

Bachelorarbeit

Tropfendynamik in binärer Scherströmung mit dem Free Energy Modell für Lattice-Boltzmann-Methoden

Tim Zyprian

19. September 2019

Erstgutachter/in: Prof. Dr.-Ing. habil. Hermann Nirschl

Zweitgutachter/in: Prof. Dr.-Ing. Heike P. Karbstein

Betreuer/in: Dr. Mathias J. Krause, M.Sc. Stephan Simonis

Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik
Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik (MVM)
Institut für Angewandte und Numerische Mathematik (IANM)

Karlsruher Institut für Technologie

Kurzfassung. Gegenstand dieser Arbeit ist die numerische Simulation des Tropfenaufbruchs in einer binären Scherströmung. Das Tropfenverhalten wurde mittels des Free Energy Lattice-Boltzmann-Modells in der OpenLB Bibliothek für C++ für unterschiedliche Strömungsverhältnisse quantitativ und qualitativ untersucht und ausgewertet. Für den Tropfenabriss bei $Re = 0.0625$ konnte die konzipierte Methode mit aktueller Literatur überprüft und bestätigt werden. Die Tropfendeforrmation wurde in unterschiedlichen Strömungsumgebungen durch die Erhöhung der Reynoldszahl auf $Re = 3$ und $Re = 12$ analysiert. Die Untersuchungen wurden anhand der Dichte des dispergierten Fluids und des Ordnungsparameters ϕ ausgewertet. Diese Arbeit stellt die Basis zur Untersuchung von höheren Reynoldszahlen dar. Notwendige weitere Schritte zur Durchführung dieser wurden isoliert und beschrieben.

Abstract. Subject of this thesis is the numerical simulation of drop deformation and breakup in binary shear flow. The behaviour is studied using a free energy Lattice Boltzmann method with the OpenLB library for C++. It is investigated and evaluated quantitatively and analytically for varying flows. The droplet breakup for $Re = 0.0625$ could be verified with relevant literature for the designed method. The deformation process was investigated for different conditions with increased Reynolds numbers $Re = 3$ and $Re = 12$. The examinations were evaluated by the density of the dispersed phase and order parameter ϕ . This thesis displays the foundation for the usage with higher Reynolds numbers. Necessary steps to accomplish that are shown and described.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	6
2 Grundlagen der Strömungsmechanik	8
2.1 Inkompressible Strömungen	8
2.1.1 Grundbegriffe der Strömungsmechanik	8
2.1.2 Kontinuitätsgleichung	11
2.1.3 Navier-Stokes-Gleichung	12
2.1.4 Energieerhaltung und Zustandsgleichung	12
2.2 Mehrphasenströmungen	13
2.2.1 Young-Laplace-Gleichung	14
3 Die Lattice-Boltzmann-Methode	16
3.1 Einführung CFD	16
3.2 Die Boltzmann-Gleichung	18
3.3 Die Lattice-Boltzmann-Methode	18
3.4 Randbedingungen der Tropfendeformation	23
3.5 Das Free Energy Modell	26
4 Aktueller Wissenschaftlicher Stand	30
5 Numerische Experimente und Ergebnisse	33
5.1 Simulationsmethode	33
5.2 Validierung des aktuellen wissenschaftlichen Stands	35
5.2.1 Beschreibung des zu validierenden Testfalls	35
5.2.2 Parametereinstellung der Validierung	37
5.2.3 Anpassung der Validierung und Ergebnisse	44
6 Erhöhung der Reynoldszahl	48
6.1 Parametereinstellung der Testfälle	48
6.2 Simulationsergebnisse	51
6.3 Quantitative Auswertung der Momentendichte	54
6.4 Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Testfälle	63
7 Ausblick	66
7.1 Zusammenfassung	66
7.2 Ausblick	66

1 Einführung

Gemische aus Flüssigkeiten, Gasen oder Feststoffen sind allgegenwärtig und können in der Natur und Industrie vorgefunden werden. Sind die Bestandteile dieser Gemische nicht oder nur teilweise ineinander löslich, so liegt ein Mehrphasensystem vor, welches in Bewegung versetzt als Mehrphasenströmung bezeichnet wird. In der Natur gibt es Beispiele für Mehrphasenströmungen bei Wetterphänomenen, wie der Wolkenbildung oder Meeresströmungen. Auch die Industrie ist in Bereichen der Lebensmittelindustrie oder Energietechnik stark an Mehrphasenströmungen interessiert.



Abbildung 1.1: Mehrphasenströmungen in Natur und Industrie [26, Abb. 1.28-29].

Im Alltag werden häufig Emulsionen verwendet. Dazu gehört eine Vielzahl an Lebensmitteln, Kosmetika oder Pharmazeutika. Durch die Vermengung nicht mischbarer Flüssigkeiten können Emulsionen erzeugt werden, indem sich kleine Tropfen einer Flüssigkeit in der jeweils anderen gleichmäßig verteilen. Dabei können entweder Tropfen einer wässrigen Flüssigkeit in eine ölige eingebbracht werden oder umgekehrt. Um die gewünschten Produkteigenschaften und beständige Emulsionen erzielen zu können, wird eine exakt definierte Tropfenverteilung und -größe der dispergierten Phase angestrebt [13].

Die Herstellung von Emulsionen erfolgt in der Verfahrenstechnik mit Emulgierapparaten, wie zum Beispiel Homogenisatoren oder Rührwerken [24]. Diese Apparate zerkleinern Flüssigkeitstropfen mit mechanischer Energie. Je nach Wahl des Emulgiergeräts erfolgt die Zerkleinerung bei unterschiedlichen Strömungsverhältnissen. Dort werden die Tropfen mechanisch belastet, gedehnt und zerreißen in kleinere Tropfen [24].

Während des Tropfenaufbruchs wirken gleichermaßen deformierende und formehaltende Kräfte. Die wirkenden Kräfte der Zerkleinerung in laminarer Strömungsumgebung stellen Schubspannungen der Reibungskräfte dar, während sich turbulente Strömungen komplexer verhalten. Durch Wirbel entstehen örtliche und

1 Einführung

zeitliche Schwankungen der Strömungsparameter. Die wirksamen Kräfte sind hier Trägheitskräfte, viskose Spannungen und turbulente Scherkräfte [27].

Ziel dieser Arbeit ist es, den Tropfenabriss in laminaren Strömungen qualitativ und quantitativ beschreiben und visualisieren zu können. Davon ausgehend kann das Verhalten des Modells für höhere Reynoldszahlen beschrieben werden, damit später die Nachbildung des Tropfenabrisse im turbulenten Regime erfolgen kann. Die Turbulenz in Kombination mit der Betrachtung von Tropfen in der Größenordnung weniger Mikrometer ($0,1\mu m - 1\mu m$) machen Experimente in diesem Bereich äußerst komplex und kostenintensiv, weshalb die zunehmend bedeutsame numerische Simulation eine sinnvolle Alternative darstellt. Zusätzlich ist auch der Einfluss einer Scherrate der Tropfenumgebung auf die Tropfendeformation zu integrieren.

Dabei wird zunächst der aktuelle Stand der Literatur erhoben, um schließlich einen aktuellen Vergleichsstandard zur Gegenüberstellung aufzusetzen. Ein tieferes Verständnis für das Deformationsverhalten von Tropfen in laminaren und turbulenten Strömungen fördert den Wissensstand emulgiertechnischer Problemstellungen und hilft dabei, die Produkteigenschaften unter den bestimmten Strömungsverhältnissen gezielter definieren zu können.

Die numerische Simulation der Zerkleinerung von Tropfen im mehrphasigen Bereich erfolgt mit der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) und der OpenLB Bibliothek für die Programmiersprache C++. Die Lattice-Boltzmann-Methode eignet sich hervorragend für Simulationen im Bereich Turbulenz und Mehrphasenströmung. Anders als konventionelle Simulationsmethoden, wie die Finite-Volumen-Methode (FVM), ist die LBM gut parallelisierbar, was speziell bei den hier geforderten, rechenintensiven Simulationen einen großen Vorteil darstellt. Durch die Parallelität von Hardware kann eine Steigerung der Rechenleistung erfolgen. Daraus müssen sich Probleme möglichst in unabhängige Teilprobleme zerlegen lassen, damit diese Parallelität effektiv ausgenutzt werden kann. Dies ist mit der Lattice-Boltzmann-Methode möglich. Durch die einfache Aufteilung des Rechengitters ist die LBM speziell als Simulationsmethode für komplexe Geometrien und Körper geeignet [19], [18], [22].

In Kapitel 2 und 3 werden die notwendigen theoretischen Grundlagen im Bereich Strömungsmechanik und Lattice-Boltzmann-Methode gelegt. Anschließend folgt in Kapitel 4 eine Erhebung des aktuellen wissenschaftlichen Stands, insbesondere auf Basis von Komrakova et al. [15] und Kusumaatmaja et al. [32], auf dessen Grundlage Lösungsansätze für die hier zu bearbeitende Problemstellung dargestellt werden. Diese Ansätze werden in Kapitel 5 und 6 mit numerischen Experimenten implementiert sowie anschließend analysiert und ausgewertet, so dass ein Ausblick auf zukünftige Ansätze in diesem Forschungsbereich in Kapitel 7 möglich ist.

2 Grundlagen der Strömungsmechanik

2.1 Inkompressible Strömungen

Die quantitative Beschreibung einer Strömung erfolgt in jedem Punkt $\vec{x} = (x, y, z)$ des betrachteten Feldes zu jeder Zeit t durch die Größen Geschwindigkeit $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$, Druck p , Dichte ρ und Temperatur T . Im Bereich der Kontinuumsmechanik sind die sechs abhängigen Variablen als Funktion der vier unabhängigen Variablen x, y, z und t auszudrücken. Die Zusammenhänge dieser Größen formulieren die physikalischen Grundgleichungen der Strömungslehre, welche als Erhaltungssätze formuliert sind [28].

Im folgenden Kapitel werden Grundbegriffe der Strömungsmechanik definiert und die nötigen Gleichungen eingeführt, um ein mathematisches Modell für die Beschreibung der zu simulierenden Strömung zu erstellen. Als Hauptliteraturquelle dienen Standardwerke der Strömungsmechanik von Oertel et al. [26] und Prandtl et al. [28], so dass aus Gründen der Einfachheit an einigen Stellen wiederholtes Referenzieren vernachlässigt wird.

2.1.1 Grundbegriffe der Strömungsmechanik

Emulsionen sind fließfähige und disperse Systeme. Ihre Eigenschaften und struktureller Aufbau werden durch ihre rheologischen Eigenschaften angegeben. Die charakteristischste rheologische Größe ist die dynamische Viskosität η mit $[\eta] = Pa \cdot s$, so wie die kinematische Viskosität ν mit $[\nu] = m^2/s$. Die Viskosität beschreibt die Zähflüssigkeit eines Fluids und damit den Widerstand gegen das Fließen [23]. Sie wird mit

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau(\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}}, \quad (2.1)$$

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (2.2)$$

beschrieben. Viskosität ist nicht direkt messbar, sondern eine aus Schubspannung $\tau = \frac{F}{A}$, mit $[\tau] = N/m^2$, und Scherrate $\dot{\gamma} = \frac{dv}{dy} = \frac{v}{h}$, mit $[\dot{\gamma}] = 1/s$, abgeleitete Größe [13]. Die Schubspannung setzt sich aus der Scherkraft F und der Plattenfläche A zusammen. Die Scherrate setzt sich aus der Geschwindigkeit v und der Höhe h zusammen, die auch als infinitesimal kleine Änderungen dv und dy beschrieben werden können, falls $\frac{dv}{dy} = const$ [23].

Abbildung 2.1 zeigt das Zweiplattenmodell, in dem ein Fluid durch eine Relativbewegung zwischen parallelen Platten geschert wird. Zwischen einer ruhenden

und einer mit $v = \text{const}$ bewegten Platte mit dem Abstand h stellt sich ein lineares Geschwindigkeitsprofil $v(y)$ mit $\dot{\gamma} = \text{const}$ ein, die als Couette-Strömung bezeichnet wird [13].

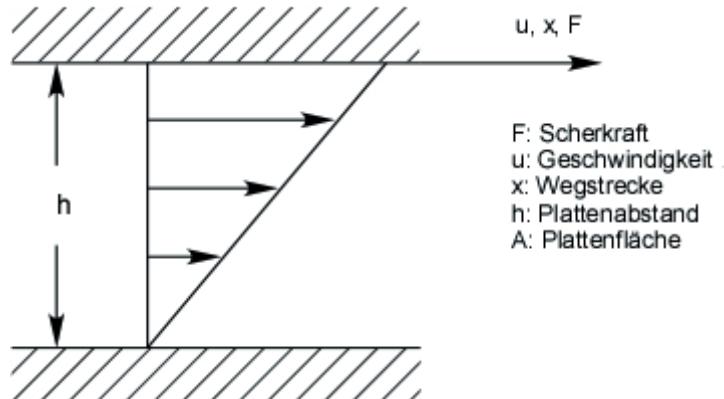


Abbildung 2.1: Scherung eines Fluids im Zweiplattenmodell [13, Abb. 1, Kapitel V].

Die Viskosität hängt mit $\eta = \eta(T, p, \dot{\gamma}, t, c_v, \dots)$ [13] von einer Reihe von Parametern ab, wobei besonders die Temperaturabhängigkeit von Bedeutung ist. Des Weiteren gilt, dass $\tau = \tau(\dot{\gamma})$, nach dessen Verhalten Fluide unterschieden werden können. Bei Emulsionen und Suspensionen verändern Tropfen- und Partikelverteilung sowie Phasenwechselwirkungen die rheologischen Eigenschaften [13]. Ist die Viskosität nicht von der Schergeschwindigkeit abhängig, zeigt das Fluid Newtonsches Verhalten auf. Bekannte Newtonsche Fluide sind Wasser oder niedrigmolekulare Alkohole [23].

Neben rheologischen Eigenschaften müssen auch klassische strömungsmechanische Konzepte betrachtet werden. Die Reynoldszahl Re ist eine dimensionslose Kennzahl zur Beschreibung der Strömungsverhältnisse. Sie ist definiert als das Verhältnis der Trägheitskraft zur Reibungskraft. Nach einer Umformung ergibt sich

$$Re = \frac{\rho v L_c}{\eta} = \frac{v L_c}{\nu}, \quad (2.3)$$

nach [26]. Dabei bezeichnet L_c die charakteristische Länge und v die Strömungsgeschwindigkeit. Anhand des problemabhängigen kritischen Werts Re_{krit} ist zu erkennen, ob es sich um eine laminare oder turbulente Strömung handelt. So beträgt für Rohrströmungen laut [30] der kritische Grenzwert $Re_{\text{krit}} \approx 2300$. Dabei bezeichnet Turbulenz die Bewegung von Fluiden, bei der in weiten Bereichen Verwirbelungen der Strömungsschichten auftreten, siehe Abbildung 2.2. Die räumlichen und

zeitlichen Komponenten einer turbulenten Strömung fluktuieren räumlich und es herrscht eine starke Durchmischung, die einen erhöhten Diffusionskoeffizienten zur Folge hat [30], [31].

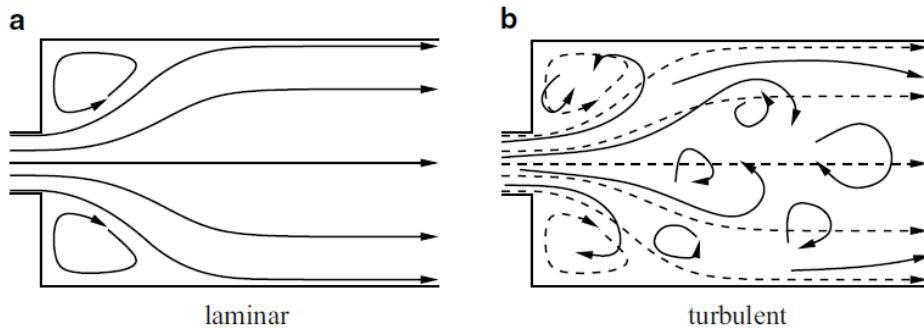


Abbildung 2.2: Laminare und turbulente Strömungen [31, Abb. 6.1].

