2, \dots$ bestimmt die Anzahl der Randzellenreihen linksseitig des Rechengebietes; analoges gilt für alle anderen Gebietsränder. Dadurch greifen die ENO/WENO-Schemata ausschließlich auf finite Differenzen, die aus dem Fluidgebiet stammen, weil diese glatter sind. Mit dieser Technik ermöglicht das WENO-Schema fünfter Ordnung eine Randbehandlung dritter Ordnung.

Für die Universal-Limiter-Methoden wird aufgrund ihres nichtadaptiven Konstruktionsschemas in den meisten Fällen die Breite des Diskretisierungssterns in der Nähe des Gebietsrandes reduziert und somit auf ein Verfahren erster oder zweiter Ordnung zurückgegriffen.

Dieser Nachteil der Randbehandlung bei Universal-Limiter-Methoden ist ein weiterer Grund, weshalb in dieser Arbeit der konvektive Term der Navier-Stokes-Gleichungen und der konvektive Term der Transportgleichung (siehe Kapitel 5.7) mit dem WENO-Schema fünfter Ordnung diskretisiert wurde.

3.5 Der Löser für die Poissongleichung

Das Hilfsgeschwindigkeitsfeld \vec{u}^* aus (3.1)

$$\vec{u}^* = \vec{u}^n + \delta t (-\nabla(\vec{u}^n \otimes \vec{u}^n) + \vec{g} + \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot (\mu D^n))) , \quad (3.22)$$

ist im Allgemeinen nicht divergenzfrei, das heißt $\nabla \cdot u^* \neq 0$. Um aber die von der Kontinuitätsgleichung (2.4) geforderte Divergenzfreiheit zu erhalten, muß die Poisson-

Gleichung

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} = \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\delta t} \quad (3.23)$$

möglichst effizient gelöst werden. Dazu wird zunächst die rechte Seite von Gleichung (3.23) mit zentralen Differenzen im Zellmittelpunkt ausgewertet, also

$$\left[\frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\delta t} \right]_{i,j,k} = \frac{1}{\delta t} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^* - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^*}{\delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^* - v_{i,j-\frac{1}{2},k}^*}{\delta y} + \frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^* - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^*}{\delta z} \right). \quad (3.24)$$

Die linke Seite von (3.23) wird ebenfalls im Zellmittelpunkt mit zentralen Differenzen berechnet. Da in diesem Kapitel nur inkompressible Einphasenströmungen betrachtet werden, ist die Dichte ρ eine globale Konstante, so daß hier keine Interpolationen von Dichtewerten notwendig sind. Die diskrete Form ist somit folgende

$$\begin{aligned} \left[\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right]_{i,j,k} &= \frac{1}{\delta x} \left(\left(\frac{p_{i+1,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{(\delta x)\rho} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i-1,j,k}^{n+1}}{(\delta x)\rho} \right) \right) \\ &+ \frac{1}{\delta y} \left(\left(\frac{p_{i,j+1,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{(\delta y)\rho} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j-1,k}^{n+1}}{(\delta y)\rho} \right) \right) \\ &+ \frac{1}{\delta z} \left(\left(\frac{p_{i,j,k+1}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{(\delta z)\rho} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1}}{(\delta z)\rho} \right) \right). \end{aligned}$$

Die Poissongleichung führt dazu, daß ein Gleichungssystem der Form $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit einer dünnbesetzten Matrix \mathbf{A} gelöst werden muß. Diese Gleichungssysteme können sehr groß sein, denn für jede Gitterzelle gibt es eine Unbekannte. Direkte Lösungsverfahren, wie das Gauß'sche Eliminationsverfahren, sind hierfür ungeeignet, da sie eine Komplexität der Ordnung $O(n^3)$ und im ungünstigsten Fall einen Speicherplatzbedarf von $O(n^2)$ haben, wobei n die Zahl der Unbekannten ist. Da es nicht notwendig ist, die auftretenden linearen Gleichungssysteme exakt zu lösen, reicht es, iterativ eine approximierete Lösung zu berechnen. In M. Griebel et al. [29] wird zur iterativen Lösung der Poissongleichung für einphasige Probleme das SOR-Verfahren [32] vorgeschlagen.

Die effizientesten bekannten Methoden zur Lösung von Gleichungssystemen sind *Mehrgitterverfahren*. Doch diese Verfahren müssen an jedes Problem, insbesondere bei allgemeinen Geometrien, angepaßt werden.

In der Praxis stellen Krylov-Unterraum-Verfahren, wie zum Beispiel das Verfahren der konjugierten Gradienten, eine bessere Alternative zu dem SOR-Verfahren dar und diese sind darüber hinaus flexibler als Mehrgitterverfahren.

Motiviert durch H. van der Vorst et al. [3] wurde im Rahmen dieser Arbeit eine verbesserte Variante des BiCGSTAB-Verfahren programmiert und parallelisiert. Für Zweiphasenprobleme ist schließlich noch ein Jacobi-Vorkonditionierer hinzugefügt worden (siehe Kapitel 6.4).

Die BiCGSTAB-Methode [73] hat den Vorteil, auf unsymmetrische Matrizen \mathbf{A} angewendet werden zu können und weist im Vergleich zu anderen Krylov-Unterraum-

Methoden ein schnelleres und glatteres Konvergenzverhalten auf (vgl. [48]). Der zugehörige Algorithmus des stabilisierten BiCGSTAB-Verfahrens lautet:

Stabilisierter BiCGSTAB-Algorithmus
wähle \mathbf{x}_0 und $\epsilon, \tilde{\epsilon} > 0$
$\mathbf{r}_0 := \mathbf{p}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, j := 0$
Solange $\ \mathbf{r}_j\ _2 < \epsilon$
$\mathbf{v}_j := \mathbf{A}\mathbf{p}_j$
$\sigma_j := (\mathbf{v}_j, \mathbf{r}_0)_2$
Wenn $ \sigma_j > \tilde{\epsilon}\ \mathbf{v}_j\ _2\ \mathbf{r}_0\ _2$ dann
$\alpha_j := \frac{(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_0)_2}{\sigma_j}$
$\mathbf{s}_j := \mathbf{r}_j - \alpha_j\mathbf{v}_j$
sonst
$\mathbf{x}_0 := \mathbf{x}_j$
Neustart
Wenn $\ \mathbf{s}_j\ _2 > \epsilon$ dann
$\mathbf{t}_j := \mathbf{A}\mathbf{s}_j$
$\omega_j := \frac{(\mathbf{t}_j, \mathbf{s}_j)_2}{(\mathbf{t}_j, \mathbf{t}_j)_2}$
$\mathbf{x}_{j+1} := \mathbf{x}_j + \alpha_j\mathbf{p}_j + \omega_j\mathbf{s}_j$
$\mathbf{r}_{j+1} := \mathbf{s}_j - \omega_j\mathbf{t}_j$
$\beta_j := \frac{\alpha_j(\mathbf{r}_{j+1}, \mathbf{r}_0)_2}{\omega_j(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_0)_2}$
$\mathbf{p}_{j+1} := \mathbf{r}_{j+1} + \beta_j(\mathbf{p}_j - \omega_j\mathbf{v}_j)$
$j := j + 1$
sonst
$\mathbf{x}_{j+1} := \mathbf{x}_j + \alpha_j\mathbf{p}_j$
$\mathbf{r}_{j+1} := \mathbf{s}_j$
$j := j + 1$

Dabei werden in jedem Iterationsschritt homogene Neumann-Randwerte für den Druck gesetzt. Der Vorteil des stabilisierten BiCGSTAB-Verfahrens gegenüber dem herkömmlichen BiCGSTAB-Verfahren ist, daß zwei mögliche Verfahrensabbrüche aufgehoben werden. Zunächst wird vor der Berechnung des Skalars α_j die Größe des auftretenden Nenners überprüft, um bei großen aber annähernd orthogonalen Vektoren \mathbf{v}_j und \mathbf{r}_0 eine Division durch sehr kleine Werte zu vermeiden. Liegt der Betrag des Nenners relativ zur Länge der Vektoren \mathbf{v}_j und \mathbf{r}_0 unterhalb einer vorgegebenen Schranke, so wird ein Neustart des Verfahrens mit $\mathbf{x}_0 := \mathbf{x}_{j+1}$ durchgeführt. Eine weitere mögliche Division durch Null tritt bei der Berechnung von ω_j auf. Zur Behebung dieser Problematik wird in [3] eine Kontrolle des Vektors \mathbf{s}_j empfohlen, der dem Residuenvektor im BiCGSTAB-Verfahren entspricht. Gilt $\|\mathbf{s}_j\|_2 \leq \epsilon$, so ergibt sich mit

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j\mathbf{p}_j$$

bereits

$$\|\mathbf{r}_{j+1}\|_2 = \|\mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{v}_j\|_2 = \|\mathbf{s}_j\|_2 \leq \epsilon ,$$

wodurch keine Notwendigkeit zur Ermittlung des Vektors \mathbf{t}_j und damit der Berechnung der skalaren Größe ω_j vorliegt.

Die Approximation der Lösung braucht nur bis zu einer gewissen Qualität zu erfolgen, die vom Benutzer bestimmt wird. Dazu ist es notwendig, Konvergenz- und Haltekriterien für die iterativen Verfahren festzulegen. In dieser Arbeit wurden die folgenden Kriterien implementiert:

- die maximale Anzahl der Iterationen n wird vorgegeben,
- die Norm des Residuums $\|\mathbf{r}_j\|_2 = \|\mathbf{A}\mathbf{x}_j - \mathbf{b}\|_2$ unterschreitet einen vorgegebenen Wert ϵ .

Es werden dabei vor jedem Iterationsschritt homogene Randbedingungen für den Druck gesetzt. Sowohl das BiCGSTAB-, als auch das Red-Black-Verfahren sind gegeneinander getestet worden. Als Leistungsvergleich für den einphasigen Fall diente das Nischenströmungsproblem. Dazu wurde der Einheitswürfel in 60^3 Gitterzellen unterteilt und eine Viskosität $\mu = 0.001$ verwendet, die obere Würfelseite bewegt sich mit Geschwindigkeit $\vec{u} = (1, 0, 0)$ in tangentialer Richtung. An allen anderen Seiten sind Haftbedingungen gesetzt worden. In Abbildung 3.13 ist der Verlauf des Residuums in der L^2 -

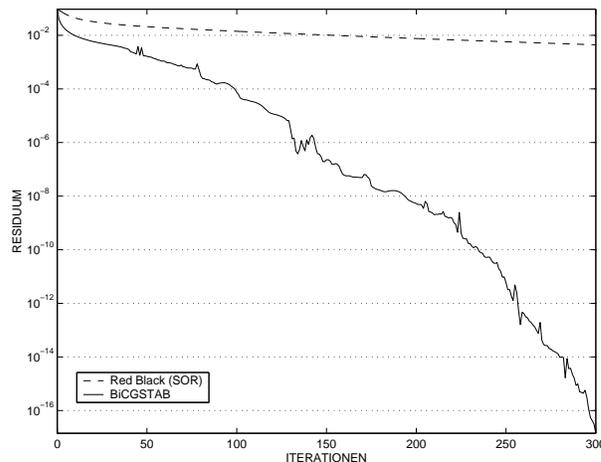


Abbildung 3.13: Glättung des Residuums bei dem Nischenströmungsproblem

Norm für die erste Iteration der Poisson-Gleichung dargestellt. Da der Druck zu Beginn mit Null initialisiert wurde, stellt er im ersten Zeitschritt einen schlechten Anfangswert für die Poissongleichung dar, so daß dort die Leistung des Lösers am stärksten gefragt ist. Im späteren Verlauf der Zeititeration ist der Druck aus dem vorherigen Zeitschritt ein guter Anfangswert für die Berechnung des aktuellen Drucks, dadurch werden in der Regel weniger Iterationsschritte benötigt.

3.6 Die Zeitschrittweitensteuerung

Die Berechnung der Simulationen wird mit einer Zeitschrittweitensteuerung kontrolliert. Sie wird beschränkt durch den konvektiven und viskosen Term und durch die Volumenkräfte der Navier-Stokes-Gleichungen. Im Folgenden wird Schrittweise auf die letzten Endes verwendete Zeitschrittweitensteuerung hingeführt, mit der sichergestellt werden soll, daß die Informationen pro Zeitschritt maximal nur eine Gitterzelle weit fließen können, da die diskreten Differentialgleichungen nur Flüsse zwischen benachbarten Gitterzellen betrachten.

Die Zeitschrittweitenbeschränkung des konvektiven Terms sorgt dafür, daß keine Konvektion weiter als eine Gitterzelle pro Zeitschritt stattfindet. Diese Bedingung ist als Courant-Friedrichs-Levi-Bedingung (CFL-Bedingung) bekannt und fordert

$$\delta t_k \leq \min_{\Omega} \left(\frac{\delta x}{|u|_{max}}, \frac{\delta y}{|v|_{max}}, \frac{\delta z}{|w|_{max}} \right), \quad (3.25)$$

wobei $|\cdot|_{max}$ für die maximale Absolutgeschwindigkeit steht.

Wenn die dynamische Viskosität $\mu > 0$ ist, dann darf die Diffusion ebenfalls nicht weiter als eine Gitterzellenweite pro Zeitschritt wirken. Dies führt zu der folgenden Zeitschrittweitenbeschränkung bezüglich der viskosen Terme

$$\delta t_v \leq \left(\frac{\mu}{\rho} \left(\frac{2}{(\delta x)^2} + \frac{2}{(\delta y)^2} + \frac{2}{(\delta z)^2} \right) \right)^{-1}. \quad (3.26)$$

Diese Ungleichung (3.26) resultiert aus der Stabilitätsanalyse [54] für eine explizite Zeitdiskretisierung der Diffusionsgleichung.

Die Volumenkräfte, wie zum Beispiel die Gravitation, können in der Konvektionsabschätzung (3.25) mitberücksichtigt werden, denn $|u|_{max} + |g_1|\delta t$ ist eine lineare Approximation an die obere Schranke der Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung inklusive der Volumenkraft. Damit lautet die um die Volumenkraft g_1 erweiterte CFL-Bedingung für die Zeitschrittweite δt_{gk}^u bezüglich der u -Komponente des Geschwindigkeitsfeldes

$$\delta t_{gk}^u \leq \left(\frac{|u|_{max} + |g_1|\delta t_{gk}^u}{\delta x} \right)^{-1}$$

oder nach δt_{gk}^u aufgelöst, ergibt sich die Darstellung

$$\delta t_{gk}^u \leq 2 \left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + \sqrt{\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} \right)^2 + \frac{4|g_1|}{\delta x}} \right)^{-1}. \quad (3.27)$$

Analog dazu errechnen sich die Abschätzungen bezüglich der v - und w -Geschwindigkeitskomponente inklusive der Volumenkräfte. Ferner können die konvektiven und diffusiven Kräfte gemeinsam wirken. Aus diesem Grund ist noch die die Zeitschrittweiten-

beschränkung bezüglich des viskosen Terms (5.18) in die Abschätzung (3.27) einzubeziehen. Zusammen mit $V := \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{2}{(\delta x)^2} + \frac{2}{(\delta y)^2} + \frac{2}{(\delta z)^2} \right)$ ergibt sich damit

$$\delta t_{gkv}^u \leq 2 \underbrace{\left(\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right) + \sqrt{\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right)^2 + \frac{4|g_1|}{\delta x}} \right)^{-1}}_{=: C_u}. \quad (3.28)$$

C_v und C_w lassen sich entsprechend definieren, so daß man $\delta t_{gkvo}^{u/v/w} \leq 2C_{u/v/w}$ erhält. Die vollständige Zeitschrittweitensteuerung lautet dann schließlich

$$\delta t \leq 2\tau \min_{\Omega} (C_u, C_v, C_w), \quad (3.29)$$

Dabei ist $\tau \in (0, 1]$ eine Sicherheitskonstante für die Zeitschrittweite. Sie ist notwendig, weil lediglich die Geschwindigkeiten aus dem vorangegangenen Zeitschritt bekannt sind. Im Allgemeinen ist τ umso kleiner zu wählen, je dynamischer sich die Strömung verhält.

Kapitel 4

Level-Set-Approximation der freien Oberfläche

Es gibt unterschiedliche numerische Ansätze zur Beschreibung freier Ränder. Zunächst wird ein kleiner Überblick über die populärsten Methoden gegeben. Im Rahmen dieser Arbeit ist die Level-Set-Methode eingesetzt worden. Die Oberflächenspannung wird dabei über die Level-Set-Funktion mit den Navier-Stokes-Impulsgleichungen gekoppelt. Diese Kopplung erfordert in jedem Zeitschritt eine Reinitialisierung der Level-Set-Funktion, um bestimmte Eigenschaften zu erhalten. Am Ende dieses Kapitels wird die Level-Set-Methode im Zusammenhang mit Hindernissen kurz erklärt.

4.1 Traditionelle Techniken für freie Oberflächen

Die klassischen Methoden, die bis heute eingesetzt und weiterentwickelt werden, lassen sich grob in vier Klassen einteilen: *Moving-Grid-Verfahren*, *Surface-Tracking-Methoden*, *Volume-Tracking-Techniken* und *Front-Capturing-Methoden*.

Moving-Grid-Methoden

Moving-Grid-Verfahren beschreiben die freie Oberfläche entlang wohldefinierter Zellränder. Die Idee dabei ist, das Gitter zusammen mit der Fluidgeschwindigkeit zu transportieren, so daß es im zeitlichen Verlauf an die freie Oberfläche angepaßt bleibt. Lagrange- und Lagrange-Euler-Methoden zählen zu den bekanntesten Vertretern der Moving-Grid-Klasse.

Es gibt verschiedene Lagrange'sche Ansätze. Eine Möglichkeit ist, auf einem rechteckigen Gitter zu rechnen, welches sich während der zeitlichen Entwicklung verzerrt. Eine andere Möglichkeit ist, auf verallgemeinerten orthogonalen Gittern zu rechnen, die der Form der freien Oberfläche angepaßt sind. Darüber hinaus gibt es auch Lagrange'sche Methoden auf triangulierten Gittern.

Sie haben alle den Vorteil gemeinsam, daß sich die freie Oberfläche zu jedem Zeitpunkt gut darstellen läßt, solange die Deformation des Gitters moderat bleibt. Wenn aber die Fluidströmung das Gitter extrem verformt, dann kann es zu numerischen

Instabilitäten kommen.

Ein Weg, starke Gitterverzerrungen zu beheben, besteht darin, neue Gitter zu erzeugen. Dabei wird, wenn notwendig, ein weniger verformtes Gitter konstruiert, auf dem die physikalischen Größen durch Interpolation aus den alten Gitterwerten berechnet werden. Diese Interpolationen induzieren numerische Diffusion, wodurch ein künstliches Verschwimmen der freien Oberfläche erfolgt. Die Verwendung von Dreiecksgittern reduziert diese Diffusion auf Kosten einer komplizierteren Verwaltung der Gitterpunkte und eines erhöhten Speicherplatzbedarfs.

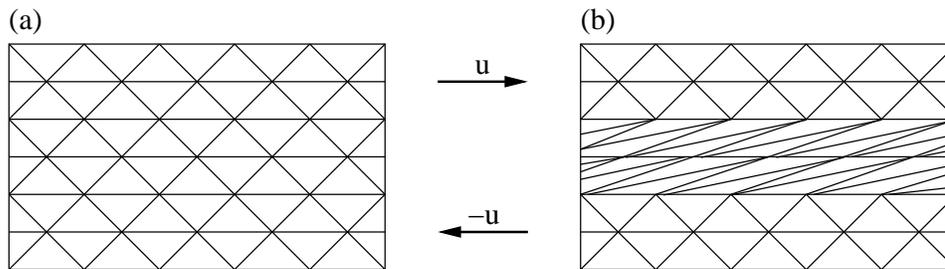


Abbildung 4.1: Scherströmung: (a): Anfangsbedingung der Scherströmung. (b): Gitterverzerrung durch die Fluidgeschwindigkeit u und $-u$. Neue Verknüpfung der Gitterpunkte ergibt wieder (a).

Ausschlaggebend für den Nachteil von rechteckigen Gittern ist die unflexible Verbindung unter den Gitterpunkten. Jeder Gitterpunkt innerhalb des Rechengebietes gehört zu genau vier Rechtecken (in zwei Raumdimensionen). Diese Einschränkung hat bei der Neukonstruktion des Gitters zur Folge, daß im Allgemeinen mehr Interpolationen notwendig werden als auf Dreiecksgittern, denn triangulierte Gebiete können jedem Gitterpunkt beliebig viele Dreiecke zuordnen. Diese höhere Flexibilität ermöglicht die Konstruktion eines uniformeren Gitters mit weniger Interpolationen. Zum Beispiel zeigt Abbildung 4.1(b) in die Länge gestreckte dreieckige Gitterzellen an der Grenzschicht einer Scherströmung. Das Ersetzen durch symmetrischere Dreiecke benötigt (im Idealfall) keine zusätzlichen Gitterpunktinterpolationen (siehe 4.1 (a)).

Weiterhin gibt es auch Mischformen zwischen Lagrange'schen und Euler'schen Methoden, sogenannte Lagrange-Euler'sche-Verfahren. Dabei wird die Fluidströmung auf dem Euler'schen Gitter ausgewertet und die freie Oberfläche mit einem darübergelegten Lagrange'schen Gitter dargestellt. Diese Idee kombiniert die Vorteile eines rechteckigen Gitters, auf dem sich die Strömung leicht berechnen läßt, mit den Vorteilen eines Lagrange'schen Gitters, durch das die freie Oberfläche gut approximiert wird.

Die Berechnung eines Zeitschrittes verläuft dabei über mehrere Stationen. Zuerst wird das Lagrange'sche Gitter, über das die freie Oberfläche dargestellt wird, mit der Fluidgeschwindigkeit des Euler'schen Gitters transportiert. Über dieses neue Lagrange'sche Gitter kann nun jeder Punkt auf dem Euler'schen Gitter genau einer Phase zugeordnet werden. Dadurch lassen sich die Phaseneigenschaften (Viskosität, Dichte, ...)

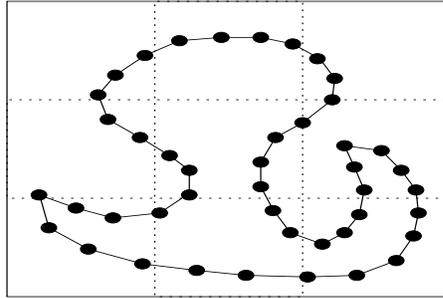


Abbildung 4.2: Oberflächenbeschreibung mit der Surface-Marker-Methode

in jedem Punkt des Euler'schen Gitters bestimmen. Schließlich wird die Berechnung der neuen Strömungsdaten bezüglich der verschiedenen Phasen auf dem Euler'schen Gitter durchgeführt. Mit den neuen Geschwindigkeits- und Druckwerten werden dann wieder die aktuellen Lagrange'schen Positionen ermittelt. Diese dienen als Ausgangspunkt für den nächsten Zeitschritt.

Lagrange-Euler'sche Methoden haben den Nachteil, daß Informationen beider Gitter zu speichern sind und zusätzlich zwischen beiden Gittern interpoliert werden muß, wodurch numerische Diffusion entsteht.

Surface-Tracking-Methoden

Surface-Tracking-Verfahren beschreiben die freie Oberfläche mit Marker-Partikeln, die auf ihr verteilt liegen. Die vollständige Oberfläche wird dann mit einer verknüpften Sequenz von Kurveninterpolationen rekonstruiert. In jedem Zeitschritt wird nur der Transport der Partikel innerhalb des Strömungsfeldes berechnet. Eine bis heute erfolgreich eingesetzte Surface-Tracking-Anwendung ist die Surface-Marker-Methode (SM).

Die Surface-Marker-Technik wurde von S.Chen, D.B. Johnson und P.E. Raad [11] entwickelt. Sie haben dabei Einphasenprobleme mit freien Rändern in zwei Raumdimensionen betrachtet, also ein Fluid im Vakuum. Eine Erweiterung auf dreidimensionale Probleme wurde von A. Dehmel [20] entwickelt.

In [11] wird die freie Oberfläche innerhalb eines rechteckigen Euler'schen Gitters mittels einer verketteten Liste von Marker-Partikeln repräsentiert, die linear miteinander verbunden werden. Abbildung 4.2 zeigt ein solches Beispiel. Zur Bewegung der Oberfläche ist nicht die Kenntnis der Geschwindigkeiten im gesamten Gebiet erforderlich, sondern nur in einer Umgebung des freien Randes. Zusätzlich können Oberflächendetails, die feiner sind als die Schrittweite des Euler'schen Gitters, mit Hilfe der Partikel aufgelöst werden. Um bei sich im zeitlichen Verlauf vergrößernden Gebieten die Randbeschreibung nicht zu ungenau werden zu lassen, sollte nach jedem Zeitschritt der Abstand benachbarter Partikel kontrolliert werden. Wenn die Distanz eine vorgegebene Schranke überschreitet, wird durch Interpolation ein zusätzliches Partikel eingesetzt. Umgekehrt sollten in sehr dicht aufgelösten Randbereichen Partikel gelöscht werden,

um den Speicher- und Rechenaufwand zu reduzieren. Die Berechnung des Transportes der Partikel erfolgt aus der Strömungsgeschwindigkeit des Euler'schen Gitters durch bilineare Interpolation.

Schwierigkeiten bei dieser Methode treten auf, wenn Fluidfronten aufeinandertreffen oder sich abspalten. Solche topologischen Änderungen erfordern spezielle Erkennungsverfahren. Diese müssen angeben, wann zwei Partikellisten zu einer einzigen zusammengefügt werden oder eine Partikelliste in zwei getrennte aufgeteilt wird. Darüber hinaus ist eine Erweiterung auf drei Raumdimensionen nur mit einer komplizierteren Datenverwaltung möglich. Denn statt eines einfachen Polygonzuges durch eine Partikelliste wird nun ein zweidimensionales Dreiecksnetz zur Beschreibung der Oberfläche nötig, das aus Listen von Dreiecken, Kanten und Ecken besteht.

Volume-Tracking-Methoden

Volume-Tracking-Techniken sind Euler'sche Verfahren, die über eine Volumenanteilsfunktion den Fluid-Füllstand in jeder Gitterzelle angeben. Es wird nur der Transport des Fluid-Volumens berechnet und dann aus ihm, wenn nötig, die freie Oberfläche rekonstruiert. Eine der populärsten Volume-Tracking-Techniken ist die Volume-of-Fluid (VOF) Methode.

Die Volume-of-Fluid-Technik wurde 1979 von Hirt und Nichols [35] entwickelt. Sie ermöglicht die Berechnung von sich ablösenden und aufeinandertreffen Fluidpartien in sowohl zwei als auch drei Raumdimensionen.

Im zweidimensionalen Fall wird die freie Oberfläche mit einer geschlossenen Kurve $\Gamma_f \subset \Omega \subset \mathbb{R}^2$ über einem Euler'schen Gitter identifiziert. Die Idee ist nun, eine sogenannte Volumenanteilsfunktion $F : \Omega \times [0, t_{end}] \mapsto [0, 1]$ einzuführen, die in jeder Gitterzelle den Anteil des Fluidvolumens innerhalb der freien Oberfläche angibt. Für eine Gitterzelle, die vollständig außerhalb von Γ_f liegt, gilt $F = 0$. Für eine Gitterzelle, die vollständig innerhalb Γ_f liegt, gilt $F = 1$. Für Gitterzellen, die von Γ_f durchlaufen werden, ist $F \in (0, 1)$, wobei der genaue Wert den Volumenanteil innerhalb von Γ_f am gesamten Zellvolumen repräsentiert.

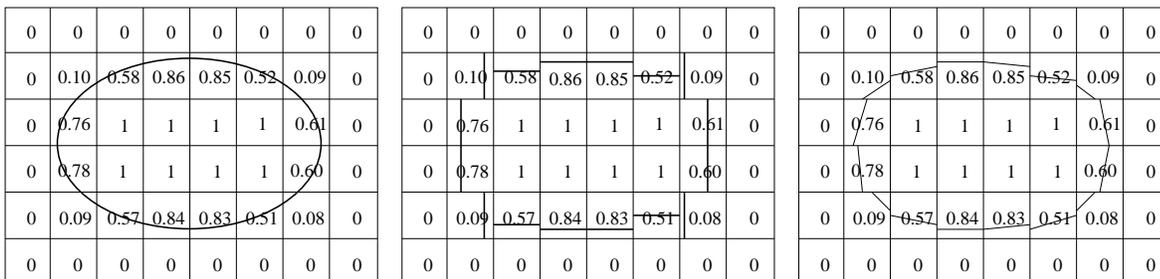


Abbildung 4.3: Exakte Oberfläche, SLIC und PLIC Rekonstruktion

Alle nötigen geometrischen Daten, wie zum Beispiel der Normalenvektor und die Krümmung, werden ausschließlich aus der Volumenanteilsfunktion mit Hilfe verschie-

denster Approximationstechniken ermittelt. Diese sind Teil aktueller Forschung.

Der von Noh und Woodward [51] entwickelte *Simple-Line-Interface-Calculation* (SLIC) Algorithmus gehört zu den ersten Oberflächenrekonstruktionsansätzen. Der freie Rand wird dabei durch horizontale oder vertikale Linien approximiert, die die Gitterzellen dem Volumenanteil nach schneiden (siehe Abbildung 4.3, Bildmitte). Die Orientierung der Linien wird so gewählt, daß die Kontaktfläche gleicher Fluidsorten aus benachbarten Zellen möglichst beibehalten wird. Dadurch wird die numerische Diffusion reduziert, weil eine Zelle sich zuerst vollständig mit einem Fluidtyp füllen muß, bevor sie diesen an andere Nachbarzellen weitergeben kann. Die Advektionsberechnung beruht auf einer Splitting-Methode. Dabei wird die Oberfläche zuerst rekonstruiert und dann in x -Richtung transportiert. Mit diesen neuen Daten wird die Lage der Oberfläche erneut rekonstruiert und schließlich in y -Richtung transportiert. Dabei ist zu beachten, daß während der x - bzw. y -Advektionsberechnung die Liniensegmente jeweils unterschiedliche Oberflächen darstellen. Damit keine zu große (fehlerhafte) Oberflächenverformung stattfindet, ist es vorteilhaft, die Reihenfolge der Advektionsberechnung in x - und y -Richtung in jedem Zeitschritt zu wechseln. Eine Erweiterung auf drei Dimensionen ist leicht möglich.

Die grobe Annäherung der Oberfläche mit der SLIC-Methode wurde von Hirt und Nichols [35] verbessert. Sie verwenden Linien mit einer beliebigen Steigung als Oberflächenapproximation (siehe Abbildung 4.3, rechtes Bild). Diese Idee wird heute als *Piecewise Linear Interface Construction (PLIC)* Technik bezeichnet. Sie ermöglicht neben einer besseren Oberflächenannäherung auch eine bessere Normalenvektor- und Krümmungsberechnung. Dabei kann die Steigung einer Linie innerhalb einer Oberflächenzelle, also wenn $F \in (0, 1)$ gilt, im zweidimensionalen Fall durch einwertige Funktionen, nämlich $X(y)$ oder $Y(x)$ dargestellt werden. Als Approximationen zu $X(y)$ und $Y(x)$ werden

$$\begin{aligned} Y_i = Y(x_i) &= F_{i,j-1} \delta y_{j-1} + F_{i,j} \delta y_j + F_{i,j+1} \delta y_{j+1} \quad , \\ X_j = X(y_j) &= F_{i-1,j} \delta x_{i-1} + F_{i,j} \delta x_i + F_{i+1,j} \delta x_{i+1} \end{aligned}$$

verwendet. Anhand dieser Werte lassen sich Näherungen für die Ableitung der Volumenanteilsfunktion in x -Richtung durch

$$\left[\frac{dY}{dx} \right]_i = \frac{\frac{Y_{i+1}+Y_i}{2} - \frac{Y_i+Y_{i-1}}{2}}{\frac{1}{2} \left(\frac{\delta x_{i+1}+\delta x_i}{2} + \frac{\delta x_i+\delta x_{i-1}}{2} \right)} = 2 \frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{\delta x_{i+1} + 2\delta x_i + \delta x_{i-1}} \quad (4.1)$$

und analog die Ableitung in y -Richtung

$$\left[\frac{dX}{dy} \right]_j = 2 \frac{X_{j+1} - X_{j-1}}{\delta y_{j+1} + 2\delta y_j + \delta y_{j-1}} \quad (4.2)$$

berechnen. Falls nun $|\left[\frac{dY}{dx} \right]_i|$ kleiner als $|\left[\frac{dX}{dy} \right]_j|$ ist, dann liegt die Oberfläche mehr horizontal als vertikal, und die Ableitung in x -Richtung wird als Steigung der Linie verwendet. Umgekehrt wird für eine mehr horizontal verlaufene Oberfläche die Ableitung in y -Richtung als Steigung der Linie eingesetzt. Auf welcher Seite der approximierten

Oberfläche sich das Fluid befindet, hängt davon ab, welche Richtungsableitung als Steigung ausgewählt wird. Falls $|\left[\frac{dY}{dx}\right]_i|$ verwendet wird, dann bestimmt das Vorzeichen von $\left[\frac{dX}{dy}\right]_j$, ob das Fluid oberhalb (positiv) oder unterhalb (negativ) des Randes liegt. Wenn $|\left[\frac{dX}{dy}\right]_j|$ eingesetzt wird, dann bestimmt das Vorzeichen $\left[\frac{dY}{dx}\right]_i$ ob das Fluid rechtsseitig (positiv) oder linksseitig (negativ) der Oberfläche liegt. Damit ist der Rand und die Lage des Fluides eindeutig bestimmt. Diese Rechnung wird für alle Gitterzellen mit $F_{i,j} \in (0, 1)$ durchgeführt.

Zusätzlich haben Hirt und Nichols ein verbessertes Advektionsschema entwickelt, welches als *Donor-Akzeptor-Verfahren* bekannt ist. Dort wird mit Kontrollfunktionen gesichert, daß nur soviel Volumen in eine Akzeptor-Gitterzelle wandern kann, wie sich in der Donor-Gitterzelle befindet. Allerdings ergeben sich dabei Rundungsfehler, bei denen die Volumenanteilsfunktion Werte außerhalb des Intervalls $[0, 1]$ annehmen kann. Eine Rücksetzung dieser Werte auf den nächstliegenden legalen Wert ist dabei in jedem Rechenzeitschritt erforderlich. Diese führt im Laufe der Rechnung zu einer Verletzung der Volumenerhaltung.

4.2 Die Level-Set-Technik

Level-Set-Verfahren gehören zur Klasse der Front-Capturing-Methoden. Diese definieren die freie Oberfläche als eingebettete Niveaumenge einer höherdimensionalen Lipschitz-stetigen skalaren Funktion. Das Fortbewegen der Oberfläche reduziert sich auf den Transport dieser skalaren Funktion. Der freie Rand wird schließlich durch einen Konturplot der entsprechenden Niveaumenge visualisiert.

Im Rahmen dieser Arbeit ist die Level-Set-Technik verwendet worden, um inkompressible Zweiphasenströmungen zu simulieren.

Level-Set-Darstellung als Anfangswertproblem

Die Level-Set-Approximation wurde im Jahr 1988 von Osher und Sethian [52, 57] eingeführt und wird seitdem erfolgreich für Probleme aus der Bildverarbeitung, der Materialkunde, den Verbrennungs- und Ätzprozessen, der Seismologie und der Robotik angewandt.

Im Folgenden wird eine geschlossene Kurve Γ_f in zwei Raumdimensionen betrachtet, die zwei Gebiete voneinander trennt. Das Ziel ist es, die Bewegung der Kurve zu verfolgen, die unter einer gegebenen Geschwindigkeitsfunktion F in Normalenrichtung fortschreitet. Einflüsse in tangentialer Richtung werden hierbei vernachlässigt (siehe Abbildung 4.4).

Für die Herleitung des Level-Set-Algorithmus bezüglich einer sich zeitlich evolvierenden Kurve $\Gamma_f(t)$ sei $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein festes Gebiet mit $\Gamma_f(t) \subset \Omega$ für alle $t \in [t_0, t_{end}]$. Die Idee besteht darin, eine möglichst glatte Funktion $\phi(\vec{x}, t)$ zu konstruieren, die auf Ω definiert ist und deren Nullniveaumenge $\{\phi = 0\}$ gleich der Kurve $\Gamma_f(t)$ ist, also

$$\Gamma(t) = \{\vec{x} : \phi(\vec{x}, t) = 0\} \quad \text{für alle } t \in [t_0; t_{end}] . \quad (4.3)$$

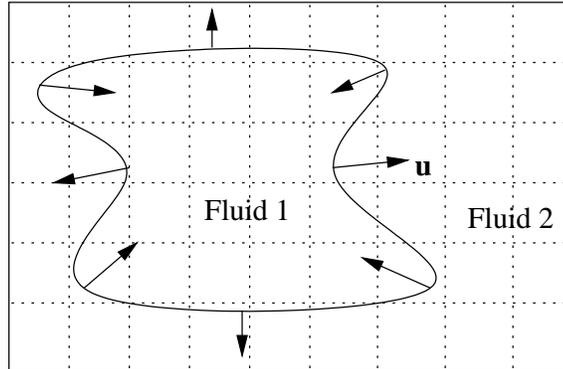


Abbildung 4.4: Oberflächenbewegung in Normalenrichtung

Mit anderen Worten, der Level-Set-Wert eines Partikels $\vec{x}(t) \in \Gamma_f(t)$ ist immer gleich Null:

$$\phi(\vec{x}(t), t) = 0 \quad \text{für alle } t \in [t_0, t_{end}] . \quad (4.4)$$

Durch Differenzieren der Gleichung (4.4) mittels der Kettenregel folgt

$$\phi_t + \nabla\phi(\vec{x}(t), t) \cdot \vec{x}'(t) = 0 . \quad (4.5)$$

Hierbei ist $\nabla\phi$ auf Γ_f orthogonal zur Niveaumenge $\{\phi(\vec{x}, t) = 0\}$ und $F := \vec{x}'(t) \cdot \vec{n}$ ist das Geschwindigkeitsfeld, das orthogonal zu den Niveaumengen der Funktion ϕ steht. Weiterhin ist $\vec{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ der Einheitsnormalenvektor bezüglich der Niveaumenge $\{\phi = 0\}$. Es gilt also

$$\begin{aligned} \vec{x}'(t) \cdot \vec{n} &= F \\ \Leftrightarrow \vec{x}'(t) \cdot \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} &= F \\ \Leftrightarrow \vec{x}'(t) \cdot \nabla\phi &= F|\nabla\phi| \end{aligned} \quad (4.6)$$

Durch Einsetzen der Gleichung 4.6 in Gleichung 4.5, entsteht eine Transportgleichung für ϕ in Form eines Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \phi_t + F|\nabla\phi| &= 0 , \\ \text{Anfangswert: } \phi(\vec{x}, t = 0) &= 0 . \end{aligned} \quad (4.7)$$

Diese Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung der Level-Set-Funktion ϕ . In der Literatur wird 4.7 auch als ‐Level-Set-Hamilton-Jacobi‐ Formulierung bezeichnet.

Im Fall der Navier-Stokes-Gleichungen ist ein globales Geschwindigkeitsfeld \vec{u} gegeben. Da nur die Transportgeschwindigkeit in Normalenrichtung zur freien Oberfläche betrachtet wird, gilt

$$F = \vec{u} \cdot \vec{n} = \vec{u} \cdot \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} . \quad (4.8)$$

Durch Einsetzen von (4.8) in (4.7) ergibt sich die zeitliche Entwicklung der Level-Set-Funktion bezüglich der Strömungsgeschwindigkeit \vec{u} zu

$$\begin{aligned} \phi_t + \vec{u} \cdot \nabla \phi &= 0 \\ \text{Anfangswert: } \phi(\vec{x}, t = 0) & \end{aligned} \quad (4.9)$$

Weil ausschließlich die Nullniveaumenge die physikalisch relevante freie Oberfläche darstellt, hat man viel Freiraum, die Level-Set-Funktion außerhalb ihrer Nullmenge zu bewegen. Dies kann ausgenutzt werden, um möglichst glatte Level-Set-Funktionen während der numerischen Berechnung zu verwenden, wodurch die Stabilität und die Genauigkeit des Algorithmus verbessert werden. In dieser Arbeit soll die Level-Set-Funktion zusätzlich folgende Bedingungen erfüllen

$$\phi(\vec{x}, t) \begin{cases} > 0 & \text{falls } \vec{x} \in \{\text{Phase 1}\} \\ = 0 & \text{falls } \vec{x} \in \Gamma_f \\ < 0 & \text{falls } \vec{x} \in \{\text{Phase 2}\} \end{cases}$$

und $|\nabla \phi| = 1$ (Eikonalgleichung).

Damit wird sie zu einer vorzeichenbehafteten Lipschitz-stetigen Abstandsfunktion. Überall dort, wo zwei Ränder sich berühren oder schneiden, ist diese Level-Set-Funktion lipschitzstetig. Ansonsten ist sie in einer Umgebung des freien Randes immer glatt.

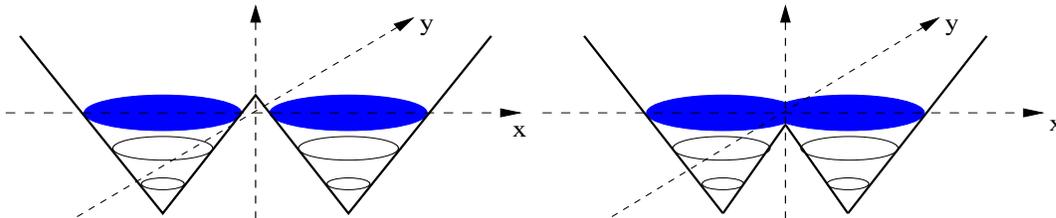


Abbildung 4.5: Level-Set-Darstellung: Getrennte (links) und vereinigte Oberflächen

Die Transportgleichung 4.9 wird hierbei im Ort mit dem WENO-Schema fünfter Ordnung diskretisiert, das in Kapitel 3.4 im Rahmen der numerischen Verfahren für hyperbolische Erhaltungsgleichungen beschrieben wurde. Dadurch führen Ecken, Kanten oder Sprungstellen, die innerhalb der Level-Set-Funktion entstehen könnten, nicht zu numerischen Instabilitäten, so daß sich die Handhabung von topologischen Singularitäten wie zum Beispiel das Zusammentreffen und Ablösen von zwei Fluidpartien ermöglicht.

In Abbildung 4.5 ist der Graph der Level-Set-Funktion für zwei Raumdimensionen in Form einer breiten Linie inklusive den Niveaulinien als Kreise dargestellt. Die Level-Set-Funktion ist zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten dargestellt. Das linke Bild zeigt zwei getrennte Oberflächen, im rechten Bild vereinigen sich die Oberflächen.

Man beachte, dass der Rand der farbigen Flächen die Nullniveaumenge der Level-Set-Funktion ist. An den Singularitäten der freien Oberfläche ist die Level-Set-Funktion nur Lipschitz-stetig.

4.3 Vorteile der Level-Set-Methode

Die Darstellung der freien Oberfläche mit der Level-Set-Funktion hat folgende Vorteile:

1. Während andere Verfahren, die auf einer Parametrisierung der Oberfläche beruhen, bei topologischen Änderungen mehrwertig oder singular werden, behält diese Methode immer die Wohldefiniertheit der Level-Set-Funktion.
2. Die Level-Set-Methode ist ein vollständig Euler'sches Verfahren, deshalb können Finite-Differenzen-Verfahren auf einem festen Gitter angewendet werden, um die anfallenden Gleichungen in Raum und Zeit zu diskretisieren.
3. Die Berechnung des Normalenvektors und der Krümmung gehen auf natürliche Weise aus der Level-Set-Funktion hervor. Dabei ist für zwei Raumdimensionen die mittlere Krümmung κ der Level-Set-Kurve Γ_f in einem Punkt $(\vec{x}, t) \in \Gamma_f$ definiert als Divergenz des Normalenvektors in (\vec{x}, t) , also

$$\kappa = \nabla \cdot \vec{n}(\vec{x}, t) = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi(\vec{x}, t)}{|\nabla \phi(\vec{x}, t)|} \right) = - \frac{\phi_y^2 \phi_{xx} - 2\phi_x \phi_y \phi_{xy} + \phi_x^2 \phi_{yy}}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (4.10)$$

Sie wird im Allgemeinen mit zentralen Differenzen diskretisiert.

4. Weiterhin ermöglicht die einfache Datenstruktur des Euler'schen Gitters eine Parallelisierung des Algorithmus, so daß insbesondere Probleme in drei Raumdimensionen effizienter berechnet werden können.

4.4 Approximation des Zweiphasenmodells mit Oberflächenspannung

Das Ziel ist die Kopplung der Navier-Stokes-Gleichungen mit der Level-Set-Methode. Dabei soll die Oberflächenspannung mitberücksichtigt werden. Hierzu wird das in Kapitel 2.4 hergeleitete Modell (2.19) für Zweiphasenströmungen betrachtet:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} d\vec{x} - \int_{\Gamma_f} \sigma \kappa \vec{n} dF + \int_{\Omega} \rho \vec{g} d\vec{x}. \quad (4.11)$$

Die Oberflächenspannung ist als Quellterm in Form eines Randintegrals enthalten. Da die differentielle Form der Navier-Stokes-Gleichungen für die Diskretisierung betrachtet wird, muß dieser Term noch in ein Volumenintegral umgewandelt werden. Ebenso sind die Viskosität und die Dichte nicht mehr global konstant, sondern sie weisen Sprünge

an der Phasengrenze auf. Deshalb wird die Dichte- und die Viskositätsverteilung in Abhängigkeit von der Level-Set-Funktion als

$$\begin{aligned}\rho(\phi) &= \rho_g + (\rho_l - \rho_g)H(\phi) \\ \mu(\phi) &= \mu_g + (\mu_l - \mu_g)H(\phi)\end{aligned}$$

beschrieben, wobei $H(\phi)$ die Heavyside'sche Sprungfunktion ist. Sie ist definiert als

$$H(\phi) := \begin{cases} 0 & \text{falls } \phi < 0 \\ \frac{1}{2} & \text{falls } \phi = 0 \\ 1 & \text{falls } \phi > 0 \end{cases} .$$

Mit den Level-Set-abhängigen Formulierungen kann die Navier-Stokes-Gleichung (4.11) umgeschrieben werden in

$$\int_{\Omega} \rho(\phi) \frac{D\vec{u}}{Dt} d\vec{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} d\vec{x} - \int_{\Gamma_f} \sigma \kappa \vec{n} dF + \int_{\Omega} \rho(\phi) \vec{g} d\vec{x} . \quad (4.12)$$

Das Randintegral lässt sich nun mit Hilfe der Dirac δ -Funktion [41, 24] in ein Volumenintegral umwandeln. Dabei ist die δ -Funktion auf der freien Oberfläche $\Gamma_f := \{\phi = 0\}$ konzentriert.

Satz: Es gilt

$$\int_{\Gamma_f} \sigma \kappa \vec{n} dF = \int_{\Omega} \sigma \kappa(\phi(\vec{x})) \delta(\phi(\vec{x})) \nabla \phi(\vec{x}) d\vec{x} \quad (4.13)$$

wobei $\delta : \mathbb{R} \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$, $\phi \mapsto \delta(\phi)$ die eindimensionale Dirac δ -Funktion ist mit den Eigenschaften $\delta(0) = \infty$ und $\int_{\mathbb{R}} \delta dx = 1$.

Beweis:

siehe Brackbill, Kothe, Zemach [7] \square

Wenn nun (4.13) in (4.12) eingesetzt wird, ergibt sich

$$\int_{\Omega} \left(\rho(\phi) \frac{D\vec{u}}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{T} + \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi - \rho(\phi) \vec{g} \right) d\vec{x} = 0 .$$

Da Ω beliebig klein gewählt werden kann, lautet die zugehörige differentielle Form

$$\rho(\phi) \frac{D\vec{u}}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{T} + \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi - \rho(\phi) \vec{g} = 0 ,$$

oder etwas umformuliert

$$\rho(\phi) \frac{D\vec{u}}{Dt} + \nabla p = \nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D}) - \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi + \rho(\phi) \vec{g} . \quad (4.14)$$

Diese Darstellung von inkompressiblen Zweiphasenflüssen wurde in ähnlicher Form für zwei Raumdimensionen von Unverdi & Tryggvason [71] und Sussman, Smereka & Osher [70] verwendet. Die Modellierung der Oberflächenspannung über eine δ -Funktion, die die Oberflächenkräfte auf dem freien Rand aktiviert ist von Brackbill, Kothe & Zemach [7] erfunden worden.

Die im Rahmen dieser Arbeit implementierte Koppelung mit der Level-Set-Methode hat im Gegensatz zu der Volume-of-Fluid-Methode den Vorteil, daß sich aufgrund der Stetigkeit des freien Randes der Level-Set-Menge sowohl der Normalenvektor als auch die Krümmung genauer und kostengünstiger berechnen lassen.

4.5 Dimensionslose Formulierung

Oft ist es nützlich, Gleichung (4.14) in dimensionslosen Größen zu formulieren, um aus ähnlichen Modellgrößen (Modellgrößen, die sich nur um einen Faktor unterscheiden) dynamisch ähnliche Strömungen zu berechnen. Dazu werden aus den dimensionsbehafteten Größen die zugehörigen dimensionslosen Größen durch

$$\vec{x}' = \frac{\vec{x}}{L}, \quad \vec{u}' = \frac{\vec{u}}{U}, \quad t' = \frac{U}{L}t, \quad p' = \frac{p}{\rho_l U^2}, \quad \rho' = \frac{\rho}{\rho_l}, \quad \mu' = \frac{\mu}{\mu_l}, \quad (4.15)$$

gebildet, wobei L und U konstante skalare Vergleichsgrößen sind. Durch Einsetzen dieser dimensionslosen Größen in Gleichung (4.14), ergibt sich die dimensionslose Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen

$$\vec{u}'_{t'} + \vec{u}' \cdot \nabla' \vec{u}' + \frac{\nabla' p'}{\rho'(\phi)} = \frac{1}{\rho'(\phi)} \left(\frac{1}{Re} \nabla' \cdot (\mu'(\phi) \mathbf{D}') - \frac{1}{We} \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla' \phi \right) + \frac{\vec{g}'}{Fr} \quad (4.16)$$

mit $\mathbf{D}' = \{\nabla' \vec{u}'\} + \{\nabla' \vec{u}'\}^T$ und $\vec{g}' = \frac{\vec{g}}{\|\vec{g}\|}$. Der Operator ∇' bezieht sich auf die Variable \vec{x}' . Die Dichte und die Viskosität werden berechnet als Konvexkombination der Verhältnisse zwischen beiden Phasen

$$\rho'(\phi) = \frac{\rho_l}{\rho_g} + \left(1 - \frac{\rho_l}{\rho_g}\right) H(\phi)$$

und

$$\mu'(\phi) = \frac{\mu_l}{\mu_g} + \left(1 - \frac{\mu_l}{\mu_g}\right) H(\phi).$$

Desweiteren enthält die Gleichung (4.16) folgende dimensionslose Parametergruppen, die die Eigenschaften der Strömung beschreiben

$$Re = \frac{\rho_l L U}{\mu_l} \quad (\text{Reynoldszahl}) \quad (4.17)$$

$$Fr = \frac{U^2}{\|\vec{g}\| L} \quad (\text{Froudezahl}) \quad (4.18)$$

$$We = \frac{\rho_l L U^2}{\sigma} \quad (\text{Weberzahl}) . \quad (4.19)$$

Hierbei stehen die Reynoldszahl für das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften, die Froudezahl für das Verhältnis zwischen Trägheits- und Gravitationskräften

und die Weberzahl für das Verhältnis zwischen Trägheits- und Grenzflächenkräften. Die Oberflächenspannung σ geht als Materialkonstante in der Weberzahl ein. Da (4.16) nur von diesen dimensionslosen Parametergruppen abhängt, verhalten sich Strömungen in ähnlichen Geometrien genau dann dynamisch ähnlich, wenn jeweils ihre Reynolds-, Froude- und Weberzahlen übereinstimmen.

Die Diskretisierung des Zweiphasenmodells in Kapitel 5 betrachtet nur die dimensionsbehafteten Navier-Stokes-Gleichungen (4.14). Aber um mühsame Umrechnungen zu sparen, sind für diese Arbeit aus praktischen Gründen beide Formen der Navier-Stokes-Gleichungen implementiert worden.

4.6 Die Level-Set-Reinitialisierung

Im Allgemeinen ist eine zeitlich evolvierte Level-Set-Funktion keine Abstandsfunktion mehr. Wichtig für die Berechnung der Oberflächenspannungskräfte ist aber, daß die Level-Set-Funktion während der zeitlichen Entwicklung immer eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion innerhalb einer ϵ -Umgebung des freien Randes Γ_f bleibt. Dies ist notwendig für eine stabile Berechnung der Oberflächenspannung. Falls die Abstandseigenschaft der Level-Set-Funktion nicht aufrecht erhalten wird, entstehen mit der Zeit sehr große oder auch sehr kleine Geschwindigkeitsgradienten an der freien Oberfläche, die zu verzerrten Oberflächenspannungskräften führen und schlimmstenfalls Oszillationen erzeugen.

Es gibt verschiedene Methoden mit dem Ziel, die Abstandseigenschaft der Level-Set-Funktion wiederherzustellen, ohne dabei ihre Nullniveaumenge zu verändern. *Fast-Marching-* und *Narrow-Band-Techniken* von J.A. Sethian [57] beruhen auf einer expliziten Rekonstruktion der Nullniveaumenge, von dem aus über eine Binärbaum-Datenstruktur genau einmal durch die Gitterzellen gewandert wird, in denen die zugehörigen Abstandswerte neu errechnet werden.

Eine elegantere Weise, die Abstandseigenschaft zu erhalten, wurde von Sussman, Smereka und Osher [70] eingeführt, basierend auf einer Beobachtung von J.-M. Morel. Die Idee ist, iterativ in *künstlicher Zeit* τ eine stationäre Lösung der folgenden partiellen Differentialgleichung vom Hamilton-Jacobi-Typ

$$d_\tau + \text{sign}(\phi)(|\nabla d| - 1) = 0 \quad (4.20)$$

mit der Anfangsbedingung

$$d(\vec{x}, 0) = \phi(\vec{x})$$

zu berechnen, wobei die signum-Funktion definiert ist durch

$$\text{sign}(\phi) := \begin{cases} -1 & \text{falls } \phi < 0 \\ 0 & \text{falls } \phi = 0 \\ 1 & \text{falls } \phi > 0. \end{cases} \quad (4.21)$$

Dieser Ansatz benötigt keine explizite Oberflächenrekonstruktion. Die stationäre Lösung von Gleichung (4.20) ist eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion, die die Nullniveaumenge von ϕ unverändert läßt, weil $\text{sign}(0)=0$. Wenn also die stationäre Lösung

erreicht ist, wird einfach $\phi(\vec{x})$ durch $d(\vec{x}, \tau_{stationär})$ ersetzt. Desweiteren genügt es, daß die Level-Set-Funktion nur in einer ϵ -Umgebung des freien Randes eine Abstandsfunktion ist. Denn bei der Diskretisierung des Zweiphasenmodells in Kapitel 5 werden eine über der ϵ -Umgebung regularisierte Deltafunktion und eine regularisierte Heaviside'sche Gewichtsfunktion verwendet. Dafür, daß diese Funktionen den Dichte- und Viskositätssprung und die Oberflächenspannungskräfte auf beiden Seiten der freien Oberfläche gleichmäßig aktivieren, ist es hinreichend, wenn in dieser ϵ -Umgebung eine Abstandsfunktion gegeben ist. Somit ist der stationäre Zustand erreicht, wenn

$$|\nabla d| = 1 \quad \text{für} \quad |d| \leq \epsilon$$

gilt. Eine vorteilhafte Eigenschaft von Gleichung (4.20) besteht darin, daß die Level-Set-Funktion zuerst in der Nähe des freien Randes reinitialisiert wird. Dies ist leicht ersichtlich, wenn (4.20) umgeschrieben wird zu

$$d_\tau + \vec{c} \cdot \nabla d = \text{sign}(\phi) \quad \text{mit} \quad \vec{c} = \text{sign}(\phi) \frac{\nabla d}{|\nabla d|} .$$

Diese Darstellung zeigt, daß es sich um eine nichtlineare Differentialgleichung handelt. Ihre Charakteristiken laufen von der Nullniveaumenge aus in Normalenrichtung mit der Geschwindigkeit ± 1 . Dies bedeutet, daß d zuerst in der Nähe der freien Oberfläche reinitialisiert wird, so daß dann dort $\nabla d = 1$ gilt. Also ist es nicht nötig, Gleichung (4.20) auf dem ganzen Gebiet bis zum stationären Zustand zu lösen, womit eine erhebliche Anzahl an Iterationen eingespart werden kann. Beispielsweise sei $\delta\tau$ die Zeitschrittweite für den Iterationsprozeß und 2ϵ der Glättungsbereich des freien Randes, dann kann der Iterationsprozeß nach $\frac{\epsilon}{\delta\tau}$ Zeitschritten gestoppt werden. In der Praxis hat sich herausgestellt, daß meistens nicht mehr als drei bis fünf Iterationen notwendig sind.

Diese Methode der Reinitialisierung hat zudem den Vorteil, daß eine komplizierte Anfangsgeometrie der freien Oberfläche auf einfache Weise beschrieben werden kann, indem $\phi = -1$ für die Gitterzellen der ersten Phase und $\phi = 1$ für die Gitterzellen der zweiten Phase gesetzt wird. Eine einmalige globale Reinitialisierung dieser Anfangsdaten, also eine Reinitialisierung, die bis $\tau = L$ mit $L = \{\text{maximale Gebietslänge}\}$ durchgeführt wird, führt zu der gewünschten Abstandsfunktion, mit der dann die Simulationsberechnung beginnen kann.

4.7 Zweiphasenströmung mit Hindernissen

Durch eine einfache Erweiterung ist es möglich, Strömungen näherungsweise auch in beliebigen dreidimensionalen Geometrien zu behandeln. Die Idee ist, alle Gitterzellen über ein zusätzlich eingeführtes *Flag*-Feld zu kennzeichnen. Jede Zelle wird mit einer bitweisen Codierung einem der folgenden Zelltypen zugeordnet:

- Fluidzellen* : Gitterzellen, in denen die Strömungsgleichungen gelöst werden.
Hinderniszellen : Gitterzellen, wo keine Strömungsberechnung stattfindet.
Randzellen : Hinderniszellen, die an Fluidzellen grenzen, so daß dort entsprechende Randwerte für die Geschwindigkeiten und den Druck gesetzt werden müssen .

Eine ausführliche Beschreibung der Vorgehensweise ist in Griebel et al. [29] zu finden. Im Folgenden wird kurz die Kombination mit der Level-Set-Methode erklärt.

Im Gegensatz zu den Variablen der Navier-Stokes-Gleichungen, die ausschließlich in Fluidzellen und Randzellen definiert sind und nur dort berechnet werden, ist die Level-Set-Funktion ϕ unabhängig von den Zelltypen auf dem gesamten Rechengebiet definiert. Jeder Reinitialisierungsschritt der Level-Set-Funktion wird also über das vollständige Gebiet berechnet, folglich ist die Abstandseigenschaft der Level-Set-Funktion auch innerhalb von Hindernissen erfüllt.

Da die Transportgleichung für ϕ nur in Fluidzellen gelöst wird, können während der zeitlichen Entwicklung der Level-Set-Funktion große Gradienten in der Nähe von Randzellen entstehen. Der Einsatz des WENO-Schemas fünfter Ordnung für den konvektiven Term der Transportgleichung ermöglicht in solchen Situationen eine stabile Berechnung, wie zum Beispiel die numerische Simulation einer Wasserströmung um ein Hindernis in Kapitel 7.6 zeigt.

Kapitel 5

Diskretisierung des Zweiphasenmodells mit Oberflächenspannung

In diesem Kapitel werden sämtliche Erweiterungen zum diskreten Modell der einphasigen Strömungen aus Kapitel 3 beschrieben, die zur Berechnung von Zweiphasenströmungen notwendig sind. Die Diskretisierung des zusätzlich in den Navier-Stokes-Gleichungen enthaltenen Quelltermes, der Transport der Level-Set-Funktion und der Reinitialisierungsprozeß bilden im Folgenden die Schwerpunkte. Dabei ergeben sich Schwierigkeiten bei der Massenerhaltung und der Konvergenz des Poisson-Lösers.

Ein numerisches Problem bei der Level-Set-Reinitialisierung ist, daß sie aufgrund numerischer Diffusionseffekte dazu neigt, die freie Oberfläche künstlich zu bewegen, wodurch die Erhaltung der Masse gestört wird. In dieser Arbeit wurden durch eine geschickte Approximation der signum-Funktion und durch den Einsatz des WENO-Verfahrens fünfter Ordnung Verbesserungen erzielt.

Ein anderes Problem ist der Dichtesprung zwischen den beiden Phasen, der in die Kondition der Systemmatrix aus der Poissongleichung eingeht. Dies führt bei einem großen Dichtesprung zu einem schlechten Konvergenzverhalten. Deshalb ist ein Jacobi-Vorkonditionierer hinzugefügt worden, und die damit erzielte Leistungssteigerung des vorkonditionierten BiCGSTAB-Verfahrens wurde am Beispiel einer Zweiphasensimulation mit einem Dichteverhältnis von 1/1000 belegt.

5.1 Erweiterte Projektionsmethode

Die Impulsgleichungen der Projektionsmethode aus Kapitel 3.1 werden nun um den Quellterm für die Oberflächenspannung erweitert. Ferner kommen der Dichte- und Viskositätssprung hinzu. Diese drei zusätzlichen Größen werden durch die Level-Set-Funktion beschrieben.

Insgesamt hat die erweiterte Methode den folgenden Ablauf: Berechne zuerst die

Schätzgeschwindigkeiten

$$\bar{u}^* = \bar{u}^n + \delta t \left(-\nabla \cdot (\bar{u}^n \otimes \bar{u}^n) + \bar{g} + \frac{1}{\rho(\phi^n)} (\nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D}^n) - \sigma \kappa(\phi^n) \delta(\phi^n) \nabla \phi^n) \right) \quad (5.1)$$

und ermittle anschließend eine vorläufige, neue Level-Set-Funktion ϕ^* über explizites Lösen der Transportgleichung nach Kapitel (5.7)

$$\phi^* = Z(R(\phi^n, \bar{u}^n)) ,$$

wobei Z der diskrete Zeitoperator und R der diskrete Raumoperator ist. Bestimme nun ϕ^{n+1} durch Reinitialisierung von ϕ^* nach Kapitel 5.8. Analog zu Kapitel 3.1 werden aus dem folgenden System

$$\frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^*}{\delta t} + \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho(\phi^{n+1})} = 0 , \quad (5.2)$$

$$\nabla \cdot \bar{u}^{n+1} = 0 . \quad (5.3)$$

zunächst die Poissongleichung abgeleitet und dann die neuen Geschwindigkeiten \bar{u}^{n+1} bestimmt. Durch Anwendung der Divergenz auf Gleichung (5.2) und unter Verwendung von Gleichung (5.3) folgt die Poissongleichung:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho(\phi^{n+1})} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \frac{\bar{u}^*}{\delta t} . \quad (5.4)$$

Im Unterschied zu Kapitel 3.1 ist die Dichte in (5.4) nicht konstant, und kann daher nicht eliminiert werden. Die Geschwindigkeiten \bar{u}^{n+1} berechnen sich aus der Druckkorrektur von \bar{u}^* :

$$\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^* - \frac{\delta t}{\rho(\phi^{n+1})} \nabla p^{n+1} . \quad (5.5)$$

Das Setzen der Randbedingungen für die Geschwindigkeiten und den Druck erfolgt analog zu Kapitel 2.5 und 3.1.

5.2 Numerische Behandlung der freien Oberfläche

Sowohl die Dichte als auch die Viskosität enthalten im Allgemeinen einen Sprung an der Phasengrenze. Das Problem ist, daß eine scharfe Auswertung der Dichtesprünge zu numerischen Instabilitäten in der Poissongleichung führt. Um Zweiphasensysteme mit großen Viskositäts- und Dichtesprüngen inklusive Oberflächenspannung stabil berechnen zu können, müssen diese innerhalb einer fest vorgegebenen ϵ -Umgebung der freien Oberfläche regularisiert werden. Aufgrund der Tatsache, daß ϕ den Abstand zum freien Rand mißt, ist diese ϵ -Umgebung gleich der Menge $\{|\phi| < \epsilon\}$. Dabei ist $\epsilon := \alpha h$ proportional zur Raumgittermaschenweite h und α ist der Proportionalitätsfaktor, der

zu Beginn einer Rechnung festgesetzt wird. In der Regel wird über drei bis vier Gitterzellen geglättet, also $\alpha \in [1.5; 2.0]$. In den numerischen Beispielen aus Kapitel 7 wurde $\alpha = 1.6$ gewählt.

Abbildung 5.1 zeigt, der Einfachheit halber für zwei Raumdimensionen, die ϵ -Umgebung der freien Oberfläche, in der sowohl die Viskositäts- und Dichtesprünge als auch die Dirac'sche Deltafunktion regularisiert werden. In dieser Arbeit wurden

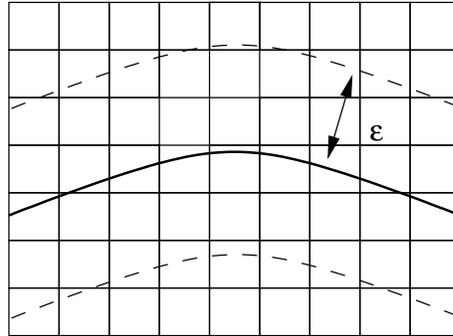


Abbildung 5.1: Numerischer Glättungsbereich

die folgenden regularisierten Formen der Heavyside'schen Gewichtsfunktion und der δ -Funktion verwendet:

$$H^\epsilon(\phi) := \begin{cases} 0 & \text{falls } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right] & \text{falls } |\phi| \leq \epsilon \\ 1 & \text{falls } \phi > \epsilon \end{cases} \quad (5.6)$$

$$\delta^\epsilon(\phi) := \partial_\phi H^\epsilon = \begin{cases} \frac{1}{2\epsilon} (1 + \cos(\frac{\pi\phi}{\epsilon})) & \text{falls } |\phi| < \epsilon \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (5.7)$$

Aus den beiden Funktionsdefinitionen geht hervor, daß der gesamte Glättungsbereich der freien Oberfläche approximativ 2ϵ breit ist. Sowohl die Dichte als auch die Viskosität berechnen sich aus der Level-Set-Funktion mit Hilfe von H^ϵ . Die Oberflächenspannung wird durch δ^ϵ in den Impulsgleichungen aktiviert. Dies wird im Folgenden genauer erklärt.

5.2.1 Viskositäts- und Dichtefunktion

Wesentlich bei der Simulation von Zweiphasenströmungen ist die mit den beiden Phasen übereinstimmende Berechnung der Dichte ρ und der Viskosität μ . Anstatt nun diese Größen, wie üblicherweise, getrennt voneinander über die Transportgleichungen

$$\partial_t \mu + \vec{u} \cdot \nabla \mu = 0 \quad \text{und} \quad \partial_t \rho + \vec{u} \cdot \nabla \rho = 0 , \quad (5.8)$$

zu entwickeln, werden in dieser Arbeit die beide Gleichungen (5.8) auf den Transport der Level-Set-Funktion ϕ

$$\partial_t \phi + \vec{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (5.9)$$

zurückgeführt, wobei sich schließlich die Dichte ρ und die Viskosität μ zu jedem Zeitpunkt aus den Level-Set-Werten ϕ berechnen lassen durch:

$$\rho^\epsilon(\phi) = \rho_l + (\rho_g - \rho_l)H^\epsilon(\phi) \quad \text{und} \quad \mu^\epsilon(\phi) = \mu_l + (\mu_g - \mu_l)H^\epsilon(\phi). \quad (5.10)$$

Die Transportgleichung braucht damit nur noch einmal pro Zeitschritt gelöst zu werden. Zusätzlich ist dieser Ansatz numerisch stabiler und enthält weniger numerische Diffusion, weil die Level-Set-Funktion glatter ist (Lipschitz-stetig) als das Dichte- und das Viskositätsfeld aus (5.8), die einen Sprung an der Phasengrenze haben. Entscheidend ist aber, daß hier jede Phase immer exakt (bis auf den fest vorgegebenen Glättungsbereich ϵ) ihren zugehörigen Viskositäts- und Dichtewert erhält. Dies ist bei einem getrennten Transport von Viskosität, Dichte und freier Oberfläche nicht garantiert.