Die Machzahl Ma ist eine weitere wichtige dimensionslose Kennzahl der Strömungsmechanik. Sie gibt mit

$$Ma = \frac{v}{c_s} \quad (2.4)$$

das Verhältnis der Strömungsgeschwindigkeit v eines Körpers oder Fluids zur Schallgeschwindigkeit c_s des umgebenden Fluids an [26]. Mittels der Machzahl lassen sich Strömungen in verschiedene Bereiche aufteilen. Je nach Strömungsbereich treten demnach unterschiedliche physikalische Phänomene auf, daher ist die Machzahl eine wichtige Kennzahl zur Auswahl der Lösungsansätze. Die Machzahl steht des Weiteren mit anderen dimensionslosen Kennzahlen in einem Verhältnis. Mittels der Knudsenzahl Kn kann mit $Kn = \alpha \frac{Ma}{Re}$ die Reynoldszahl und die Machzahl über den konstanten numerischen Faktor α in Relation gebracht werden [19]. Dabei ist die Knudsenzahl

$$Kn = \frac{\lambda}{l} \quad (2.5)$$

eine weitere dimensionslose Kennzahl, die mit der freien Weglänge λ und der charakteristischen Länge l das Verhalten von Gasströmungen beschreibt [26], [19].

Die Schallgeschwindigkeit c_s entspricht der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Schallwellen in einem Medium und damit einer Signalgeschwindigkeit. Mit der Schallgeschwindigkeit können Störungen im Strömungsfeld übertragen werden [26]. Sie kann mit

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = k \cdot \frac{p}{\rho} = k R_s T = k \frac{R}{\tilde{M}} T \quad (2.6)$$

angegeben werden. Das Fluid, über das die Schallwelle hinweg läuft, weist gemäß [26] eine Störung des Drucks dp , der Dichte $d\rho$ und der Geschwindigkeit dv auf. Kleine Störungen verbreiten sich verlustfrei und damit isentrop mit $\partial s / \partial t = 0$, so dass die spezifische Entropie s sich über die Zeit t nicht verändert [26]. Mit der Gleichung der isentropen Zustandsänderung und der idealen Gasgleichung lässt sich die Schallgeschwindigkeit gemäß Gleichnung (2.6) umformulieren [26]. Mit der spezifischen Gaskonstante R_s , der allgemeinen Gaskonstante $R = 8,314$, mit $[R] = J/mol \cdot K$, dem Isentropenexponenten k und der Molmasse \tilde{M} . Für die Schallgeschwindigkeit ergeben sich damit bedeutende Proportionalitäten zu diesen Größen [26].

Inkompressibilität ist die Fluideigenschaft unter äußerem Krafteinfluss in Form von Druckeinwirkung bei konstanter Temperatur sein Volumen nicht zu verändern und $\rho = const$ gilt. Strömungen von kompressiblen Fluiden können als inkompressibel betrachtet werden, wenn $Ma^2 \ll 1$ [26]. Inkompressibilität ist eine idealisierte Annahme, da in der Realität jedes Medium zu einem gewissen Maße kompressibel ist. Die Inkompressibilität ist für die Strömungsmechanik und speziell für die CFD (Computational Fluid Dynamics), besonders wichtig, da sich so vereinfachte mathematische Formulierungen erschließen [31].

2.1.2 Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung formuliert das Prinzip der Massenerhaltung. Die Fluidmasse eines Volumenelements kann nicht erschaffen oder zerstört werden. Sei die stationäre Strömung eines Fluids Gegenstand der Betrachtung mit $\partial/\partial t = 0$, der Dichte ρ , der Geschwindigkeit $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$, dem Massenstrom $\dot{m} = m/t$ und den Raumkoordinaten $\vec{x} = (x, y, z)$, so ergibt sich nach [26]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}). \quad (2.7)$$

Da für ein imkompressibles Fluid eine konstante Dichte $\rho = const$ angenommen werden kann, vereinfacht sich die Formel mit $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ zu

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0. \quad (2.8)$$

2.1.3 Navier-Stokes-Gleichung

Die inkompressible Navier-Stokes-Gleichung (kurz NSG) beschreibt die Impulserhaltung für Strömungen. Die zeitliche Änderung des Impulses setzt sich zusammen aus der Differenz der ein- und austretenden Impulsströme und den auf das Volumenelement wirkenden Volumenkräften und Spannungen [26]. Volumenkräfte wirken auf die im System vorliegende Masse, wie beispielsweise die Schwerkraft und werden als $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ bezeichnet mit $[\vec{k}] = N/m^3$ [26]. Mit Vereinfachungen der Spannungen, der Inkompressibilität $\rho = \text{const}$ und der Kontinuitätsgleichung $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ gemäß [26], ergibt sich letztendlich in koordinatenfreier Schreibweise

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = \vec{k} - \nabla p + \nu \Delta \vec{v}, \quad (2.9)$$

wobei $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ bezeichnet. Die exakte Lösung für die Navier-Stokes-Gleichung ist nur in wenigen, stark vereinfachten Fällen bekannt, weshalb die Annäherung durch numerische Lösungsverfahren notwendig ist [31].

2.1.4 Energieerhaltung und Zustandsgleichung

Auch für die Energie gilt der Grundsatz der Erhaltung. Für die Energie einer Strömung gilt in einer stationären ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) und reibungsfreien ($\eta = 0$) Strömung, dass die Änderung des Energiestroms der Leistung der wirkenden Kräfte und Wärmeströme entspricht [17], [9]. Mit

$$\dot{E} = \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \dot{m} = \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \rho v A \quad (2.10)$$

wird der Energiestrom \dot{E} aus der massenspezifischen inneren Energie e und der massenspezifischen kinetischen Energie $v^2/2$ zusammengesetzt. Aus dem Massenstrom $\dot{m} = \text{const}$ folgt $\rho v A = \text{const}$ und mit der Definition der massenspezifischen Enthalpie $h = e + p/\rho$ ergibt sich für die Energieerhaltung:

$$h + \frac{1}{2} v^2 + gz = -q = \text{const}. \quad (2.11)$$

Wird dem System keine Wärme zu- oder abgeführt und bleibt die innere Energie unverändert, so ist der Energiesatz im stationären, reibungsfreien, inkompressiblen Strömungsfall ohne Energieaustausch mit der Umgebung mit der Bernoulli-Gleichung identisch [26].

Weitere Gleichungen zur Verhaltensbeschreibung von Fluiden stellen die Zustandsgleichungen dar. Wie die Erhaltungssätze können diese Gleichungen dazu dienen, das Gleichungssystem einer Strömung zu lösen, indem genug Gleichungen vorliegen, um die benötigte Anzahl an unbekannten Variablen zu bestimmen [26].

Die wichtigste der Zustandsgleichungen ist die ideale Gasgleichung. Sie gehört zu den thermischen Zustandsgleichungen und basiert auf der kinetischen Gastheorie [21], [26]. Sie beschreibt mit

$$pV = NRT \quad (2.12)$$

den Zustand eines Gases bezüglich seiner Zustandsvariablen und setzt diese mit der allgemeinen Gaskonstanten R bzw. der spezifischen Gaskonstante R_s in Verbindung. Eine weitere bekannte thermische Zustandsgleichung stellt die Van-der-Waals-Gleichung dar, welche die Gasgleichung für reale Gase mit erweiterten Parametern mit

$$p = \frac{RT}{V_m - b} \cdot \frac{a}{V_m^2} \quad (2.13)$$

beschreibt [8]. Dabei sind a und b materialspezifische Konstanten und V_m bezeichnet das molare Volumen mit $[V_m] = m^3/mol$.

2.2 Mehrphasenströmungen

Mehrphasenströmungen sind definiert als Strömungen verschiedener Phasen im Sinne verschiedener Aggregatzustände. Strömungen, die aus derselben Komponente oder verschiedenen chemikalischen Komponenten bestehen, sind zu unterscheiden. Beispielhaft hierfür ist eine Öl/Wasser-Emulsion als Multikomponenten-Mehrphasenströmung, während die Strömung von flüssigem Wasser mit verdampften Gasanteilen eine Einzelkomponenten-Mehrphasenströmung darstellt. Da besonders Gemische aus zwei Komponenten in der Praxis üblich sind, werden diese gesondert als Zweiphasenströmung bezeichnet [13].

Mehrphasenströmungen mit mehreren chemischen Komponenten müssen nach der Löslichkeit ihrer Komponenten untereinander noch weiter unterteilt werden. Es sind völlig ineinander lösliche Mischungen wie Wasser und niedrige Alkohole sowie unlösliche Mischungen wie Wasser und Öl zu unterscheiden [4], [3].

Im Fall einer Mehrphasenströmung mit mehreren chemischen Komponenten, die ineinander unlöslich sind, bildet sich eine Grenzfläche zwischen beiden Phasen aus, die physikalische Effekte wie Segregation oder Oberflächenspannung zu Folge hat [26]. Diese Phasenkopplung gilt es besonders zu beachten und wird im Laufe dieser

Arbeit im Fokus stehen. Sie wird in der Simulation durch die Betrachtung und Implementierung essenzieller intermolekularer Interaktionen und Wechselwirkungen betrachtet.

2.2.1 Young-Laplace-Gleichung

In Mehrphasenströmungen bildet meist die dispergierte Phase kleine Partikel umgeben von der anderen, kontinuierlichen Phase. Beide Phasen sind nicht ineinander löslich. Dies können im Fall einer Suspension Feststoffpartikel oder Fluidpartikel bei einer Emulsion sein. In dem hier thematisierten Fall von Emulsionen bilden sich in der Flüssig-Flüssig Mischung Tropfen. Auch vorstellbar wären Blasen oder Partikel in Gasform [13]. Die von der kontinuierlichen Phase umgebenden Tropfen bilden eine Oberflächenspannung σ und Grenzflächenspannung γ aus. Diese Spannungen basieren auf Wechselwirkungen zwischen den Molekülen, wie in der Abb. 2.3 dargestellten Grenzfläche. Es wirken unterschiedliche intermolekulare Kräfte an der trennenden Grenzfläche zweier Medien mit unterschiedlichen Dichten ρ_1 und ρ_2 . An der Oberfläche entsteht somit eine resultierende Kraft \vec{F} , welche die Oberflächenspannung ausbildet mit $\sigma = |\vec{F}|/L_{\text{Berandung}}$ [26].

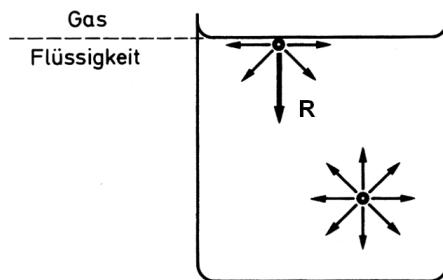


Abbildung 2.3: Grenzflächenspannung zwischen Wasser und Gas [26, Abb. 2.7].

Die Oberflächenspannung stellt die Tendenz einer Flüssigkeit dar, die eigene Oberfläche zu minimieren und ist damit für die kugelförmige Form von Tropfen verantwortlich. Die Kugel ist im dreidimensionalen Raum die effizienteste Form zur Oberflächenminimierung. Aufgrund der Oberflächenspannung ist der Innendruck p_i eines Tropfens höher als der Druck p_a im umgebenden Medium. Die Druckdifferenz $\Delta p = p_i - p_a$ ist von der Oberflächenspannung σ und den Radien R_i abhängig. Ihre Beziehung ist durch die Young-Laplace-Gleichung [26] mit

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.14)$$

2 Grundlagen der Strömungsmechanik

gegeben. Im Falle einer Kugel gilt $R_1 = R_2 = R$ und somit wird die obige Gleichung vereinfacht zu:

$$\Delta p = \frac{2\sigma}{R}. \quad (2.15)$$

Im zweidimensionalen Fall vereinfacht sich die Formel weiter, da nur noch ein einziger Radius vorliegt.

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Im folgenden Kapitel werden Grundbegriffe der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) definiert, Fallbeispiele erläutert und die nötigen Gleichungen eingeführt, um ein mathematisches Modell für die Beschreibung der zu simulierenden zweiphasigen Scherströmung im laminaren und, falls möglich, transitionell turbulenten Regime zu erstellen. Als Hauptliteraturquelle dient Krüger et al. [19], so dass aus Gründen der Einfachheit an einigen Stellen auf Referenzen verzichtet wird.

3.1 Einführung CFD

Die numerische Simulation dient der approximativen Vorhersage von Sachverhalten unter vorgegebenen Randbedingungen. Sie basieren auf mathematischen Modellen und bilden Wirkungszusammenhänge in Form von Algorithmen und Computerprogrammen ab. Besonders dort, wo Experimente aus Kostengründen, ethischen oder technischen Gründen nicht umsetzbar sind, können Simulationen eine wertvolle Alternative darstellen. Für numerische Simulationen werden diskrete Modelle benötigt. Kontinuierliche Modelle, wie Differenzialgleichungssysteme, müssen daher diskretisiert werden [18].

Bei Strömungsproblemen geschieht dies durch die Zerlegung eines durchströmten Raums in endlich viele Rechengitter oder auch Lattices. Für jeden dieser Teilräume werden die Strömungsparameter berechnet. Werden die Teillösungen zusammengesetzt, resultiert eine Verteilung der Parameter im gesamten Raum. Fluidströmungen können dabei unterschiedlich betrachtet werden. Eine geeignete Charakterisierung stellt die Längenskala $[L] = m$ dar. Auch die Zeit $[t] = s$ wäre eine mögliche Skala [18].

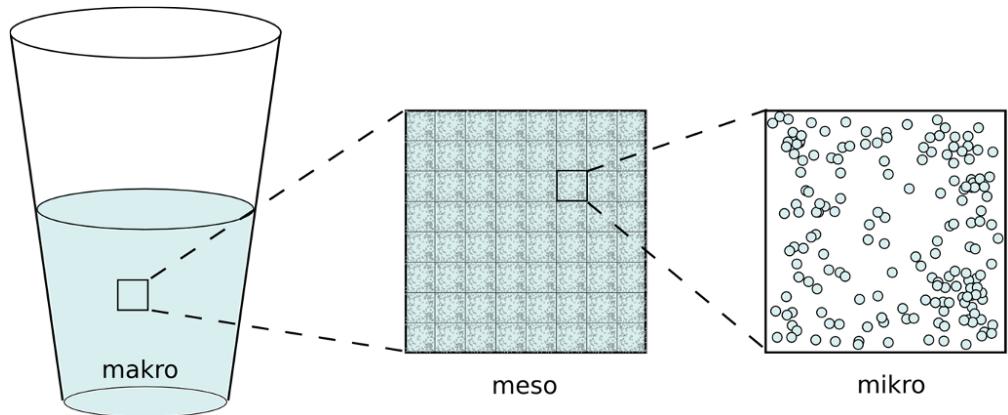


Abbildung 3.1: Betrachtete Skala bei einer Fluidsimulation [18, Abb.3].

So kann sich ein Fluid modellhaft, gemäß Abbildung 3.1 makroskopisch, mesosko-

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

pisch oder mikroskopisch beschreiben lassen. Dabei verhält sich die Zunahme der Detailschärfe proportional zur Intensität der Rechenleistung. Die naheliegendste Längenskala, die makroskopische, vernachlässigt viele Eigenschaften des Fluids, während die mikroskopische Längenskala die exakteste Betrachtungsweise darstellt. Jedoch ist sie äußerst rechenintensiv und damit für die meisten Simulationen ungeeignet [19], [18].

In den letzten Jahrzehnten hat sich, neben der mikro- und makroskopischen Betrachtung, die mesoskopische Herangehensweise als Mittelweg durchgesetzt. Der mesoskopischen Betrachtung liegt die Boltzmann-Gleichung zugrunde. Ähnlich wie bei der makroskopischen Betrachtung wird das Verhalten einzelner Teile vernachlässigt, jedoch werden mikroskopische Geschwindigkeiten als Verteilung erfasst. Damit schlägt die mesoskopische Betrachtung eine Brücke zwischen makro- und mikroskopischer Längenskala.

Die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) konnte in den letzten Jahrzehnten den Zusammenhang von mesoskopischen zu makroskopischen Modellen, zur Beschreibung inkompressibler Strömungen, festigen. Damit wird eine vereinfachte Boltzmann-Gleichung gelöst, mit dem Ziel eine numerische Lösung der inkompressiblem Navier-Stokes-Gleichung zu erhalten [19], [18]. Die LBM verfügt über eine große Detailtiefe, während der rechnerische Aufwand mit anderen Simulationsmethoden vergleichbar ist. Dazu kann die LBM aktuell verfügbare parallele Mikroprozessorarchitektur deutlich besser ausnutzen und ist strukturell algorithmisch weniger komplex [22], [10]. Die Parallelität ist ein großer Vorteil der LBM. Ausschließlich durch die Parallelität von Hardware kann eine Steigerung der Rechenleistung erfolgen. Daher müssen sich Probleme möglichst in unabhängige Teilprobleme zerlegen lassen, damit diese Parallelität effektiv ausgenutzt werden kann [18], [10].

3.2 Die Boltzmann-Gleichung

Die Grundlage der LBM stellt die Boltzmann-Gleichung dar [19]. Sie beschreibt die totale Zeitableitung der Verteilung als Kollisionsintegral und ist damit eine Gleichung für die statistische Verteilung von Teilchen in einem bestimmten Medium [6]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \underbrace{\vec{v} \cdot \nabla \vec{x}}_{Transportterm} + \underbrace{\frac{\vec{F}}{m} \nabla \vec{v}}_{Feldterm} \right) f(\vec{x}, \vec{v}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{Kollision} = \Omega(f). \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet \vec{F} die äußere Kraft, m die Masse der Teilchen und $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$ die Verteilungsdichte. Das Kollisionsintegral beschreibt den Teil der Gleichung (3.1), der durch Kollision einzelner Teile entsteht und kann mit dem Kollisionsoperator $\Omega(f)$ abgekürzt werden. Die Gleichung soll die Bestimmung der Verteilungsdichte $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$, so wie eine Beschreibung von Transportprozessen und der Dissipation aus Stoßprozessen ermöglichen [34].

3.3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Der ursprüngliche Kollisionsoperator $\Omega(f)$ beinhaltet alle möglichen Kollisionen zweier Partikel für jede Art der wirkenden intermolekularen Kräfte. Viele Kollisionsoperatoren in der LBM basieren auf dem vereinfachten Modell von Bhatnagar, Gross und Krook [2], dem BGK-Kollisionsoperator [19]

$$\Omega(f) = \frac{1}{\tau} (f - f^{eq}). \quad (3.2)$$

Dabei bezeichnet τ die Relaxationszeit. Die Gleichung beschreibt die Relaxation der Verteilungsfunktion f zur Gleichgewichtsverteilung f^{eq} . Mit dem BGK-Boltzmann-Kollisionsoperator wird die kräftefreie Version der Boltzmann-Gleichung aus Gleichung (3.1) nun zur BGK-Boltzmann-Gleichung

$$\frac{d}{dt} f = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{x} \right) f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}) \quad (3.3)$$

Dabei ist τ die mittlere freie Zeit zwischen Kollisionen, dargestellt aus dem mittleren freien Weg l_f und der mittleren, absoluten Thermalgeschwindigkeit \bar{c} mit

$$\tau = \frac{l_f}{\bar{c}}, \quad l_f = \sqrt{\frac{8}{\pi R T}} \nu, \quad \bar{c} = \sqrt{\frac{8}{\pi} R T}. \quad (3.4)$$

Dabei erhält der BGK-Boltzmann-Operator das H -Theorem und die Kollision-Invarianten Masse, Impuls und Energie [22]. Der BGK-Kollisionsoperator ermöglicht eine vereinfachte Form der Boltzmann-Gleichung. Es gibt auch andere LB-Modelle, wie das MRT Modell [19] oder das Entropie Modell [19], jedoch wird in dieser Arbeit das BGK-Modell als Grundlage genutzt.

Um die BGK-Boltzmann-Gleichung nach Gleichung (3.3) zu lösen, muss sie diskretisiert werden [18], [22]. Als erster Schritt erfolgt die Einführung eines diskreten Geschwindigkeitsraumes. Für Simulationen im 2D und 3D Bereich werden standardmäßig die Modelle $D2Q9$ und $D3Q19$ verwendet. Gemäß dem $DdQq$ Modell bezeichnet d die Anzahl der Dimensionen und q die Geschwindigkeiten \vec{c}_i , wobei $i = 0, 1, \dots, q - 1$ [19]. Die Geschwindigkeiten für den 2D Fall in Abbildung 3.2, mit dem $D2Q9$ Modell, betragen [22]:

$$\begin{aligned} \vec{c}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{c}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{c}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \vec{c}_3 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{c}_4 &= \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, & \vec{c}_5 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \vec{c}_6 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{c}_7 &= \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, & \vec{c}_8 &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

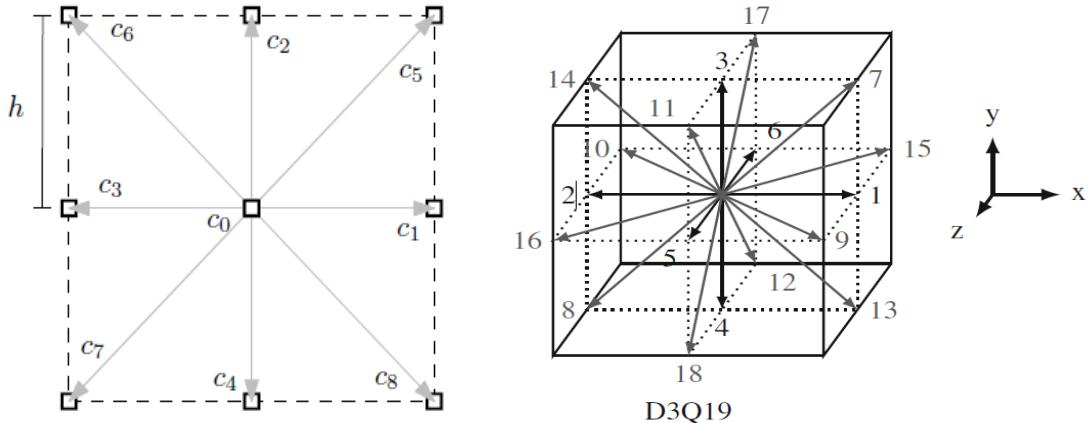


Abbildung 3.2: links $D2Q9$ [22], rechts $D3Q19$ [19, Fig. 3.4].

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Die zugehörigen Gewichte w_i sind im Falle von $D2Q9$ definiert als

$$w_i = \begin{cases} \frac{4}{9}, & i = 0 \\ \frac{1}{9}, & i = 1, 2, 3, 4 \\ \frac{1}{36}, & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases}, \quad (3.6)$$

gemäß [22], [35]. Analog lassen sich für den 3D Fall mit $D3Q19$ alle Vektoren aufstellen, so dass nach Abbildung 3.2 ein Lattice Schema entsteht [19]. Auch hier können sich die Gewichtsdaten w_i darstellen lassen. Mit den Gewichten können die Momente von f approximiert werden [22]. Dabei ist

$$f_i(\vec{x}, t) := w_i f(\vec{x}, \vec{c}_i, t). \quad (3.7)$$

Die Verteilungsfunktion $f_i(\vec{x}, t)$ bezeichnet bei der Lattice Position \vec{x} und Zeit t die Partikelpopulation, welche sich in Richtung \vec{c}_i bewegt. Während die Verteilungsfunktion f kontinuierlich war, kennzeichnet die Notation des Index i bei f_i , dass alle Argumentvariablen diskret sind. Die Fluidehdichte ist mit

$$\rho(\vec{x}, t) := \sum_{i=0}^{q-1} f_i(\vec{x}, t) \quad (3.8)$$

definiert. Die makroskopische Geschwindigkeit \vec{v} bildet sich aus f_i , ρ und den mikroskopischen Geschwindigkeiten \vec{c}_i mit

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \sum_{i=0}^{q-1} f_i(\vec{x}, t) \vec{c}_i, \quad (3.9)$$

gemäß [35], [19]. Die Gleichgewichtsfunktion f^{eq} ist in diskreter Form als approximierte Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$f_i^{eq}(\vec{x}, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{v}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{v})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2c_s^2} \right] \quad (3.10)$$

definiert [19], wobei die skalare Größe c_s nach [19] mit $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ die Schallgeschwindigkeit des Modells beschreibt, siehe Gleichung 2.6. Die Momente der Equilibriumsfunktion f_i^{eq} , die den erhaltenen Größen ρ und \vec{v} entsprechen, sind dieselben,

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

wie die von f_i , so dass sie mit

$$\sum_i f_i^{eq} = \sum_i f_i = \rho, \quad (3.11)$$

$$\sum_i f_i^{eq} \vec{c}_i = \sum_i f_i \vec{c}_i = \rho \vec{v} \quad (3.12)$$

dargestellt werden können. Die Gleichgewichtsfunktion f_i^{eq} ist von den lokalen Größen ρ und \vec{v} gemäß Gleichungen (3.8) und (3.9) abhängig. Wir erhalten insgesamt aus den Gleichungen (3.7), (3.8), (3.9) und (3.10) eine geschwindigkeitsdiskrete BGK-Boltzmann-Gleichung

$$\frac{d}{dt} f_i = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \nabla \vec{x} \right) f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad (3.13)$$

als System aus q Gleichungen für $i = 0, \dots, q$. Mit der Methode der Charakteristiken und dem expliziten Eulerverfahren [1], [19] kann eine Diskretisierung erfolgen und wir erhalten die Lattice-Boltzmann-Gleichung [19], [22] (auch kurz LBG oder LBE für Lattice-Boltzmann-Equation):

$$f_i(\vec{x} + \Delta t \vec{c}_i, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)). \quad (3.14)$$

Dabei beschreibt $\Delta t > 0$ die Zeitschrittweite. Die Größe $\Delta x > 0$ gibt die Entfernung zweier Lattice Knotenpunkte pro Dimension an. Die Diskretisierung des Ortsraumes, der Zeit und der Geschwindigkeit ist so gewählt, dass $\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t$ wieder im Ortsgitter liegt. Die Methode wird in Kollision und Strömen bzw. Collision und Streaming unterteilt, siehe Abbildung 3.3. Es erfolgt die Transformation der Lattice-Boltzmann-Gleichung in ein explizites Verfahren. Wobei der Kollisionsschritt lokal stattfindet und mit

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)) \quad (3.15)$$

beschrieben wird. Dabei bezeichnet f_i^* die Verteilungsfunktion nach der Kollision und f_i^{eq} ist mit Gleichung (3.10) aus f_i zu erhalten.

Das Streaming hingegen findet nicht lokal statt, sondern hängt von den direkten Nachbar-Knotenpunkten ab. Dies wird auch Propagation genannt und wird mit

$$f_i(\vec{x} + \Delta t \vec{c}_i, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}, t) \quad (3.16)$$

ausgedrückt [22]. Nach der Kollision und der Strömung der resultierenden Verteilungsfunktion f_i^* auf die Nachbarknoten ist ein Zeitschritt vergangen und wird wiederholt [19].

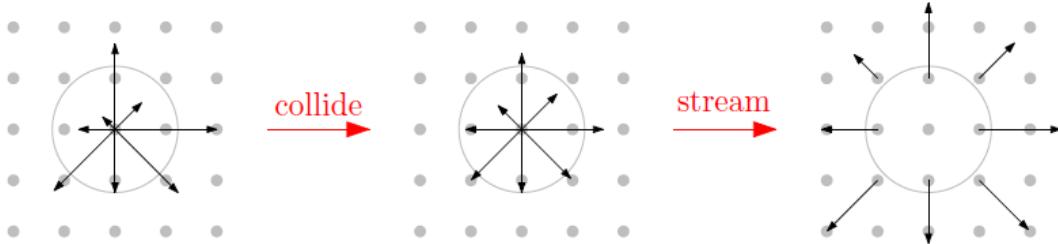


Abbildung 3.3: Kollision und Streaming in der Lattice Zelle mit links vor dem Stream Step und rechts danach [22].

Es ist zu beachten, dass die Lattice-Boltzmann-Methoden nur für bestimmte Rahmenbedingungen valide sind. Dazu gehören niedrige Knudsen- und Machzahlen. Für verdünnte Gase oder Mikrofluide ist diese Methode weniger geeignet [25], [19].

Die einfachste Möglichkeit der Initialisierung zu Beginn, ist bei $t = 0$ mit $f_i^{eq}[\rho(\vec{x}, t = 0), v(\vec{x}, t = 0)]$ [19]. Dafür werden meist die Werte $\rho = 1$ und $v = 0$ genutzt. Dabei folgt die generische LBM folgendem Schema gemäß [19]:

1. Berechnung der makroskopischen Momente $\rho(\vec{x}, t)$ und $v(\vec{x}, t)$ aus $f_i(\vec{x}, t)$, gemäß Gleichung 3.8 und 3.9.
2. Berechnung der Gleichgewichtsverteilung f_i^{eq} , gemäß Gleichung 3.10.
3. Bei Bedarf Ausgabe der makroskopischen Größen ρ, v und σ zur Visualisierung. Dabei bezeichnet $\sigma(\vec{x}, t)$ den viskosen Stresstensor [19].
4. Kollisionsschritt f_i, f_i^{eq} zu f_i^* , gemäß Gleichung 3.15.
5. Strömungsschritt f_i^* zu f_i , gemäß Gleichung 3.16.
6. Nächster Zeitschritt von t zu $t + \Delta t$ und erneuter Schleifenstart bis die Abbruchbedingung des zuletzt definierten Zeitschritts t_i oder Konvergenz erreicht wurde.

Es können, je nach Art der Simulation, unterschiedliche Randbedingungen und Kräfte eingebracht werden. So liegt in dieser Arbeit die Einbindung zwischen Schritt 2 und 5, sowie die Implementierung im OpenLB Code im Fokus.

3.4 Randbedingungen der Tropfendefor-mation

Dieses Unterkapitel gibt einen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Randbedingungen, die zur Beschreibung einer Mehrphasenströmung notwendig sind.

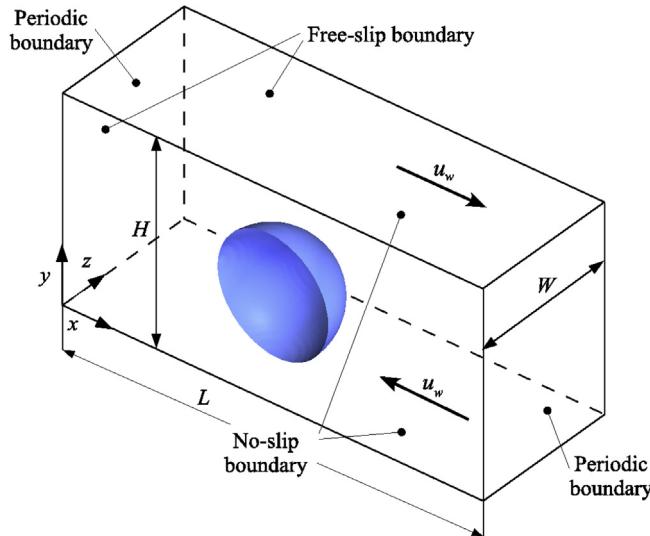


Abbildung 3.4: Tropfendefor-mation unter Scherkraft [15, Fig.2].