5.2.2 Normalenvektor, Krümmung und Oberflächenspannung

Die Oberflächenspannung, die als singulärer Quellterm in den Impulsgleichungen (5.1) enthalten ist, wird über die eindimensionale Dirac'sche δ -Funktion in einer ϵ -Umgebung des freien Randes aktiviert. Hierbei wird zur Approximation die geglättete Deltafunktion δ^ϵ verwendet, also

$$\sigma\kappa(\phi)\delta(\phi)\nabla\phi \approx \sigma\kappa(\phi)\delta^\epsilon(\phi)\nabla\phi.$$

Der Normalenvektor \vec{n} und die mittlere Krümmung κ berechnen sich aus der Level-Set-Funktion. Der Normalenvektor geht hervor aus

$$\vec{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = \frac{(\phi_x, \phi_y, \phi_z)^T}{\sqrt{(\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)}}$$

und die mittlere Krümmung in drei Raumdimensionen ist als Divergenz des Normalenvektors definiert

$$\begin{aligned} \kappa &= \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \\ &= \frac{\phi_x^2(\phi_{yy} + \phi_{zz}) + \phi_y^2(\phi_{xx} + \phi_{zz}) + \phi_z^2(\phi_{xx} + \phi_{yy}) - 2(\phi_x\phi_y\phi_{xy} + \phi_x\phi_z\phi_{xz} + \phi_y\phi_z\phi_{yz})}{(\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned}$$

Alle Terme, die zur Berechnung des Normalenvektors und der Krümmung notwendig sind, wurden in dieser Arbeit mit zentralen Differenzen diskretisiert.

Als Absicherung wird für den Fall, daß der Nenner der Krümmungs- oder der Normalenvektordarstellung gleich Null wird, wird eine erneute Berechnung dieser Größen mit einseitigen Differenzen durchgeführt. Theoretisch dürfte eine solche Situation nicht entstehen, wenn die Level-Set-Funktion in jedem Zeitschritt ausreichend reinitialisiert wurde. In den sämtlichen durchgeführten Simulationen aus Kapitel 7 hat keine Berechnung mit einseitigen Differenzen stattgefunden.

Desweiteren sind Interpolationen notwendig, weil die Geschwindigkeiten und die Level-Set-Werte an unterschiedlichen Stellen liegen. Wenn zum Beispiel die Geschwindigkeitskomponente $u_{i+\frac{1}{2},j,k}^*$ aus Gleichung (5.1) sich innerhalb der vorgegebenen ϵ -Umgebung befindet, dann berechnet sich der zugehörige Oberflächenspannungsterm $[T(\phi)]_{i+\frac{1}{2},j,k}$ mittels

$$[T(\phi)]_{i+\frac{1}{2},j,k} = [\kappa(\phi)\delta_\epsilon(\phi)\nabla\phi]_{i+\frac{1}{2},j,k} = [\kappa(\phi)]_{i+\frac{1}{2},j,k}\delta_\epsilon(\phi_{i+\frac{1}{2},j,k})\left(\frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}}{\delta x}\right).$$

Dabei werden $[\kappa(\phi)]_{i+\frac{1}{2},j,k}$ und das Argument $\phi_{i+\frac{1}{2},j,k}$ der Deltafunktion über ein-dimensionale Lagrange-Polynominterpolation dritten Grades berechnet. Eine genaue Beschreibung dieser Polynominterpolationen wird im kommenden Abschnitt gegeben. Schließlich werden auf analoge Weise die Oberflächenspannungsterme $[T(\phi)]_{i,j+\frac{1}{2},k}$ und $[T(\phi)]_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ für die Geschwindigkeitskomponenten $v_{i,j+\frac{1}{2},k}^*$ und $w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^*$ bestimmt, sofern sich diese ebenfalls innerhalb der fest vorgegebenen ϵ -Umgebung befinden.

Die Berechnung des Normalenvektors und der Krümmung an Ecken und Kanten des freien Randes führt zu keinen numerischen Instabilitäten, wie insbesondere die in Kapitel 7.3 durchgeführte Simulationsrechnung eines Wasserwürfels mit Oberflächenspannung zeigt. Der Grund besteht darin, daß das in dieser Arbeit für die konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichungen, der Transportgleichung und der Reinitialisierungsgleichung verwendete WENO-Schema fünfter Ordnung immer eine etwas regulalisierte Darstellung der Ecken und Kanten erzeugt, wie aus den Testrechnungen am Beispiel der skalaren Erhaltungsgleichung in Kapitel 3.4.3 zu sehen ist. Deshalb können zentrale Differenzen zur Bestimmung des Normalenvektors und der Krümmung auch in Situationen, in denen die freie Oberfläche topologische Singularitäten enthält, eingesetzt werden.

Desweiteren ist das gesamte Diskretisierungsgitter der Level-Set-Funktion an den Gebietsrändern um eine Gitterzellenschicht zu erweitern, denn sonst würde, falls die freie Oberfläche den Gebietsrand berührt, bei der Krümmungsberechnung auf falsche Werte zugegriffen.

5.3 Interpolationsregeln

In diesem Abschnitt werden die Interpolationsregeln beschrieben, die notwendig sind, um das Geschwindigkeitsvektorfeld $\vec{u} = (u, v, w)$, die Level-Set-Werte ϕ und die Krümmung κ in verschiedenen Punkten einer Zelle zu ermitteln. Hierzu ist in dieser Arbeit eine Lagrange Polynominterpolation dritten Grades eingesetzt worden. Dabei wird für äquidistante Gitter zum Beispiel die Geschwindigkeitskomponente u im Zellmittelpunkt (i, j, k) berechnet durch

$$u_{i,j,k} = \frac{1}{16} \left(-u_{i-\frac{3}{2},j,k} + 9u_{i-\frac{1}{2},j,k} + 9u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k} \right), \quad (5.11)$$

entsprechendes gilt für die Berechnung von $v_{i,j,k}$ und $w_{i,j,k}$. In Fluidzellen, die an Gebietsränder oder Hinderniszellen grenzen, wird nur auf Werte aus dem Fluidgebiet

zugegriffen, so daß dort links- beziehungsweise rechtsseitig gewichtete Interpolationen entstehen:

$$\begin{aligned} \text{Links : } u_{i,j,k} &= \frac{1}{16} \left(5u_{i-\frac{1}{2},j,k} + 15u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 5u_{i+\frac{3}{2},j,k} + u_{i+\frac{5}{2},j,k} \right) , \\ \text{Rechts : } u_{i,j,k} &= \frac{1}{16} \left(u_{i-\frac{5}{2},j,k} - 5u_{i-\frac{3}{2},j,k} + 15u_{i-\frac{1}{2},j,k} + 5u_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) , \end{aligned}$$

analoges gilt für $v_{i,j,k}$ und $w_{i,j,k}$. Gegebenenfalls werden Level-Set-Werte an Mittelpunkten der Zellseitenflächen auf die selbe Art ermittelt.

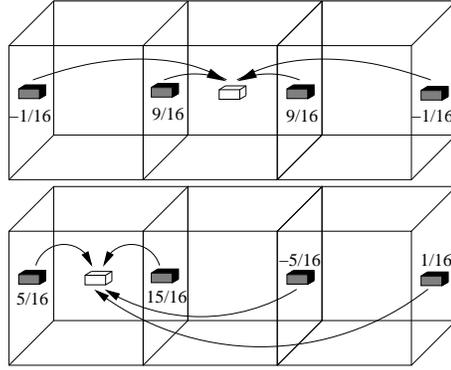


Abbildung 5.2: Zentrale und linksseitige eindimensionale Lagrange-Interpolation

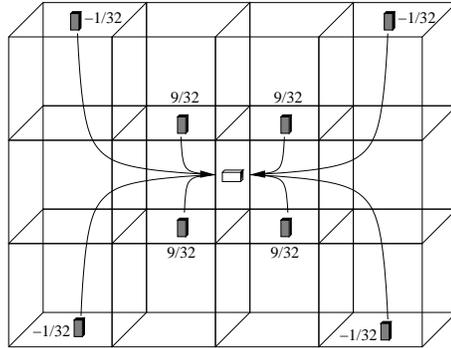


Abbildung 5.3: Zweidimensionale Lagrange-Interpolation

Die Bestimmung der Geschwindigkeitswerte an den Mittelpunkten der Zellseitenflächen, wo sie nicht vorgegeben sind, verläuft über zweidimensionale Lagrange-Interpolation. Zum Beispiel wird v an der Stelle $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ ermittelt über

$$\begin{aligned} v_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{1}{32} \left(-v_{i-1,j+\frac{3}{2},k} - v_{i-1,j-\frac{3}{2},k} - v_{i+2,j+\frac{3}{2},k} - v_{i+2,j-\frac{3}{2},k} + \right. \\ &\quad \left. 9v_{i,j+\frac{1}{2},k} + 9v_{i,j-\frac{1}{2},k} + 9v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} + 9v_{i+1,j-\frac{1}{2},k} \right) . \end{aligned}$$

In Abbildung 5.3 sind die Positionen und die Gewichte der v -Geschwindigkeitswerte eingezeichnet, die zur Interpolation notwendig sind. Auf analoge Art werden die u - und w -Geschwindigkeitskomponenten an anderen Zellseitenflächen bestimmt.

Bei der zweidimensionalen Lagrange-Polynominterpolation wird in Fluidzellen, die an Gebietsränder oder Hinderniszellen grenzen, auf bilineare Interpolation reduziert.

5.4 Erweiterter viskoser Teil des Spannungstensors

Der viskose Anteil $\nabla \cdot \mu(\phi)\mathbf{D}$ des Spannungstensors \mathbf{T} bezieht nun die partiellen Ableitungen der Viskosität $\mu(\phi)$ mit ein, die im Unterschied zu den einphasigen Strömungen aus Kapitel 3 keine globalen Konstanten mehr sind.

So müssen zur Berechnung des Hilfgeschwindigkeitsfeldes \vec{u}^* in (5.1) die viskosen Terme der x -Geschwindigkeitskomponente

$$2(\mu(\phi)u_x)_x + (\mu(\phi)(u_y + v_x))_y + (\mu(\phi)(u_z + w_x))_z \quad (5.12)$$

an den Stellen $(i \pm \frac{1}{2}, j, k)$ diskretisiert werden. Genauso wird für die viskosen Terme der y -Geschwindigkeitskomponente die Diskretisierung von

$$(\mu(\phi)(u_y + v_x))_x + 2(\mu(\phi)u_y)_y + (\mu(\phi)(v_z + w_y))_z \quad (5.13)$$

an den Stellen $(i, j \pm \frac{1}{2}, k)$ und für die viskosen Terme der z -Geschwindigkeitskomponente die Diskretisierung von

$$(\mu(\phi)(u_z + w_x))_x + (\mu(\phi)(v_z + w_y))_y + 2(\mu(\phi)w_z)_z \quad (5.14)$$

an den Stellen $(i, j, k \pm \frac{1}{2})$ benötigt. Da für viskose Fluide die Geschwindigkeiten glatt sind, können die ersten Ableitungen mit zentralen Differenzen ermittelt werden. Zum Beispiel berechnen sich die Ableitungen von u über

$$\begin{aligned} [u_x]_{i,j,k} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x}, \\ [u_y]_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta y}, \\ [u_z]_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta z}. \end{aligned}$$

Die ersten Ableitungen der anderen Geschwindigkeitskomponenten werden analog dazu berechnet. Desweiteren können die zweiten partiellen Ableitungen aus (5.12), (5.13) und (5.14) ebenfalls mit zentralen Differenzen bestimmt werden, weil der Viskositätsprung an der Phasengrenze durch die Heavyside'sche Gewichtsfunktion H^ϵ reguliert wurde. Damit lassen sich sämtliche Terme aus (5.12) an der Stelle $(i + \frac{1}{2}, j, k)$

approximieren über

$$\begin{aligned}
& [(2\mu(\phi)u_x)_x]_{i+\frac{1}{2},j,k} \\
&= 2 \frac{\mu(\phi_{i,j,k})[u_x]_{i,j,k} - \mu(\phi_{i+1,j,k})[u_x]_{i+1,j,k}}{\delta x}, \\
& [(\mu(\phi)(u_y + v_x))_y]_{i+\frac{1}{2},j,k} \\
&= \frac{\mu(\phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k})[u_y+v_x]_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} - \mu(\phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k})[u_y+v_x]_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}{\delta y}, \\
& [(\mu(\phi)(u_z + w_x))_z]_{i+\frac{1}{2},j,k} \\
&= \frac{\mu(\phi_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}})[u_z+w_x]_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - \mu(\phi_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}})[u_z+w_x]_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z}.
\end{aligned}$$

Vor der Berechnung der Viskositätswerte $\mu(\phi)$ wird die Level-Set-Funktion ϕ durch passende Lagrange-Polynominterpolation an der richtigen Stellen ausgewertet (siehe Abbildung 5.2 und Abbildung 5.3). Ebenso werden alle Terme aus (5.13) an den Stellen $(i, j + \frac{1}{2}, k)$ und alle Terme aus (5.14) an den Stellen $(i, j, k + \frac{1}{2})$ berechnet.

5.5 Der Löser für die Poissongleichung mit nicht-konstanter Dichte

Da das Hilfsgeschwindigkeitsfeld \vec{u}^* im Allgemeinen nicht divergenzfrei ist, muß für den Fall von Zweiphasenströmungen, wie bereits in 5.1 erläutert, eine Poissongleichung mit nicht konstanten Dichtekoeffizienten

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^\epsilon(\phi^{n+1})} \nabla p^{n+1} = \frac{\nabla \vec{u}^*}{\delta t} \quad (5.15)$$

möglichst effizient gelöst werden. Da die Geschwindigkeiten für viskose Fluide glatt sind, kann die rechte Seite mit zentralen Differenzen ausgewertet, also

$$[\nabla \cdot \vec{u}^*]_{i,j,k} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^* - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^*}{\delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^* - v_{i,j-\frac{1}{2},k}^*}{\delta y} + \frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^* - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^*}{\delta z}. \quad (5.16)$$

Die linke Seite wird für drei Raumdimensionen mit einem Sieben-Punkte-Stern berechnet, wobei die Dichte zuvor an den passenden Stellen durch entsprechende eindimensionale Lagrange-Interpolation (Abbildung 5.2) der Level-Set-Werte bestimmt wird. Das diskrete Schema besitzt somit die folgende Form:

$$\begin{aligned}
\left[\nabla \cdot \frac{1}{\rho^\epsilon(\phi)} \nabla p^{n+1} \right]_{i,j,k} &= \frac{1}{(\delta x)^2} \left(\left(\frac{p_{i+1,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i+\frac{1}{2},j,k})} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i-1,j,k}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i-\frac{1}{2},j,k})} \right) \right) \\
&+ \frac{1}{(\delta y)^2} \left(\left(\frac{p_{i,j+1,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i,j+\frac{1}{2},k})} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j-1,k}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i,j-\frac{1}{2},k})} \right) \right) \\
&+ \frac{1}{(\delta z)^2} \left(\left(\frac{p_{i,j,k+1}^{n+1} - p_{i,j,k}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}})} \right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k-1}^{n+1}}{\rho^\epsilon(\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})} \right) \right).
\end{aligned}$$

Dabei werden vor jedem Iterationsschritt homogene Neumann-Randwerte für den Druck gesetzt (siehe Kapitel 3.1).

Die Qualität der Iterationsverfahren für das aus der diskretisierten Poissongleichung entstehene lineare Gleichungssystem der Form $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ist wesentlich an die Konditionszahl $cond(\mathbf{A}) := \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|$ gebunden. Für zweiphasige Probleme verschlechtert sich die Kondition der Matrix, je größer der Dichtesprung ist. Deshalb konvergiert zum Beispiel ein SSOR-Löser nur sehr langsam, wie auch von Dehmel [20] berichtet wurde.

Das in dieser Arbeit eingesetzte (parallelisierte) BiCGSTAB-Verfahren zeigt ebenfalls ein schlechtes Konvergenzverhalten für Zweiphasenströmungen mit einem Dichtesprung von eins zu tausend (Luft/Wasser) (siehe Abbildung 5.4). Mit *Vorkonditionieren* kann hierbei eine Konvergenzbeschleunigung erzielt werden.

Durch die Nutzung einer äquivalenten Umformung des Gleichungssystems

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{P}^{-1}\mathbf{Ax} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}, \quad \text{wobei } \mathbf{P}^{-1} \text{ regulär ist,} \quad (5.17)$$

läßt sich die Konditionszahl für $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$ verbessern. Die invertierbare Matrix \mathbf{P} wird dabei als *Vorkonditionierungsmatrix* bezeichnet. Mit $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$ läge eine im Sinne der Konvergenz optimale Wahl der Matrix \mathbf{P}^{-1} vor. Eine derartige Forderung käme jedoch einer Invertierung der Matrix \mathbf{A} gleich und ist daher aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen in der Regel nicht realisierbar. Das Ziel der Vorkonditionierung liegt in der Definition einer einfach berechenbaren Matrix \mathbf{P}^{-1} , die einen geringen Speicheraufwand aufweist und mit $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$ eine gute Approximation der Einheitsmatrix liefert, so daß $cond(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}) \ll cond(\mathbf{A})$ gilt.

Zu den kostengünstigsten Methoden zählt die Jacobi-Vorkonditionierung, bei der die Matrix \mathbf{A} durch eine reguläre Diagonalmatrix \mathbf{D}^{-1} vorkonditioniert wird. Diese Methode benötigt den geringsten Speicheraufwand und läßt sich leicht anwenden. Der für diese Arbeit programmierte Diagonalvorkonditionierer besteht aus den Diagonalelementen von \mathbf{A} . Die so erzeugte Diagonalmatrix ist regulär, weil alle Diagonalelemente der Systemmatrix \mathbf{A} bezüglich der Poissongleichung (5.15) ungleich Null sind. Die Konvergenzbeschleunigung, die durch das vorkonditionierte System erreicht wird, ist in dieser Arbeit am Beispiel eines Wasserwürfels, der wegen der Oberflächenspannung zu schwingen beginnt, getestet worden. Dabei ist der Dichtesprung eins zu tausend, eine genaue Versuchsbeschreibung wird in Kapitel 7.2 aufgeführt.

In Abbildung 5.4 wird die Leistung des BiCGSTAB-Lösers, einmal ohne und einmal mit Vorkonditionierer, am oben erwähnten Beispiel des Wasserwürfels verglichen. Die Graphen zeigen den Verlauf der L^2 -Norm des Residuums beim Lösen der Poissongleichung im ersten Zeitschritt der Navier-Stokes-Gleichungen.

Hierbei stellt sich heraus, daß die Glättung des Residuums mit dem vorkonditionierten BiCGSTAB-Verfahren deutlich schneller geworden ist, so daß sich mit diesem vorkonditionierten Poissonlöser nun auch Zweiphasenströmungen mit großen Dichtesprüngen wesentlich effizienter berechnen lassen.

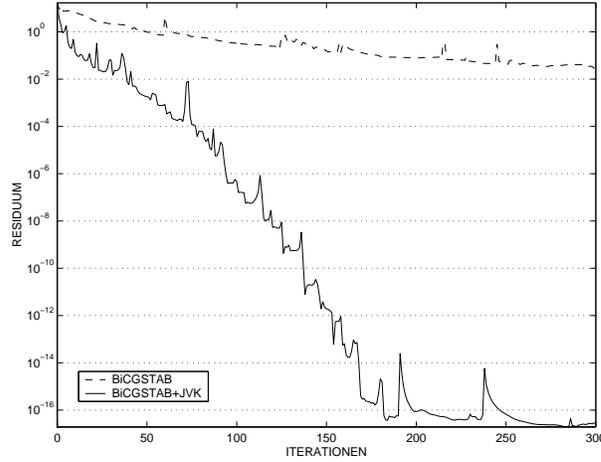


Abbildung 5.4: Verlauf des Residuums der Poissongleichung mit Dichtesprung

5.6 Die erweiterte Zeitschrittweitensteuerung

Die Zeitschrittweitensteuerung aus Kapitel 3.6 wird im Fall von Zweiphasenströmungen zusätzlich durch die Oberflächenspannungskraft, die das Geschwindigkeitsfeld mitbeeinflusst, erweitert. Ferner ist auch die Zeitschrittweitenabschätzung bezüglich der viskosen Terme (3.26) dahingehend zu modifizieren, daß die Viskositäten beider Fluidphasen nun in Betracht gezogen werden:

$$\delta t_v \leq \left(\max \left\{ \frac{\mu_g}{\rho_g}, \frac{\mu_l}{\rho_l} \right\} \left(\frac{2}{(\delta x)^2} + \frac{2}{(\delta y)^2} + \frac{2}{(\delta z)^2} \right) \right)^{-1}. \quad (5.18)$$

Zusammen mit $V := \max \left\{ \frac{\mu_g}{\rho_g}, \frac{\mu_l}{\rho_l} \right\} \left(\frac{2}{(\delta x)^2} + \frac{2}{(\delta y)^2} + \frac{2}{(\delta z)^2} \right)$ sei im Folgenden Gleichung (3.28) der Ausgangspunkt der Zeitschrittweitensteuerung für Zweiphasenströmungen

$$\delta t_{gkv}^u \leq 2 \left(\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right) + \sqrt{\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right)^2 + \frac{4|g_1|}{\delta x}} \right)^{-1}. \quad (5.19)$$

Diese beschreibt die Beschränkung der Zeitschrittweite für die u -Geschwindigkeitskomponente bezüglich der Konvektion, der Diffusion und der Volumenkräfte.

Die Oberflächenspannung wird als Volumenkraftterm der Form $\frac{1}{\rho}(\sigma \delta^\epsilon \kappa)$ in den Impulsgleichungen (5.1) aktiviert. Dabei hat die δ^ϵ -Funktion (5.7) als maximalen Wert $\frac{1}{\epsilon}$, wobei $\epsilon = \alpha h$ die Stärke der Regularisierung angibt mit h als Gitterschrittweite und α als Proportionalitätsfaktor. Die regularisierte Dichte hat an dieser Stelle den Wert $\frac{1}{2}(\rho_l + \rho_g)$. Somit ist $\frac{2|\kappa|\sigma}{\alpha h(\rho_l + \rho_g)}$ eine Approximation an die von der Oberflächenspannung induzierte Geschwindigkeit. Da die Oberflächenspannungskraft analog zur Volumenkraft g_1 in Gleichung (5.19) eingebaut werden kann, ergibt sich damit als Zeitschrittweiteinschränkung bezüglich der u -Geschwindigkeitskomponente die folgende

erweiterte Darstellung:

$$\delta t_{gvko}^u \leq 2 \underbrace{\left(\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right) + \sqrt{\left(\frac{|u|_{max}}{\delta x} + V \right)^2 + \frac{4|g_1|}{\delta x} + \frac{8|\kappa|\sigma}{\alpha h(\rho_l + \rho_s)(\delta x)}} \right)^{-1}}_{=: C_u}. \quad (5.20)$$

C_v und C_w lassen sich entsprechend definieren, so daß man $\delta t_{gvko}^{u/v/w} \leq 2C_{u/v/w}$ erhält. Die vollständige Zeitschrittweitensteuerung lautet dann schließlich

$$\delta t \leq 2\tau \min_{\Omega} (C_u, C_v, C_w), \quad (5.21)$$

Dabei ist $\tau \in (0, 1]$ die Sicherheitskonstante für die Zeitschrittweite, wie in Kapitel 3.6.

5.7 Diskretisierung der Transportgleichung

Die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche erfolgt allein über den Transport der Level-Set-Funktion ϕ . Hierzu ist die Diskretisierung der Transportgleichung

$$\partial_t \phi + \vec{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (5.22)$$

notwendig. Dabei ist es wichtig, die Transportgleichung mit möglichst hoher Ordnung in Raum und Zeit zu diskretisieren, denn die Berechnung der Krümmung, die über zweimaliges Differenzieren der Level-Set-Funktion ermittelt wird

$$\begin{aligned} \kappa &= \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \\ &= \frac{\phi_x^2(\phi_{yy} + \phi_{zz}) + \phi_y^2(\phi_{xx} + \phi_{zz}) + \phi_z^2(\phi_{xx} + \phi_{yy}) - 2(\phi_x \phi_y \phi_{xy} + \phi_x \phi_z \phi_{xz} + \phi_y \phi_z \phi_{yz})}{(\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

führt im ungünstigsten Fall dazu, daß zwei Ordnungen verloren gehen, wie das folgende Lemma zeigt.

Lemma: Seien $f, \tilde{f} : D \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal differenzierbar und sei \tilde{f} für jedes $x \in D$ eine Approximation zweiter Ordnung an f , also $\tilde{f}(x) = f(x) + O(h^2)$. Dann gilt

$$\frac{\tilde{f}(x+h) - 2\tilde{f}(x) + \tilde{f}(x-h)}{h^2} = f_{xx}(x) + O(1).$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{f}(x+h) - 2\tilde{f}(x) + \tilde{f}(x-h)}{h^2} &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) + O(h^2)}{h^2} \\ &= \underbrace{\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}}_{f_{xx}(x) + O(h^2)} + O(1) \\ &= f_{xx}(x) + O(1) \quad \square \end{aligned}$$

Die Vergleichsrechnungen für die Konvergenzordnung der Krümmung in Kapitel 7.1 bestätigen, wie zu erwarten, diese Tatsache, die in der zugrundeliegenden Literatur überraschenderweise nicht erwähnt wird. Um also eine Konvergenzordnung von mindestens Eins für die Krümmung zu erhalten, sollte eine Diskretisierung der Level-Set-Funktion von mindestens dritter Ordnung in Raum und Zeit vorgenommen werden. Deshalb wurde in dieser Arbeit die Transportgleichung auf folgende Weise diskretisiert:

Raumdiskretisierung

Die Konvektionsgeschwindigkeiten $\vec{u} = (u, v, w)$ des konvektiven Termes $\vec{u} \cdot \nabla \phi$ der Transportgleichung (5.22) werden über Lagrange-Polynominterpolation dritten Grades (siehe Kapitel 5.3) in den Mittelpunkten der Gitterzellen bestimmt. Die einzelnen Komponenten von $\nabla \phi = (\phi_x, \phi_y, \phi_z)$ werden mit dem WENO-Verfahren fünfter Ordnung aus Kapitel 3.4.3 diskretisiert.

Zeitdiskretisierung (Adams-Bashfort versus Runge-Kutta)

Die Zeitdiskretisierung erfordert ein Zeitgitter, das entweder im Sinne von finiten Differenzen als diskrete Punkte betrachtet oder als finite Volumen, also als Zeitvolumen angesehen werden kann. Im Allgemeinen wird nach der Raumdiskretisierung, die Zeit im Sinne eines Anfangswertproblems für gewöhnliche Differentialgleichungen berechnet.

Für die Zeitdiskretisierung wird folgende gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung mit gegebenem Anfangswert betrachtet:

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = L(\phi(t)) , \quad \phi(t_0) = \phi^0 . \quad (5.23)$$

Hierbei ist L der Raumoperator, das heißt L enthält die Raumableitungen der skalaren Funktion ϕ zum Zeitpunkt t . Gleichung (5.23) wird in drei Raumdimensionen jeweils für die x -, y - und z -Komponente angewendet.

Das Problem ist nun, eine Lösung ϕ^1 zu finden, die um einen Zeitschritt δt vom Anfangspunkt entfernt ist. Die Lösung ϕ^1 zum Zeitpunkt $t_1 = t_0 + \delta t$ kann als neue Anfangsbedingung gesehen werden und damit dann wieder um δt transportiert werden zu $t_2 = t_1 + \delta t$, $t_3 = t_2 + \delta t, \dots$

Die Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen betrachtet häufig das Integral über (5.23) von t_n bis $t_{n+1} = t_n + \delta t$:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d\phi}{dt} dt = \phi^{n+1} - \phi^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(\phi(t)) dt , \quad (5.24)$$

mit $\phi^{n+1} = \phi(t_{n+1})$. Das rechte Integral von Gleichung (5.24) kann nicht einfach ausgewertet werden, weil ϕ für $t > t_n$ nicht bekannt ist. Deshalb muß versucht werden, dieses Integral auf andere Weise möglichst genau zu approximieren.

Eine Möglichkeit, das Integral zu approximieren, bieten die *Adams-Bashfort-Methoden* [9]. Sie zählen zu den besten Mehrpunkt-Verfahren und ihre Idee ist, das Zeitinte-

gral mittels Lagrange-Polynomextrapolation zu berechnen. Für ein explizites Adams-Bashfort-Verfahren der Ordnung $m + 1$ wird ein Lagrange Polynom durch die Punkte $L(\phi^{n-m}), L(\phi^{n-m+1}), \dots, L(\phi^n)$ konstruiert und dann mit der Simpson-Regel [58] das Integral berechnet. Das Adams-Bashfort-Verfahren zweiter Ordnung für *äquidistante* Zeitschritte lautet:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\delta t}{2}[3L(\phi^n) - L(\phi^{n-1})] . \quad (5.25)$$

Bis auf $L(\phi^n)$ ist also keine zusätzliche Berechnung des Raumoperators L notwendig. Aber dafür müssen Werte aus alten Zeitpunkten gespeichert werden, um höhere Ordnungen zu erhalten. Der prinzipielle Nachteil von Adams-Bashfort-Methoden besteht darin, daß zu Beginn der Rechnung nur der Anfangswert gegeben ist, obwohl zur Erhaltung der Ordnung mehrere Werte benötigt werden. Ein Ausweg ist, am Anfang der Berechnungen ein Verfahren niedriger Ordnung (explizites Euler-Verfahren) mit kleinen Zeitschritten zu verwenden, so daß die gewünschte Genauigkeit erhalten bleibt, und sobald mehr Werte erhältlich sind, die Ordnung zu erhöhen und die Zeitschritte langsam zu vergrößern. Dies impliziert aber nicht-äquidistante Zeitschrittweiten, auf die wiederum Gleichung (5.25) nicht zugeschnitten ist.

In einigen Artikeln wird als Zeitdiskretisierung das Adams-Bashfort-Verfahren zweiter Ordnung verwendet. Dabei wird fälschlicherweise die Formel (5.25) eingesetzt, die ausschließlich für äquidistante Zeitschrittweiten gültig ist, obwohl aufgrund des expliziten Schemas eine Zeitschrittweitensteuerung implementiert wurde, die im allgemeinen zu nicht äquidistanten Zeitschrittweiten führt. Passender wäre in diesen Fällen ein Adams-Bashfort-Verfahren zweiter Ordnung für *nicht äquidistante* Zeitschritte.

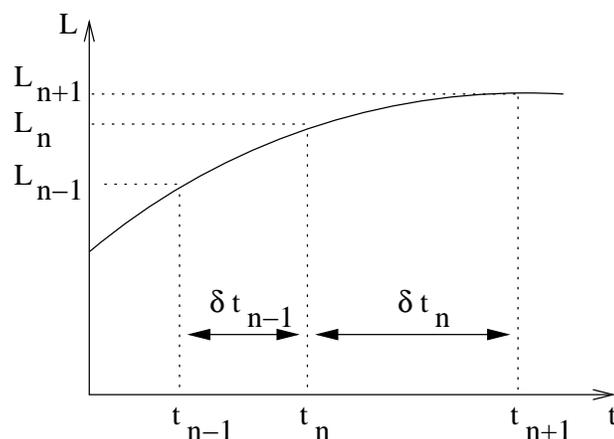


Abbildung 5.5: Zur nicht äquidistanten Zeitdiskretisierung

Hierzu werden zwei gegebene Punkte L_{n-1} und L_n zu den Stützstellen t_{n-1} und t_n betrachtet, mit $L_i = L(\phi(t_i))$, $i = n - 1, n$. Zusätzlich sei $\delta t_{n-1} := t_n - t_{n-1}$ und

$\delta t_n := t_{n+1} - t_n$. Ziel ist die Approximation des Integrals aus

$$\phi^{n+1} - \phi^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(\phi(t)) dt . \quad (5.26)$$

Das Lagrange-Polynom ersten Grades durch die Punkte (t_{n-1}, L_{n-1}) und (t_n, L_n) hat die Form

$$p(t) = L_{n-1} \frac{t - t_n}{t_{n-1} - t_n} + L_n \frac{t - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} . \quad (5.27)$$

Damit ergibt sich als Integralapproximation

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} p(t) dt &= \frac{\delta t_n}{2} (p(t_{n+1}) + p(t_n)) \\ &= \frac{\delta t_n}{2} \left(L_{n-1} \frac{t_{n+1} - t_n}{t_{n-1} - t_n} + L_n \frac{t_{n+1} - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} + L_n \right) \\ &= \frac{\delta t_n}{2} \left(L_n \left(\frac{t_{n+1} - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} + 1 \right) + L_{n-1} \left(\frac{t_{n+1} - t_{n-1}}{t_{n-1} - t_n} \right) \right) \\ &= \frac{\delta t_n}{2} \left(L_n \left(\frac{\delta t_n + 2\delta t_{n-1}}{\delta t_{n-1}} \right) - L_{n-1} \frac{\delta t_n}{\delta t_{n-1}} \right) . \end{aligned}$$

Das erste Gleichheitszeichen gilt, weil die Trapezregel Polynome ersten Grades exakt integriert. Damit hat das verallgemeinerte Adams-Bashfort-Verfahren zweiter Ordnung die Form

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\delta t_n}{2} \left(\frac{\delta t_n + 2\delta t_{n-1}}{\delta t_{n-1}} L_n - \frac{\delta t_n}{\delta t_{n-1}} L_{n-1} \right) .$$

Der Fall äquidistanter Zeitschrittweiten (also $\delta t_n = \delta t_{n-1}$) führt erwartungsgemäß zu Gleichung (5.25).

Desweiteren kann die Chorin'sche Projektionsmethode aus Kapitel 5.1 zusätzlich um das Adams-Bashfort-Verfahren erweitert werden, wodurch sich die Strömungsgeschwindigkeiten der Navier-Stokes-Gleichungen in der Zeit von zweiter Ordnung genau berechnen lassen. Diese Idee ist erstmals von van Kahn in [40] beschrieben worden.