Gemäß Abbildung 3.4 besteht die Problemstellung dieser Arbeit aus einem dreidimensionalen Raum mit zwei parallelen, bewegten Wänden, welcher in x -Richtung durchströmt wird und einem Zweiphasensystem, in dem die dispergierte Phase II sich als Tropfen in der kontinuierlichen Phase I anlagert. Die Fluide sind nicht miteinander mischbar. Dabei ist zu erwähnen, dass in der Abbildung 3.4 aus der Publikation von Komrakova et al. [15] eine Gebietsteilung aufgrund laminarer Strömungsumgebung vorliegt. In dieser Arbeit liegt der Ursprung nicht im Tropfenumgebung und es wird der gesamte Tropfen im Raum betrachtet. Das Modell von Komrakova et al. ist für Turbulenzdarstellung ungeeignet, da sich Turbulenz dreidimensional und unregelmäßig verhält. In Anbetracht zukünftiger Arbeiten im turbulenten Regime ist die Simulation des vollständigen Modells essenziell.

Diese Bedingungen müssen in die Lattice-Boltzmann-Methode implementiert werden. Durch Randbedingungen einzubinden sind, angelehnt an [15]:

1. Verhalten zwischen zwei bewegten Wänden in y -Richtung und den Fluiden, unter einer Wandscherung mit v_{Wand} und $\dot{\gamma}$.
2. Verhalten zwischen zwei starren Wänden in z -Richtung und den Fluiden.
3. Ein- und Ausströmung.

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Neben diesen Randbedingungen gilt es noch die Phasenkopplung zwischen Phase I und Phase II als Modellgleichung über das Free Energy Modell einzubeziehen.

Im betrachteten dreidimensionalen Raum gilt es die Einflüsse der bewegenden Wände und der vorhandenen, aber nicht beeinflussenden Wände zu unterscheiden. Dies geschieht mit der Slip und No-Slip Bedingung [15]. Mit der No-Slip Randbedingung wird die Haftbedingung für die bewegten Wände in y -Richtung miteinbezogen. Sie besagt, dass das Fluid an diesen Wänden keine Strömungsgeschwindigkeit aufweist. Es liegt keine Reibung zwischen Fluid und Oberflächen vor. Mathematisch dargestellt mit der Randgeschwindigkeit \vec{V}_B , der Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} und des Tangentialvektors \vec{t} ist die No-Slip Randbedingung $[\vec{v} - \vec{V}_B] \cdot \vec{t} = 0$ [19]. Dies basiert auf der Dirichlet-Bedingung, für die gilt $\vec{v}(\vec{x}_B, t) = \vec{V}_B(\vec{x}_B, t)$ [19].

Die Slip, oder auch Free-Slip, Randbedingung wird für die Begrenzungen des betrachteten 3D Raums verwendet, die keine beeinflussenden, festen Oberflächen darstellen. Sie ist eine Symmetrie Bedingung, in der diese Begrenzungen keinen Einfluss auf die Fluidgeschwindigkeit ausüben. Sie wird mit der Neumann-Bedingung dargestellt, in der $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}(\vec{x}_B, t) = \vec{T}_B(\vec{x}_B, t)$ gilt [19]. Dabei ist \vec{n} der Normalenvektor des Rands, $\vec{\sigma}$ bezeichnet die Summe aller viskosen Einflüsse und Drücke sowie der Haftungsvektor \vec{T}_B an der Begrenzung [19], [15].

Die zu behandelnde Thematik kann als transiente Strömung betrachtet werden, in der der Tropfen aufgrund der Strömungsumgebung seinen Initialzustand verändert und schließlich zerreißt. Es ist notwendig eine Ein- und Ausflussbedingung zu schaffen. Dies wird durch eine periodische Randbedingung und der Annahme periodischer Ränder orthogonal zur x -Richtung geschaffen. Diese treffen die Annahme, dass Strömungsteilchen, welche den betrachteten Raum mit der Länge \vec{L} an einer äußeren Grenze $\vec{x} = \vec{L}$ verlassen, auf der gegenüberliegenden $\vec{x} = 0$ Seite wieder eintreten. Dies kann für die NSG, nach Gleichung (2.9), mit $\rho(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x} + \vec{L}, t)$ beziehungsweise $\rho\vec{v}(\vec{x}, t) = \rho\vec{v}(\vec{x} + \vec{L}, t)$ implementiert werden [19], [15]. Angewandt auf die LBM bedeutet dies, dass eingehende Populationen f_i^* den austretenden entsprechen mit

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_i^*(\vec{x} + \vec{L}, t) \quad (3.17)$$

oder alternativ

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x} + \vec{L} - \vec{c}_i \Delta t, t), \quad (3.18)$$

gemäß [19]. Es gilt demnach die Slip, No-Slip und Perdiodizitäts Randbedingung für den Tropfenabriss in einer scherbelasteten Strömung zu betrachten.

Feste Begrenzungen, hier durch die parallelen Wände dargestellt, werden durch die Bounce-Back Methode, zu deutsch auch Rückprall, berücksichtigt. Es stellt eine Methode dar, um Randbedingungen für Wände einzubinden. Partikel kollidieren mit der Wand und werden durch diese in die entgegengesetzte Richtung zurückgeworfen, siehe Abbildung 3.5, so dass $\vec{v}(t + \Delta t) = -\vec{v}(t)$ gilt.

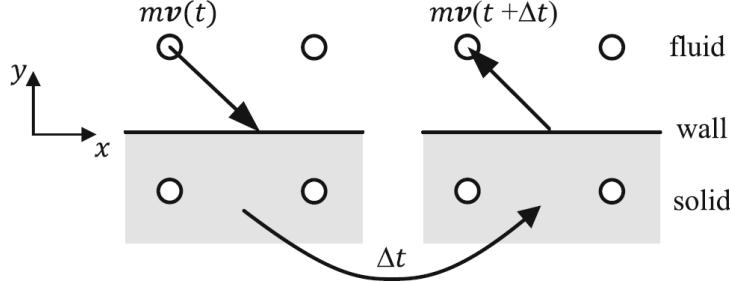


Abbildung 3.5: Die Bounce-Back Methode [19, Fig. 5.10].

Die Bounce-Back Methode kann unterschiedlich realisiert werden. Grundsätzlich gibt es die Fullway-Bounce-Back und Halfway-Bounce-Back Methode. In der vollständigen Rückprallbedingung wandern die Partikel den kompletten Weg (Streaming) bis zum festen Knotenpunkt (Collision) und werden dort umgekehrt (Streaming) [19]. In der Halfway Methode findet die Inversion bereits auf halber Strecke, während dem ersten Streaming Schritt, statt [19]. Zudem unterscheiden sich ruhende

$$f_{i,ruhend}(\vec{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}_b, t) \quad (3.19)$$

und bewegte Wände

$$f_{i,bewegend}(\vec{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}_b, t) - 2w_i\rho_w \frac{\vec{c}_i \vec{v}_w}{c_s^2}. \quad (3.20)$$

Mit \vec{x}_b werden die Rand-Knotenpunkte, auch Boundary Nodes, bezeichnet. Populationen f_i , die zum Zeitpunkt t den Ort \vec{x}_b verlassen, treffen zum Zeitpunkt $t + \frac{\Delta t}{2}$ die Oberfläche der Wand mit der Geschwindigkeit \vec{c}_i . Diese Geschwindigkeit wird mit $-\vec{c}_i$ reflektiert und zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ gelangt die Population zurück zum Ort \vec{x}_b .

Die Bounce-Back Gleichung für eine Dirichlet-Randbedingung [19] mit \vec{v}_w als Wandgeschwindigkeit beschreibt eine bewegte Wand. Dabei steht der Index w für die Wand und $\vec{x}_w = \vec{x}_b + \frac{1}{2}\vec{c}_i\Delta t$ [19].

3.5 Das Free Energy Modell

Die Phasekopplung wird über das Free Energy Modell beschrieben. Es ist neben dem Shan-Chen-Modell [33] eine Möglichkeit zur Simulation von Mehrkomponentenströmungen [10]. Es beschreibt die freie Energie eines Systems in einer bestimmten Anordnung. In kontinuierlichen Strömungen hängt diese Energie von den Strömungsvariablen ab [19]. In Mehrphasenströmungen, wie hier behandelt, beschreibt nach Krüger et al.

$$\vec{\Psi} = \int_V [\Psi_b + \Psi_g] dV + \int_A \Psi_S dA \quad (3.21)$$

die allgemeine Form der freien Energie, mit Ψ_b , Ψ_g und Ψ_S als Funktion von Raum und Zeit [19]. Der Term Ψ_b beschreibt die Bulk Free Energy und führt zu einer Zustandsgleichung, welche die Koexistenz mehrerer Phasen erlaubt [19]. Mit Ψ_g wird der Gradiententerm beschrieben. Dieser Teil der Gleichung beschreibt die freie Energie der Grenzfläche zwischen beiden Phasen [19]. Ψ_S beschreibt die Interaktion des Fluids mit den umgebenden festen Oberflächen [19]. In dieser Arbeit gilt es die Bulk- und Oberflächenthermodynamik des Systems beschreiben zu können.

Der Free Energy Ansatz in dieser Arbeit basiert auf Semperebon et al. 2016 [32] und Komrakova et al. 2014 [15], sowie auf den Algorithmus aus [10]. Daher werden aus Gründen der Einfachheit, speziell in diesem Kapitel, an einigen Stellen auf Referenzen verzichtet. Es werden für jedes Fluid dieselben Dichten und Viskositäten angenommen. Eine kugelförmige Domain eines Fluids mit dem Radius R liegt als dispergierte Phase in einer kontinuierlichen Phase eines anderen Fluids vor, in der sich eine Grenzfläche formt, gemäß Abbildung 3.4 mit den in Kapitel 2 beschriebenen Phänomenen. Da hier zwei Komponenten betrachtet werden, müssen auch zwei Lattices bzw. Gitter angenommen werden. Einzelne Komponentendichten werden mit C_i bezeichnet, so dass in dem hier besprochenen Fall einer Zweikomponentenströmung mit zwei Lattices f_i und g_i

$$\rho = C_1 + C_2, \quad \phi = C_1 - C_2 \quad (3.22)$$

die Dichte ρ und der Ordnungsparameter ϕ definiert sind und

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \phi = \sum_i g_i \quad (3.23)$$

gilt. Dabei bezeichnet C_1 die Komponentendichte der kontinuierlichen Phase und C_2 die der dispergierten Phase. Dabei beschreibt die relative Konzentration der

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Komponenten $\phi = C_1 - C_2$ zu jeder Zeit den Zustand des betrachteten Systems [15]. Bestünde das System aus weiteren Komponenten, müssten weitere Ordnungsparameter eingeführt werden [32]. Um die Strömung einer Emulsion aus zwei Fluiden zu simulieren, werden die Kontinuitätsgleichung (2.8) und Navier-Stokes-Gleichung (2.9) aus Kapitel 2 benötigt, um die Fluidbewegung zu beschreiben, während für die Berücksichtigung der Ordnungsparameter die Konvektions-Diffusionsgleichung nach Cahn und Hilliard [5]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(\phi \vec{v}) = M_\phi \Delta \mu_\phi \quad (3.24)$$

notwendig ist. Die Kontinuitätsgleichung, NSG und Cahn-Hilliard-Gleichung beschreiben folglich die Entwicklung von Dichte, Geschwindigkeit und Ordnungsparametern. Diese Gleichungen gilt es mit einer Annäherung einer Lösung durch Algorithmen mittels LBM zu lösen.

Die Konvektions-Diffusionsgleichung beschreibt allgemein den Transport von makroskopischen Größen wie Energie, Dichte oder Temperatur. In diesem Fall ist dies der Ordnungsparameter ϕ . Dabei bezeichnet $\nabla(\phi \vec{v})$ den Konvektionsterm und $M_\phi \nabla^2 \mu_\phi$ den Diffusionsterm, der die Bewegung der Ordnungsparameter aufgrund von Inhomogenitäten des chemischen Potentials μ erklärt. M_ϕ bezeichnet den Mobilitätsparameter [32]. Das chemische Potential μ kann aus ρ und ϕ , nach Gleichung (3.22) berechnet werden, mit:

$$\mu_\rho = A_1 + A_2 + \frac{\alpha}{4} ((\kappa_1 + \kappa_2)(-\nabla^2 \rho) + (\kappa_2 - \kappa_1)\nabla^2 \phi), \quad (3.25)$$

$$\mu_\phi = A_1 - A_2 + \frac{\alpha}{4} ((\kappa_1 - \kappa_2)(\nabla^2 \rho) - (\kappa_2 + \kappa_1)\nabla^2 \phi). \quad (3.26)$$

Dabei sind A_1 und A_2 als

$$A_1 = \frac{\kappa_1}{8}(\rho + \phi)(\rho + \phi - 2)(\rho + \phi - 1), \quad (3.27)$$

$$A_2 = \frac{\kappa_2}{8}(\rho - \phi)(\rho - \phi - 2)(\rho - \phi - 1) \quad (3.28)$$

definiert. Die Parameter α und κ sind dabei Input Parameter für die Kopplung der beiden Lattices f_i und g_i [10] und werden für die Grenzflächenbreite und Oberflächenspannung σ gemäß Young-Laplace nach Gleichung (2.14) verwendet, mit

$$\Delta p = \frac{2\sigma}{R} = \frac{\alpha}{3R}(\kappa_1 + \kappa_2). \quad (3.29)$$

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

für den dreidimensionalen Fall. Damit können die Ergebnisse der Young-Laplace-Gleichung mit denen der Input Parameter verglichen werden. Um die Kraft zu berechnen, sind zwei Lattice Kopplungen notwendig [10]. Die erste stellt die Gleichung des chemischen Potentials für jeden Lattice dar, mit Gleichung (3.26). Die zweite Lattice Kopplung berechnet aus ρ , ϕ und μ_i die Kraft

$$\vec{F} = -\rho \nabla \mu_\rho - \phi \nabla \mu_\phi. \quad (3.30)$$

Die Kraft \vec{F} wird anschließend in eine vektorfreie, populationsspezifische Schreibweise transformiert mit

$$F_i = w_i \left(\frac{\vec{c}_i - \vec{v}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{v}) \vec{c}_i}{c_s^4} \right) \cdot \vec{F}. \quad (3.31)$$

Dabei wird die Geschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{1}{\rho} \sum_i f_i \vec{c}_i + \frac{\vec{F} \Delta t}{2} \quad (3.32)$$

genutzt, sodass Gleichung (3.9) um einen Kraftbezogenen Term $\vec{F} \Delta t / 2$ erweitert wird. Die Gleichgewichtsverteilungen f_i^{eq} und g_i^{eq} werden gemäß Gleichung (3.10) mit

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{v}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{v})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2c_s^2} \right], \quad (3.33)$$

$$g_i^{eq} = w_i \rho \left(\left[1 + \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{v}}{c_s^2} + \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{v})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2c_s^2} \right] - 1 + \frac{\Gamma_\phi \mu_\phi}{\phi c_s^2} \right) \quad (3.34)$$

dargestellt. Hier ist Γ_ϕ eine Konstante, die von der Mobilität des Ordnungsparameters ϕ abhängt. Letztendlich können daraus die Post-Kollisionsfunktionen f_i^* aus f_i^{eq} und F_i sowie g_i^* aus g_i^{eq} gebildet werden, wie in Gleichung (3.15) mit

$$f_i^* = f_i + \frac{\Delta t}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) F_i \Delta t, \quad (3.35)$$

$$g_i^* = g_i + \frac{\Delta t}{\tau} (g_i - g_i^{eq}) \quad (3.36)$$

3 Die Lattice-Boltzmann-Methode

dargestellt. Der beschriebene Algorithmus ist zur Veranschaulichung der Abläufe in Abbildung 3.6 dargestellt. Dabei bezeichnen die schwarzen Pfeile lokale Schritte, während rot gekennzeichnete Schritte nicht lokal stattfinden.