Eine andere Möglichkeit, die Zeit zu diskretisieren, verläuft über *Runge-Kutta-Methoden* [9]. Das explizite Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung wird auch als klassische Heuns Methode oder modifiziertes Euler-Verfahren bezeichnet. Es besteht aus zwei Teilschritten. Zunächst wird ein halber Zeitschritt als Prädiktor-Wert über einen expliziten Euler-Schritt berechnet; dann folgt mit der Mittelpunkregel ein Korrektor-Schritt, wodurch die Methode ihre zweite Ordnung erhält:

$$\begin{aligned} \text{Prädiktor:} \quad \phi^{n+\frac{1}{2}} &= \phi^n + \frac{\delta t}{2} L(\phi^n) , \\ \text{Korrektor:} \quad \phi^{n+1} &= \phi^n + \delta t L(\phi^{n+\frac{1}{2}}) . \end{aligned}$$

Der Vorteil dieses Verfahrens ist seine bessere Stabilität (TVD-stabil [28]) im Vergleich zu den Adams-Bashfort-Methoden. Zusätzlich benötigen Runge-Kutta-Methoden bis auf die Anfangsbedingung keine weiteren Daten, um vom Beginn einer Rechnung an die Ordnung der Zeitdiskretisierung einzuhalten.

Das *Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung* besteht aus einer Konvexkombination von drei Euler-Schritten.

$$\begin{aligned}\phi^{(1)} &= \phi^n + \delta t L(\phi^n) \\ \phi^{(2)} &= \phi^n + \frac{\delta t}{4} [L(\phi^n) + L(\phi^{(1)})] \\ \phi^{n+1} &= \phi^n + \frac{\delta t}{6} [L(\phi^n) + 4L(\phi^{(2)}) + L(\phi^{(1)})] .\end{aligned}\tag{5.28}$$

In den numerischen Tests wird dieses Runge-Kutta-Verfahren für die Transportgleichung eingesetzt. Dabei sind vor jeder Berechnung des Raumoperators L die Randbedingungen (Rutsch-, Haft-, Ein-/Ausflußbedingungen) zu setzen.

Auch Runge-Kutta-Verfahren können auf die Chorin'sche Projektionsmethode aus Kapitel 5.1 angewendet werden, welche das explizite Euler-Verfahren verwendet. Um eine Zeitdiskretisierung von höherer Ordnung zu erhalten, kann das Runge-Kutta-Verfahren zweiter oder dritter Ordnung eingesetzt werden. Dabei muß allerdings für jeden Euler-Schritt des Runge-Kutta-Verfahrens die Poissongleichung gelöst werden. Eine Runge-Kutta-Methode zweiter Ordnung benötigt also pro Zeitschritt zweimal das Lösen der Poissongleichung.

5.8 Diskretisierung der Reinitialisierungsfunktion

Für die nach dem Transportschritt entstandene vorläufige Level-Set-Funktion ϕ^* (siehe Kapitel 5.1) wird die folgende Reinitialisierungsgleichung in Form eines Anfangswertproblems

$$\begin{aligned}d_\tau + \text{sign}(\phi^*) (|\nabla d| - 1) &= 0 \\ \text{Anfangswert: } d(0) &= \phi^*(\vec{x}, t)\end{aligned}\tag{5.29}$$

sowohl im Ort als auch in der Zeit mit einem Verfahren zweiter Ordnung diskretisiert und in künstlicher Zeit τ iterativ gelöst. Bei in dieser Arbeit durchgeführten numerischen Testrechnungen hat sich herausgestellt, daß die Ordnung der Reinitialisierung zur Erhaltung der Masse beiträgt und eine genauere Berechnung der Krümmung ermöglicht.

Desweiteren können nach einem (Navier-Stokes)-Zeitschritt in Nähe der freien Oberfläche sehr große beziehungsweise sehr kleine Level-Set-Gradienten entstehen. Die Reinitialisierung wird dann in Bereichen mit flachem Gradienten sehr langsam, oder schlimmer, eine Verletzung der CFL-Bedingung kann in Bereichen mit sehr steilen Gradienten eintreten, wodurch die Massenerhaltung gestört wird.

Zu beiden Problemen wurden während der Entwicklung des im Rahmen dieser Arbeit erzeugten numerischen Simulationsprogramms Verbesserungen implementiert

und durch numerische Ergebnisse bezüglich der Massenerhaltung und schließlich auch bezüglich der Krümmung belegt.

Zeitdiskretisierung

Für alle folgenden Berechnungen ist Gleichung (5.29) in der Zeit mit dem Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung (siehe (5.28)) diskretisiert worden.

Raumdiskretisierung

Der Raumoperator L bezüglich der Gleichung (5.29) ist $L(d) = \text{sign}(\phi^*) (|\nabla d| - 1)$. Vollständig ausgeschrieben hat er die Form

$$\left(\frac{S(\phi^*)d_x}{\sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}} \right) d_x + \left(\frac{S(\phi^*)d_y}{\sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}} \right) d_y + \left(\frac{S(\phi^*)d_z}{\sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}} \right) d_z - S(\phi), \quad (5.30)$$

mit $S = \text{sign}$. Aus Gründen der numerischen Stabilität ist es nützlich die signum-Funktion $S(\phi^*)$ zu glätten.

Die gesamte Diskretisierung des Raumoperators L wirft zwei Fragen auf: Erstens, wie sollte die signum-Funktion regularisiert werden, ohne daß dabei der freie Rand künstlich bewegt wird? Zweitens, auf welche Weise soll ∇d berechnet werden?

In [70] haben die Autoren die folgende geglättete signum-Funktion

$$S_h(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + h^2}} \quad (5.31)$$

verwendet. Diese Funktion führt zu einer besseren Massenerhaltung. Sie funktioniert gut, solange $\nabla \phi$ in der ϵ -Umgebung nicht zu groß oder zu klein ist.

Die Raumableitungen von ∇d werden im Allgemeinen mit einem ENO-Verfahren zweiter Ordnung berechnet, die Geschwindigkeiten $S(\phi^*)d_x$, $S(\phi^*)d_y$ und $S(\phi^*)d_z$ dieser Reinitialisierungsgleichung bestimmen dabei die Upwindrichtung.

In dieser Arbeit ist der Einfluß der Diskretisierung von ∇d auf die Erhaltung der Masse untersucht worden. Dabei wurde ∇d insbesondere mit den ENO- und WENO-Methoden, die von unterschiedlich hoher Approximationsordnung sind, berechnet. Wie schon in Kapitel 3.4 beschrieben wurde, wird dazu beispielsweise für die Berechnung von $[d_x]_{i,j,k}$ ein Newton-Interpolationspolynom $P_{i-1,i}$ konstruiert, daß d im Intervall $I = [x_{i-1}, x_i] \times y_j \times z_k$ von r -ter Ordnung approximiert, und ein weiteres Polynom $P_{i,i+1}$, das d im Intervall $I = [x_i, x_{i+1}] \times y_j \times z_k$ von r -ter Ordnung approximiert.

Für $[d_x]_{i,j,k}$ stehen nun die zwei Werte $d_x^- = \left[\frac{dP_{i-1,i}}{dx} \right]_{i,j,k}$ und $d_x^+ = \left[\frac{dP_{i,i+1}}{dx} \right]_{i,j,k}$ zur Verfügung (analog für d_y und d_z). Welcher dieser beiden Werte ausgewählt wird, ermittelt sich über folgende Upwindabfrage [69]:

$$[d_x]_{i,j,k} = \begin{cases} d_x^+ & \text{falls } d_x^- S_h(\phi_{i,j,k}) < -d_x^+ S_h(\phi_{i,j,k}) \text{ und } d_x^+ S_h(\phi_{i,j,k}) < 0 \\ d_x^- & \text{falls } d_x^- S_h(\phi_{i,j,k}) > 0 \text{ und } d_x^+ S_h(\phi_{i,j,k}) > -d_x^- S_h(\phi_{i,j,k}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Zur Untersuchung der Massenerhaltung wurden Testrechnungen durchgeführt, bei der ∇d mit dem ENO-Verfahren erster, zweiter, dritter Ordnung und mit dem WENO-Verfahren fünfter Ordnung diskretisiert worden ist. Als Testproblem ist ein Wasser-

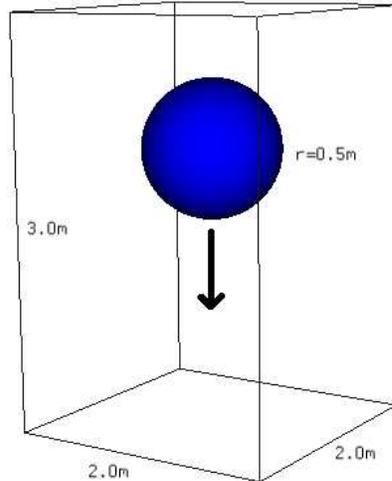


Abbildung 5.6: Versuchsaufbau der Testrechnung

Luft-Phasensystem gerechnet worden. Dabei wurde eine Wasserkugel vom Radius 0.5m betrachtet, die aufgrund der Gravitationskraft $\vec{g} = (0.0, -9.81, 0.0) \text{m/s}^2$ zu Boden fällt. Die Größe des Gesamtgebietes betrug $2\text{m} \times 3\text{m} \times 2\text{m}$. Für die Level-Set-Funktion wurde eine exakte vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion zur Oberfläche der Kugel mit dem Mittelpunkt $(1\text{m}, 2\text{m}, 1\text{m})$ und dem Radius $r=0.5\text{m}$ als Anfangswert vorgegeben. Das Rechengebiet hatte eine Auflösung von $40 \times 60 \times 40$ Gitterzellen. Alle weiteren Konstanten sind mit folgenden Werten belegt worden:

$$\begin{aligned} \mu_g &= 1.81 \cdot 10^{-5} \text{kg/ms}, & \mu_l &= 1.002 \cdot 10^{-3} \text{kg/ms}, \\ \rho_g &= 1.205 \text{kg/m}^3, & \rho_l &= 998.2 \text{kg/m}^3, \\ g &= -9.81 \text{m/s}^2, & \sigma &= 0.072529 \text{N/m}. \end{aligned}$$

Für die Regularisierung der Heavysidefunktion und der Deltafunktion ist $\epsilon = 1.5h$ gesetzt worden. Abbildung 5.7 zeigt die Ergebnisse der Berechnungen. Die obere Kugel beschreibt die Anfangslage und die untere Kugel den Endzustand.

Im ersten Bild (links) ist ein deutlicher Massenverlust zu erkennen, der unter Einsatz des ENO-Verfahrens erster Ordnung entsteht. Die blaue Wasserkugel unterscheidet sich deutlich im Vergleich zu den Testergebnissen mit den ENO-Verfahren zweiter, dritter Ordnung und der WENO-Methode fünfter Ordnung. Bei Verwendung der Verfahren höherer Ordnung entstehen kleine Einbuchtungen an den Seiten der Kugel, wie in Abbildung 5.7 zu erkennen ist.

Je mehr sich die Kugel dem Boden nähert, desto größer wird der Druck zwischen beiden. Dies führt dazu, daß das Wasser seitlich ausweicht und die Kugelform immer

flacher wird. Da sich schon die Lösung für das ENO-Verfahren zweiter Ordnung von der Lösung für das WENO-Schema fünfter Ordnung optisch kaum unterscheidet, ist das Ergebnis für das ENO-Verfahren dritter Ordnung in Abbildung 5.7 nicht dargestellt.

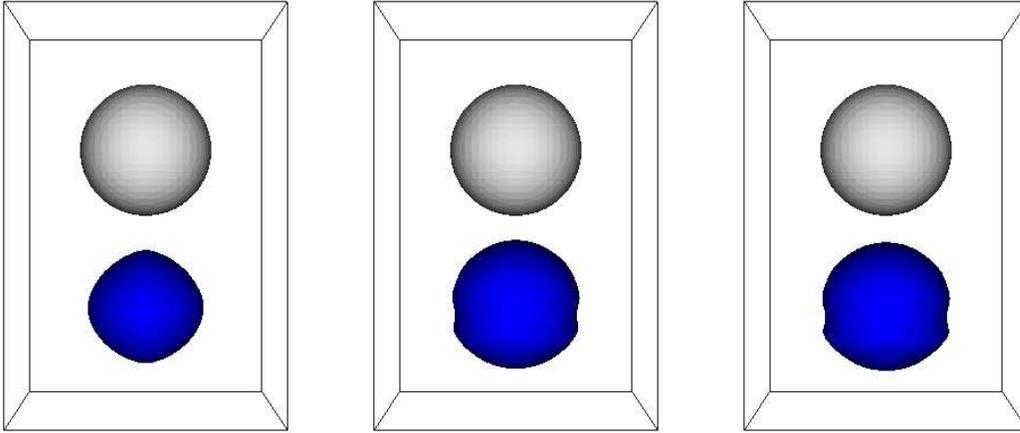


Abbildung 5.7: Massenerhaltung mit ENO-1, ENO-2 und WENO-5

Die Gesamtmasse der jeweiligen Testrechnungen wurde zum Zeitpunkt $t = 0.5s$ gemessen über

$$\int_{\Omega} \rho^h(\phi(\vec{x})) d\vec{x}, \quad (5.32)$$

wobei ρ^h , die Dichtefunktion (5.10) zur Bestimmung der Masse, nur über eine Gittermaschenweite h geglättet wurde. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.1 dargestellt. Die größte Verbesserung bezüglich der Massenerhaltung wird durch den Wechsel vom

Erhaltene Masse in Prozent der Anfangsmasse			
ENO-1	ENO-2	ENO-3	WENO-5
57.8%	94.3%	94.9%	95.8%

Tabelle 5.1: Numerische Studie zur Massenerhaltung

ENO-Schema erster Ordnung auf das ENO-Schema zweiter Ordnung erreicht, denn der Unterschied beträgt dort 36.5%. Das ENO-Verfahren dritter Ordnung und das WENO-Schema fünfter Ordnung verbessern die Massenerhaltung um nochmals bis zu 1.5%. In Abhängigkeit der Oberflächenspannungskraft und bei komplizierteren Formen der freien Oberfläche kann der Unterschied in der Masse zwischen dem WENO-Schema fünfter Ordnung und dem ENO-Verfahren zweiter Ordnung deutlich höher sein als 1.5%.

Im folgenden Kapitel soll ausschließlich der Einfluß der Reinitialisierungsgleichung 5.29 auf die Erhaltung der Masse untersucht und verbessert werden. Dabei werden

zwei unterschiedliche Methoden, die zu einer verbesserten Massenerhaltung führen, beschrieben. Während sich bei einer der beiden Methoden im Rahmen dieser Arbeit herausgestellt hat, daß diese zu Stabilitätsproblemen führen kann, ist mit der anderen Methode eine verbesserte Massenerhaltung während des Reinitialisierungsprozesses erzielt worden.

Als Testbeispiel wird dabei eine freie Oberfläche verwendet, die einen Würfel beschreibt. Dessen Oberflächenstruktur ist im Vergleich zu der Kugel wesentlich komplizierter, denn sowohl die Kanten als auch die Ecken des Würfels müssen während der Reinitialisierung möglichst unverändert bleiben. Genau an diesen Stellen können zusätzlich die Stärken der Verfahren höherer Ordnung im Vergleich zum ENO-Schema zweiter Ordnung optisch besser dargestellt werden.

5.9 Verbesserte Massenerhaltung

Um das Problem der Massenerhaltung zu beheben, haben Chang, Hou, Merriman und Osher [10] einen zusätzlichen Reinitialisierungsprozeß eingeführt. Dieser beruht auf einer Beobachtung von T.Y. Hou, der erkannt hat, daß die numerische Diffusion des Reinitialisierungsprozesses eine künstliche Bewegung der freien Oberfläche in Normalenrichtung erzeugt, deren Bewegungsgeschwindigkeit proportional zur Krümmung des freien Randes ist.

Der durch die künstliche Bewegung des freien Randes bei der ersten Reinitialisierung erzeugte Fehler in der Massenerhaltung, wird nun über das iterative Lösen einer zweiten Reinitialisierungsgleichung vom gestörten Hamilton-Jacobi-Typ

$$\begin{aligned} \partial_\tau d + (A_0 - A(\tau))(-P + \kappa)|\nabla d| &= 0 \\ \text{Anfangsbedingung: } d(\vec{x}, \tau = 0) &= \phi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (5.33)$$

wieder rückgängig gemacht. Dabei ist A_0 die ursprüngliche Masse zum Zeitpunkt $t = 0$ und $A(\tau)$ ist die aktuelle Masse, die aus der Level-Set-Funktion $d(\tau)$ von Gleichung (5.33) hervorgeht. Desweiteren wird P aus (5.33) in [10] als eine positive Konstante definiert, die dazu beiträgt den Reinitialisierungsprozeß (5.33) zu stabilisieren. Eine genauere Beschreibung zur Bestimmung dieser Konstanten P wird in [10] nicht gegeben. Gleichung (5.33) wird iterativ bis zum stationären Zustand gelöst, der erreicht ist, wenn näherungsweise $(A_0 - A(\tau)) = 0$ gilt. Mit dieser Methode kann theoretisch die Massenerhaltung bis zur Maschinengenauigkeit erfüllt werden.

Die gestörte Hamilton-Jacobi-Gleichung (5.33) ist für das in dieser Arbeit entwickelte Simulationsprogramm getestet worden. Dabei wurde sie in der Zeit mit dem Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung (5.28) und im Raum mit dem WENO-Schema fünfter Ordnung aus Kapitel 3.4.3 diskretisiert.

In einer Reihe hierzu durchgeführter Simulationsberechnungen wurde festgestellt, daß bei komplizierten Strukturen der freien Oberfläche mit stark variierender Krümmung das numerische Verfahren instabil wird und Oszillationen an der freien Oberfläche entstehen.

Der Grund für die numerischen Instabilitäten besteht darin, daß die Krümmung κ aus Gleichung (5.33) als nichtlineare Geschwindigkeit eingeht. Hierbei reicht es schon, daß die Anfangsbedingung für die Gleichung (5.33) kleine Sprünge in der Krümmung enthält, die dann während des iterativen Lösens nichtlinear anwachsen. Verschiedenste Versuche, durch kontrollierte Zeitschrittweitensteuerung des Iterationsverfahrens eine bessere Stabilität zu erreichen, waren erfolglos.

Wegen der oben festgestellten numerischen Probleme, die in [10] nicht erwähnt wurden, ist die Methode mit der gestörten Hamilton-Jacobi-Gleichung hier nicht weiter betrachtet worden.

Ein anderer Ansatz, den durch den Reinitialisierungsprozeß erzeugten Massenverlust zu reduzieren, besteht darin, das Verhalten der geglätteten signum-Funktion

$$S_h(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + h^2}} \quad (5.34)$$

zu verbessern. Für eine Analyse der Eigenschaften von (5.34) wird in [53] zur Vereinfachung der *eindimensionale Fall* mit dem Upwind-Verfahren erster Ordnung im Raum und dem expliziten Euler-Verfahren in der Zeit betrachtet. Angenommen, die freie Oberfläche befindet sich im Intervall (x_i, x_{i+1}) , dann gilt $d_i < 0 < d_{i+1}$ für die Level-Set-Werte d_i und d_{i+1} in den Gitterpunkten x_i und x_{i+1} . Ein Reinitialisierungszeitschritt für die Gleichung (5.29) mit Upwind- und Euler-Verfahren führt zu

$$d_i^1 = d_i + s_i \delta \tau \left(1 - \frac{d_{i+1} - d_i}{\delta x} \right) \quad (5.35)$$

$$d_{i+1}^1 = d_{i+1} + s_{i+1} \delta \tau \left(1 - \frac{d_{i+1} - d_i}{\delta x} \right), \quad (5.36)$$

wobei $-1 \leq s_i \leq 0$ und $0 \leq s_{i+1} \leq 1$ Approximationen zu $\text{sign}(d_i)$ und $\text{sign}(d_{i+1})$ aus (5.29) sind.

Das obige Schema ist monoton, das heißt d_i^1 und d_{i+1}^1 sind nicht-fallend in d_i und d_{i+1} , solange die CFL-Bedingung

$$\delta \tau \leq \delta x \quad (5.37)$$

erfüllt ist. Wenn $\frac{(d_{i+1} - d_i)}{\delta x} \leq 1$ ist, dann gilt $d_i^1 < 0 < d_{i+1}^1$, unabhängig von $\delta \tau$, s_i und s_{i+1} . Aber falls $\frac{(d_{i+1} - d_i)}{\delta x} > 1$ gilt und $\text{sign}(d)$ durch $S_h(d)$ aus (5.34) approximiert wird, dann kann nicht garantiert werden, daß d_i und d_{i+1} ihr Vorzeichen nicht wechseln. Falls zum Beispiel $\delta \tau = c(\delta x)$, $d_i = -m(\delta x)$ und $d_{i+1} = n(\delta x)$ mit $c, m, n \in \mathbb{R}^+$ gesetzt wird, dann ist

$$d_i^1 = m(\delta x) \left[-1 + \frac{c(m + n - 1)}{\sqrt{m^2 + 1}} \right] \quad (5.38)$$

$$d_{i+1}^1 = n(\delta x) \left[1 - \frac{c(m + n - 1)}{\sqrt{n^2 + 1}} \right]. \quad (5.39)$$

Zu beliebig kleinem, fest vorgegebenen $c = \frac{\delta \tau}{\delta x}$ können m und n leicht so gewählt werden, daß d_i^1 oder d_{i+1}^1 gegenüber d_i beziehungsweise d_{i+1} das Vorzeichen wechselt, wodurch

sich die freie Oberfläche eventuell weiter als eine Gitterzelle bewegt. Aus (5.35) und (5.36) folgt, daß diese Vorzeichenwechsel von d durch die modifizierte CFL-Bedingung

$$\frac{\delta\tau}{\delta x} \leq \frac{|d_k|}{\delta x |s_k| \left| 1 - \frac{d_{i+1} - d_i}{\delta x} \right|} \quad \text{für } k=i, i+1 . \quad (5.40)$$

verhindert werden können. Damit keine größere Zeitschrittweitereinschränkung entsteht als durch die ursprüngliche CFL-Bedingung (5.37), wird folgende Approximation für $\text{sign}(d)$ gewählt:

$$s_k = \frac{d_k}{\sqrt{d_k^2 + \left(1 - \left| \frac{d_{i+1} - d_i}{\delta x} \right| \right)^2 \delta x^2}} . \quad (5.41)$$

Diese neue Form der regularisierten signum-Funktion ist von der lokalen Steigung der Level-Set-Funktion abhängig. Dort, wo ∇d lokal sehr steil ist, nähert sich die signum-Funktion dem Wert Null und damit werden die Geschwindigkeiten aus (5.30) im Reinitialisierungsprozeß (5.29) herabgesetzt. Dort, wo ∇d lokal sehr flach ist, nähert sich der Betrag der signum-Funktion dem Wert Eins, wodurch die Geschwindigkeiten aus (5.30) im Reinitialisierungsprozeß (5.29) erhöht werden. Wenn $\nabla d = 1$, dann ist die signum-Funktion exakt.

Die obige Analyse deutet an, daß auch im mehrdimensionalen Fall, wenn als Zeitdiskretisierung das Euler-Verfahren eingesetzt und $\nabla d(x)$ durch einen diskreten Operator Dd approximiert wird, $S(d)$ durch

$$s_k = \frac{d_k}{\sqrt{d_k^2 + (1 - |Dd|)^2 \delta x^2}} \quad (5.42)$$

approximiert werden kann. Dadurch erhalten alle Level-Set-Werte während der Reinitialisierung ihr Vorzeichen, wodurch ein unphysikalisches Bewegen der freien Oberfläche reduziert wird. Dies führt schließlich zu einer verbesserten Massenerhaltung. Für Zeitdiskretisierungen höherer Ordnung bieten sich Runge-Kutta-Methoden an, weil diese aus Konvexkombinationen von Euler-Schritten bestehen.

In den folgenden Testrechnungen ist als Zeitdiskretisierung das Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung und als Ortsdiskretisierung das WENO-Schema fünfter Ordnung verwendet worden. Zusätzlich wurde in [53] aus numerischen Gründen die modifizierte signum-Funktion (5.42) leicht geglättet durch

$$s_k = \frac{d_k}{\sqrt{d_k^2 + |Dd|^2 \delta x^2}} . \quad (5.43)$$

Die Level-Set-Funktion ϕ ist so initialisiert worden, daß sie innerhalb des dreidimensionalen Einheitsgebietes $[0, 1]^3$ einen Würfel beschreibt. Das Einheitsgebiet wurde durch $40 \times 40 \times 40$ Gitterzellen aufgelöst. Desweiteren ist im Inneren des Würfels $\phi = 1$ und im Äußeren des Würfels $\phi = -1$ gesetzt worden. Da die Level-Set-Funktion mit diesen Anfangswerten keine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion darstellt, wird die

Reinitialisierungsgleichung (5.29) in künstlicher Zeit bis τ bis zum stationären Zustand iteriert, so daß die Level-Set-Funktion schließlich auf dem gesamten Gebiet näherungsweise eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion darstellt.

Anhand dieser Tests läßt sich insbesondere an den Kanten und Ecken des Würfels der Einfluß der numerischen Diffusion sehr gut erkennen.

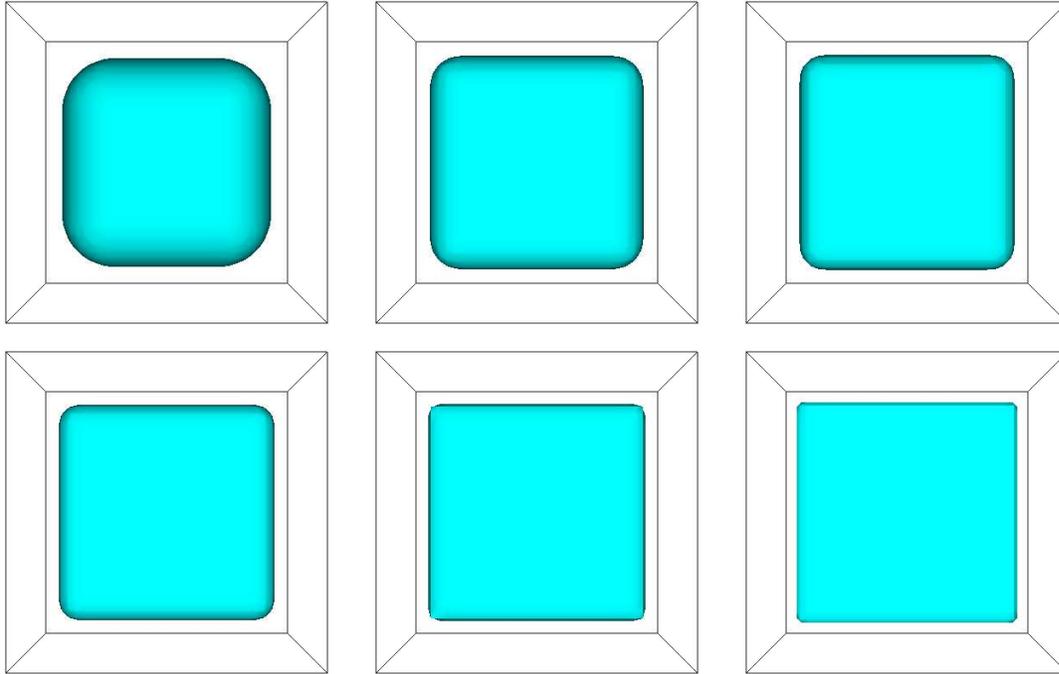


Abbildung 5.8: Reinitialisierung mit dem ENO-Verfahren erster, zweiter, dritter Ordnung (obere Reihe) und mit dem WENO-Schema fünfter Ordnung exklusive und inklusive modifizierter signum-Funktion (untere Reihe links und mitte). Die Anfangsbedingung und exakte Lösung ist unten rechts abgebildet.

Die Ergebnisse in Abbildung 5.8 zeigen jeweils die Nullniveaumenge der berechneten Abstandsfunktion. Jedes dieser Ergebnisse ist mit einer anderen Diskretisierung für die konvektiven Terme der Reinitialisierungsfunktion berechnet worden.

Tabelle 5.2 zeigt die erhaltene Masse in Prozent der Anfangsmasse nach der Reinitialisierung. Sowohl Abbildung 5.8 als auch Tabelle 5.2 belegen eine Qualitätssteigerung der Reinitialisierung, wenn das WENO-Schema fünfter Ordnung zusammen mit der modifizierten signum-Funktion eingesetzt wird. Hierbei ist im Gegensatz zu Gleichung (5.32) die Masse berechnet worden über

$$\int_{\Omega} \rho(\phi(\vec{x})) d\vec{x},$$

also ohne Glättung der Dichte über eine Gittermaschenweite. Folglich bedeutet die

ENO-1	ENO-2	ENO-3	WENO-5	WENO-5 modif. sign
84.80 %	95.66%	96.41%	98.39%	100.0%

Tabelle 5.2: Erhaltene Masse in Prozent der Anfangsmasse nach der Reinitialisierung

hundertprozentige Massenerhaltung für das WENO-Verfahren fünfter Ordnung inklusive der modifizierten signum-Funktion in diesem Fall, daß der Level-Set-Wert, wie aufgrund der analytischen Betrachtung zu erwarten war, in jeder Gitterzelle sein Vorzeichen beibehalten hat.

Abschließend sei zur vollständigen Übersicht der Algorithmus für Zweiphasenströmungen aufgeführt:

Algorithmus zur Berechnung von Zweiphasenströmungen

Setze $t:=0$, $n:=0$

Initialisiere \vec{u} , p , ϕ , $flag$

Falls ($\phi \in \{-1, 1\}$)

Setze τ_{end} :=Größte Kantenlänge des Gebietes

Setze die Randbedingungen für die Level-Set-Funktion

Solange $\tau < \tau_{end}$

Reinitialisiere nach (5.8)

Setze die Randbedingungen für u^n

Solange $t \leq t_{end}$

Bestimme den neuen Zeitschritt δt in jedem Teilgebiet nach (5.6)

Berechne \vec{u}^* aus \vec{u}^n und ϕ^n nach (5.1)

Setze die Randbedingungen für \vec{u}^*

Berechne $RHS := \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\delta t}$

Berechne ϕ^* aus ϕ^n und \vec{u}^n nach (5.7)

Solange $\tau < 2\epsilon$

Berechne ϕ^{n+1} durch Reinitialisierung von ϕ^* nach (5.8)

Solange $it < it_{max}$ **oder** $\|\mathbf{r}^{it}\| < \tilde{\epsilon}$

Löse iterativ $\nabla \cdot \frac{1}{\rho(\phi^{n+1})} \nabla p^{n+1} = RHS$ nach (5.5)

Bestimme \vec{u}^{n+1} über die Druckkorrektur

Setze die Randbedingungen für u^{n+1}

$t := t + \delta t$, $n := n + 1$

Im nun folgenden Kapitel wird der obige Algorithmus parallelisiert, um aufwendige dreidimensionale Simulationen effizienter berechnen zu können.

Kapitel 6

Parallelisierung

Die rasante Entwicklung von Groß- beziehungsweise Hochleistungsrechnern ermöglicht es, immer komplexere Problemstellungen in wesentlich schnellerer Zeit zu berechnen. Bis vor wenigen Jahren galten Vektorrechner als die schnellsten und leistungsstärksten Großrechner für numerische Probleme. Mittlerweile assoziiert man mit dem Begriff des Hochleistungsrechners hauptsächlich den des Parallelrechners. Sowohl dessen Skalierbarkeit als auch die Standardisierung paralleler Programmiersprachen und Bibliotheken haben den Parallelrechner weltweit etabliert.

6.1 Gebietszerlegung als Parallelisierungsstrategie

Ein naheliegender Ansatz zur Parallelisierung numerischer Algorithmen ist, das gesamte Rechengebiet Ω beziehungsweise dessen diskretes Gegenstück Ω_h in einzelne Teilgebiete $\Omega_h^1, \dots, \Omega_h^P$ zu zerlegen. Dabei gibt P die Anzahl der Teilgebiete an. Derartige *Gebietszerlegungsmethoden* sind über 120 Jahre alt und werden oftmals, nach ihrem Entwickler H. A. Schwarz [56], auch als Schwarz'sche Methoden bezeichnet. Die Strategie zur Zerteilung des Lösungsgebietes Ω_h in einzelne Teilgebiete $\Omega_h^1, \dots, \Omega_h^P$ hängt stark von der Problemstellung und dem verwendeten Gitter ab. Für das in dieser Arbeit zur Diskretisierung eingesetzte Kartesische Gitter wird eine Gebietszerlegung in angrenzende Blöcke verwendet. Alle diese Blöcke werden um künstliche Überlappungszellen, sogenannte „Randbordüren“ [29], an den Rändern erweitert, damit die Diskretisierungssterne während der Berechnungen nicht auf undefinierte Werte zugreifen. Die Werte in den Randbordüren [29] sind gleich den Werten der entsprechenden inneren Gitterzellen des angrenzenden Gebietes.

Um immer die aktuellen Werte in den Überlappungspunkten zu verwenden, erfolgt, wenn notwendig, ein Datenaustausch (Kommunikation) zwischen den einzelnen Prozessoren (siehe Abbildung 6.1). Dabei ist darauf zu achten, daß der Kommunikationsaufwand geringer ist als der Berechnungsaufwand. Demzufolge sollten die Überlappungsgebiete möglichst klein gehalten werden. Entscheidend für die Effizienz der Parallelisierung ist auch eine bestmögliche Lastbalancierung, bei der alle Blöcke annähernd die gleiche Anzahl an Unbekannten zu lösen haben.

Jedes Teilgebiet läßt sich dann durch einen eigenen Prozeß realisieren und kann

somit je einem Prozessor zur Berechnung der Unbekannten zugeordnet werden. Damit reduziert sich der erforderliche Speicher- und Rechenaufwand pro Prozessor in Abhängigkeit der Anzahl an Teilgebieten.

Im Idealfall sollte sich bei gleichbleibender Anzahl an Gitterpunkten (also Unbekannten) die gesamte Rechenzeit bei dem Einsatz von P Prozessoren für P Teilgebiete entsprechend um das P -fache verkürzen. Aufgrund technischer Grenzen der Rechenausrüstung¹ ist dies aber nicht zu erwarten.

6.2 Parallelisierung des Strömungsprogramms und Leistungsmessung

Die Parallelisierung des im Rahmen dieser Arbeit erstellten Simulationsprogramms für Zweiphasenströmungen erfolgte mit der Kommunikationsbibliothek *MPI* (*message passing interface*) [31].

Weil MPI von Anfang an standardisiert wurde, hat es seit seiner Einführung eine weite Verbreitung und Akzeptanz gefunden. Mittlerweile existieren für fast alle Parallelrechner und Rechnercluster MPI-Portierungen. Ebenso ist mit MPICH des Argonne National Laboratory [50] eine Public-Domain-Version erhältlich. Charakteristisch für MPI ist, daß es heterogenes paralleles Rechnen unterstützt. Dies bedeutet, daß verschiedenste Rechner zu einem großen virtuellen Parallelrechner verbunden werden können.

Mit dem Ziel eines möglichst geringen Kommunikationsaufwandes wird für die Umsetzung der Gebietszerlegungsmethode zunächst das gesamte diskrete Rechengebiet Ω_h über die Minimierung der Kostenfunktion K

$$K(P^x, P^y, P^z) = \frac{I}{P^x} \cdot \frac{J}{P^y} + \frac{J}{P^y} \cdot \frac{K}{P^z} + \frac{I}{P^x} \cdot \frac{K}{P^z}$$

$$\text{Nebenbedingung: } P = P^x \cdot P^y \cdot P^z \text{ mit } P^x, P^y, P^z \in \mathbb{N}$$

in P Teilgebiete unterteilt, wobei I, J und K die vorgegebenen Anzahlen der Gitterzellen in x -, y - und z -Richtung sind und P^x, P^y und P^z die Anzahl der Zerlegungen in x -, y - beziehungsweise z -Richtung beschreiben. Falls P^x, P^y und P^z , wie bei allen Testrechnungen dieser Arbeit, Teiler von I, J beziehungsweise K sind, entsteht hierdurch eine uniforme Gebietszerlegung in Quader.

Desweiteren werden unterschiedliche Anzahlen an Randbordüren benötigt, weil die Diskretisierungssterne der einzelnen Differentialoperatoren verschieden groß sind. Schematisch zeigt Abbildung 6.1 den Kommunikationsschritt bezüglich einer Randbordüre für die Geschwindigkeiten an den Zellseitenflächen und die skalaren Werte (Druck, Level-Set-Funktion) in den Zellmittelpunkten. Analog dazu wird der Kommunikationsprozeß auf zwei oder drei Randbordüren erweitert. In dieser Arbeit sind für die unterschiedlichen Variablen folgende Anzahlen an künstlichen Randpunktschichten eingesetzt worden:

¹Kommunikationsschritte kosten Zeit.

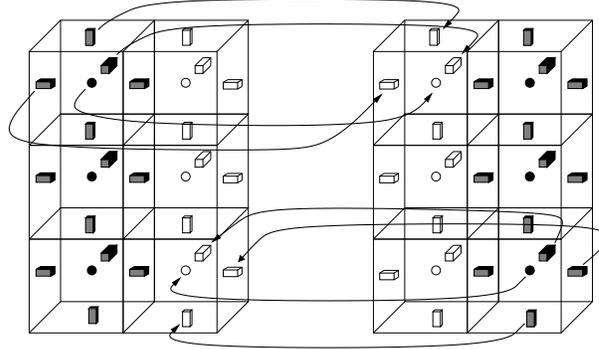


Abbildung 6.1: Datenaustausch am Beispiel einer „künstlichen Randpunktreihe“

- die Geschwindigkeiten und die Level-Set-Funktion benötigen jeweils drei Randzellenschichten für das WENO-Verfahren fünfter Ordnung,
- der Druck benötigt für den Poisson-Löser nur eine Randzellenschicht,
- das *Flag*-Feld zur Beschreibung des Gebietsrandes, gegebenenfalls inklusive Hindernissen, benötigt drei Randzellenschichten.

Bei Programmstart werden einmalig alle Prozessoren über das *Flag*-Feld informiert. Während des Programmablaufs werden ausschließlich die aktuell geforderten Randzellenwerte versendet. So findet unter anderem vor der Berechnung der nicht divergenzfreien Geschwindigkeiten \vec{u}^* eine Kommunikation für $\vec{u} = (u, v, w)$ statt. Das Lösen der Poissongleichung benötigt vor jedem Iterationsschritt eine Kommunikation für den Druck. Schließlich werden für die Berechnung der Transportgleichung und der Level-Set-Reinitialisierung zusätzliche Kommunikationen für die Level-Set-Funktion notwendig. Der um die Kommunikationsroutinen erweiterte Algorithmus ist im nächsten Kapitel zu sehen.

Während der Kommunikationsschritte ist insbesondere darauf zu achten, daß die Geschwindigkeits-, Level-Set- und *Flag*-Feld Werte in den Ecken- und Kantenbordüren eines jeden Teilblocks auch korrekt ausgetauscht werden. Ist dies nicht der Fall, so ergeben sich falsche Werte bei der Berechnung der zweidimensionalen Lagrange-Interpolation aus Kapitel 5.3, und auch die Berechnung der Krümmung führt dann zu falschen Ergebnissen.

Aus diesem Grund ist in dem für diese Arbeit entwickelten Simulationsprogramm eine zusätzliche Kommunikationsroutine programmiert worden, die ausschließlich Werte aus den Ecken und Kanten der jeweiligen Teilblöcke in die Ecken- und Kantenbordüren aller angrenzenden Blöcke überträgt, also auch in die Teilblöcke, welche in Diagonalbeziehungsweise in Raumdiagonalrichtung angrenzen.

Leistungsmessung des parallelisierten Programms

Die durch das parallelisierte Programm im Vergleich zu dem sequentiellen Programm

erreichten Geschwindigkeitssteigerungen lassen sich über den Speedup-Wert und die kommunikationsbedingten Leistungsverluste durch die parallele Effizienz messen. Diese Größen sind definiert als

$$\begin{aligned} \text{Speedup :} \quad S(p) &:= \frac{T(1)}{T(p)} \\ \text{parallele Effizienz :} \quad E(p) &:= \frac{T(1)}{p \cdot T(p)} = \frac{S(p)}{p}, \end{aligned}$$

wobei p die Anzahl der eingesetzten Prozessoren bezeichnet und $T(p)$ die benötigte Rechenzeit bei paralleler Berechnung auf p Prozessoren ist.

In dieser Arbeit ist die Leistungsmessung am Beispiel eines Wasserwürfels, der unter dem Einfluß der Oberflächenspannung zu oszillieren beginnt, durchgeführt worden. Hierzu wurde das würfelförmige Grundgebiet Ω durch ein diskretes Gitter Ω_h , das aus $60 \times 60 \times 60$ äquidistanten Gitterzellen besteht, ersetzt. Die exakte Versuchsbeschreibung und dessen Simulationsergebnisse sind in Kapitel 7.3 zu finden.

Der Vorteil dieses diskreten Gitters ist, daß es sich jeweils in 2^n (für $n = 1, 2, \dots, 6$) gleiche Teilblöcke aufteilen läßt und somit eine optimale Lastbalancierung liefert. Die Zeitmesspunkte sind direkt vor und nach der Zeitschleife gesetzt worden. Für die Leistungsmessung wurde das Beispiel aus Kapitel 7.3 bis zur Zeit $t = 0.06s$ berechnet, wozu genau einundsechzig Zeitschritte notwendig waren.

Alle Rechnungen wurden auf dem Parallelrechner *Parnass2* der Abteilung Wissenschaftliches Rechnen der Universität Bonn durchgeführt. Dieser besteht aus 144 Pentium-Prozessoren, die über eine Myrinet-Verbindung mit 1.28 GBit pro Sekunde Daten untereinander versenden können.

Parallele Laufzeiten $T(p)$, Speedup $S(p)$ und parallele Effizienz $E(p)$			
Prozessoren p	$T(p)$ in sec.	$S(p)$	$E(p)$ in %
1	9014.49	1.00	100.0
2	4654.82	1.93	96.8
4	2382.53	3.78	94.5
8	1231.48	7.32	91.5
16	672.7	13.40	83.7
32	355.41	25.36	79.2
64	188.87	47.72	74.5

Tabelle 6.1: Leistungsmessung des parallelisierten Programms

Die erzielten Rechengeschwindigkeiten sind in Tabelle 6.1 aufgeführt. Wegen des Zeitbedarfs für die Kommunikation können hier natürlich nicht die optimalen Werte $S(p) = p$ und $E(p) = 100\%$ erreicht werden. Aber eine parallele Effizienz von 74.5% für 64 Prozessoren ist ein guter Wert unter Beachtung der Tatsache, daß in diesem Fall jeder Teiblock nur noch eine Größe von $15 \times 15 \times 15$ Gitterzellen besitzt. Wenn anstelle des relativ groben Gitters immer feinere Diskretisierungsgitter eingesetzt werden, so

verbessert sich die Effizienz, weil der Rechenaufwand gegenüber dem Kommunikationsaufwand immer mehr anwächst.

Der um die Kommunikationsroutinen erweiterte Algorithmus aus Kapitel 5.9 kann schließlich folgendermaßen dargestellt werden:

Parallelisierter Algorithmus für Zweiphasenströmungen
<p>Setze $t:=0$, $n:=0$ Initialisiere $\vec{u}, p, \phi, flag$ Falls $(\phi \in \{-1, 1\})$ Setze $\tau_{end}:=$Größte Kantenlänge des Gebietes Setze die Randbedingungen für die Level-Set-Funktion Solange $\tau < \tau_{end}$ Reinitialisiere nach (5.8) und tausche dabei vor jedem Euler-Teilzeitschritt die Level-Set-Werte der Randbordüren aus Setze die Randbedingungen für u^n Solange $t \leq t_{end}$ Bestimme den neuen Zeitschritt δt in jedem Teilgebiet nach (5.6) und ermittle über eine Kommunikation das Minimum Berechne \vec{u}^* aus \vec{u}^n und ϕ^n nach (5.1) Setze die Randbedingungen für \vec{u}^* Berechne $RHS := \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\delta t}$ Berechne ϕ^* aus ϕ^n und \vec{u}^n nach (5.7) Solange $\tau < 2\epsilon$ Berechne ϕ^{n+1} durch Reinitialisierung von ϕ^* nach (5.8) und tausche dabei vor jedem Euler-Teilzeitschritt die Level-Set-Werte der Randbordüren aus Solange $it < it_{max}$ oder $\ \mathbf{r}^{it}\ < \tilde{\epsilon}$ Löse iterativ $\nabla \cdot \frac{1}{\rho(\phi^{n+1})} \nabla p^{n+1} = RHS$ nach (5.5) und tausche vor jedem Iterationsschritt die Druckwerte der Randbordüren aus Bestimme \vec{u}^{n+1} über die Druckkorrektur Tausche die Geschwindigkeitswerte der Randbordüren aus Setze die Randbedingungen für u^{n+1} $t := t + \delta t$, $n := n + 1$</p>

Kapitel 7

Konvergenzanalysen und Simulationsergebnisse

Entscheidend für eine gute Approximation der Oberflächenspannung ist die Konvergenzordnung der Krümmung. Deshalb wird die Konvergenzordnung der Krümmung einer diagonal transportierten Einheitssphäre analysiert.

Danach wird am Beispiel einer aufsteigenden Fluid-Blase die Konvergenzordnung des gesamten numerischen Verfahrens für Zweiphasenströmungen inklusive Oberflächenspannung untersucht.

Schließlich demonstrieren zahlreiche Simulationen aus den Bereichen der Natur und der Technik die breiten Einsatzmöglichkeiten dieses für diese Arbeit erzeugten Simulationsprogramms. Für die Visualisierung der Daten wurde das Programm *VTK (The Visualisation Toolkit)* [60] verwendet.

7.1 Konvergenzanalyse der Krümmung am Beispiel einer diagonal transportierten Einheitssphäre

Im Folgenden wird ein Konvergenztest für die Krümmung einer diagonal durch das Rechengebiet transportierten Einheitssphäre beschrieben und gleichzeitig der Massenverlust untersucht, der aufgrund des Transportes der Level-Set-Funktion entsteht. Für die Abschätzung der Güte der numerischen Krümmungsapproximation wurde die mittlere Krümmung der Einheitssphäre berechnet, bei der der analytische Wert bekanntlich $\kappa = 2$ beträgt. Auf dem Rechengebiet $\Omega = [0, 4]^3$ wurde eine endliche Folge von äquidistanten Gittern durch wiederholtes Halbieren der Gittermaschenweite gebildet. Die numerische Konvergenzordnung p wurde nach der Formel

$$p = \frac{\log \left(\frac{\|\kappa_{2h} - \kappa\|}{\|\kappa_h - \kappa\|} \right)}{\log 2}, \quad (7.1)$$

berechnet, wobei κ ist die exakte Krümmung und κ_h bzw. κ_{2h} die diskrete Krümmung auf dem Gitter mit der Gittermaschenweite h bzw. $2h$ bezeichnet.

Es wurden periodische Randbedingungen für Ω gesetzt. Die Geschwindigkeiten und die Level-Set-Funktion sind initialisiert worden mit

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= 1.0 \\ v(x, y, z) &= 1.0 \\ w(x, y, z) &= 0.0 \\ \phi(x, y, z) &= 1.0 - \sqrt{(x - 2.0)^2 + (y - 2.0)^2 + (z - 2.0)^2}. \end{aligned}$$

Die Strömungsgeschwindigkeiten verändern sich nicht mit der Zeit. Die Größe des Glättungsparameters für die freie Oberfläche ist $\epsilon = \alpha h$ mit $\alpha = 1.5$. Gerechnet wurde bis zum Zeitpunkt $t=4$. Dabei wurde die Einheitskugel genau eine Periode weit diagonal durch das Gebiet Ω transportiert. Die Zeitschrittweite betrug jeweils $\delta t = (\delta x)^2$.

Für alle n Zellen, in denen die Krümmung berechnet wurde, ist zusätzlich die Differenz

$$\begin{aligned} \Delta\kappa_h &:= \kappa_h(\phi_h) - \kappa(\phi) \quad \text{und} \\ \Delta\kappa_h^\delta &:= (\kappa_h(\phi_h) - \kappa(\phi))\delta^\epsilon(\phi_h) \end{aligned}$$

bestimmt worden, um schließlich damit die Normenauswertungen $\|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^1}$, $\|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^2}$ und $\|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^\infty}$ zu bilden.

Für die L^1 - und L^2 -Norm wird das Oberflächenelement, auf welches sich die Krümmung bezieht, durch h^2 approximiert. Falls, wie in [1], die L^1 - und L^2 -Norm der Krümmung über das Volumenelement h^3 berechnet wird, so verbessert sich das Konvergenzverhalten auf künstliche Weise, dies wurde in dieser Arbeit vermieden.

Die Normen sowohl inklusive als auch exklusive des Deltafunktional δ_ϵ wurden somit auf folgende Weise berechnet:

$$\begin{aligned} \|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^1} &:= \sum_{|\phi_h| < \epsilon} |\Delta\kappa_h^{(\delta)}| h^2 \\ \|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^2} &:= \sqrt{\sum_{|\phi_h| < \epsilon} (\Delta\kappa_h^{(\delta)})^2 h^2}. \\ \|\Delta\kappa_h^{(\delta)}\|_{L^\infty} &:= \max_{|\phi_h| < \epsilon} |\Delta\kappa_h^{(\delta)}|. \end{aligned}$$

Um den Einfluß der konvektiven Terme auf die Krümmung zu zeigen, ist zum einen das SMART-Verfahren zweiter Ordnung und zum anderen das WENO-Schema fünfter Ordnung für die konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichungen und der Transportgleichung eingesetzt worden. Zusätzlich wurden die physikalischen Größen beim SMART-Verfahren an Stellen, wo sie nicht definiert sind, durch lineare Interpolation und beim WENO-Schema fünfter Ordnung durch Lagrange-Polynominterpolation dritter Ordnung berechnet.

Die Transportgleichung ist in beiden Fällen in der Zeit mit einem Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung diskretisiert worden. Die Ergebnisse werden in Tabelle 7.1 aufgeführt.

Krümmungsfehler unter Verwendung des SMART-Verfahrens zweiter Ordnung				
L_1 -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
Auflösung	$\Delta\kappa$ ohne δ_ϵ	Ordnung	$\Delta\kappa$ mit δ_ϵ	Ordnung
8^3	13.90E-0	—	5.50E-0	—
16^3	17.06E-0	-0.3	22.71E-0	—
32^3	12.21E-0	0.5	32.04E-0	—
64^3	7.62E-0	0.6	40.74E-0	—
L_2 -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
8^3	2.62E-0	—	1.36E-0	—
16^3	3.42E-0	-0.4	5.38E-0	—
32^3	2.59E-0	0.4	8.35E-0	—
64^3	2.02E-0	0.4	13.2E-0	—
L_∞ -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
8^3	0.94E-0	—	0.72E-0	—
16^3	1.85E-0	-1.0	3.56E-0	—
32^3	1.69E-0	0.1	7.13E-0	—
64^3	1.86E-0	-0.1	17.9E-0	—

Krümmungsfehler unter Verwendung des WENO-Verfahrens fünfter Ordnung				
L_1 -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
Auflösung	$\Delta\kappa$ ohne δ_ϵ	Ordnung	$\Delta\kappa$ mit δ_ϵ	Ordnung
8^3	1.35E+1	—	3.75E+0	—
16^3	1.30E+0	3.4	1.81E+0	1.0
32^3	2.09E-1	2.6	4.99E-1	1.9
64^3	2.12E-2	3.3	1.12E-1	2.2
L_2 -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
8^3	2.86E-0	—	8.33E-1	—
16^3	2.76E-1	3.4	4.40E-1	0.8
32^3	4.71E-2	2.6	1.24E-1	1.8
64^3	4.65E-3	3.3	2.96E-2	2.1
L_∞ -Fehler der Krümmung ohne und mit Einfluß des δ -Funktionals				
8^3	1.26E-0	—	4.66E-1	—
16^3	1.89E-1	2.7	2.73E-1	0.8
32^3	3.15E-2	2.6	8.11E-2	1.8
64^3	3.13E-3	3.3	2.49E-2	1.7

Tabelle 7.1: Fehler der Krümmungsberechnung unter Verwendung des SMART-Verfahrens zweiter Ordnung und des WENO-Verfahrens fünfter Ordnung

Das SMART-Verfahren führt dazu, daß der Krümmungsfehler in den Normen exklusive des Deltafunktionals in der L^1 -Norm von der Ordnung 0.6 und in der L^2 -Norm von der Ordnung 0.4 gegen Null konvergiert (in der Supremumsnorm konvergiert es nicht!). Wenn die Normen inklusive des Deltafunktionals betrachtet wird, so divergiert die Krümmung. Die Bestimmung einer Konvergenzordnung erübrigt sich hierbei.

Durch das WENO-Schema fünfter Ordnung wird eine wesentlich bessere Konvergenz für die Krümmung erreicht. In allen Normen, exklusive oder inklusive Deltafunktional, konvergiert die Krümmung, wobei der Einfluß des Deltafunktionals die Konvergenz um ungefähr eine Ordnung verschlechtert.

Entscheidend ist hier der Vorteil, daß die Krümmung unter Beachtung des Deltafunktionals konvergiert, denn in allen folgenden Simulationen werden die Oberflächenspannungskräfte über das Deltafunktional aktiviert und gerade für diese Fälle ist es wichtig, das die Krümmung konvergiert, um damit eine Konvergenz für das gesamte numerische Verfahren zu ermöglichen (siehe nächstes Kapitel).

Anzahl der Gitterzellen für die Krümmungsberechnung. Massenerhaltung in Prozent der Anfangsmasse.				
	SMART-Verfahren		WENO-Verfahren	
Auflösung	Gitterzellen	Masse	Gitterzellen	Masse
8^3	172	56.72%	202	92.11%
16^3	610	99.89%	616	99.82%
32^3	2468	100.17%	2456	99.96%
64^3	9644	100.02%	9688	100.00%

Tabelle 7.2: Anzahl der Gitterzellen in denen die Krümmung berechnet wurde. Massenerhaltung in Prozent der Anfangsmasse.

Tabelle 7.2 zeigt, daß in diesem Beispiel der diagonal transportierten Einheitssphäre die Wirkung der Transportgleichung auf die Erhaltung der Masse für beide Schemata ab einer Gebietsauflösung von $16 \times 16 \times 16$ Gitterzellen gering ist. Weiterhin geht aus dieser Tabelle hervor, daß sich bei jeder Gitterverfeinerung die Anzahl n der Gitterzellen, in denen die Krümmung berechnet wird, in etwa vervierfacht. Dies entspricht einem quadratischen Zuwachs der Gitterpunkte zur Darstellung der freien Oberfläche bei einer Verdopplung der Gitterzellen in jeder Raumrichtung.

7.2 Konvergenzanalyse des gesamten Verfahrens am Beispiel einer aufsteigenden Blase

Analytische Lösungen von Zweiphasenströmungen inklusive Oberflächenspannung konnten trotz intensiver Recherchen nicht gefunden werden. Die Konvergenzordnung des gesamten numerischen Verfahrens kann aber auch ohne Kenntnis der exakten Lösung auf approximative Weise bestimmt werden, und zwar durch

$$p = \frac{\log \left(\frac{\|\psi_{2h} - \psi_{4h}\|}{\|\psi_h - \psi_{2h}\|} \right)}{\log 2}, \quad (7.2)$$

wobei ψ_h, ψ_{2h} und ψ_{4h} diskrete Lösungen auf den Gittern mit der Maschenweite $h, 2h$ und $4h$ sind, und ψ für die Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes oder die Level-Set-Funktion steht. Damit läßt sich die Ordnung des Fehlers ausschließlich über die Differenz zweier Lösungen, die auf Gittern mit aufeinanderfolgenden Verfeinerungsniveaus berechnet worden sind, bestimmen. Um die Differenz zweier Lösungen bilden zu können, müssen die Werte des gröbereren Gitters auf das feinere Gitter interpoliert werden. In dieser Arbeit wurden die Werte über eine konstante Gitterinterpolation berechnet.

Die Konvergenzordnung (7.2) des gesamten numerischen Verfahrens ist jeweils in der L^1 -, L^2 - und der L^∞ -Norm am Beispiel einer aufsteigenden Fluidblase bestimmt worden. Hierzu ist ein würfelförmiges Rechenggebiet Ω mit 0.15m Kantenlänge durch folgende drei unterschiedlich feine Gitter

$$N = 36 \times 36 \times 36, \quad N = 72 \times 72 \times 72 \quad \text{und} \quad N = 144 \times 144 \times 144 \quad (7.3)$$

aufgelöst worden. Die Level-Set-Funktion wurde so initialisiert, daß ihre Nullniveaumenge eine im Punkt (0.075; 0.05; 0.075) zentrierte Fluidblase mit dem Radius $r=0.025\text{m}$ beschreibt. Alle weiteren verwendeten physikalischen und numerischen Parameter sind in Tabelle 7.3 aufgeführt.

Größe des Gebietes:	0.15m×0.15m×0.15m	
Auflösung:	siehe (7.3)	
Radius der Blase:	0.025m	
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.005 \text{ N/m}$	
Phase der Blase:	$\mu_g=0.00025 \text{ kg/ms,}$	$\rho_g=1.0 \text{ kg/m}^3$
Umgebende Phase:	$\mu_l=0.0005 \text{ kg/ms,}$	$\rho_l=10.0 \text{ kg/m}^3$
Volumenkräfte:	$(g_1, g_2, g_3)=(0,-9.81,0)\text{m/s}^2$	
Breite der Oberfläche:	$\epsilon = 1.6h$	
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.1	
Gebiets-Randbedingungen:	Rutschbedingung an allen Seitenflächen	

Tabelle 7.3: Verwendete Parameter für die Fluidblasen-Simulation

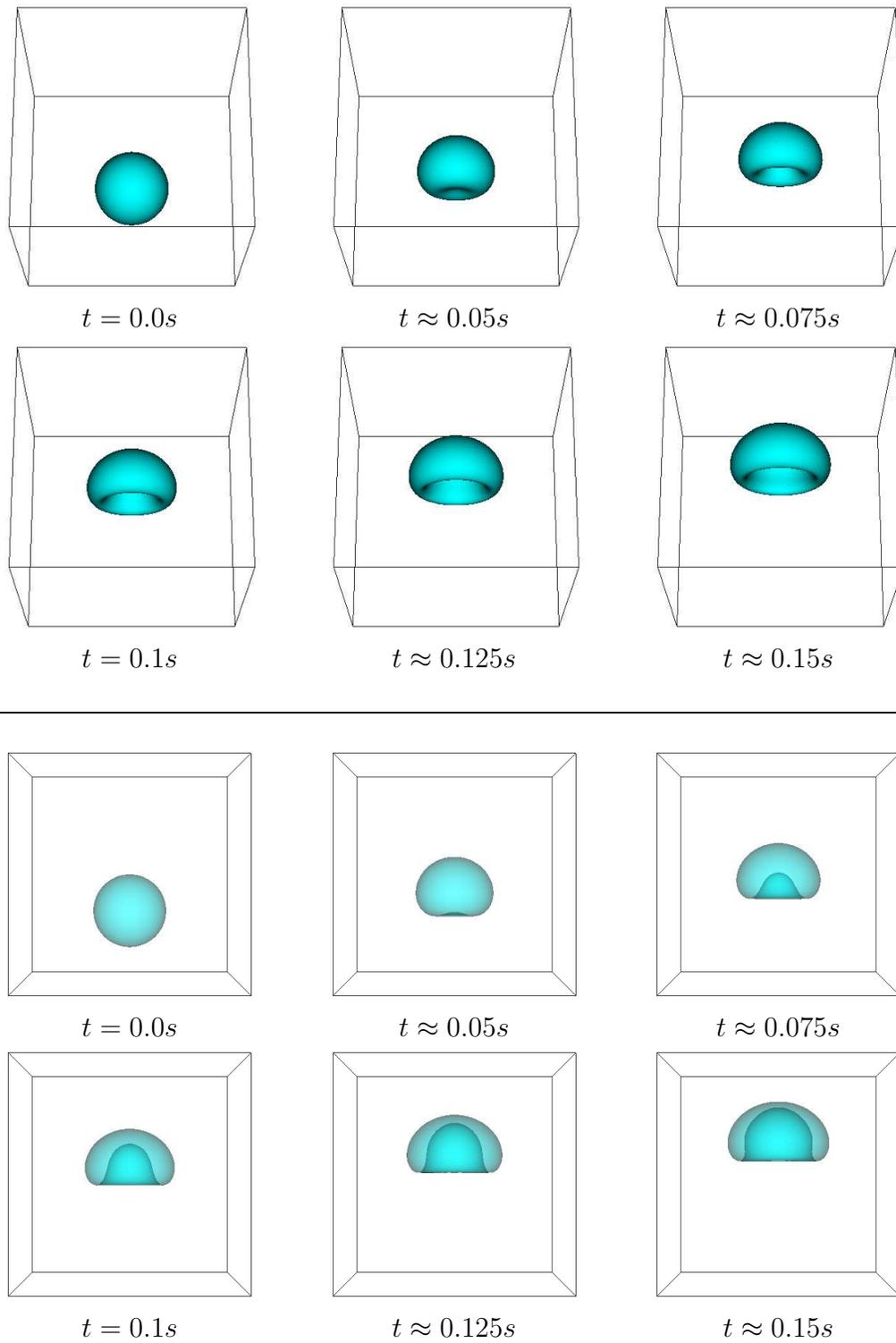


Abbildung 7.1: Aufsteigende Blase ($N = 144^3$); obere Reihen: Blick von schräg unten; untere Reihen: Blick von vorne mit leicht durchsichtiger freier Oberfläche

Das Ergebnis dieser Simulationsberechnung ist für das feinste Gitter $N = 144^3$ als zeitliche Abfolge in Abbildung 7.1 zu sehen. Die oberen beiden Reihen zeigen die aufsteigende Blase aus einem schräg unterhalb der Blase fixierten Blickwinkel. Die beiden unteren Reihen geben eine frontale Ansicht auf denselben Verlauf, wobei dort die freie Oberfläche leicht durchsichtig visualisiert wurde.

Diese Bilder zeigen, wie die Fluidblase unter Einfluß der Oberflächenspannung und aufgrund ihrer geringeren Dichte schnell aufsteigt. Durch die Aufwärtsbewegung entsteht ein Unterdruckgebiet direkt unterhalb der Blase. Folglich strömt das umgebende Fluid in Richtung der Symmetrielinie, was dazu führt, daß der Südpol der Blase schneller aufsteigt als der Nordpol. Wegen der Inkompressibilität und der geringeren Viskosität verformt sich die Fluidblase zu einer Schale. Im zeitlichen Verlauf verbreitert sich der Schalendurchmesser und gleichzeitig wird die Schalenschicht immer dünner. Da die Auftriebsströmung in der Nähe der Symmetrielinie am stärksten ist, würde sich schließlich die Fluidblase am Nordpol selbst durchdringen und ihre Topologie zu einem Torus ändern. Eine genaue Untersuchung der Topologieveränderung wird in Kapitel 7.4 an einem komplizierteren Beispiel vorgenommen.

Mit den Ergebnissen der Simulationsberechnung aus Abbildung 7.1, welche ausschließlich auf dem feinsten Gitter berechnet wurden, konnte der physikalische Ablauf anschaulich erklärt werden. Im Folgenden werden nur die zur Zeit $t=0.075s$ auf den drei unterschiedlich feinen Gittern berechneten Lösungen näher betrachtet, denn aus diesen Lösungen werden später die Konvergenzordnungen für die Geschwindigkeiten und die Level-Set-Funktion bestimmt.

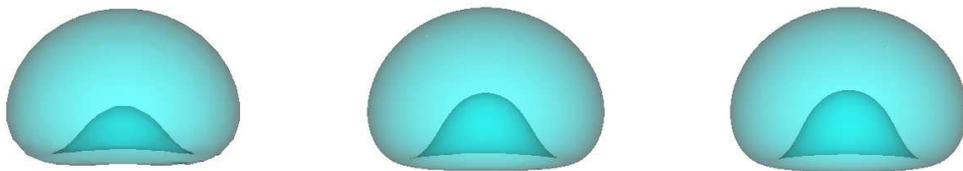


Abbildung 7.2: Blase zur Zeit $t=0.075s$ für $N = 36^3$, $N = 72^3$ und $N = 144^3$.

In Abbildung 7.2 sind die freien Oberflächen der unterschiedlich feinen Diskretisierungsgitter in vergrößerter Form dargestellt. Eine deutliche Verformung ist zu diesem Zeitpunkt an allen drei Ergebnissen zu erkennen. Die freien Oberflächen unterscheiden sich in der Einbuchtungstiefe der Schalenform und der gesamten Größe, also der Massenerhaltung.

Einen tieferen Einblick ermöglicht Abbildung 7.3, in der einige Scherenschnitte, die vertikal durch die Mitte der Fluidblasen aus Abbildung 7.2 verlaufen, zu sehen sind.

Dabei ist auf der linken Seite je Gitter ein Scherenschnitt der Level-Set-Funktion erzeugt worden, wobei nur dessen Niveaulinien für äquidistante Niveauewerte mit $\phi \leq 0$ visualisiert wurden. Da die Level-Set-Funktion eine Abstandsfunktion ist und der Scherenschnitt durch die Mitte der Fluidblase verläuft, liegen alle Niveaulinien in gleichem Abstand zueinander. Dies ist auch auf den Bildern aus der linken Spalte in Abbildung 7.3 deutlich zu erkennen.

Auf der rechten Seite von Abbildung 7.3 ist der Graph der Dichte bezüglich dieser Scherenschnitte zu sehen. Die Level-Set-Funktion, aus der die Dichte bestimmt wird, ermöglicht für alle drei Gitterauflösungen eine stabile, also oszillationsfreie, Berechnung der Dichte. Mit feiner werdendem Gitter wird der Dichtesprung zwischen den beiden Phasen immer besser aufgelöst, weil sich sowohl das Maß der Regularisierung der Dichte verkleinert als auch die Approximation mit der Level-Set-Funktion verbessert.

Mit diesen zur Zeit $t=0.075s$ betrachteten Lösungen ist im Folgenden die Konvergenzordnung p (7.2) sowohl für die Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes $\vec{u} = (u, v, w)$ als auch für die Level-Set-Werte ϕ bestimmt worden.

Tabelle 7.4 zeigt die Fehler zwischen je zwei aufeinanderfolgenden Gittern in der L^1 -, L^2 - und L^∞ -Norm und die daraus berechnete Konvergenzordnung p nach Gleichung (7.2). Es zeigt sich, daß das in dieser Arbeit entwickelte numerische Verfahren für Zweiphasenströmungen inklusive Oberflächenspannung in der L^1 -Norm und in der L^2 -Norm deutlich mit der Ordnung eins konvergiert und in der L^∞ -Norm die Konvergenzordnung zwischen 0.64 und 0.81 schwankt.

Der Grund für die Konvergenz erster Ordnung ist der, daß das approximierte Deltafunktional δ_ϵ in dieser Arbeit von erster Ordnung genau ist, da dessen Träger die Größe $O(h)$ hat. Eine Approximation höherer Ordnung des Deltafunktionals könnte das Konvergenzverhalten weiter verbessern, doch vermutlich würde darunter die Stabilität des gesamten Verfahrens leiden.

In Tabelle 7.5 sind die Werte für die aktuelle Masse

$$M(t) = \frac{\int_{\Omega} \rho^h(\phi(\vec{x}, t)) d\vec{x}}{\int_{\Omega} \rho^h(\phi(\vec{x}, 0)) d\vec{x}}$$

zum Zeitpunkt $t=0.075s$ und die mittlere Masse

$$\Delta M(t) = \frac{\frac{1}{t} \int_0^t \int_{\Omega} \rho^h(\phi(\vec{x}, t)) d\vec{x} dt}{\int_{\Omega} \rho^h(\phi(\vec{x}, 0)) d\vec{x}},$$

welche der zeitliche Durchschnitt der Masse über das Intervall $[0, t]$ ist, im Verhältnis zur Anfangsmasse dargestellt. Daraus ist eine Abhängigkeit der Massenerhaltung von der Feinheit des Diskretisierungsgitters abzulesen. Diese Beobachtung ist den Untersuchungsergebnissen bezüglich der Massenerhaltung aus Kapitel 5.8 und Kapitel 5.9 hinzuzufügen.