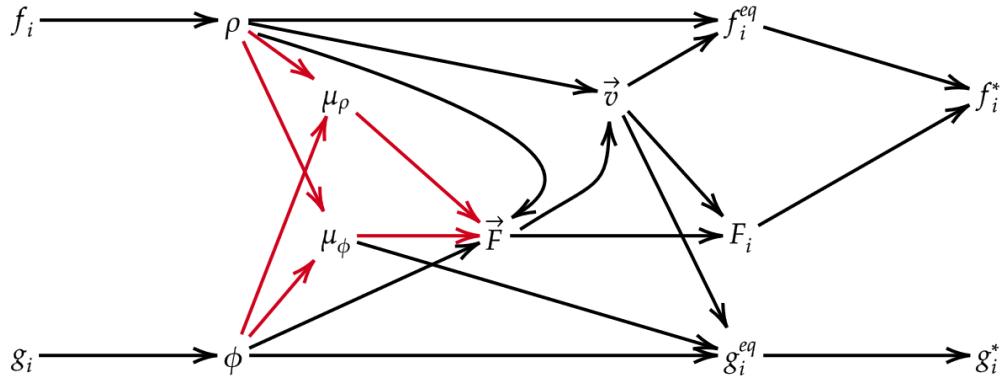


Abbildung 3.6: Visualisierung des Free Energy Algorithmus [10].

Der in 3.6 dargestellte Algorithmus ist in der Form, in der er in Kapitel 3.5 beschrieben wurde, gemäß [10] in der C++ Bibliothek OpenLB implementiert. Grundlegende Beispiele für die Fälle von Zwei- oder Dreikomponentensystemen sind für den 2D und 3D Raum gegeben, auf deren Grundlage weitere Testfälle entwickelt werden können. Zunächst gilt es, mit dieser Grundlage und den Besonderheiten der Aufgabenstellung dieser Arbeit, gemäß Kapitel 3.4 den aktuellen wissenschaftlichen Stand relevanter Publikationen zu validieren und anschließend um eigene numerische Experimente und deren Auswertung zu erweitern.

4 Aktueller Wissenschaftlicher Stand

Im Rahmen dieses Kapitels wird der aktuelle wissenschaftliche Stand der Tropfendeformations-Simulation betrachtet und analysiert. Anschließend wird evaluiert, welche Ergebnisse in der Simulation mittels der Lattice-Boltzmann-Methode zu erwarten sind. Dabei liegt ein besonderer Fokus auf den Arbeiten von Komrakova et al. [15] und Semprebon et al. [32].

Die Publikation von Semprebon et al. aus dem Jahr 2016 [32] führt ein neues Lattice-Boltzmann Free Energy Modell zur Beschreibung von ternären Gemischen ein. Es wird gezeigt, dass dieses Modell für eine beliebige Anzahl an Fluiden in 2D und 3D gültig ist. Die Besonderheit hierbei liegt auf der analytischen Ableitung von Fluid-Fluid Oberflächenspannungen und Kontaktwinkel sowie derer Variation [32]. In mehreren Tests wurde gezeigt, dass das Modell und der Algorithmus das korrekte Gleichgewicht als auch das dynamische Verhalten der Fluidmischungen darstellt. Die Publikation zeigt die Validität des Free Energy Modells und dessen Implementierung in dieser Arbeit.

Die Publikation von Komrakova et al. aus dem Jahre 2014 [15] beschreibt ein Tropfen eines suspendierten Fluids und dessen Verhalten während einfacher Scherbelastung. Dabei wurde das Free Energy Modell und die Lattice-Boltzmann-Methode genutzt. Das gesamte Mehrphasensystem ist mit drei physikalischen und zwei numerischen dimensionslosen Kennzahlen beschrieben und der Einfluss und die Bedeutung der Pecletzahl Pe , Cahnzahl Ch und Auflösung auf die Simulation wurde untersucht. Die notwendige Grenzflächendicke korreliert mit der Tropfenauflösung beziehungsweise dem Tropfenradius R . Die numerische Methode der verwendeten Free Energy LBM wurde bestätigt und validiert. Dies geschah für verschiedene Parameter und Kennwerte, wie $Re = 0,0625 - 50$ und Viskositätsverhältnis $\lambda = 1,2,3$, wobei die Ergebnisse auf Übereinstimmung mit Literaturwerten geprüft worden sind. In Abbildung 4.1 ist die Tropfendeformation zu beobachten. Durch die gegebenen Daten im laminaren Bereich mit $Re < 50$ wird das Verhalten der Tropfen in der Scherbelastung deutlich, so dass erste Anhaltspunkte und Prognosen für entsprechendes Verhalten bei steigender Re gewonnen werden können. Eine Validierung eigener Simulationsergebnisse ist aufgrund der graphischen Auswertungen von Komrakova et al. möglich, unter der Beachtung der verwendeten Strömungsverhältnisse durch Re . Interessierte Leser seien auf die wissenschaftliche Publikation verwiesen, in der weitere Ergebnisse qualitativ und quantitativ dargestellt werden [15].

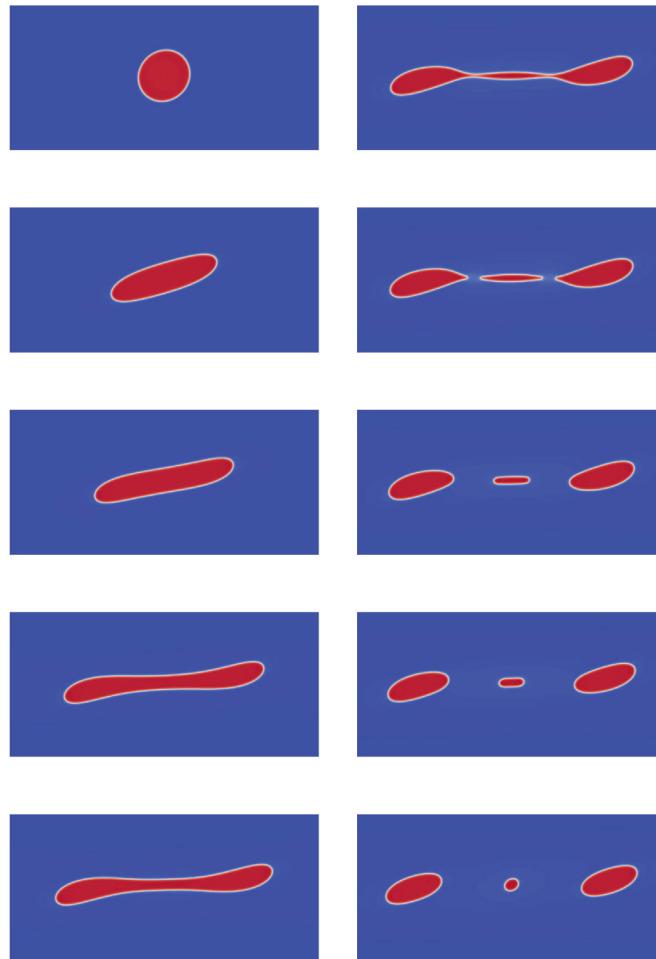


Abbildung 4.1: Veränderung des Tropfens über die Zeit $t^* \in [0, 31.5]$ bei $Re = 0.0625$, $Ca = 0.42$, $\lambda = 1.0$, $Ch = 0.0379$, $Pe = 0.43$ und $R = 30$ mit $[R] = lu$ [15, Fig.9].

Die betrachteten Testfälle der Publikation von Komrakova et al. sind durch die Querschnittsbetrachtung des Tropfens begrenzt, gemäß Abbildung 3.4, da dieser für die gegebenen laminaren Strömungsverhältnisse ausreichend ist und valide Ergebnisse liefert. Der Einfluss von Turbulenz wurde nicht untersucht. Da die von Komrakova et al. gewonnenen Daten mit anderen Literaturwerten übereinstimmen, stellt diese Arbeit eine Basis zur Validierung der eigenen numerischen Methode dar.

Das Verständnis für das Deformationsverhalten von Tropfen kann durch weitere Literatur ergänzt werden. Laut Inamuro et al.(2001) [11] kann gemäß Brujin [7] in Tipstreaming und Fracture Abrisse unterschieden werden. Dabei stellt ein Fracture Abriss den Standardfall, auch beobachtbar in Abbildung 4.1, dar. Tipstreaming bezeichnet die Ausbildung von sich ablösenden Tropfenteilchen an den beiden En-

4 Aktueller Wissenschaftlicher Stand

den eines sehr langgezogenen Tropfens, die nur für geringe Viskositätsverhältnisse λ zu beobachten ist [11]. Auch Komrakova et al. (2015) [16] stoßen in einer späteren Publikation bei der Simulation von $\lambda = 0.1 - 2$ mittels eines Free Energy LBM Ansatzes über das Phänomen, welches auch als End-Pinchig Mechanismus betitelt wird [16]. Insbesondere der Zusammenhang zwischen der Kapillaritätszahl Ca , kritischen Kapillaritätszahl Ca_{crit} und λ war Gegenstand der Untersuchungen, wobei für die Kombination von $\lambda = 2$ und $Ca = 2Ca_{crit}$ ein Capillary-Wave Abriss beobachtet werden konnte. Für die korrekte Darstellung dieser Abrissformen sind sehr große Domains notwendig, da sich der Tropfen besonders lang zieht, verglichen mit dem Abrissmechanismus aus Abbildung 4.1.

Der Tropfenabriss in turbulenten Umgebungen wurde von Komrakova (2018) mittels Free Energy LBM untersucht [14]. Zuvor bekannte Abrissmechanismen wie Initial, Independent und Cascade konnten erfolgreich simuliert und abgebildet werden [14]. Es konnte festgestellt werden, dass der Abrissmechanismus stark von der Größe des Ursprungstropfens und dem Energieeinfluss abhängt. Große Tropfen in hochturbulenter Umgebung unterliegen dem Burst Abriss, während kleine Tropfen in moderater Turbulenz zum Initial Abriss neigen, der nur einmal stattfindet [14]. Der Initialabriß ist für die Anwendung dieser Arbeit potentiell von Interesse, falls es möglich wäre die Reynoldszahl entsprechend hoch einzustellen.

Die erwähnten Literaturbeispiele bilden ein akkurate Bild von möglichen Tropfendeformationsverhaltensweisen ab und bieten mit Komrakova et al. (2014), siehe Abbildung 4.1, ein ideales Beispiel zur Validierung der mit OpenLB erstellten Free Energy LBM-Methode zur Simulation von Mehrphasenströmungen.

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

In diesem Kapitel wird die Vorgehensweise der numerischen Experimente beschrieben und dokumentiert. Es erfolgt zunächst eine Erläuterung und Validierung der aufgesetzten numerischen Methode, indem eine Konfiguration mit Tropfenabriss aus der aktuellen wissenschaftlichen Publikation von Komrakova et al. [15] nachgebaut und beschrieben wird. Aus Gründen der Einfachheit wird an einigen Stellen wiederholtes Referenzieren von Komrakova et al. vernachlässigt. Anschließend wird diese Methode auf die Rahmenbedingungen dieser Arbeit, gemäß Kapitel 3.4 angepasst und getestet.

5.1 Simulationsmethode

OpenLB ist ein numerisches Framework für Simulationen auf der Basis des Lattice-Boltzmann-Modells. OpenLB Programme folgen einem grundsätzlichen, festgelegten Muster, welches gemäß [10], [22] in 4 Schritte aufgeteilt werden kann:

1. Initialisierung
2. Geometrie Vorbereitung
3. Gitter Vorbereitung
4. Hauptschleife

Die Initialisierung versorgt das Programm mit den nötigen Parameter Startwerten und dem benötigten Speicherplatz. Die Umwandlung zwischen physikalischen und Lattice Einheiten findet in der Initialisierung über eine Klasse namens UnitConverter statt. Dieser ist essenziell, um die benötigten charakteristischen dimensionslosen Kennzahlen, wie die Reynoldszahl Re , einzustellen zu können. Initialparameter werden dem UnitConverter direkt im Code übergeben mit Auflösung N , Lattice Knotenpunktdistanz Δx , Relaxationszeit τ und den charakteristischen physikalischen Parametern Länge L , Geschwindigkeit v , Viskosität η bzw. kinematische Viskosität ν und Dichte ρ . Über eine Logdatei mit Konversionsfaktoren, auch Conversionfactors, können so gezielt Parameter verändert und Kennzahlen eingestellt werden. Nach

$$Q = Q^* \cdot C_Q \quad \text{mit} \quad [Q^*] = 1, \quad [C_Q] = [Q] \quad (5.1)$$

kann jede physikalische Quantität Q aus einer dimensionslosen Quantität Q^* und dem Konversionsfaktor C_Q dargestellt werden [22].

Bei der Vorbereitung der Geometrie wird ein Mesh generiert und initialisiert. Dies geschieht, indem bestimmten Gitterpunkten eine Materialnummer zugewiesen

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

wird. Diesen Materialnummern (MN) können wiederum Eigenschaften zugewiesen werden. Mit der Hilfe von Indikator-Funktoren können 2D und 3D Formen festgelegt werden [10]. So definieren MN von 0 bis 6 alle notwendigen, physikalisch unterschiedlichen Bereiche innerhalb der Domain Ω , welche aus Länge L , Höhe H und Breite B mit $\Omega = L \times H \times B$ gebildet wird.

Die bewegten Wände mit No-Slip Bedingung nach Kapitel 3.4 sind bei $y = H$ mit $v = v_w$, sowie bei $y = 0$ mit $v = -v_w$ und jeweils \dot{y} definiert. Die seitlichen Wände bei $z = 0$ und $z = B$ weisen die Free-Slip Randbedingungen auf. Ein- und Ausfluss benötigen hier keine eigene Materialnummer, da sie durch die implementierte periodische Randbedingung in x -Richtung, gemäß Kapitel 3.5 bereits festgelegt sind. Den Aufbau, der in dieser Arbeit verwendeten Geometrie, ist in Abbildung 5.1 zu sehen. Interessenten der Programmierung der numerischen Methode seien auf [10] und [22] verwiesen.

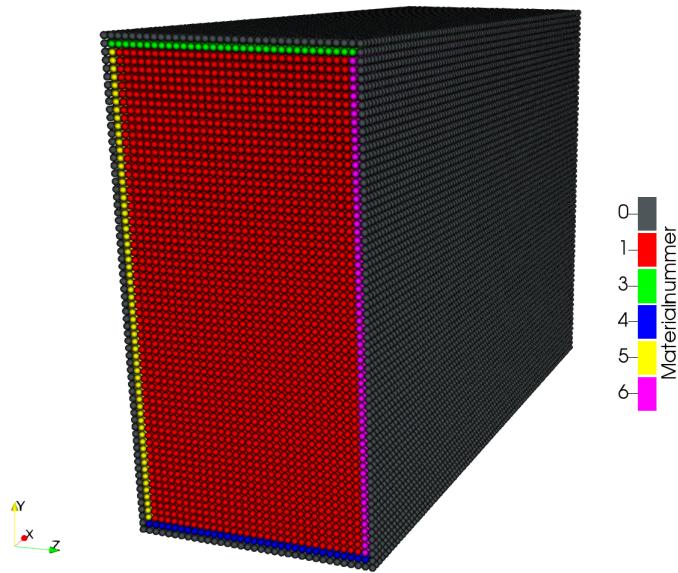


Abbildung 5.1: Materialnummern des zu simulierenden Raums Ω . Die funktionslose $MN = 0$ grenzt den Bereich ein, während die Fluidzellen $MN = 1$ von den unterschiedlichen Wänden $MN = 3, 4, 5, 6$ mit implementierten Free-Slip und No-Slip Bedingungen umgeben sind.