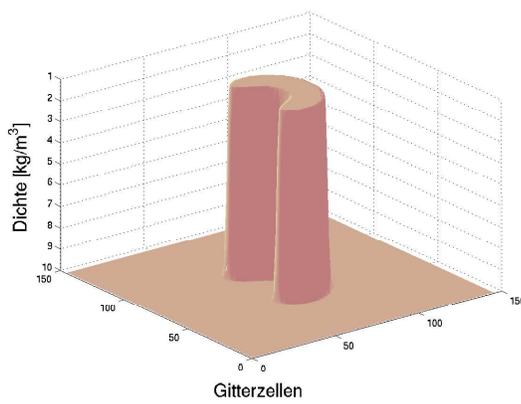
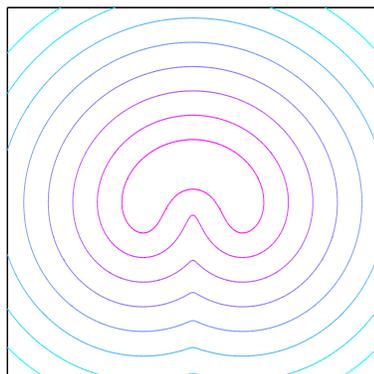
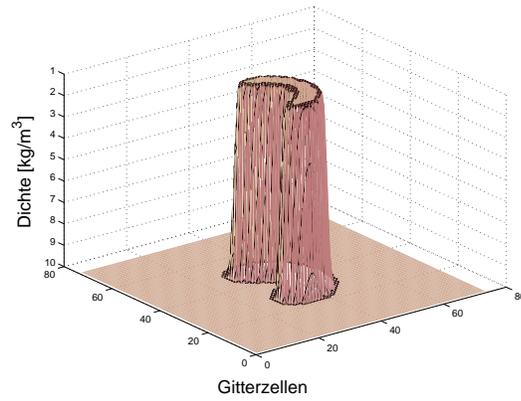
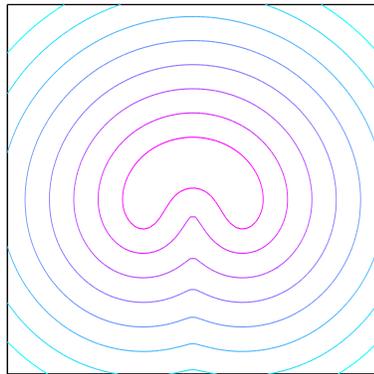
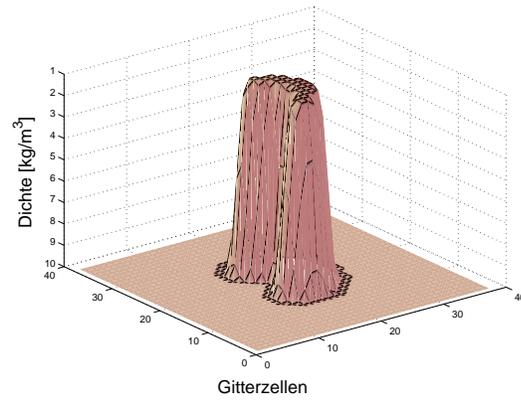
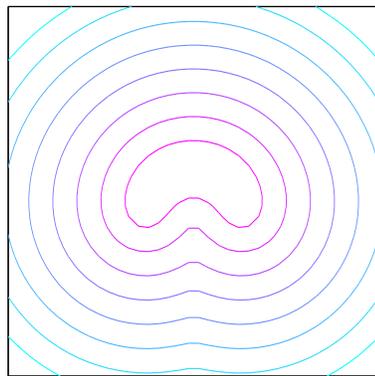


Abbildung 7.3: Zentrale Scherenschnitte der Blase zur Zeit $t=0.075s$ für $N = 36^3$ (oben), $N = 72^3$ (mitte) und $N = 144^3$ (unten). Links: Niveaulinien für $\phi \leq 0$. Rechts: Graph der Dichte

L_1 -Fehler			
	36^3 vs 72^3	72^3 vs 144^3	Ordnung
u	7.68E-6	3.76E-6	1.03
v	1.34E-5	6.36E-6	1.07
w	7.68E-6	3.76E-6	1.03
ϕ	3.16E-6	1.51E-6	1.06

L_2 -Fehler			
u	4.25E-4	2.03E-4	1.06
v	7.90E-4	3.83E-4	1.04
w	4.25E-4	2.03E-4	1.06
ϕ	6.55E-5	3.06E-5	1.09

L_∞ -Fehler			
u	1.65E-1	9.39E-2	0.81
v	2.39E-1	1.53E-1	0.64
w	1.65E-1	9.39E-2	0.81
ϕ	2.50E-3	1.50E-3	0.73

Tabelle 7.4: Konvergenzstudie zum Zeitpunkt $t = 0.075s$

Erhaltene Masse in Prozent der Anfangsmasse			
	36^3	72^3	144^3
Aktuelle Masse	96.06%	98.95%	99.81%
Mittlere Masse	98.91%	99.55%	99.88%

Tabelle 7.5: Studie zur Massenerhaltung zum Zeitpunkt $t = 0.075s$

7.3 Analyse der Oberflächenspannung am Beispiel eines Fluidwürfels

Der Einfluß der Oberflächenspannung kann an dem Verhalten eines Fluidwürfels, bei dem zu Beginn die Oberflächenspannungskräfte sehr unausgeglichen sind, beobachtet werden. Dazu wird als Anfangsbedingung ein Wasserwürfel mit 5cm Kantenlänge in einem schwerelosen Raum Ω platziert, wo er lediglich der Oberflächenspannung ausgesetzt ist. In Tabelle 7.6 sind die wichtigsten Parameter für die Simulation des Wasserwürfels mit Oberflächenspannung aufgeführt.

Da an den Kanten und Ecken des Würfels die Krümmung sehr groß ist, sollten zunächst stark variierende Oberflächenspannungskräfte induziert werden. Erwartet wird, daß die freie Oberfläche zu oszillieren beginnt bis sie ihren Gleichgewichtszustand in Form einer Kugel erreicht hat. Entscheidend dabei ist, daß sie die ursprünglichen Symmetrieeigenschaften eines Würfels während des gesamten Vorgangs aufrecht erhält.

Größe des Gebietes:	0.1m×0.1m×0.1m
Auflösung:	60×60×60 Gitterzellen
Größe des Würfels:	0.05m×0.05m×0.05m
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.07275$ N/m
Wasser-Phase:	$\mu_l = 1.002 \times 10^{-3}$ kg/ms, $\rho_l=998.2$ kg/m ³
Luft-Phase:	$\mu_g = 1.81 \times 10^{-5}$ kg/ms, $\rho_g=1.205$ kg/m ³
Breite der Oberfläche	$\epsilon = 1.6h$
Volumenkräfte	$(g_1, g_2, g_3) = (0, 0, 0)$ m/s ²
Gebiets-Randbedingungen	Rutschbedingung an allen Seitenflächen
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.1

Tabelle 7.6: Eingesetzte Parameter für die Fluidwürfel-Simulation

Wie intensiv diese Oszillationen gedämpft werden, hängt davon ab, wie schnell die von der Oberflächenspannung erzeugte Schwingungsenergie durch die innere Reibung des Fluides kompensiert wird. Im Fall des Wasserwürfels (siehe Abbildung 7.4–7.6) setzen sich die Oszillationen über einen längeren Zeitraum fort. Deshalb ist nur bis zu einem näherungsweise Gleichgewichtszustand gerechnet worden.

Im Allgemeinen kann nie ein exaktes Gleichgewicht errechnet werden, weil sowohl numerische Rundungsfehler als auch das Glätten des Phasensprungs an der freien Oberfläche dazu führen, daß die Geschwindigkeiten am freien Rand immer ungleich Null sind. Die kinetische Energie konvergiert also nicht gegen Null, sondern oszilliert im

näherungsweise Gleichgewichtszustand mit konstanter Amplitude. Minimale Bewegungen der freien Oberfläche bleiben somit immer erhalten. Dies ist aber von geringerer Bedeutung angesichts des Vorteils, daß echte Zweiphasenströmungen mit großen Viskositäts- und Dichtesprüngen stabil berechnet werden können.

Abbildung 7.4–7.6 zeigt den chronologischen Verlauf dieser Simulation vom Zeitpunkt $t = 0s$ bis zum Zeitpunkt $t = 2.79s$. Dabei ist auf der linken Seite die freie Oberfläche und auf der rechten Seite die Nullniveaumenge des zugehörigen Druckfeldes abgebildet.

Zunächst entstehen große Oberflächenspannungskräfte an den stark gekrümmten Ecken und Kanten. Diese Kräfte erzeugen dort die größte Beschleunigung, wodurch die Ecken und Kanten sofort beginnen sich abzurunden. Da die Krümmung an den Kanten ungleich der Krümmung an den Ecken ist, verläuft die Regularisierung der freien Oberfläche unterschiedlich schnell. Aus den Ecken des Würfels kommt der größte Impuls. Dieser führt schließlich dazu, daß die Würfelseitenflächen nach außen gedrückt werden. Dabei bildet die freie Oberfläche eine Sternform, in der die Krümmung wiederum stark variiert. Die Oberflächenspannungskräfte verlagern sich nun auf die Gebietsteile mit hoher Krümmung, wodurch eine erneute Glättung dieser stark gekrümmten Flächen beginnt. Diese durch das ständige Ausbalancieren der Kräfte erzeugten Oszillationen finden solange statt, bis der freie Rand näherungsweise eine Kugelform mit konstanter Krümmung angenommen hat.

Wenn in der Chorin'schen Projektionsmethode die Druckkonstante über die Nebenbedingung

$$\int_{\Omega} p \, d\vec{x} = 0 \quad (7.4)$$

fixiert wird, dann zeigt die rechte Bildreihe von Abbildung 7.4–7.6, daß die Nullniveaumenge des Druckfeldes zu jedem Zeitpunkt ähnlich zu der Form der freien Oberfläche ist. Der Grund besteht darin, daß die am freien Rand entstehenden Spannungskräfte gleichzeitig auch die größten Druckgradienten erzeugen, wie aus der freien Randbedingung (2.11) folgt. Also entsteht dort aufgrund der Bedingung (7.4) auch ein Vorzeichenwechsel, und folglich verläuft dazwischen die Nullniveaumenge des Druckfeldes.

Natürlich stellt das Visualisierungsprogramm die Nullniveaumenge des Drucks im Vergleich zu der Nullniveaumenge der Level-Set-Menge etwas weniger glatt dar, weil der Druck in der Nähe des freien Randes im Gegensatz zu der Level-Set-Funktion stark variiert.

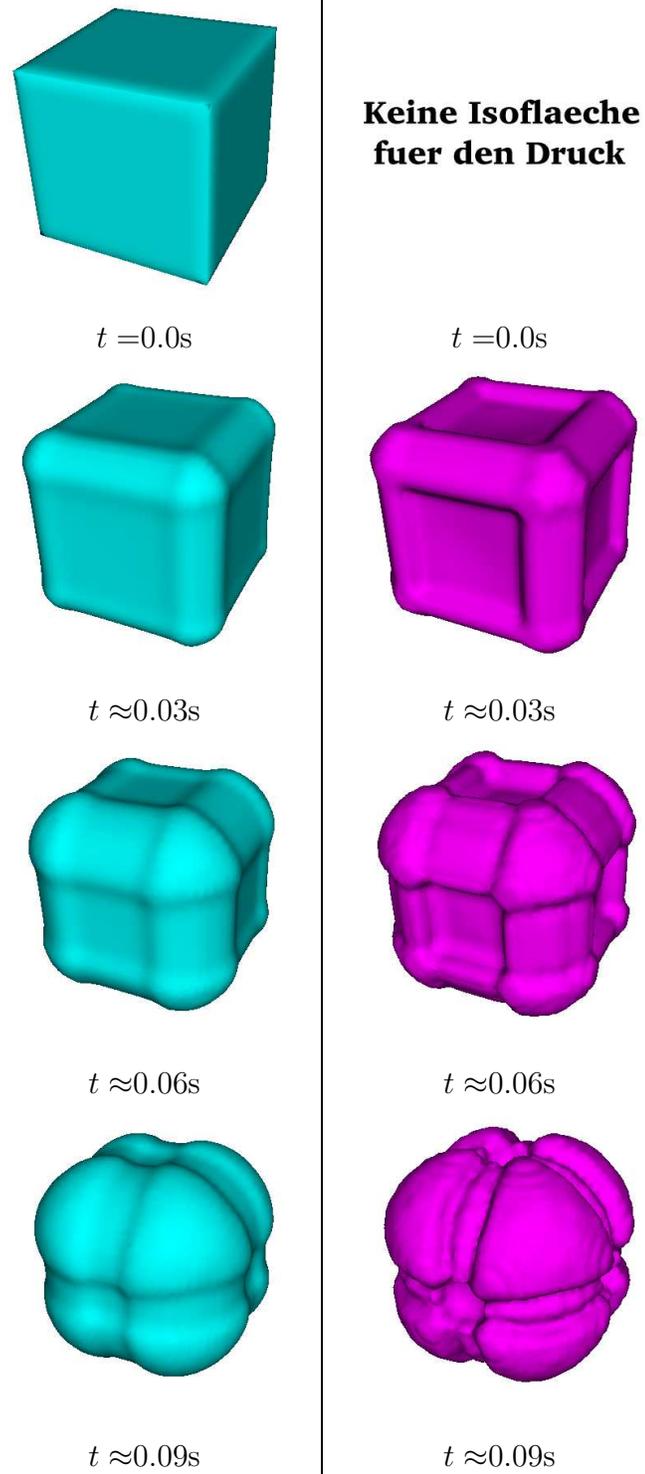


Abbildung 7.4: Wasserwürfel mit Oberflächenspannung. Links: Level-Set; Rechts: Null-niveau des Drucks

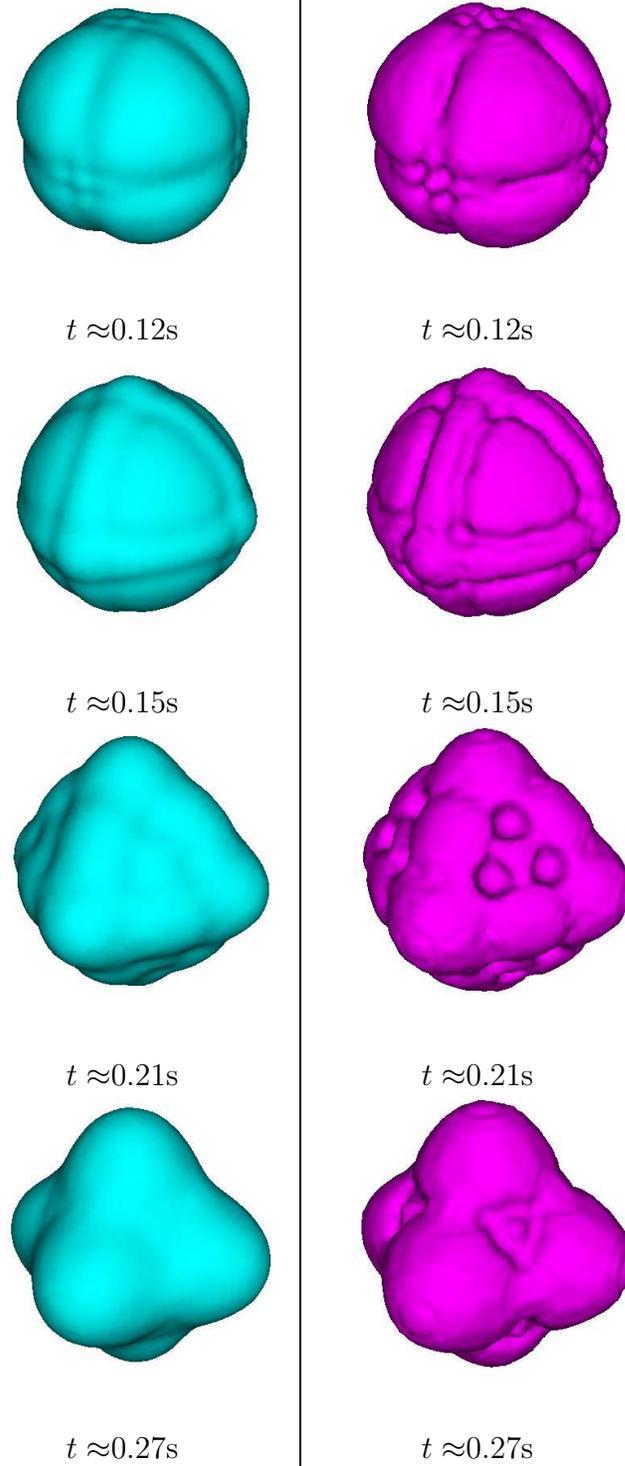


Abbildung 7.5: Wasserwürfel mit Oberflächenspannung, zeitliche Fortsetzung

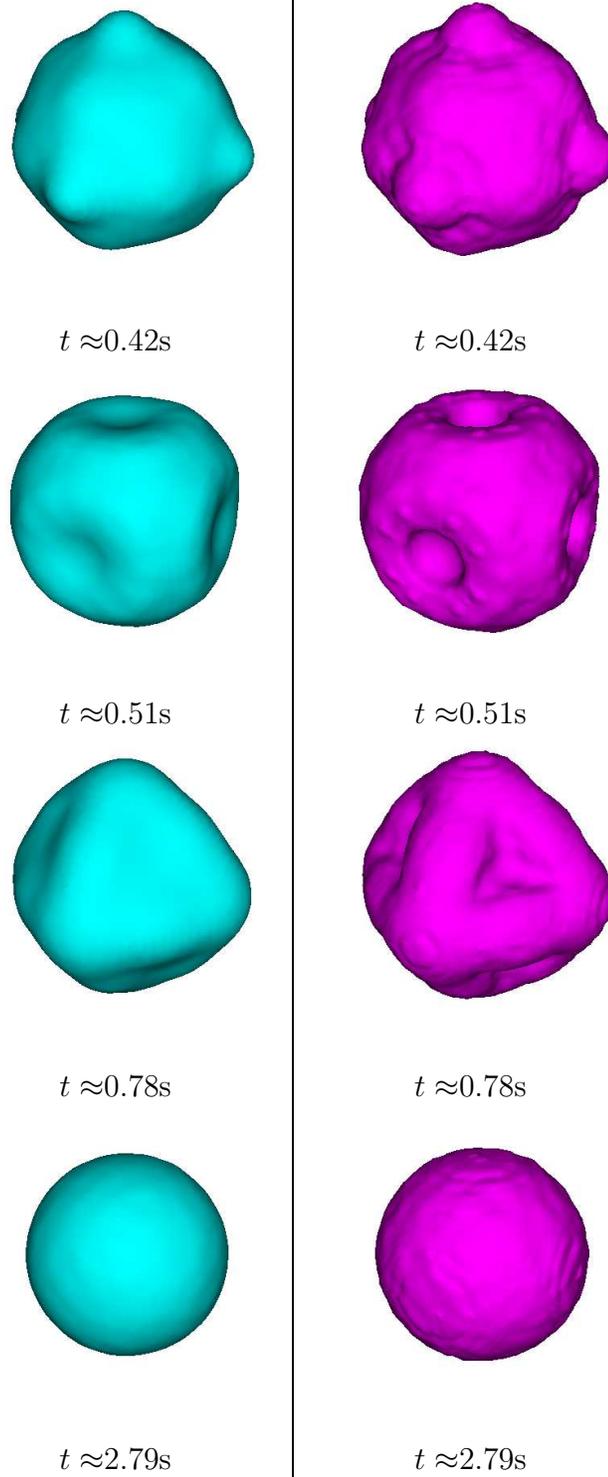


Abbildung 7.6: Wasserwürfel mit Oberflächenspannung, zeitliche Fortsetzung

7.4 Gasblasendynamik: Zwei-Blasen-Wechselwirkung mit Topologieveränderung

Als nächstes numerisches Beispiel wird die Interaktion von zwei unterschiedlich großen Fluidblasen, die unter Einfluß von Gravitations- und Oberflächenspannungskräften stehen, simuliert. Dabei haben beide Blasen die gleiche Dichte und befinden sich zu Beginn im Ruhezustand. Das bedeutet, daß das Geschwindigkeitsfeld mit Null initialisiert wird. Die Anfangsformen der Blasen entsprechen denen einer Sphäre. Dabei besitzt die größere der beiden Blasen einen Radius von $r=0.15\text{m}$ und ist um den Punkt $(0.25, 0.5, 0.25)$ zentriert. Die kleinere Blase hat einen Radius von $r=0.1\text{m}$ und hat ihren Mittelpunkt in $(0.25, 0.2, 0.25)$. Alle weiteren eingesetzten Parameter sind in Tabelle 7.7 aufgeführt.

Größe des Gebietes:	$0.5\text{m} \times 1.0\text{m} \times 0.5\text{m}$		
Auflösung:	$60 \times 120 \times 60$ Gitterzellen		
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.005$ N/m		
Phase der Fluidblasen:	$\mu_g=0.00025$ kg/ms,	$\rho_g=1\text{kg/m}^3$	
Umgebende Phase:	$\mu_l=0.0005$ kg/ms,	$\rho_l=10\text{kg/m}^3$	
Volumenkräfte	$(g_1, g_2, g_3)=(0, -9.81, 0)\text{m/s}^2$		
Breite der Oberfläche:	$\epsilon=1.6h$		
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.1		
Gebiets-Randbedingungen:	Rutschbedingung an allen Seitenflächen		

Tabelle 7.7: Parameter für die Simulation der Blasen-Wechselwirkung

Eine ähnliche, zweidimensionale Simulation ist von Chang, Hou, Merriman und Osher [10] gerechnet worden. Sie haben dabei festgestellt, daß die kleinere Blase schneller aufsteigt als die größere und sich schließlich mit der größeren vereinigt.

Für den hier betrachteten dreidimensionalen Fall sind die Ergebnisse in Abbildung 7.7 und Abbildung 7.8 mit leicht durchsichtiger Oberfläche dargestellt, um die inneren Strukturen des Durchdringungsprozesses sichtbar zu machen.

Durch die Aufwärtsbewegung der beiden Blasen entstehen je zwei Unterdruckgebiete, eines direkt unterhalb der großen Blase und ein weiteres unterhalb der kleineren Blase. Folglich strömt das Fluid in Richtung der Symmetrielinie, wodurch die kleine Blase in den Sog der größeren Blase gerät und deshalb schneller aufsteigt als diese. Aufgrund der Inkompressibilität und der geringeren Viskosität verformt sich zunächst die Bodenseite beider Fluidblasen, wobei aber, wegen der Sogkraft, die kleine Blase schnell eine Kegelform bildet, welche immer mehr in die Länge gestreckt wird und schließlich in die größere Blase eindringt.

Zur Zeit $t=0.175\text{s}$ ändert sich die Topologie dahingehend, daß sich beide Blasen zu einer einzigen vereinigen. Die freie Oberfläche bildet am Kontaktpunkt eine scharfe Kante, die sehr schnell durch die Viskosität des Fluides und durch die Oberflächenspannung regularisiert wird, wie die Abbildung bezüglich der Zeit $t=0.2\text{s}$ zeigt.

An dem zeitlichen Verlauf von 0.225s bis 0.35s ist zu sehen, daß die Impulsübertragung der kleineren Blase auf die größere dazu führt, daß sich an der Oberseite der Fluidblase eine Wölbung bildet. Diese wird immer größer und erzeugt gleichzeitig an den Verengungsstellen wieder starke Krümmungen. Folglich überwiegen an diesen Stellen die Oberflächenspannungskräfte über die schließlich der obere Teil der Blase von dem unteren Teil getrennt wird. In den Abbildungen bezüglich der Zeit 0.425s und 0.475s ist dieser Trennungsprozeß dargestellt. Auch hier zeigt sich, wegen der Oberflächenspannung und der Viskosität des Fluides, eine schnelle Regularisierung der scharfen Kanten.

Diese Simulation demonstriert, daß die Änderung der ursprünglichen Topologie der zwei Fluidblasen durch eine Vereinigung der beiden Blasen und daraufhin durch eine Trennung in zwei torusförmigen Blasenstrukturen problemlos berechnet werden kann.

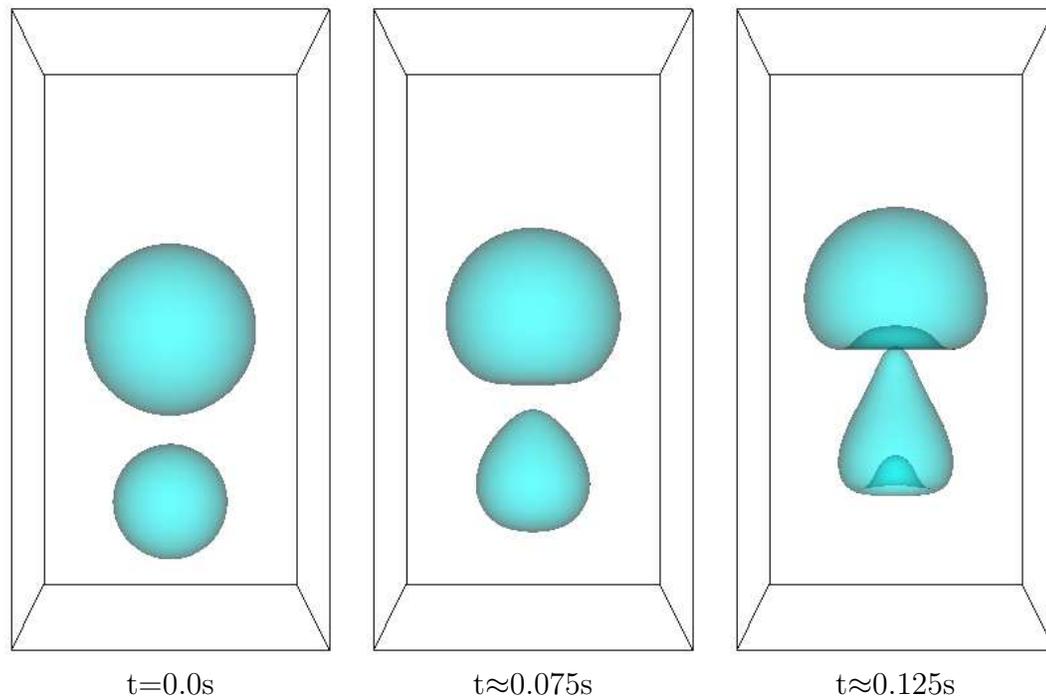


Abbildung 7.7: Zwei Blasen mit gleicher Dichte, zeitlicher Verlauf

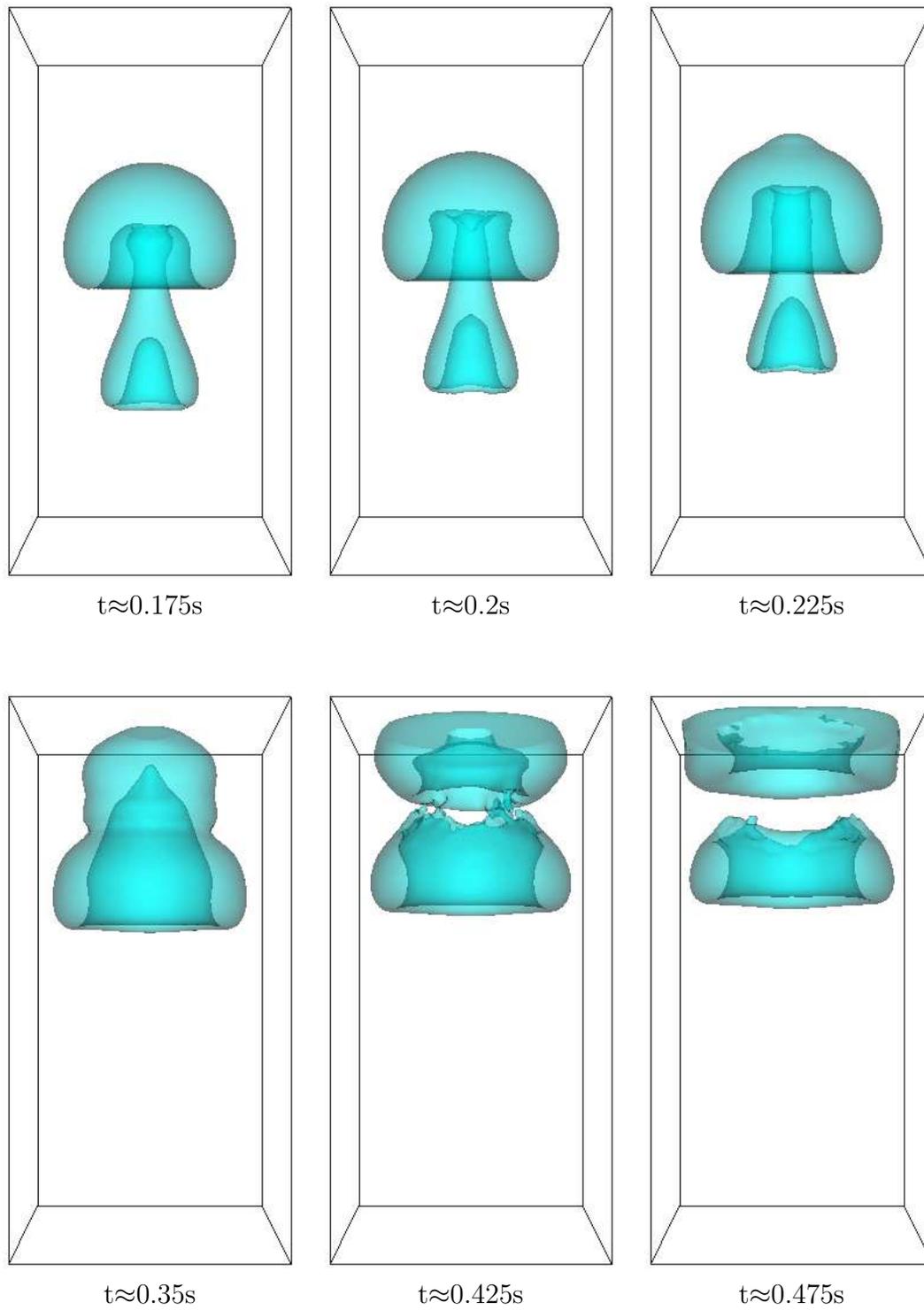


Abbildung 7.8: Zeitlicher Verlauf, Fortsetzung

7.5 Tröpfchendynamik: Simulation einer Kronencharakteristik mit Topologieveränderung

Eine besondere Herausforderung in der numerischen Strömungsdynamik ist die Simulation eines Wassertropfens, der auf einen mit einem dünnen Wasserfilm benetzten Boden fällt. Durch das komplexe Zusammenspiel von Oberflächenspannungskräften, Trägheitskräften und Inkompressibilität bildet die freie Oberfläche Kronenähnliche Formen. In Abhängigkeit vom Tropfendurchmesser, der Aufprallgeschwindigkeit, der Breite des Wasserfilms und der physikalischen Eigenschaften der Flüssigkeit entstehen kleine Kronenzacken. Diese können sich ablösen und Satellitentropfen bilden.

Physikalische Experimente bezüglich der Bildung von Wasserkronen sind von Cosali, Brunello, Coghe und Marengo [15, 16] durchgeführt worden. Sie untersuchten das Verhalten eines Wassertropfens, der senkrecht auf eine benetzte Glasplatte fällt. Dabei ist der Tröpfchengenerator auf vier unterschiedliche Höhen eingestellt worden, die sich über das Intervall [0.3m,0.9m] erstrecken. Daraus ergeben sich vier verschiedene Aufprallgeschwindigkeiten für die Tropfen. Für jede Aufprallgeschwindigkeit wurden drei unterschiedlich starke Wasserfilmschichten, die zwischen 1.1mm und 4.3mm variierten, eingestellt. Der Durchmesser der vom Tröpfchengenerator erzeugten Wassertropfen wurde konstant gehalten, er betrug $d=3.82\text{mm}$.

Einige Photographien aus diesen Experimenten sind in Abbildung 7.9 zu sehen. Die drei linken Bilder zeigen den Entstehungsverlauf einer Wasserkrone. Im rechten Bild ist eine vergrößerte Kronencharakteristik zu sehen. Es sind deutlich die Kronenzacken zu erkennen, die wegen der Oberflächenspannung abgerundet werden. Desweiteren bildet sich auch zwischen den Kronenspitzen eine Abrundung des freien Randes.

Für die Berechnung einer Simulation wurden in dieser Arbeit Experimentdaten zu einem der in [15] angegebenen Versuchsaufbauten als Anfangsdaten eingesetzt.



Abbildung 7.9: Seitenperspektive einer Wasser-Kronencharakteristik

Um ein zur Abbildung 7.9 ähnliches Verhalten zu simulieren, sind sehr feine Gitter notwendig, denn sonst lassen sich die kleinen Fluidstrukturen nicht ausreichend auflösen. Deshalb wurde ein Gitter mit $200 \times 100 \times 200$ Gitterpunkten verwendet und die Berechnung auf 32 Prozessoren des Parallelrechners *Parnass2* [30] verteilt. Der Tropfen mit dem Durchmesser $d=3.82\text{mm}$ ist ein wenig oberhalb des Wasserfilms im Punkt $(0.01, 0.05, 0.01)$ zentriert und wird mit einer Anfangsgeschwindigkeit von $v=-4.01\text{m/s}$ initialisiert. Der Wasserfilm hat eine Höhe von 1.1mm und alle anderen physikalischen Parameter entsprechen denen von Luft und Wasser bei zwanzig Grad Celsius, sie sind in Tabelle 7.8 aufgeführt.

Größe des Gebietes:	0.02m×0.01m×0.02m	
Auflösung:	200×100×200 Gitterzellen	
Durchmesser des Tropfen:	3.82mm	
Mittelpunkt des Tropfen:	0.01m×0.005m×0.01m	
Geschwindigkeit des Tr.:	4.01m/s	
Höhe des Wasserfilms:	1.1mm	
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.07275\text{ N/m}$	
Wasser-Phase:	$\mu_l = 1.002 \times 10^{-3}\text{ kg/ms}$,	$\rho_l=998.2\text{ kg/m}^3$
Luft-Phase:	$\mu_g = 1.81 \times 10^{-5}\text{ kg/ms}$,	$\rho_g =1.205\text{ kg/m}^3$
Volumenkräfte	$(g_1, g_2, g_3)=(0,-9.81,0)\text{m/s}^2$	
Breite der Oberfläche	$\epsilon = 1.6\text{h}$	
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.1	

Tabelle 7.8: Parameter für die Simulation der Kronencharakteristik

Das Ergebnis der Berechnung ist als zeitlich Abfolge in Abbildung 7.10 dargestellt. Die hohe Aufprallgeschwindigkeit erzeugt einen Überdruck innerhalb des Wasserfilms. Wegen der Inkompressibilität des Wassers und der geringeren Viskosität der Luft weicht das Wasser nach oben aus und bildet einen dünnen Wasserring um den fallenden Tropfen. Der Durchmesser und die Höhe des Wasserrings vergrößern sich kontinuierlich, wodurch die Fläche des Wasserrings im Vergleich zu dessen Volumen immer mehr anwächst. Folglich entsteht ein Ungleichgewicht bei dem die Oberflächenspannungskräfte stärkeren Einfluß auf die Oberflächenform ausüben als die Volumenkräfte. Insbesondere in der Nähe des Ringrandes ist die Krümmung sehr groß und diese induziert Oberflächenspannungskräfte, die dazu führen, daß der Wasserring kleine Kronenspitzen bildet. Sowohl die Kronenspitzen als auch der Randbereich zwischen zwei Kronenspitzen werden aufgrund der Oberflächenspannungskräfte abgerundet. Die zu erwartende Kronencharakteristik konnte von der Simulation erfasst werden.