5.2 Validierung des aktuellen wissenschaftlichen Stands

Um die aufgesetzte Simulationsmethode mit dem Free Energy Modell auf seine Korrektheit der Darstellung des Tropfenabisses einer binären Scherströmung zu überprüfen, gilt es zunächst Literaturwerte von Komrakova et al. [15] korrekt zu replizieren.

5.2.1 Beschreibung des zu validierenden Testfalls

Die Publikation von Komrakova et al. [15] beschäftigt sich mit Tropfendeformation mittels LBM und einer weiten Variation an Kennzahlen. Um möglichst vergleichbare Ergebnisse zu vorhandenen Literaturwerten zu erhalten, wurde eine Strömung im Stokes Bereich $Re \ll 1$ ausgewählt. Die charakteristischen dimensionslosen Kennzahlen der Simulation zu Abbildung 4.1 sind mit

Kennzahl	Wert
Re	0.0625
Ca	0.42
λ	1
Ch	0.0379
Pe	0.43

Tabelle 5.1: Dimensionslose Kennzahlen des Testfalls aus Abbildung 4.1 [15].

Reynoldszahl Re , Kapillaritätszahl Ca , Viskositätsverhältnis λ sowie den numerischen dimensionslosen Kennzahlen Cahnzahl Ch und Pecletzahl Pe gegeben. Dabei ist die mit der Tropfendeformation korrelierende Kapillaritätszahl größer als die kritische Kapillaritätszahl $Ca_{krit} = 0.41$, um einen Tropfenabbruch zu gewährleisten [15], [20]. Die dimensionslosen Kennzahlen können in diesem System numerisch mit

$$Re_{num} = \frac{\dot{\gamma}R^2}{\nu}, \quad Ca = \frac{R\dot{\gamma}\eta_c}{\sigma}, \quad \lambda = \frac{\eta_d}{\eta_c}, \quad Ch = \frac{\alpha}{R}, \quad Pe = \frac{\dot{\gamma}R\alpha}{MA} \quad (5.2)$$

dargestellt [15] und durch $\dot{\gamma} = 2v_w/H$, $H = H(R)$, $\sigma = \frac{\alpha}{6}(\kappa_1 + \kappa_2)$ und $M = \Delta t \Gamma(\tau - 1/2)$ weiter vereinfacht werden. Dabei bezeichnet M die Mobilität, A den numerischen Parameter des Free Energy Modells, H die Distanz der Wände in y -Richtung abhängig vom Radius R , σ die Oberflächenspannung, η_c die Viskosität der kontinuierlichen Phase und η_d die Viskosität der dispergierten Phase.

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

In Einklang mit Li et al. [20] ist laut Komrakova et al. [15] zu erwarten, dass der Tropfenabriss fünf Fragmente formt. Diese teilen sich auf in zwei Tochtertropfen, einem Satellitttropfen und zwei Sub-Satellitttropfen, gemäß des letzten Zeitschritts in Abbildung 5.2.

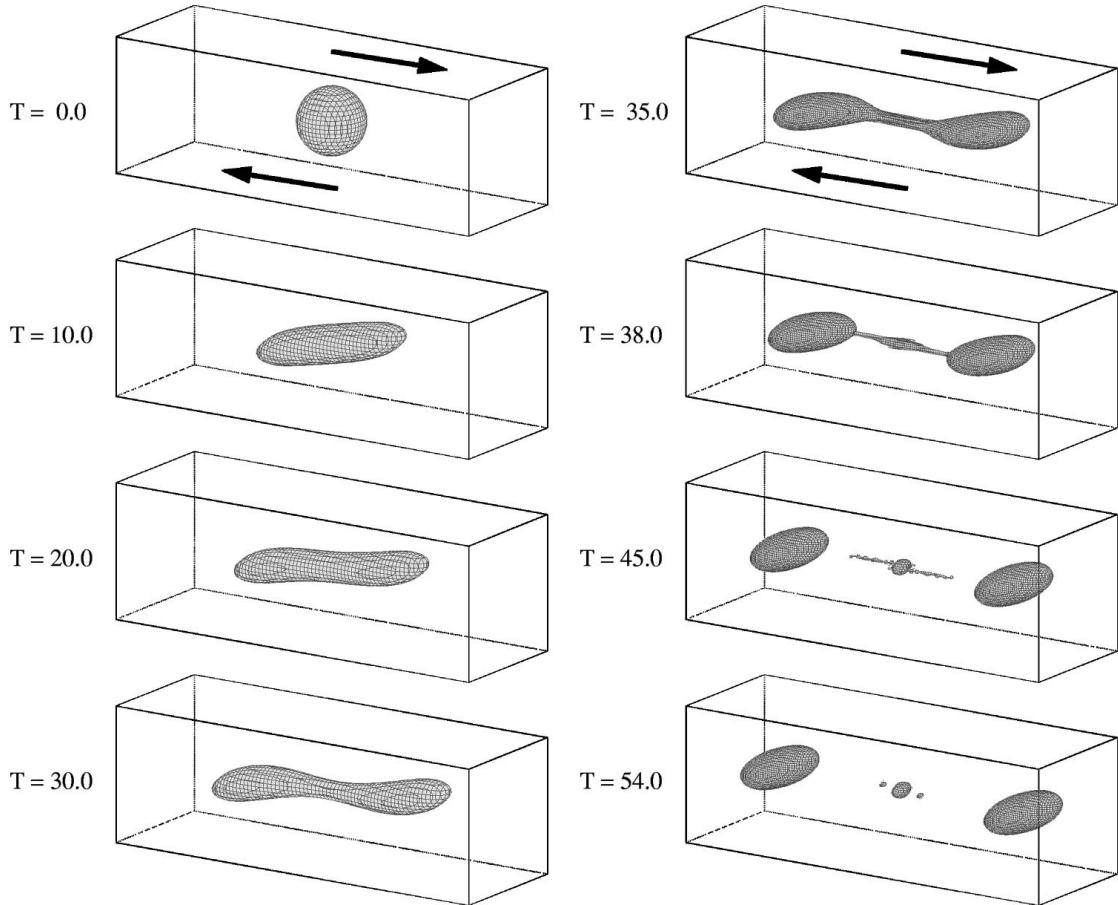


Abbildung 5.2: Veränderung des Tropfens über die Zeit für $Ca = 0.42$, $\lambda = 1$ und $Re = 0.0$ [20, Fig.11].

Um diese Fragmente zu erhalten, ist ein Initialradius R mit $[R] = lu$ (Lattice Units) von $R \geq 20$ notwendig [15]. Der Tropfenradius wurde mit $R = 30$ festgelegt. Um das System skalierbar zu halten, ist die Geometrie abhängig von R , so dass im abzubildenden Literaturfall eine Domain $\Omega = 12R \times 8R \times 2R$ gewählt wurde [15], welches in Anwendung der hier verwendeten Methode $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$ entspricht, um den gesamten Tropfen zu simulieren.

Das Ergebnis der Simulation von Komrakova et al. in Abbildung 4.1 zeigt eine Bildung von zwei Tochtertropfen und einem Satellitttropfen. Die Abweichung zu Li et al. [20] aus Abbildung 5.2 ist einer zu niedrigen Auflösung geschuldet [15].

Mit einer Anpassung des Tropfenradius $R = 64$ mit $Ch = 0.0177$ und $Pe = 0.43$ kann die erwartete Fraktionierung gemäß Li et al. erzielt werden [15], [20]. Der Einfluss von Pe und Ch auf das Deformationsverhalten ist hierbei hervorzuheben. In der Publikation von Komrakova et al. ist zu sehen, dass mit steigender Pe bei gleicher Ch eine signifikant stärkere Deformation zu beobachten ist und sich Tropfenelongation und Orientierungswinkel verändern [15].

Die Simulationsergebnisse der Validierung sollen den Literaturwerten aus Abbildungen 4.1 und 5.2 entsprechen und die erzielten Kennzahlen denen aus Tabelle 5.1 gleichen. Damit wäre die Funktion der in OpenLB programmierten Simulationsmethode mittels der Free Energy Methode in LBM als valide einzustufen, so dass Anpassungen für Untersuchungen in anderen Strömungsverhältnissen vorgenommen werden können.

5.2.2 Parametereinstellung der Validierung

Die Parameter der Simulationsmethode wurden gemäß den Definitionen von Komrakova et al. [15] aus den Gleichungen 5.2 umgesetzt und angepasst. Da die Methode skalierbar sein soll und $R = 30 = const$ gilt, werden Parameterwerte durch die bekannten Zielwerte aus Tabelle 5.1 in Abhängigkeit von R aufgelöst. Damit resultieren

Parameter	Wert
α	$0.0379R$
$\kappa_1 + \kappa_2$	$(0.0379R^2 \cdot 40.32)^{-1}$
L_{phys}	$0.25R$
N	$0.25R$
v_w	$(4R)^{-1}$
τ	1.0
ν	1.0
ρ	1.0

Tabelle 5.2: Einstellung der OpenLB Parameter für die Kennzahlen nach Tabelle 5.1.

als eingestellte Parameter für den OpenLB Programmcode. L_{phys} bezeichnet die charakteristische Länge des Systems, die zur Berechnung von Re genutzt wird. Die Interface Parameter κ_1 und κ_2 werden einzeln definiert und das bisher gegebene OpenLB Default Verhältnis beibehalten [10]. Des Weiteren sind Parameter gemäß numerischer Restriktionen in OpenLB mit Relaxationszeit $\tau \in [0.5, 1.0]$, Lattice Geschwindigkeit $v_{lattice} \leq 0.1$ und Auflösung $N > Re \frac{\tau-0.5}{3v_{lattice}}$ eingestellt [10]. Es ergeben sich folgende Werte für die Kennzahlen bei $R = 30$

Kennzahl	Wert
Re	0.0669643
Ca	0.45
Ch	0.0379
λ	1
Pe	$0.00442167/A$

Tabelle 5.3: Ergebnis der dimensionslosen Kennzahlen bei der Parameter-einstellung nach Tabelle 5.2.

und damit leichte Abweichungen von $\approx 7\%$ für Re und Ca , während die Peclet-zahl Pe gemäß den Literatur Definitionen aus [15] den numerischen Parameter A beinhaltet, der in dem hier verwendeten Free Energy Modell nicht vorliegt.

Abweichungen des verwendeten Free Energy Modells

Der fehlende numerische Parameter A basiert auf der Diskrepanz zwischen dem hier verwendeten Free Energy Modell aus Kapitel 3.5 und dem von Komrakova et al. [15], welches auf Kendon et al. [12] basiert. Kendon et al. beschreibt das chemische Potential μ abhängig von den Parametern A , B , κ und ϕ [12], während in dieser Arbeit gemäß Gleichung 3.26 bis 3.28 das chemische Potential mit $\mu(A_1, A_2, \alpha, \kappa_1, \kappa_2, \rho, \phi)$ dargestellt wird. Eine Umrechnung der Parameter gestaltet sich aufgrund der fundamentalen Unterschiede der Methoden als schwierig. Interessierte Leser seien auf Kendon et al. [12] verwiesen.

Die Re und Ca Abweichungen zu den Zielwerten von Komrakova et al. [15] basieren auf einem Datentyp Abschneidefehler. Es ist $\Delta x = L_{phys}/N \neq 1$, da nach $L_{phys} = N = 0.25R = 7.5$ die Auflösung N als Integer Datentyp auf eine ganze Zahl abschneidet, was zu leichten Abweichungen in Tabelle 5.3, verglichen mit den Zielwerten aus Tabelle 5.1, führt.

Vergleichbarkeit durch normierte Zeitschritte

Um die eigenen Testergebnisse mit den Literaturwerten vergleichen zu können, war es nötig von der Lattice Zeit t auf eine genormte, dimensionslose Zeit t^* umzurechnen, so dass ein Vergleich mit Abbildung 4.1 von $t^* \in [0, 31.5]$ vorgenommen werden kann. Die Einführung der genormten Zeit t^* erfolgt durch

$$t^* = t\dot{\gamma} = t\frac{2v_w}{H}. \quad (5.3)$$

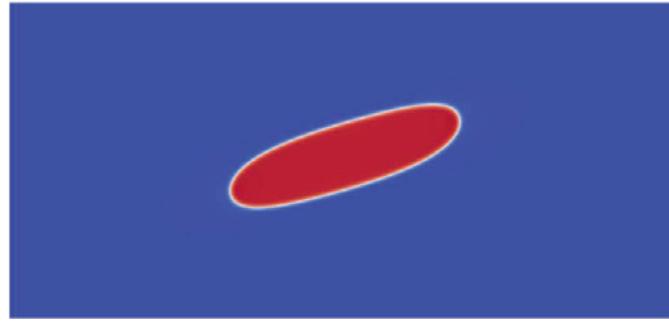
Aufgelöst mit der Höhe $H = 8R$ und $\dot{\gamma} = 2v_w/H$ können die Iterationsschritte, sowie die maximale Iterationsgrenze für eine bestimmte Wandgeschwindigkeit v_w festgelegt werden. Um vergleichbare Daten zu den Literaturwerten zu erhalten, soll

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

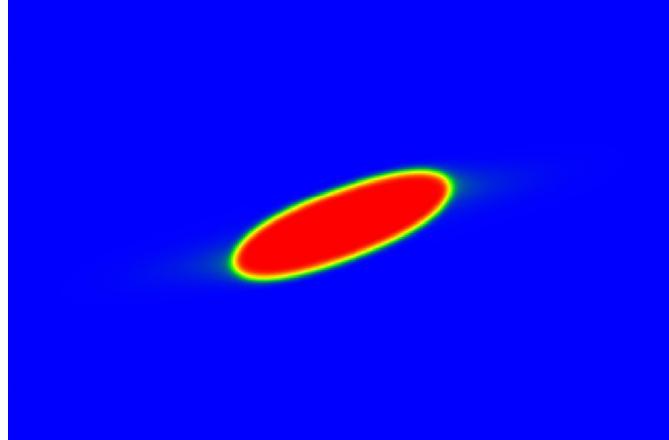
ein ausreichend großer Bereich von t^* abgedeckt werden, während die Validierung von Abbildung 4.1 $t^* \in [0, 31.5]$ benötigt. Um eine korrekte, vollständige Simulation zu gewährleisten sei zunächst der Verformungszustand bei $t^* = 5$ festzuhalten und mit Abbildung 4.1 zu vergleichen.

Erste Vergleiche der Nachbildung und Diskussion

In Abbildung 5.3 liegt ein erster Vergleich der Simulationsergebnisse und den Literaturwerten zum Zeitpunkt $t^* = 5$ vor. Dabei wurde die Dichte des dispergierten Fluids über den Querschnitt in Normale der z -Richtung betrachtet. Es ist zu beobachten, dass die Deformation des Tropfens in der eigenen Validierung zum selben Zeitpunkt weitgehend mit dem Verhalten des ursprünglichen Testfalls übereinstimmt [15]. Es ist ein stärker ausgeprägtes Interface zwischen kontinuierlicher und dispergierter Phase zu beobachten. Die Abweichungen der eingestellten Kennzahlen und die fehlende Einstellmöglichkeiten der Pecletzahl Pe werden nachfolgend diskutiert, um Fehler zu vermeiden und eine Diskussionsgrundlage für mögliche Abweichungen zu schaffen, bevor eine vollständige und rechenintensive Simulation erfolgt.



(a) Komrakova, Ausschnitt Domain



(b) eigene Simulation, volle Domain

Abbildung 5.3: Vergleich der eigenen Validierungsergebnisse und den Literaturwerten von Komrakova et al. [15] aus Abbildung 4.1 anhand der Dichte des dispergierten Fluids bei $t^* = 5$.

Die Reynoldszahl Re weicht mit $Re = 0.067$ leicht von dem Zielwert $Re = 0.0625$ ab. Aus Komrakova et al. [15] geht hervor, dass der Einfluss unterschiedlicher Reynoldszahlen bei gegebenen Strömungsbedingungen erst bei großen Unterschieden signifikant ausfällt. Deshalb kann davon ausgegangen werden, dass die Re -Abweichung um den Faktor 1.071 vernachlässigbar ist. Zudem bestätigt Komrakova et al., dass eine höhere Reynoldszahl die Tropfendeformation begünstigt und nicht hemmt [15].

Die Kapillaritätszahl Ca weicht von $Ca = 0.42$ mit $Ca = 0.45$ um einen Faktor von 1.0714 vom Zielwert ab. Dabei wurde gemäß [15] die Kapillaritätszahl im zu validierenden Testfall so gewählt, dass sie die kritische Kapillaritätszahl $Ca_{crit} = 0.41$ übersteigt, um einen effektiven Tropfenabriss zu gewährleisten. Da der hier erzielte Wert noch höher ausfällt, begünstigt $Ca = 0.45$ bei den gegebenen

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

Strömungsbedingungen den Tropfenabriss. Dies konnte ebenfall von Komrakova et al. aufgezeigt werden [15].

Die Cahnzahl $Ch = 0.0379$ konnte exakt nachgestellt werden. Auch das Verhältnis der Viskositäten $\lambda = 1$ wurde eingehalten, so dass nur noch die Pecletzahl Pe abweicht. Bereits in Komrakova et al. [15] konnte aufgezeigt werden, welchen starken Einfluss die Pecletzahl auf die Tropfendeformation haben kann, jedoch kann der verwendete Parameter A im Free Energy Modell nicht nachgestellt werden, so dass folgend mit einer Abhängigkeit von A gearbeitet wird. Die gewünschten $Pe = 0.43$ konnten als $Pe = 0.00442167/A$ festgehalten werden. Mit der Annahme $A = 1$ weicht der erreichte Wert um den Faktor 95 ab. Auf dieser Grundlage gilt es zu überprüfen, ob eine Anpassung von $Pe \cdot A$ zu einer Veränderung des Deformationsverhaltens führt.

Einfluss von Pe und Γ auf das Deformationsverhalten

Mit der Pecletzahl Pe nach

$$Pe = \frac{\dot{\gamma} R \alpha}{MA} = \frac{2v_w R \alpha}{HMA}, \quad M = \Delta t \Gamma \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (5.4)$$

und $v_w = \frac{1}{4R}$, $H = 8R$ ist eine Abhängigkeit von Tropfenradius R , Interfacedicke α und Mobilitätskoeffizient M zu sehen. Dabei sind R und α aufgrund ihrer Abhängigkeiten zu anderen dimensionslosen Kennzahlen bereits festgelegt. Die Abhängigkeit von M legt nahe, dass veränderte Werte für Interface Mobilitätsparameter Γ die gewünschte Anpassung der Pecletzahl erzielen könnte. Auf dieser Grundlage wird der Testcase für unterschiedliche Γ Werte getestet, so dass zu einem vergleichbaren Zeitschritt von t^* das Deformationsverhalten evaluiert werden kann. Der bisher ausgeführte Testcase wird daher mit $\Gamma = 1.0$ und $\tau = 1.0$ als Vergleichsbasis dienen.

Die Werte für die Pecletzahl Pe sind als Abhängigkeit von A mit $Pe \cdot A$ für unterschiedliche Parameter Γ in der nachfolgenden Tabelle 5.4 aufgetragen.

Mobilitätsparameter Γ	Peclet $Pe \cdot A$
$\Gamma = 0.1$	0.04422
$\Gamma = 0.5$	0.00884
$\Gamma = 1.0$	0.00442
$\Gamma = 5.0$	0.00088
$\Gamma = 10.0$	0.00044

Tabelle 5.4: Verschiedene gerundete Werte für $Pe \cdot A$ für unterschiedliche Parameter Γ bei $\tau = 1 = const$, wobei $\Gamma = 1$, $\tau = 1$ den geprüften Fall aus Abbildung 5.3 darstellt.

Definitionsgemäß verändert sich die Pecletzahl mit $Pe \cdot A \propto \frac{1}{\Gamma}$. Eine steigende Pecletzahl lässt ein verstärktes Deformationsverhalten erwarten, gemäß [15]. In Abbildung 5.4 ist die Deformation für verschiedene Γ -Werte zum Zeitpunkt $t^* = 1.25$ aufgetragen.

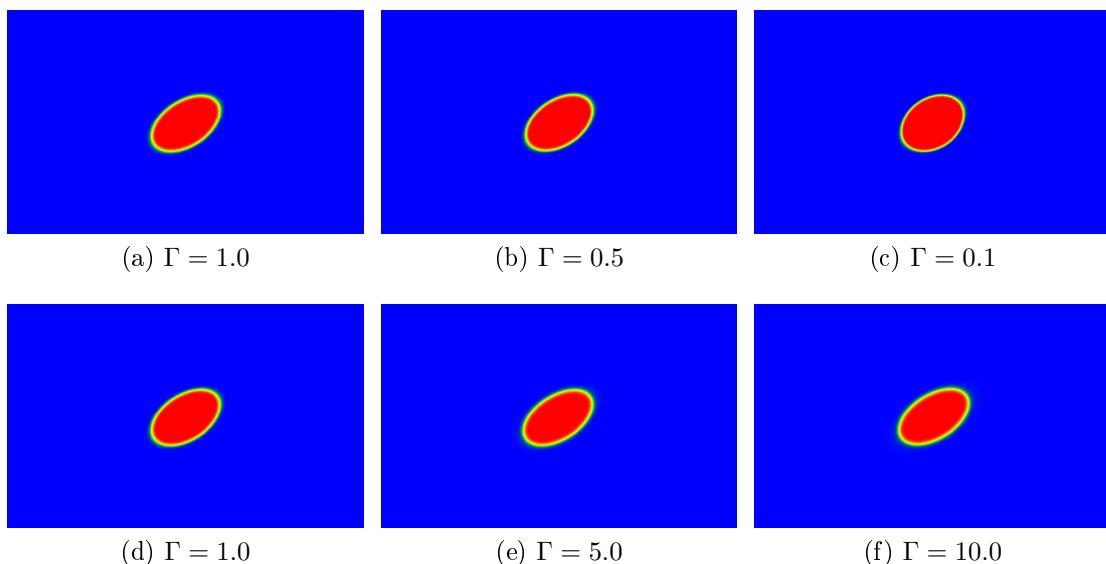


Abbildung 5.4: Deformationsverhalten für verschiedene Γ bei $\tau = 1.0$ und $t^* = 1.25$.

Wie in Abbildung 5.4 zu sehen ist, verschlechtert sich das Deformationsverhalten für niedrigere Γ -Werte, so dass mit $\Gamma = 0.1$ und $Pe \cdot A = 0.04422$ eine sichtbar schwächere Deformation vorliegt. Dies lässt Rückschlüsse auf den bisher vernachlässigten Parameter A schließen. Da eine Erhöhung von $Pe \cdot A$ eine Deformationsminderung beobachtet ließ, kann angenommen werden, dass eine Erhöhung von Γ und die einhergehende Verringerung von $Pe \cdot A$ sinnvoll sein kann. Dies wurde in

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

Abbildung 5.4 ebenfalls geprüft. Aufgrund des abweichenden Verhaltens von $Pe \cdot A$ zu Pe kann der Parameter A nicht mit der Vereinfachung $A \approx 1$ vernachlässigt werden und die Werte von $Pe \cdot A$ nicht direkt mit denen von Pe verglichen werden, so dass eine Erhöhung von $Pe \cdot A$ auf den Zielwert der Parametereinstellung $Pe = 0.43$ aus empirischer Sicht nicht sinnvoll ist.

Erhöhte Werte für Γ und $Pe \cdot A$ gemäß Tabelle 5.4 zeigen in Abbildung 5.4 keine signifikante Abweichung verglichen mit dem Standardfall von $\Gamma = 1.0$. Dies lässt vermuten, dass eine weitere Erhöhung des Γ Parameters keine weitere Auswirkungen auf das Deformationsverhalten hat. Die Betrachtung der Tropfenverformung in Abbildung 5.4 zeigt, dass der Wert von $Pe \cdot A$, als $Pe \cdot A(\Gamma)$ mit der Verformung bis zu einem bestimmten Punkt korreliert. Sei dieser Punkt approximativ in dieser skizzierten Betrachtungsweise der kritische Punkt Γ_{krit} , ab dem eine weitere Verformungskorrelation insignifikant klein ausfällt, so kann anhand der Messdaten $\Gamma_{krit} \approx 1$ hypothetisch angenommen werden. Aufgrund dieser Beobachtung wird weiterhin mit $\Gamma = 1$ gerechnet.

5.2.3 Anpassung der Validierung und Ergebnisse

Da die Domain Ω und jeder festgelegte Parameter der hier verwendeten Methode von R abhängt, siehe Gleichung 5.2, skaliert das gesamte System mit R . Lediglich Relaxationszeit τ , Mobilitätskoeffizient Γ , Viskosität ν und Dichte ρ sind unabhängig von R festgelegt. Durch die Reduktion von Radius $R = 30$ auf $R = 20$ findet eine schnellere, weniger rechenintensive Simulation statt und es treten die in Tabelle 5.5 genannten Änderungen der Parameter ein.

	R=30	R=20	Literatur Zielwerte [15]
Re	0.0669643	0.0625	0.0625
Ca	0.45	0.42	0.42
λ	1	1	1
Ch	0.0379	0.0379	0.0379
Pe	0.00442167/A	0.0047375/A	0.43
N	7	5	
L	7.5	5	
Δx	1.07143	1	

Tabelle 5.5: Vergleich der Kennzahlen und charakteristischer Werte des Standardfalls mit $\Gamma = 1$ und $\tau = 1$.

Die genormte Zeit $t^* = t\dot{\gamma} = t\frac{2\nu_w}{H}$ verändert sich wegen $H = 8R$ mit R , so dass ein genormter Zeitschritt für einen kleineren Radius deutlich geringer ausfällt. Wie in Tabelle 5.5 zu sehen ist, stimmen nun alle Kennzahlen mit denen des zu validierenden Falls von Komrakova et al. überein, mit Ausnahme der Pecletzahl.

Obwohl die Simulationsmethode mit R skaliert, ergeben sich für $R = 30$ Abweichungen zu den Literaturkennwerten gemäß Tabelle 5.5 aufgrund eines Datentyp Abschneidefehlers. Für den Fall des niedrigeren Radius $R = 20$ kann $\Delta x = 1$ erreicht werden, so dass alle Werte exakt eingehalten werden können. Erste numerische Tests mit $R = 20$ sind in Abbildung 5.5 zu betrachten.

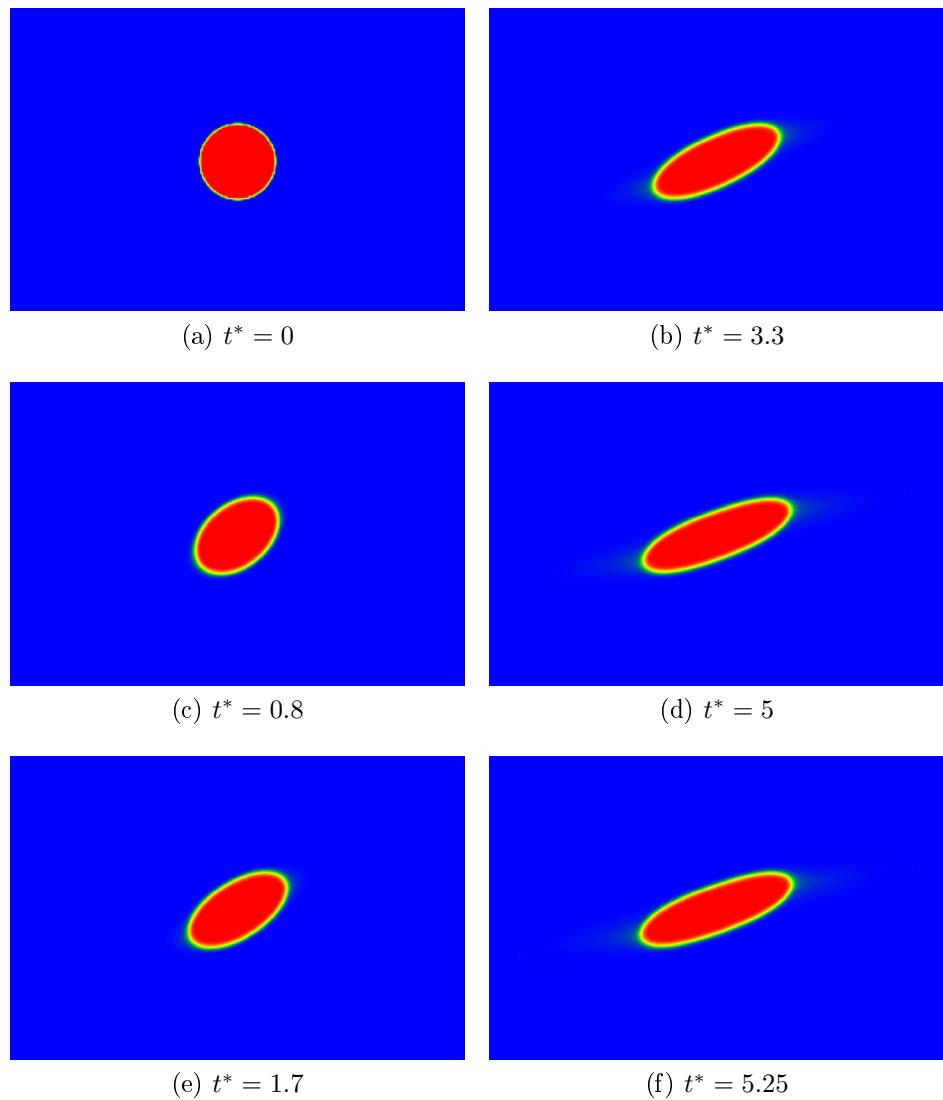


Abbildung 5.5: Deformationsverhalten für $R = 20$, $\Gamma = 1.0$, $\tau = 1.0$ für verschiedene Zeitschritte t^* .

5 Numerische Experimente und Ergebnisse

Dabei ist hervorzuheben, dass für $t^* = 5$ im Fall von $R = 20$ in Abbildung 5.5 und für $R = 30$ in Abbildung 5.3 keine signifikanten Unterschiede vorherrschen und mit der Deformation von Komrakova et al., gemäß Abbildung 4.1 größtenteils übereinstimmt. Dies bestätigt, dass mit verringerten Radius $R = 20$ wegen hoher Rechendauer gerechnet werden darf, während gleichzeitig die geforderten Parameter gemäß Tabelle 5.5 exakt eingehalten werden konnten, verglichen mit $R = 30$, siehe Tabelle 5.3. In Abbildung 5.6 sind die Simulationsergebnisse für $t^* \in [0, 37.5]$ aufgetragen und ein erfolgreicher Tropfenabriss ist zu beobachten.