Um das Ablösen kleiner Satellitentropfen zu simulieren, müßte dieses Problem mit noch größerer Auflösung berechnet, oder besser, das numerische Verfahren müßte für adaptive Gitter erweitert werden. Darauf wird im Ausblick hingewiesen.

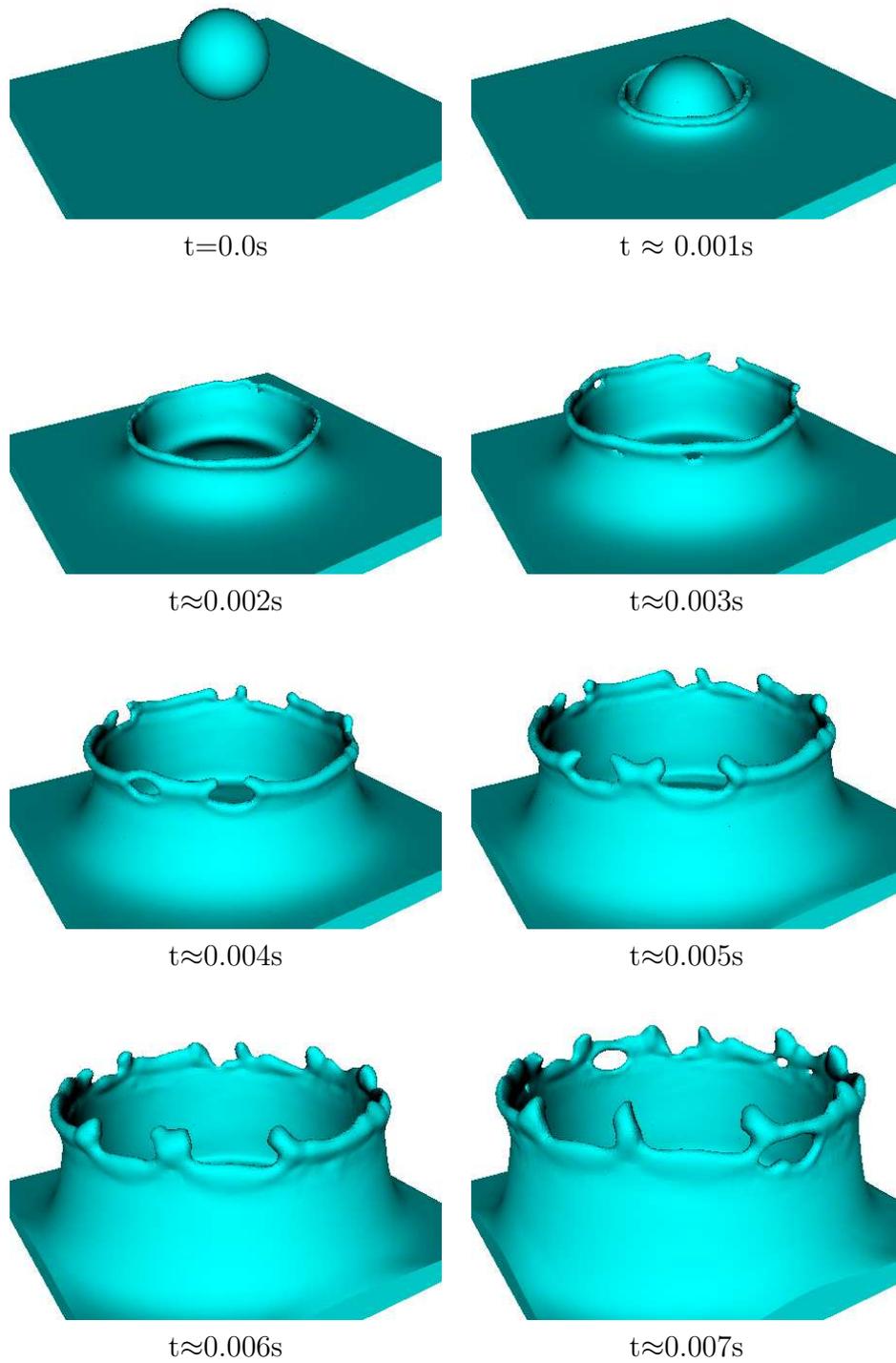


Abbildung 7.10: Splash eines Wassertropfen, Zeitverlauf in Sekunden

7.6 Zweiphasen-Festkörper-Systeme: Wasserströmung um ein Hindernis

Die Umströmung eines Hindernisses ist ein weiteres experimentell und numerisch vielfach untersuchtes Problem (siehe zum Beispiel Braza et al. [6], Eaton [22], Dennis & Chang [21], Rannacher [55]). Der Großteil der Simulationen betrachtet dabei nur zweidimensionale Einphasenströmungen um ein kreisförmiges Hindernis. Peric und Ferziger [23] berechneten eine dreidimensionale Einphasenströmung um einen Würfel, der an einer Seite des Kanals befestigt ist. Vergleichbare Beispiele, die dreidimensionale Zweiphasenströmungen um ein Hindernis simulieren, konnten nicht gefunden werden. Deshalb wurde in dieser Arbeit ein ähnliches Modell wie in Peric und Ferziger [23] konstruiert und auf Zweiphasenströmungen erweitert. Diese Testrechnung zeigt, daß, die notwendige Rechenleistung vorausgesetzt, auch die Umströmung von so komplizierten Geometrien wie Brückenpfeilern oder auch Schiffsrümpfen durchaus möglich ist.

Es wird ein Kanal der Größe $0.6\text{m} \times 0.25\text{m} \times 0.4\text{m}$ betrachtet. Darin steht ein auf der Bodenfläche befestigtes rechteckiges Hindernis mit einer quadratischen Grundfläche $0.05\text{m} \times 0.05\text{m}$ und einer Höhe von 0.2cm . Das Hindernis liegt 0.15m vom linken Rand entfernt und steht in gleichem Abstand zur vorderen und hinteren Gebietsgrenze. Der Rand des Hindernisses hat Haftbedingungen. Desweiteren ist der Kanal bis zu einer Höhe von 0.1m mit Wasser gefüllt, und darüber befindet sich Luft. Am linken Rand beträgt die Einströmgeschwindigkeit des Wassers 1m/s . Am rechten Rand sind Ausströmrandbedingungen gesetzt worden. Für alle restlichen Gebietsgrenzen wurden Rutschbedingungen verwendet. Alle weiteren Parameter sind aus Tabelle 7.9 zu entnehmen.

Größe des Gebietes:	$0.6\text{m} \times 0.25\text{m} \times 0.4\text{m}$	
Auflösung:	120×50×80 Gitterzellen	
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.07275\text{ N/m}$	
Wasser-Phase:	$\mu_l = 1.002 \times 10^{-3}\text{ kg/ms,}$	$\rho_l=998.2\text{ kg/m}^3$
Luft-Phase:	$\mu_g = 1.81 \times 10^{-5}\text{ kg/ms,}$	$\rho_g=1.205\text{ kg/m}^3$
Volumenkräfte:	$(g_1, g_2, g_3)=(0,-9.81,0)\text{m/s}^2$	
Breite der Oberfläche:	$\epsilon = 1.6\text{h}$	
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.2	

Tabelle 7.9: Parameter für die Wasserströmung um ein Hindernis

Die Ergebnisse der Simulationsberechnung sind in Abbildung 7.11 als zeitliche Abfolge dargestellt. Das Wasser strömt gegen das Hindernis, wodurch vor dem Hindernis ein Überdruckgebiet und dahinter ein Unterdruckgebiet entsteht. Aufgrund der Inkompressibilität des Wassers und der geringeren Viskosität der Luft wird das Wasser vor dem Hindernis nach oben gedrückt, wobei zusätzlich eine kleine rückschlagende Welle erzeugt wird, die sich gegen die Stromrichtung ausbreitet. Der Unterdruck hinter dem

Hindernis führt dazu, daß sich dort der Wasserspiegel senkt. Dadurch entstehen in diesem Bereich kleine Gegenwirbel aus denen schließlich ein Wasserstrahl hervorgeht, der von dort V-förmig in Stromrichtung wandert. Die Bildfolge in Abbildung 7.11 zeigt desweiteren, daß die Anzahl der sich vor dem Hindernis bildenden, konzentrischen Wellen kontinuierlich wächst, bis sich, wie in den letzten Bildern zu erkennen ist, die vordersten Wellen zu brechen beginnen.

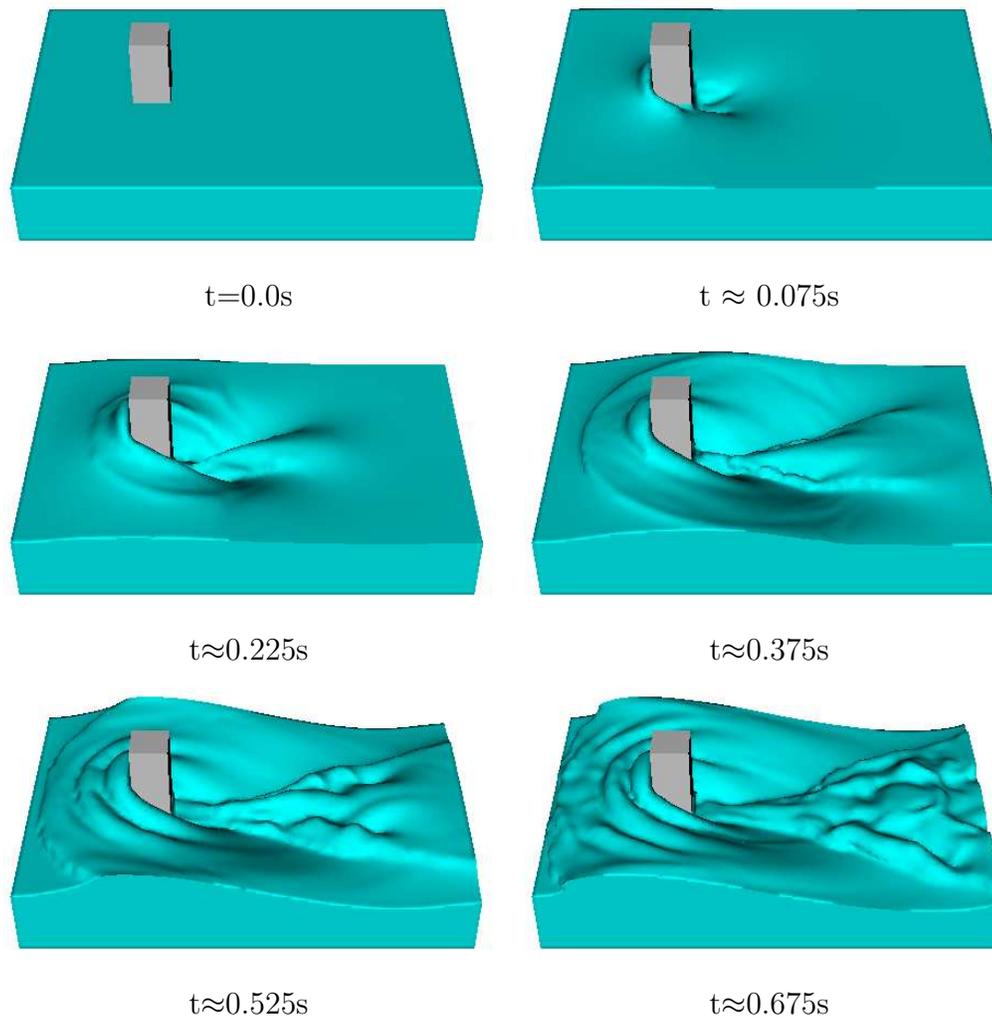


Abbildung 7.11: Wasserströmung um ein Hindernis, zeitlicher Verlauf

Wegen der geringen Zähigkeit des Wassers und der relativ hohen Einströmgeschwindigkeit wird kein stationärer Zustand erreicht. Vielmehr führt das gemeinsame Wechselspiel zwischen der Oberflächenspannung, den Luftwirbeln und den Wasserwirbeln zu ständig leicht veränderten Formen der freien Oberfläche.

7.7 Zweiphasen-Festkörper-Systeme mit dynamischer Kontaktfläche: Simulation einer Vorhangbeschichtung

Im Vergleich zu den vorher betrachteten Problemen wird im Folgenden zusätzlich der Einfluß einer dynamischen Kontaktfläche am Beispiel einer Vorhangbeschichtung analysiert. Die Vorhangbeschichtung ist eine industrielle Anwendung freier Randwertprobleme, die zum Beispiel bei der Produktion von photographischen Filmen angewendet wird. Hierbei gilt es, ein Fluid in Form eines dünnen Filmvorhangs auf das sich mit konstanter Geschwindigkeit fortbewegende Beschichtungsgut möglichst gleichmäßig zu verteilen. Die linke Skizze aus Abbildung 7.12 zeigt den schematischen Verlauf einer Vorhangbeschichtung, der sich in drei Schlüsselzonen einteilen läßt:

1. der filmformenden Zone,
2. der Vorhang-Zone,
3. der dynamischen Kontaktzone.

Oft bildet sich während des Beschichtungsprozesses eine fersenförmige Fluidwelle im Bereich der dynamischen Kontaktzone. Diese kann eigenständige Strömungsstrukturen annehmen und dadurch die Qualität der Vorhangbeschichtung beeinflussen.

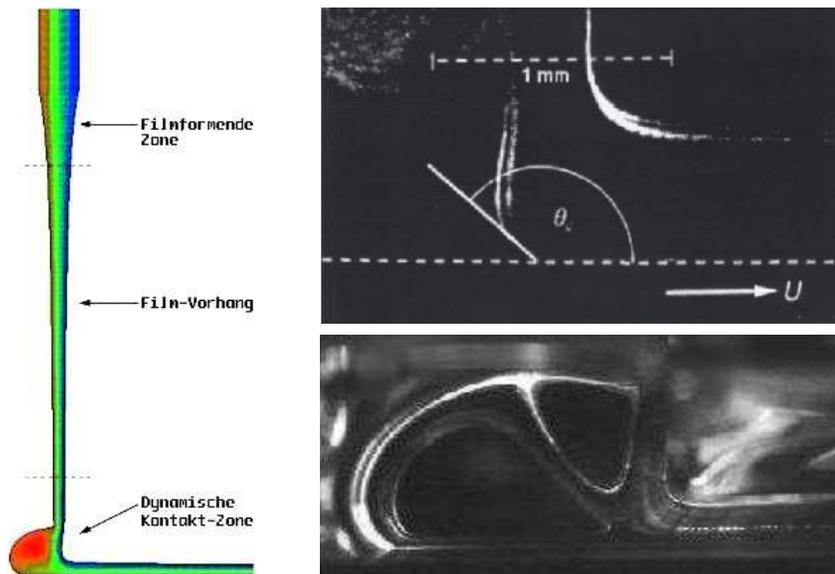


Abbildung 7.12: Links: Schlüsselzonen einer Vorhangbeschichtung; Rechts: Physikalische Experimente von Clarke, Blake et al.

Clarke [14] hat in physikalischen Experimenten festgestellt, daß sowohl die Größe als auch das strömungsdynamische Verhalten der Fluidferse stark variiert, wenn die

Einströmgeschwindigkeit des Fluides oder die Geschwindigkeit des Substrats geändert werden. Diese Änderungen führen dazu, daß sich innerhalb der Fluidferse Flußbifurkationen bilden und zahlreiche Gegenwirbel erzeugt werden. So zeigt zum Beispiel das aus physikalischen Experimenten von Clarke, Blake et al. entnommene untere Photo aus Abbildung 7.12 eine Fluidferse, in der sich zwei Gegenwirbel gebildet haben.

Die strömungsdynamischen Phänomene bei Beschichtungsproblemen sind in zahlreichen physikalischen Experimenten untersucht worden. Dabei ist vorwiegend der Einfluß der Geschwindigkeit des Beschichtungsgutes, also der dynamischen Kontaktfläche, auf den dynamischen Kontaktwinkel θ (siehe Abbildung 7.12) analysiert worden. Es stellte sich heraus, daß der dynamische Kontaktwinkel θ als Funktion der Geschwindigkeit U der dynamischen Kontaktfläche und weiterer Materialkonstanten ξ_i ($i=1,2,\dots$) dargestellt werden kann:

$$\theta = f(U, \xi_1, \xi_2, \dots) . \quad (7.5)$$

Neuste Erkenntnisse stellen die Möglichkeit wieder in Frage mit (7.5) den dynamischen Kontaktwinkel für allgemeine Beschichtungsprobleme bestimmen zu können. So zeigten Blake, Bracke und Shikhmurzaev [5], daß der Kontaktwinkel nicht nur von der Geschwindigkeit des Substrats und den Materialkonstanten abhängt, sondern auch die Geometrie des Strömungsfeldes einen bedeutenden Einfluß auf θ ausübt.

Aus der Sicht vieler Wissenschaftler gilt ein von Shikhmurzaev [61] entwickeltes Modell als eine nahezu vollständige Beschreibung der Beschichtungsprozesse. Die numerische Umsetzung dieses Modells ist eine komplizierte Aufgabe, welche bis heute nicht gelungen ist. Die Schwierigkeiten bestehen darin, daß eine Reihe unterschiedlicher Differentialgleichungen miteinander gekoppelt werden müssen. Im Ausblick dieser Arbeit wird kurz darauf eingegangen.

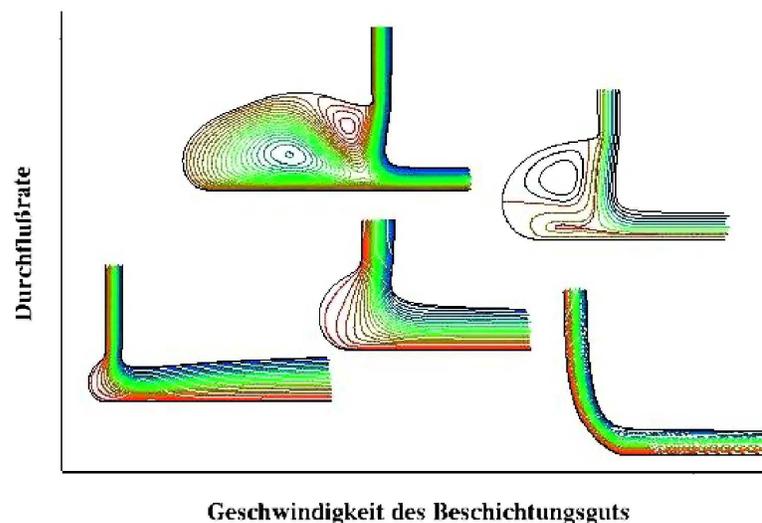


Abbildung 7.13: Strömungsverhalten an der dynamischen Kontaktlinie

Summers, Gaskell, Savage und Wilson [68] haben ein vereinfachtes zweidimensionales numerisches Modell auf Basis der Finite-Elemente-Methode entwickelt und dabei eine Reihe von Simulationen berechnet, bei denen nur die Ausströmgeschwindigkeit des Fluids und die Geschwindigkeit des Substrats geändert wurde. In Abbildung 7.13 sind ihre Ergebnisse in einem entsprechenden Koordinatensystem aufgetragen. Einige unterschiedliche Strömungsverläufe der Vorhangbeschichtung konnten mit dem Simulationsprogramm in zwei Raumdimensionen nachgerechnet werden.

Doch die zweidimensionale Betrachtung ignoriert den Einfluß der dritten Strömungskomponente und die Auswirkung der Oberflächenspannung in z -Richtung. Zusätzlich betrachtet das Finite-Elemente-Programm nur Einphasenströmungen im Vakuum, also werden Wechselwirkungen zwischen der Beschichtungsflüssigkeit und der umgebenden Luft nicht berücksichtigt. Desweiteren ist in den obigen Simulationen die Interaktion des ausströmenden Fluids mit dem Ausflußrohr oder Ausflußbecken nicht berücksichtigt, das heißt, daß eventuelle Reibungskräfte, die entscheidend an der Bildung des Fluidvorhangs mitwirken können, vernachlässigt wurden.

Simulationen von Beschichtungsprozessen in drei Raumdimensionen konnten nach intensiven Recherchen nicht gefunden werden. Dies war Motivation für die nun folgende dreidimensionale Berechnung einer Vorhangbeschichtung mit echten Zweiphasenströmungen. Dabei werden insbesondere auch die Reibungskräfte zwischen dem Fluid und dem Behälter, aus dem das Fluid fließt, mitberücksichtigt.

Größe des Gebietes:	0.5m×0.3m×0.5m	
Auflösung:	100×60×100 Gitterzellen	
Oberflächenspannung:	$\sigma=0.07275$ N/m	
Beschichtende-Phase:	$\mu_l = 3.0$ kg/ms,	$\rho_l=998.2$ kg/m ³
Luft-Phase:	$\mu_g = 1.81 \times 10^{-5}$ kg/ms,	$\rho_g=1.205$ kg/m ³
Volumenkräfte:	$(g_1, g_2, g_3)=(0,-9.81,0)$ m/s ²	
Breite der Oberfläche:	$\epsilon = 1.6$ h	
Zeit-Sicherheitskonstante:	0.5	

Tabelle 7.10: Parameter für die Vorhangbeschichtung

Hierzu wird ein Rechengebiet Ω mit den Ausmaßen 0.5m×0.3m×0.5m betrachtet. Auf dem linken Gebietsrand ist ein Becken befestigt, dessen Beckenrand sich auf einer Höhe von 0.175m befindet und welches vollständig mit Haftbedingungen versehen ist. Die gesamte Einströmfläche des Beckens beträgt 0.075m×0.45m, also 337.5 cm². Das beschichtende Fluid, dessen Materialparameter in Tabelle 7.10 angegeben sind, strömt mit einer konstanten Geschwindigkeit von $0.5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ aus dem Becken heraus. Die untere Flächenseite des Gebietes Ω beschreibt das Beschichtungsgut, das sich mit einer Geschwindigkeit von $1.5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ in x -Richtung fortbewegt. An der rechten Flächenseite von Ω wurden Ausströmrandbedingungen und an allen restlichen Gebietsrändern Rutschbedingungen vorgeschrieben.

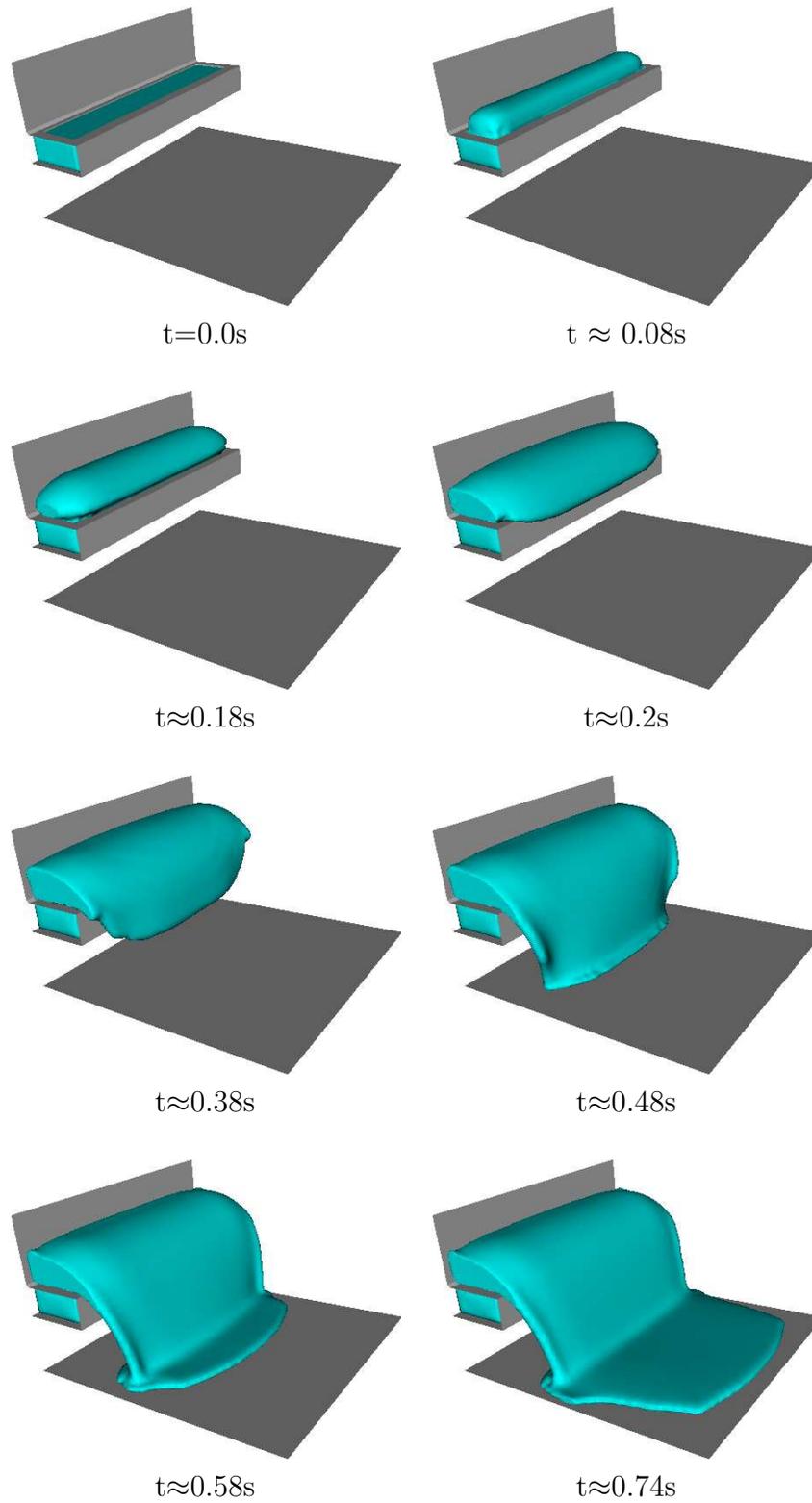


Abbildung 7.14: Vorhangbesichtung, zeitlicher Verlauf

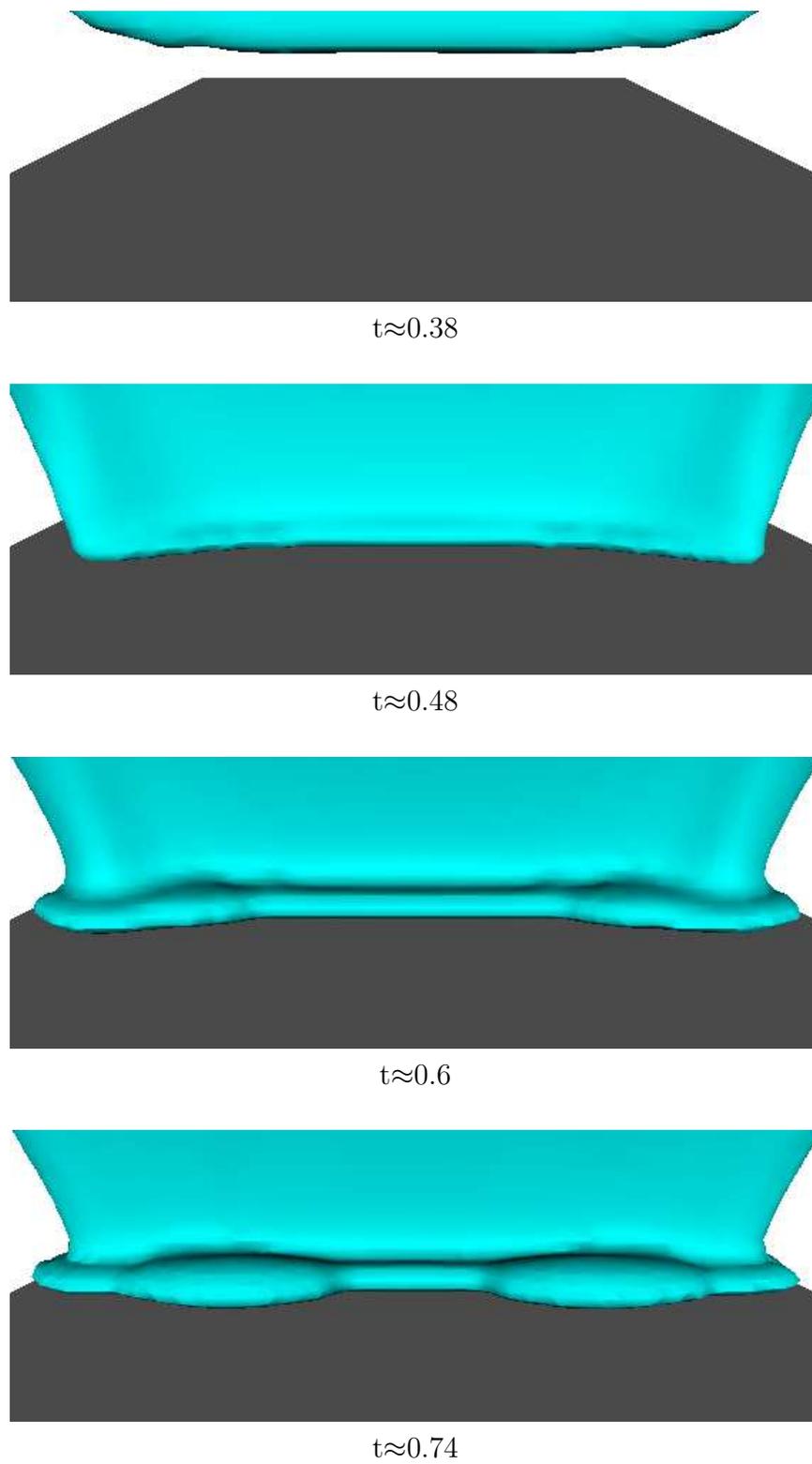


Abbildung 7.15: Vorhangbeschichtung von hinten betrachtet

In Abbildung 7.14 ist das Ergebnis der Simulation als zeitlicher Verlauf abgebildet. Die Einströmgeschwindigkeit erzeugt einen Überdruck in dem Becken, welcher das Fluid aus dem Becken nach oben herausdrückt. Das Bild zur Zeit $t=0.08\text{s}$ zeigt, wie die Oberflächenspannung und die Viskosität des Fluids die freie Oberfläche sofort nachdem sie aus dem Becken austritt abrundet. In dem darauffolgenden Bild beginnt das Fluid unter Einfluß der Gravitationskraft, die der Einströmrichtung entgegenwirkt, seitlich auszuweichen. Da das Fluid an den drei Seitenwänden nicht durchfließen kann, verläuft die Fluidströmung ausschließlich über den Beckenrand und beginnt damit, den Filmvorhang zu formen. Dabei zeigt sich, daß der Filmvorhang aufgrund der Reibung mit dem Becken und wegen der Oberflächenspannung eine leicht abgerundete Form bildet. Dadurch berührt der Filmvorhang die dynamische Kontaktfläche zu unterschiedlichen Zeitpunkten und folglich überträgt sich diese Abrundung auch auf das Beschichtungsgut, wie die Bilder ab dem Zeitpunkt $t=0.48\text{s}$ zeigen. An den seitlichen Rändern des Filmvorhangs ist die Krümmung sehr groß, so daß starke Oberflächenspannungskräfte in z -Richtung entstehen, die an der Formung des Vorhangs und schließlich auch an der Entwicklung der Fluidferse mitwirken.

So ist in Abbildung 7.15 an den Rückenansichten der Vorhangbeschichtung zu erkennen, daß die dreidimensionale Fluidferse in der Kontaktzone nicht gleichmäßig anwächst, sondern vielmehr von den Seiten her zwei zueinander symmetrische Fluidfersen entstehen, die sich schnell vergrößern. Diese Bilder zeigen deutlich, daß die strömungsdynamischen Strukturen an der Kontaktfläche für den dreidimensionalen Fall ein Verhalten aufzeigen, welches mit zweidimensionalen Simulationen nicht dargestellt werden kann.

Ein weiteres interessantes Verhalten ist in den Scherenschnitten aus Abbildung 7.16 und Abbildung 7.17 zu beobachten. Die linke Spalte zeigt den zeitlichen Verlauf eines zentralen Scherenschnittes der freien Oberfläche und die rechte Spalte zeigt den zeitlichen Verlauf eines leicht versetzten Scherenschnittes, der durch eine der beiden großen Fluidfersen verläuft. An beiden Spalten ist zu sehen, daß der Filmvorhang, sobald er das Beschichtungsgut berührt, schnell durch die Geschwindigkeit des Substrats mitgezogen wird. Dabei kann wegen der Trägheit des Fluids keine einheitliche Breite des beschichtenden Fluidfilms erzielt werden. Vielmehr gilt: je weiter der Fluidfilm transportiert wird, desto dünner wird er.

Während der Entstehung der Fluidferse zieht das Substrat gleichzeitig auch Luft mit, so daß sich am Fersenansatz ein Überdruckgebiet bildet. In den Scherenschnitten vom Zeitpunkt $t=0.58\text{s}$ bis $t=0.74\text{s}$ aus Abbildung 7.17 ist zu sehen, wie die Fluidferse anwächst, ohne dabei, aufgrund des Überdruckgebietes, die dynamische Kontaktfläche zu berühren. Der rechte Scherenschnitt zur Zeit $t=0.74\text{s}$ aus Abbildung 7.17 deutet an, daß die Fluidferse erst dann wieder die dynamische Kontaktfläche berührt, wenn ihre Größe dafür ausreicht das Überdruckgebiet einzuschließen. Wichtig für reale Vorhangbeschichtungen ist es, solche Gaseinschlüsse vermeiden zu können.

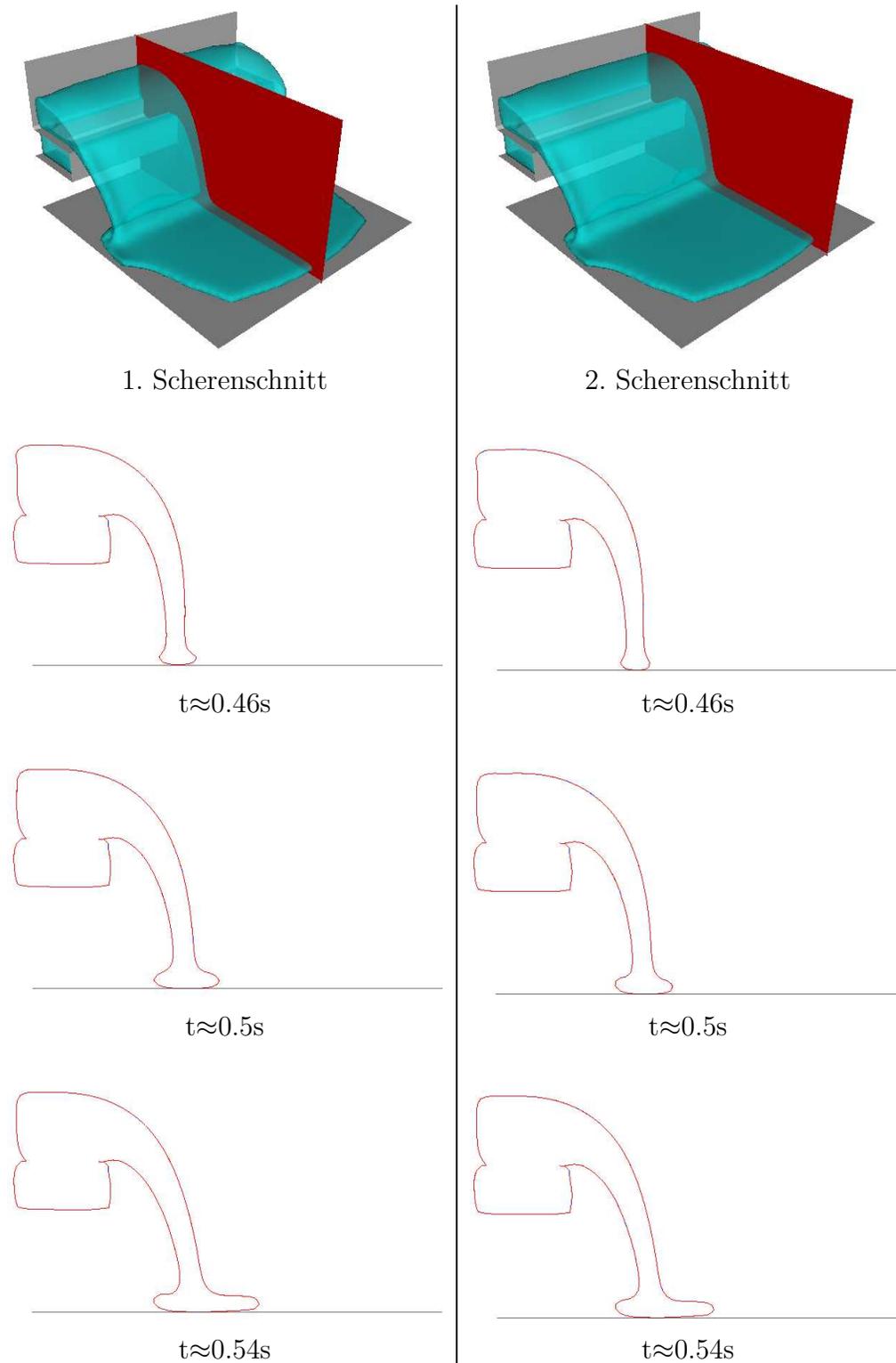


Abbildung 7.16: Zeitlicher Vergleich zweier Scherenschnitte. Links: zentraler Scherenschnitt; Rechts: Seitlich verschobener Scherenschnitt

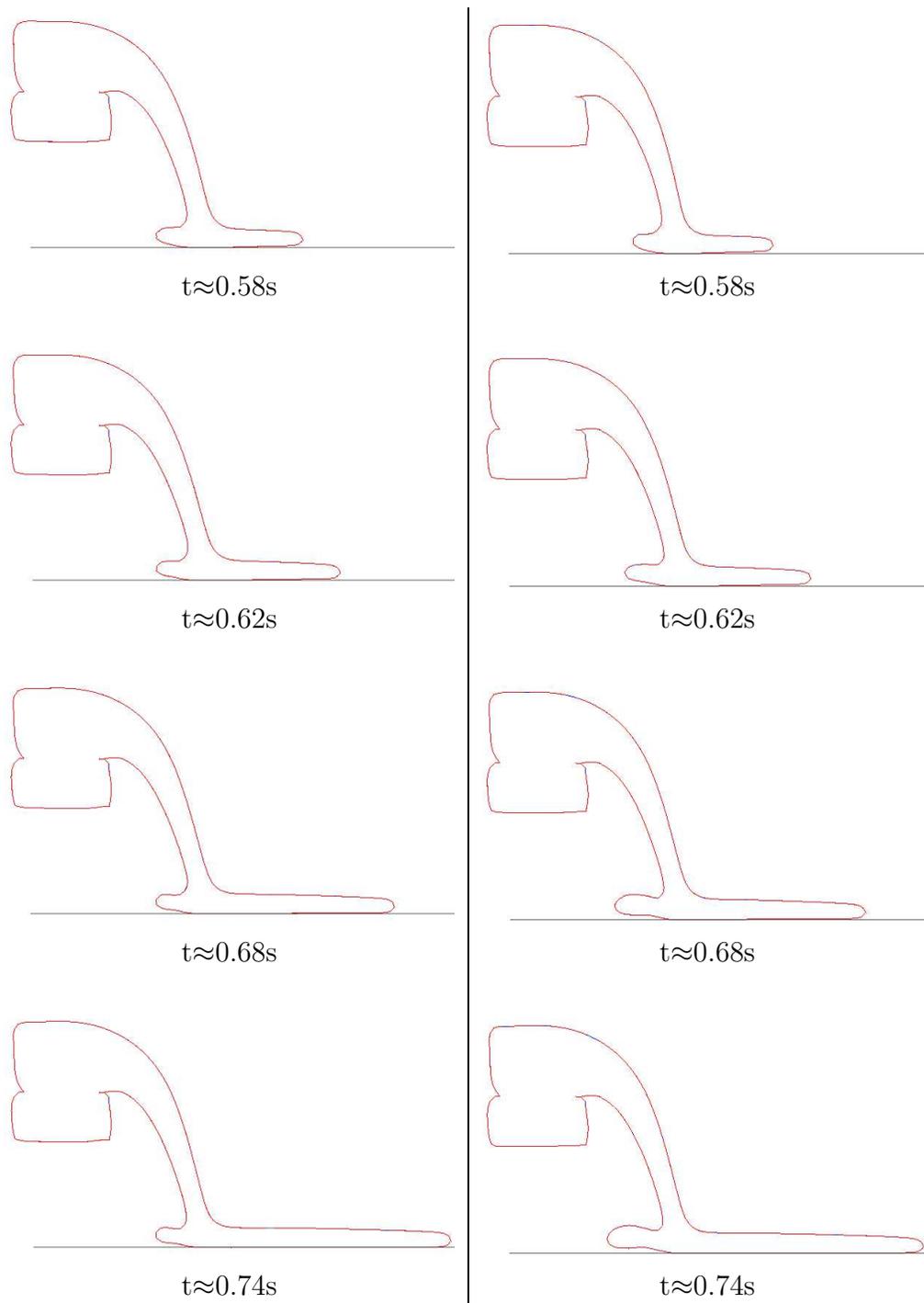


Abbildung 7.17: Zeitlicher Vergleich zweier Scherenschnitte. Links: zentraler Scherenschnitt; Rechts: Seitlich verschobener Scherenschnitt

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Für diese Arbeit ist ein paralleles, numerisches Simulationsprogramm erstellt worden, das dreidimensionale, inkompressible Zweiphasenströmungen mit Oberflächenspannung, Hindernissen und dynamischen Kontaktflächen stabil berechnen kann. Dabei wurden echte Zweiphasensysteme betrachtet, die an der Phasengrenze einen Dichte- und Viskositätssprung aufweisen.

Die Strömungsgleichungen sind mit finiten Differenzen auf einem Euler'schen Gitter mit der Chorin'schen Projektionsmethode gelöst worden. Numerische Diffusionseffekte und Stabilitätsprobleme bei Diskretisierungen höherer Ordnung der konvektiven Terme durch Universal-Limiter-Verfahren und ENO- beziehungsweise WENO-Methoden wurden am Beispiel einer skalaren Erhaltungsgleichung untersucht. Im Rahmen dieser Untersuchungen ist erstmals festgestellt worden, daß das VONOS-Schema bei reinen Transportproblemen dazu neigt, lokale Extrema künstlich zu Stufenfunktionen zu deformieren. Das WENO-Schema fünfter Ordnung ermöglicht eine stabile Berechnung und gute Erhaltung eines Funktionsprofils mit Sprungstellen sowie Stellen an denen das Profil stetig aber nicht differenzierbar ist. Für den konvektiven Term der Navier-Stokes-Gleichungen und der Transportgleichung ist das WENO-Verfahren fünfter Ordnung implementiert worden.

Die freie Oberfläche wird mit der Nullnivaumenge einer skalaren vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion (Level-Set-Funktion) identifiziert, aus der sich geometrische Größen, wie zum Beispiel die Krümmung des freien Randes, effizient berechnen lassen. Die zeitliche Entwicklung erfolgt über den Transport dieser Funktion mit den Strömungsgeschwindigkeiten. Diese Methode ist im Vergleich zu der populären VOF-Methode, bei der keine Abstands-, sondern eine Stufenfunktion transportiert wird, aufgrund der höheren Regularität der Abstandsfunktion numerisch weniger diffusiv. Desweiteren benötigt dieses Verfahren im Verlauf der Rechnung keine explizite Rekonstruktion des freien Randes. Die freie Oberfläche wird erst am Ende der Rechnung durch eine Visualisierung der Nullnivaumenge dargestellt. Sowohl der Dichte- und Viskositätssprung als auch die Oberflächenspannung können in Abhängigkeit von der Level-Set-Funktion auf natürliche Weise in den Navier-Stokes-Impulsgleichungen einge-

baut werden. Dabei geht die Oberflächenspannung als Quellterm in die Impulsgleichungen ein. Dieser Quellterm wird über ein Deltafunktional in einer Umgebung des freien Randes aktiviert. Die Größe der Umgebung ist von der Ordnung $O(h)$ und sie bleibt während der Berechnung unverändert, wobei dies über eine Reinitialisierungstechnik für die Level-Set-Funktion erreicht wird. Die Reinitialisierung erfolgt durch iteratives Lösen einer nichtlinearen Differentialgleichung.

Untersuchungen ergaben, daß durch die Reinitialisierung Probleme in der Massenerhaltung auftreten. Eine genauere numerische Betrachtung zeigte, daß die Massenerhaltung sich kontinuierlich verbessert, je höher die Diskretisierungsordnung des konvektiven Termes der Reinitialisierungsfunktion ist. Ferner wurde durch eine geschicktere Approximation der in der Reinitialisierungsfunktion enthaltenen signum-Funktion eine zusätzliche Verbesserung der Reinitialisierung erreicht. Bei Zweiphasenströmungen mit Hindernissen wird die Reinitialisierung auch innerhalb der Hindernisse durchgeführt, um die Eigenschaft einer Abstandsfunktion auf dem gesamten Rechengebiet zu erhalten. Stabilitätsprobleme traten in den durchgeführten Rechnungen nicht auf, obwohl der Transport der Level-Set-Funktion nur im Fluidgebiet berechnet wird und dadurch große Gradienten in der Nähe von Hindernissen entstehen können.

Große Drucksprünge verschlechtern die Kondition der Systemmatrix der in der Chorin'schen Projektionsmethode auftretenden Poissongleichung. Um die entstehenden großen linearen Gleichungssysteme effizient zu lösen und gleichzeitig Hindernisse problemlos zu handhaben, ist ein paralleles stabilisiertes BICGStab-Verfahren implementiert worden. Dieses wurde um einen Jacobi-Vorkonditionierer erweitert und die dadurch erzielte Leistungssteigerung am Beispiel einer Zweiphasenströmung mit einem Dichtesprung von 1/1000 (Luft/Wasser) präsentiert.

Für die Berechnung der Oberflächenspannung ist eine gute Approximation der Krümmung notwendig. Da die Krümmung über zweimaliges Differenzieren der Abstandsfunktion bestimmt wird, können Konvergenzprobleme entstehen, wenn die Abstandsfunktion nicht mindestens von einer Ordnung > 2 approximiert wird. Dies ist ein weiterer Grund dafür, daß das WENO-Verfahren fünfter Ordnung für die Diskretisierung der konvektiven Terme der Transportgleichung verwendet und zusätzlich die Zeitdiskretisierung der Transportgleichung mit einem Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung durchgeführt wurde. Darüber hinaus wurden sämtliche benötigten Interpolationen von physikalischen Werten über Lagrange-Polynome höherer Ordnung bestimmt. Ein direkter Vergleich zwischen der Krümmungsberechnung des in dieser Arbeit erstellten numerischen Verfahrens und der eines Verfahrens zweiter Ordnung zeigte eine deutlich verbesserte Konvergenzordnung.

Die Parallelisierung des gesamten Verfahrens erfolgte mit der Programmbibliothek *Message Passing Interface* (MPI) basierend auf der Gebietszerlegungsmethode. Um den Kommunikationsaufwand minimal zu halten, wurden unterschiedlich viele Randbordüren für die Teilgebiete benötigt, die den verschiedenen großen Diskretisierungsskizzen angepasst sind. Zusätzliche Kommunikationsroutinen für Eck- und Kantenzellen werden notwendig, damit die Lagrangschen-Polynominterpolationen nicht auf falsche Werte zugreifen. Die mit diesem Programm auf dem Parallelrechner *Parnass2* durchgeführten Speed-Up Tests haben selbst für ein relativ kleines Diskretisierungsgitter

gute Werte ergeben.

Eine Analyse der numerischen Konvergenzordnung des vollständig gekoppelten dreidimensionalen Verfahrens am Beispiel einer aufsteigenden Fluidblase inklusive Oberflächenspannung hat ergeben, daß dieses mit der Ordnung eins konvergiert. Zahlreiche nachfolgende Simulationen und Analysen unterschiedlichster Problemstellungen demonstrierten die breiten Anwendungsmöglichkeiten des erstellten Simulationsprogramms. So ist die Oberflächenspannung am Beispiel eines Fluidwürfels und die Topologieveränderung an zwei Beispielen aus den Bereichen der Gasblasen- und der Tröpfchendynamik untersucht worden. Desweiteren wurden erstmals in dieser Arbeit Zweiphasen-Festkörper-Systeme anhand einer Wasserströmung um ein Hindernis und schließlich Zweiphasen-Festkörper-Systeme inklusive einer dynamischen Kontaktfläche am Beispiel einer Vorhangbeschichtung analysiert.

Alle diese ermutigenden Ergebnisse geben Anlaß zu einer Reihe von möglichen Weiterentwicklungen, von denen nur einige im Folgenden aufgeführt werden.

8.2 Ausblick

Eine adaptive Behandlung der Level-Set-Funktion ist von entscheidender Bedeutung für Simulationen, in denen die freie Oberfläche große Skalenunterschiede aufweist, wie zum Beispiel bei der Kronencharakteristik (siehe Kapitel 7.5), bei der im Verhältnis zur gesamten Krone sehr kleine Kronenzacken und Satelliten-Tröpfchen entstehen können. Zusätzlich könnte dadurch auch die Massenerhaltung verbessert werden.

Mit der Modellierung und Implementierung thermaler Einflüsse, beispielsweise als Boussinesq-Approximation, könnte das Strömungsverhalten von Zweiphasensystemen inklusive thermaler Effekte simuliert werden. Dabei ist unter anderem zu beachten, daß die Oberflächenspannungskräfte in Abhängigkeit der Temperatur berechnet werden.

Eine weitere interessante Aufgabe wäre, das vereinfachte Modell der Vorhangbeschichtungs-Simulation aus Kapitel 7.7 durch ein von Shikhmurzaev [61, 62] erweitertes physikalisches Modell zu ersetzen. Die Grundidee dieses Modells besteht darin, die Oberflächenspannung zwischen der Liquid/Gas-Grenzfläche und der Liquid/Festkörper-Grenzfläche zu relaxieren, um damit lokale Änderungen in der Oberflächenspannung bei zwei sich in unmittelbarer Nähe der Kontaktfläche berührenden Grenzschichten modellieren zu können. Hierzu werden hydrodynamische Gleichungen für die freie Oberfläche hergeleitet, indem die strukturbehaftete Beschreibung [26] und die strukturlose Beschreibung [4] miteinander kombiniert werden. Dabei betrachtet die strukturbehaftete Beschreibung die freie Oberfläche als eine Volumenschicht mit endlicher Breite, in der die Gesetze der Kontinuumsmechanik gelten. Die strukturlose Beschreibung dagegen betrachtet den freien Rand als Fläche, in der die Kräfte, die auf den Festkörper wirken, und die Kräfte, die auf das Fluid wirken, in einer Umgebung der dynamischen Kontaktfläche miteinander bilanziert werden. Daraus ergeben sich schließlich drei zusätzliche partielle Differentialgleichungen, die entlang der Liquid/Gas- und Liquid/Festkörper-Grenzfläche mit Hilfe von Fluß- und Kraftbilanzgleichungen zu lösen sind.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Eintauchender Regentropfen und eintauchender Milchtropfen	2
2.1	Zeitliche Entwicklung von Ω_0 nach Ω_t	8
2.2	Zweiphasenmodellierung	12
2.3	Zur Beschreibung der Oberflächenspannungskraft	13
3.1	Das dreidimensionale, versetzte Gitter	18
3.2	Anfangsbedingung ϕ_0	21
3.3	Upwind erster Ordnung, N=120.	23
3.4	QUICK-Verfahren, N=120.	24
3.5	Transport des Zellwandwertes ϕ_w in Abhängigkeit des lokalen Verhaltens von ϕ : (a) und (c) lokal monoton; (b) und (d) lokal nicht monoton . . .	25
3.6	Links: Beschränktheitsbereich im Diagramm der normalisierten Variablen. Rechts: Verlauf der Geraden von FOU bzw. QUICK	26
3.7	Das SMART-Diagramm mit normalisierten Variablen	27
3.8	SMART-Verfahren, N=120.	29
3.9	VONOS-Diagramm in normalisierten Variablen	29
3.10	VONOS-Verfahren, N=120.	31
3.11	Oben: ENO-Schema zweiter Ordnung, N=120. Unten: ENO-Schema dritter Ordnung, N=120.	34
3.12	WENO-Schema fünfter Ordnung, N=120.	36
3.13	Glättung des Residuums bei dem Nieschenströmungsproblem	40
4.1	Scherströmung: (a): Anfangsbedingung der Scherströmung. (b): Gitterverzerrung durch die Fluidgeschwindigkeit u und -u. Neue Verknüpfung der Gitterpunkte ergibt wieder (a).	44
4.2	Oberflächenbeschreibung mit der Surface-Marker-Methode	45
4.3	Exakte Oberfläche, SLIC und PLIC Rekonstruktion	46
4.4	Oberflächenbewegung in Normalenrichtung	49
4.5	Level-Set-Darstellung: Getrennte (links) und vereinigte Oberflächen . . .	50
5.1	Numerischer Glättungsbereich	59
5.2	Zentrale und linksseitige eindimensionale Lagrange-Interpolation	62
5.3	Zweidimensionale Lagrange-Interpolation	62
5.4	Verlauf des Residuums der Poissongleichung mit Dichtesprung	66

5.5	Zur nicht äquidistanten Zeitdiskretisierung	69
5.6	Versuchsaufbau der Testrechnung	73
5.7	Massenerhaltung mit ENO-1, ENO-2 und WENO-5	74
5.8	Reinitialisierung mit dem ENO-Verfahren erster, zweiter, dritter Ordnung (obere Reihe) und mit dem WENO-Schema fünfter Ordnung exklusive und inklusive modifizierter signum-Funktion (untere Reihe links und mitte). Die Anfangsbedingung und exakte Lösung ist unten rechts abgebildet.	78
6.1	Datenaustausch am Beispiel einer „künstlichen Randpunktreihe“	82
7.1	Aufsteigende Blase ($N = 144^3$); obere Reihen: Blick von schräg unten; untere Reihen: Blick von vorne mit leicht durchsichtiger freier Oberfläche	90
7.2	Blase zur Zeit $t=0.075s$ für $N = 36^3$, $N = 72^3$ und $N = 144^3$	91
7.3	Zentrale Scherenschnitte der Blase zur Zeit $t=0.075s$ für $N = 36^3$ (oben), $N = 72^3$ (mitte) und $N = 144^3$ (unten). Links: Niveaulinien für $\phi \leq 0$. Rechts: Graph der Dichte	93
7.4	Wasserwürfel mit Oberflächenspannung. Links: Level-Set; Rechts: Nullniveau des Drucks	97
7.5	Wasserwürfel mit Oberflächenspannung, zeitliche Fortsetzung	98
7.6	Wasserwürfel mit Oberflächenspannung, zeitliche Fortsetzung	99
7.7	Zwei Blasen mit gleicher Dichte, zeitlicher Verlauf	101
7.8	Zeitlicher Verlauf, Fortsetzung	102
7.9	Seitenperspektive einer Wasser-Kronencharakteristik	103
7.10	Splash eines Wassertropfen, Zeitverlauf in Sekunden	105
7.11	Wasserströmung um ein Hindernis, zeitlicher Verlauf	107
7.12	Links: Schlüsselzonen einer Vorhangbeschichtung; Rechts: Physikalische Experimente von Clarke, Blake et al.	108
7.13	Strömungsverhalten an der dynamischen Kontaktlinie	109
7.14	Vorhangbeschichtung, zeitlicher Verlauf	111
7.15	Vorhangbeschichtung von hinten betrachtet	112
7.16	Zeitlicher Vergleich zweier Scherenschnitte. Links: zentraler Scherenschnitt; Rechts: Seitlich verschobener Scherenschnitt	114
7.17	Zeitlicher Vergleich zweier Scherenschnitte. Links: zentraler Scherenschnitt; Rechts: Seitlich verschobener Scherenschnitt	115

Tabellenverzeichnis

5.1	Numerische Studie zur Massenerhaltung	74
5.2	Erhaltene Masse in Prozent der Anfangsmasse nach der Reinitialisierung	79
6.1	Leistungsmessung des parallelisierten Programms	83
7.1	Fehler der Krümmungsberechnung unter Verwendung des SMART-Verfahrens zweiter Ordnung und des WENO-Verfahrens fünfter Ordnung	87
7.2	Anzahl der Gitterzellen in denen die Krümmung berechnet wurde. Mas- senerhaltung in Prozent der Anfangsmasse.	88
7.3	Verwendete Parameter für die Fluidblasen-Simulation	89
7.4	Konvergenzstudie zum Zeitpunkt $t = 0.075s$	94
7.5	Studie zur Massenerhaltung zum Zeitpunkt $t = 0.075s$	94
7.6	Eingesetzte Parameter für die Fluidwürfel-Simulation	95
7.7	Parameter für die Simulation der Blasen-Wechselwirkung	100
7.8	Parameter für die Simulation der Kronencharakteristik	104
7.9	Parameter für die Wasserströmung um ein Hindernis	106
7.10	Parameter für die Vorhangbeschichtung	110

Literaturverzeichnis

- [1] I. Aleinov, E.G. Puckett: *Computing Surface Tension with Higher-Order Kernels*, Department of Mathematics and Institute of Theoretical Dynamics, University of California, Davis; Proceedings of the 6th International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Lake Tahoe.
- [2] A. Amsden, F. Harlow: *A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations*, J. Comp. Phys., **6**, S.322 (1970).
- [3] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. van der Vorst: *Templates for the Solution of Linear Systems*, SIAM, Philadelphia (1994).
- [4] D. Bedeaux, A.M. Albano und P. Mazur: *Boundary conditions and non-equilibrium thermodynamics*, Physica A, **82**, S.438 (1976).
- [5] T.D. Blake, M. Bracke, Y.D. Shikhmurzaev: *Experimental evidence of nonlocal hydrodynamic influence on the dynamic contact angle*, Physics of Fluids, **11**, S.1995 (1999).
- [6] M. Braza, P. Chassing, H. Minh: *Numerical study and physical analysis of pressure and velocity fields in the near wake of a circular cylinder*, J. Fluid Mech., **165**, S.79 (1986).
- [7] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, C. Zemach: *A Continuum Method for Modeling Surface Tension*, J. Comp. Phys., **100**, S.335 (1992).
- [8] J.P. Boris, E.S. Oran: *Numerical Simulation of Reactive Flow*, Elsevier Science Publishing Co., Inc. (1987).
- [9] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quaterioni, T.A. Zang: *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (1988).
- [10] Y.C. Chang, T.Y. Hou, B. Merriman, S. Osher: *A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows*, J. Comp. Phys., **124**, S.449 (1996).
- [11] S. Chen, D.B. Johnson, P.E. Raad: *The Surface Marker Method*, Department of Civil and Mechanical Engineering, Southern Methodist University, Dallas, Texas, 75275-0335, USA.
- [12] A. J. Chorin: *Numerical solution of the Navier-Stokes-equations*, Math. Comput., **22**, S.745 (1968).
- [13] A. J. Chorin, J. E. Marsden: *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*, 3rd ed. New York, Springer, c1993 (1998).
- [14] A. Clarke: *Recirculating flows in curtain coating*, in „The Mechanics of Thin Film Coatings“, World Scientific, Singapore, S.32 (1996).

-
- [15] G.E. Cossali, G. Brunello, A. Coghe, M. Marengo: *Impact of a single drop on a liquid film: Experimental analysis and comparison with empirical models*, Italian Congress of Thermofluid Dynamics UIT, Ferrara, 30 June–2 July 1999.
- [16] G.E. Cossali, G. Brunello, A. Coghe, M. Marengo: *Single drop splash on thin film: Measurements of crown characteristics*, ILASS–Euope (1999).
- [17] B. J. Daly: *Numerical study of two fluid Rayleigh–Taylor instability*, The Physics of Fluids, **10**, S.297 (1967).
- [18] B. J. Daly: *Numerical study of the effect of surface tension on interface instability*, The Physics of Fluids, **12**, S.1340 (1969a).
- [19] B. J. Daly: *A technique for including surface tension effects in hydrodynamic calculations*, J. Comp. Phys., **4**, S.97 (1969b).
- [20] A. Dehmel: *Numerische Simulation dreidimensionaler Strömungen mit freien Randwerten*, Diplomarbeit, Technische Universität München, Institut für Informatik (1996).
- [21] S. Dennis, G. Chang: *Numerical solutions for steady flow past a circular cylinder at Reynolds numbers up to 100*, J. Fluid Mech., **42**, S.471 (1970).
- [22] B. Eaton: *Analysis of the laminar vortex shedding behind a circular cylinder by computer–aided flow visualization*, J. Fluid Mech., **180**, S.117 (1987).
- [23] H. Ferziger M. Peric: *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (1996).
- [24] O. Forster: *Analysis 3*, Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg (1992).
- [25] A. Frohn, N. Roth: *Dynamics of Droplets*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (2000).
- [26] P.G. de Gennes: *Wetting: statics and dynamics*, Rev. Mod. Phys., **57**, S. 827 (1985).
- [27] P.H. Gaskell, A.K.C. Lau: *Curvature–compensated convective transport: SMART a new boundedness–preserving transport algorithm*, Int. j. numer. methods fluids, **8**, S.617 (1988).
- [28] S. Gottlieb, C.W. Shu, E. Tadmor: *Strong Stability Preserving High–order Time Discretization Methods*, NASA/CR–2000–210093 ICASE Report No. 2000–15, April 2000.
- [29] M. Griebel, T. Dornseifer and T. Neunhoeffler: *Numerical Simulation in Fluid Dynamics, a Practical Introduction*, SIAM, Philadelphia (1998).
- [30] M. Griebel, M. A. Schweitzer, G. W. Zumbusch: *Parnass2: A cluster of dual-processor PCs*, Proceedings of the 2nd Workshop Cluster-Computing, Karlsruhe, nr. CSR-99-02 in Chemnitzer Informatik Berichte, S.45, TU Chemnitz (1999).
- [31] W. Gropp, E. Lusk, Skjellum: *Using MPI, Portable Parallel Programming with the Message–Passing Interface*, 2nd Edition, The MIT Press (1999).
- [32] Ch. Großmann, H.–G. Roos: *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Teubner Studienbücher, Mathematik (1994).
- [33] F. Harlow, J. Welch: *Numerical calculation of time–dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*, The Physics of Fluids, **8**, S.2182 (1965).
- [34] A. Harten, B. Enquist, S. Osher, S. Chakravarthy: *Uniformly high order essentially non–oscillatory schemes, III*, J. Comp. Phys., **71**, S.231 (1987).

- [35] C.W. Hirt, B.D. Nichols: *Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries*, Los Alamos Scientific Laboratory, New Mexico 87545, Nov.1, 1979; *Journal of Computational Physics* 39 (1981).
- [36] C. Hirt, B. Nichols, N. Romero: *SOLA – A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows*, Technical report, Los Alamos Scientific Lab. Rep. LA–5852.
- [37] W. Huber: *Paralleles Rechnen*, München/Wien: Oldenbourg (1997).
- [38] G. S. Jiang, C. W. Shu: *Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes*, *J. Comp. Phys.*, **126**, S.202 (1996)
- [39] G. S. Jiang, D. Peng: *Weighted ENO Schemes for Hamilton-Jacobi Equations*, AMS(MOS) subject classification. 35L99, 65M06. UCLA (1997)
- [40] J. van Kan: *A Second-Order Accurate Pressure-Correction Scheme for Viscous Incompressible Flow*, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7**, S.870, (1986)
- [41] K. Königsberger: *Analysis 2*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (1997).
- [42] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, G. Zanetti: *Modelling and merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER*, *J. Comput. Phys.*, **113**, S.134 (1994).
- [43] L.D. Landau, E.M. Lifshitz: *Fluid Mechanics*, Oxford/London/Paris/Frankfurt: Pergamon Press (1959).
- [44] B.P. Leonard: *A stable and accurate convective modelling procedure based on quadric upstream interpolation*, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **19**, S.59 (1979).
- [45] B.P. Leonard, S. Mokhtari: *Beyond First-Order Upwinding: The Ultra-Sharp Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection*, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **30**, S.729 (1990).
- [46] R. J. LeVeque: *Numerical Methode for Conservation Laws*, Basel: Birkhäuser (1990)
- [47] R. J. LeVeque, R.P. Beyer: *Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method*, *SIAM J. Numer. Anal.*, **29**, S.332 (1992).
- [48] A. Meister: *Numerik linearer Gleichungssysteme*, Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg (1999).
- [49] W. Mulder, S. Osher, J. Sethian: *Computing Interface Motion in Compressible Gas Dynamics*, *J. Comp. Phys.*, **100**, S.209 (1992).
- [50] MPICH: <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>
- [51] W. Noh, P. Woodward: *A Simple Line Interface Calculation*, Proceedings, Fifth International Conference on Fluid Dynamics, Eds. A.I. van de Vooran and P.J. Zandberger, Springer (1976).
- [52] S. Osher and J.A. Sethian: *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*, *J. Comp. Phys.*, **79**, S.12 (1988).
- [53] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao, M. Kang: *A PDE-Based Fast Local Level Set Method*, *J. Comp. Phys.*, **155**, S.410 (1999).
- [54] R. Peyret, T. Taylor: *Computational Methods for Fluid Flow*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (1983).

-
- [55] R. Rannacher: *On the numerical solution of the incompressible Navier–Stokes–Equations*, Preprint 92–16, IWR Heidelberg.
- [56] H.A. Schwarz: *Gesammelte mathematische Abhandlungen*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer, Band 2 (1890).
- [57] J.A. Sethian: *Level Set Methods and Fast Marching Methods*, Cambridge University Press (1999).
- [58] R. Schaback, H. Werner: *Numerische Mathematik*, Berlin/Heidelberg/New York: Springer (1993).
- [59] M. Schelkle, M. Rieber, A. Frohn: *Numerische Simulation von Tropfenkollisionen*, Spektrum der Wissenschaft, Dossier 2 (1999).
- [60] W. Schroeder, K. Martin, B. Lorenzen: *The Visualisation Toolkit*, 2nd Edition, PRENTICE HALL, Upper Saddle River, NJ 07458 (1998).
- [61] Y.D. Shikhmurzaev: *The moving contact line on smooth solid surface*, Int. J. Multiphase Flow **19**, S.589 (1993).
- [62] Y.D. Shikhmurzaev: *Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems*, J. Fluid Mechanics **334**, S.211 (1997).
- [63] C.W. Shu: High Order ENO and WENO Schemes for Computational Fluid Dynamics, in „High–Order Methods for computational physics“, Berlin/Heidelberg/New York: Springer, **9**, S.439 (1999).
- [64] C.W. Shu: *Total–variation–diminishing time discretization*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, S.1073 (1988).
- [65] C.W. Shu, S. Osher: *Efficient Implementation of Essentially Non–oscillatory Shock–Capturing Schemes*, J. Comp. Phys., **77**, S.439 (1988).
- [66] C.W. Shu, S. Osher: *Efficient Implementation of Essentially Non–oscillatory Shock–Capturing Schemes, II*, J. Comp. Phys., **83**, S.32 (1989).
- [67] C.W. Shu, S. Osher: *High Order Essentially Non–Oscillatory Schemes for Hamilton–Jacobi Equations*, SIAM J. Numer. Anal., **28**, S.902 (1991).
- [68] J.L. Summers, P.H. Gaskell, M.D. Savage, M.C.T. Wilson: *The kinematic and dynamics of free surface coating flows*, Final Report on EPSRC Grant GR/L17191, June 2000.
- [69] M. Sussman, E. Fatemi: *An Efficient, Interface Preserving Level Set Re–Distancing Algorithm and its Application to Interfacial Incompressible Fluid Flow*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **20**, S.1165 (1999).
- [70] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher: *A Level Set Approach for Computing Solutions to incompressible Two–Phase Flow*, J. Comp. Phys., **114**, S.146 (1994).
- [71] S.O. Unverdi and G. Tryggvason: *A front–tracking method for viscous, incompressible, multi flows*, J. Comp. Phys., **100**, S.25 (1992).
- [72] A. Varonos, G. Bergeles: *Development and assessment of a variable–order non–oscillatory scheme for convection term discretization*, Int. J. Numer. Methods Fluids, **26**, S.1 (1998).
- [73] H. van der Vorst: *BI–CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI–CG for the solution of nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **13**, S.631 (1992).