Dort sind erkennbare Unterschiede zum Tropfenabriss von Komrakova et al. 4.1 zu erkennen. Trotz der gleich eingestellten Parameter und der Verringerung der Auflösung mit Tropfenradius $R = 20$, benötigt der Tropfenabriss mit der Methode dieser Arbeit eine hohe Rechendauer. Dies war zu erwarten, da die genormten Zeitschritte t^* sehr hoch ausfallen. Der Abriss gemäß der genormten Zeitschritte t^* stimmt mit denen von Komrakova et al. aus Abbildung 4.1 grob überein, so dass der Abriss bei $t^* \approx 30$ erfolgt. Jedoch unterscheidet sich das Fluidverhalten signifikant, so dass die Domain $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$ in x -Richtung zu klein ist und gemäß der periodischen Randbedingung aus Kapitel 3.4 die gebildeten Tochtertropfen auf der gegenüberliegenden Seite wieder eintreten. Das beobachtbare Fluidverhalten bei der Deformation wirkt des Weiteren hochviskoser als im angepeilten Literaturfall, was zu der Beobachtung des stärker ausgeprägten Interfaces passt. Dennoch wurde der Abriss erfolgreich aufgezeigt, so dass die hier verwendete Simulationsmethode grundsätzlich funktioniert. Eine analytische Auswertung der Deformation aus Abbildung 5.6 folgt in Kapitel 6, insbesondere im Vergleich mit der Deformation in anderen Strömungsverhältnissen.

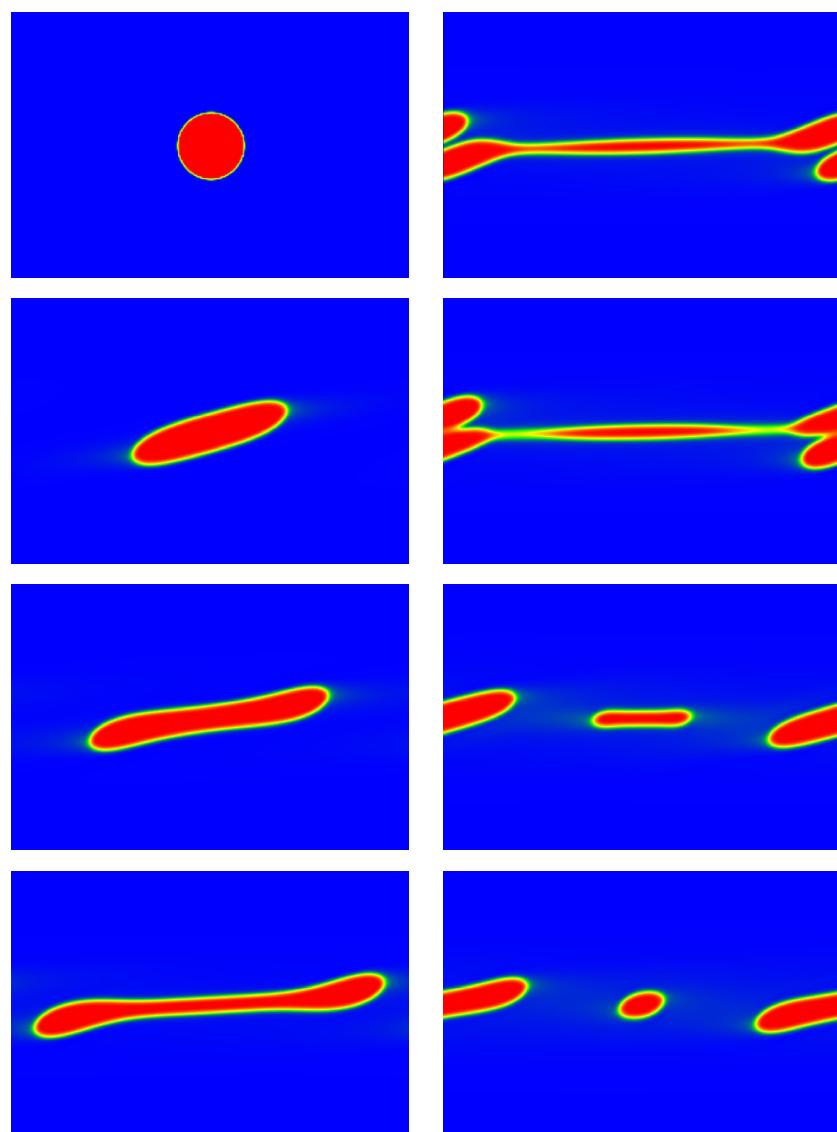


Abbildung 5.6: Deformationsverhalten mit $R = 20$ für verschiedene normierte Zeitschritte spaltenweise von oben nach unten, links $t^* = 0, 7.5, 15, 22.5$ und rechts $t^* = 28.5, 30, 34.25, 37.5$ mit Kennzahlen nach Tabelle 5.5, in der vollen Domain $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$.

6 Erhöhung der Reynoldszahl

In diesem Kapitel erfolgt die Anpassung der Strömungsbedingungen der gezeigten Simulationsmethode anhand der Reynoldszahl. In Tabelle 6.1 ist eine Übersicht aller Testfälle mit Parametern und Kennzahlen dargestellt, während anschließend die Ergebnisse optisch und analytisch anhand der Dichte des dispergierten Fluids und des Ordnungsparameters ϕ dargestellt sind und ausgewertet werden.

6.1 Parametereinstellung der Testfälle

Mit unterschiedlichen Parametern wurde die Auswirkung der Erhöhung der Reynoldszahl Re auf die Tropfendeformation untersucht. Hierbei gilt es zu beachten, dass in dieser Methode die numerische Definition $Re_{num} = \frac{\dot{\gamma}R^2}{\nu}$ gemäß Gleichung 5.2 für die Simulation verwendet wird.

In Tabelle 6.1 sind die Parameter und Kennzahlen für die unterschiedlichen Strömungsbedingungen aufgetragen. Die Erhöhung der Reynoldszahl Re erfolgt insbesondere durch die Anpassung der Wandgeschwindigkeit $v_w = v_{lattice}$, dem Radius R , der charakteristischen Länge L_{char} in Kombination mit der Auflösung N und der kinematischen Viskosität ν im Zusammenhang mit τ . Das Tropfenverhalten ist nachfolgend in den Abbildungen dargestellt.

Die Ergebnisse der Simulation für $Re = 0.0625$ nach Komrakova et al. ist bereits in Abbildung 5.6 dargestellt. In den nachfolgenden Tests für verschiedene Strömungsumgebungen sind die Parameter stärker nach den numerischen Restriktionen von OpenLB eingestellt worden. Besonders

$$\Delta x = \frac{L_{char}}{N}, \quad N > Re \frac{\tau - \frac{1}{2}}{3v_{lattice}}, \quad \nu = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \Delta t, \quad \nu^* = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (6.1)$$

gilt es bei der Parameter Auswahl zu beachten. Zusätzlich gilt $\tau \in [0.5, 1]$ und $v_{lattice} \leq 0.1$. Für die schnellste und stabilste Simulation soll $v_{lattice} = 0.1$ angestrebt werden, während $v_{lattice} = 0.02$ für akkurate, weniger kompressible Simulationen dient [10]. Für den Fall von $Re = 0.0625$ war eine kleinere Geschwindigkeit $v_{lattice} \ll 0.1$ notwendig, um die geringe Reynoldszahl erreichen zu können. Nach Gleichung 5.1 und 6.1 gilt $\Delta t = 1$ bei dem Konversionsfaktor $C_\nu = 1$ für die Einstellung $\nu_{char} = \nu^*$ mit $\nu^*(\tau)$. Nur dann sind die physikalische und Lattice Geschwindigkeit gleich mit $v_{char} = v_{lattice}$.

Die Erhöhung der Reynoldszahl $Re = \frac{vL_c}{\nu}$ mittels der Auflösung N und der charakteristischen Länge L_{char} führt zu einer Abweichung von Re_{num} , da diese unabhängig von Auflösung und Länge ist und vom Radius R abhängt. Erhöhte Werte von Re haben keinen Einfluss auf die Simulationsergebnisse, solange sich Re_{num}

nicht ändert. Für den Fall $H = 8R$ und $L = N = 0.25R$ gilt $Re = Re_{num}$. Bei hohen Reynoldszahlen muss jedoch die Auflösung entsprechend hoch sein um Instabilitäten zu vermeiden, was eine Abweichung der beiden Kennzahlen mit sich bringt und die Hauptproblematik bei der Erhöhung der Reynoldszahl darstellt.

Parameter	$Re_{num} = 0.0625$	$Re_{num} = 3$	$Re_{num} = 12$
R	20	20	32
N	5	5	8
Ω	$240 \times 160 \times 80$	$240 \times 160 \times 80$	$384 \times 256 \times 128$
α	0.758	0.758	1.5
κ_1	0.000982	0.000982	0.0075
κ_2	0.000654	0.000654	0.005
Γ	1	1	1
τ	1	1	0.7
Δx	1	1	1
Δt	1/6	1	1
L_{char}	5	5	8
v_{char}	0.0125	0.1	0.1
$v_{lattice}$	0.00208333	0.1	0.1
ν_{char}	1	1/6	1/15
ρ_{char}	1	1	1
Ma	0.00360844	0.173205	0.173205
Kn	0.057735	0.057735	0.0144338
Ca	0.0625	20.16	0.5333
Ch	0.42	0.0379	0.046875
$Pe \cdot A$	0.0047375	0.0379	0.1875
λ	1	1	1
t^*	38400t	800t	1280t

Tabelle 6.1: Vergleichstabelle verschiedener Testfälle für unterschiedliche Reynoldszahlen Re mit allen OpenLB Parametern.

Einstellung von $Re = 3$

Durch die Gleichungen 6.1 wurde für $\tau = 1$ die kinematische Viskosität $\nu = 1/6$ eingestellt, um den Konversionsfaktor $C_\nu = 1$ zu erhalten, so dass nun $v_{char} = v_{lattice}$ gelten kann. Gleichzeitig wurden diese mit $v = 0.1$ gemäß den OpenLB Restriktionen eingestellt. Durch die wesentlich höhere Lattice Geschwindigkeit konnten die genormten Zeitschritte t^* gemäß Gleichung 5.3 erniedrigt werden, was zu einer geringeren Rechenzeit führt. Die Interface Parameter α und κ_i wurden aus

dem nachgebildeten Komrakova Testfall übernommen, um mit möglichst wenig Parameterveränderungen das Deformationsverhalten zu beobachten. Durch auflösen der Gleichungen für $Re = Re_{num}$ und $N = L$, damit $\Delta x = 1$, folgt $N = L = 0.25R$.

Einstellung von $Re = 12$

Um die Reynoldszahl weiter zu erhöhen erfolgt eine Einstellung über τ und ν gemäß Gleichung 6.1. Die Interface Parameter α , κ_1 und κ_2 wurden erhöht, da es andernfalls zu Artefaktbildung und Instabilitäten in den entstandenen Simulationsbildern führt. Eine weitere Anpassung stellt der erhöhte Radius $R = 32$ dar, mit dem sich auch die Domain $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$ ändert. Um bei steigender Reynoldszahl Divergenz zu vermeiden, ist es notwendig, die Auflösung N hoch genug einzustellen. Auch hier wurde $Re = Re_{num}$ analog zu $Re = 3$ eingehalten.

Weitere Erhöhung der Reynoldszahl

Eine weitere Erhöhung der Reynoldszahl, etwa auf $Re = 100$ oder $Re = 1000$, gestaltet sich in der Praxis aufgrund der Parametereinstellung als schwierig. Die Simulation richtet sich nach $Re_{num}(v_{lattice}, R, \nu)$, während $Re(v_{lattice}, L_{char}, \nu)$ gilt. Die Parametereinstellung muss folgenden Kriterien genügen:

1. $N = L$, damit $\Delta x = 1$.
2. N und L sind abhängig von R .
3. $N \uparrow$ bei Erhöhung der Reynoldszahl zur Vermeidung von Divergenz, was durch $N = L$ und $Re \propto L$ zu $Re \uparrow$ führt, während Re_{num} gleich bleibt.
4. $C_\nu = 1$, indem $\nu = \nu^*$ gemäß Gleichung 6.1 damit $\Delta t = 1$.
5. $v_{lattice} \leq 0.1$ aus Stabilitätsgründen der LBM.

Durch die Limitierung von $v = 0.1 = const$ und der Anpassung anderer Parameter folgt, dass bei einer Erhöhung von der charakteristischen, numerischen Reynoldszahl Re_{num} über τ , ν , $N(R)$, $L(R)$ die Reynoldszahl Re stärker ansteigt. Eine sinnvolle Möglichkeit das gesamte System analog zu den Beispielen aus Tabelle 6.1 zu erhöhen und eine Divergenz der Simulation zu vermeiden, ist die Erhöhung des Radius R , wie etwa theoretisch von $Re(R = 20) = 12$ auf $Re(R = 200) = 120$. Diese Methode hätte einen enormen Rechenaufwand. Im Fall von $R > 32$ kommt es allerdings zu einem Fehler innerhalb des OpenLB Quellcodes und der implementierten Kopplungsmodelle. Es bedarf weiterer Anpassungen und Optimierung der implementierten Modelle innerhalb des OpenLB Codes, um die Reynoldszahl weiter zu erhöhen und das Modell für turbulente Strömungsfälle nutzbar zu machen.

6.2 Simulationsergebnisse

Nachfolgend sind die Simulationsergebnisse der in Tabelle 6.1 dargestellten Test-cases anhand der Dichte des dispergierten Fluids dargestellt.

Qualitative Auswertung von $Re = 3$

In Abbildung 6.1 ist für $Re = 3$ zu sehen, dass die Domain $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$ zu klein für eine vollständige Betrachtung ist. Ein Zusammenschmelzen der dispersen Phase ist zu beobachten. Dennoch ist in der Deformation ein beginnender Abriss sichtbar, da in der Mitte des Fluids mit zunehmender Zeit t^* die Dicke des Tropfens abnimmt, während die Enden dicker werden, so dass für eine wesentlich längere x -Koordinate ein Abbruch an den Enden des langgezogenen Tropfens zu vermuten ist. Diese Art von Tropfenabbruch wurde in der Literatur bereits experimentell für niedrige Viskositätsverhältnisse beobachtet und wird Tipstreaming genannt [11]. Interessierte Leser seien auf Inamuro et al. verwiesen [11]. Für eine steigende Zeit t^* bildet sich eine stationäre Verteilung des dispergierten Fluids aus. Dabei fällt auf, dass sich das dispergierte Fluid im approximativ-stationären Zustand nicht mittig in $y = H/2$ lokalisiert, sondern sich, entsprechend der beiden Wandgeschwindigkeiten, zwei Bereiche dicht neben $y = H/2$ ausbilden.

Qualitative Auswertung von $Re = 12$

Abbildung 6.2 zeigt das Tropfenverhalten bei Strömungsverhältnissen von $Re = 12$. Grundsätzlich ähnelt die Verformung der von $Re = 3$. Auch hier deformeit der Tropfen so, dass am Ende der langgezogenen, ellipsoiden Form zwei Tropfen mit beginnenden Abriss abzeichnen. Aufgrund der Größe der Domain Ω reißen diese jedoch nicht wie beim Tipstreaming gemäß [11] ab, sondern vermischen sich durch die periodischen Ein- und Ausflussbedingungen miteinander, so dass sich exakt in der Mitte der Domain bei $y = H/2$ eine Phase des dispergierten Fluids ausbildet und ebenfalls einen approximativ-stationären Zustand einnimmt. Eine deutlich erkennbare Phasengrenze zur kontinuierlichen Phase bildet sich aus. Es ist auffällig, dass die Verformung bei $Re = 12$, gemessen an den genormten Zeitschritten t^* , wesentlich mehr Zeit benötigt, so dass die signifikanten Deformationsprozesse erst ab $t^* = 30$ beginnen.

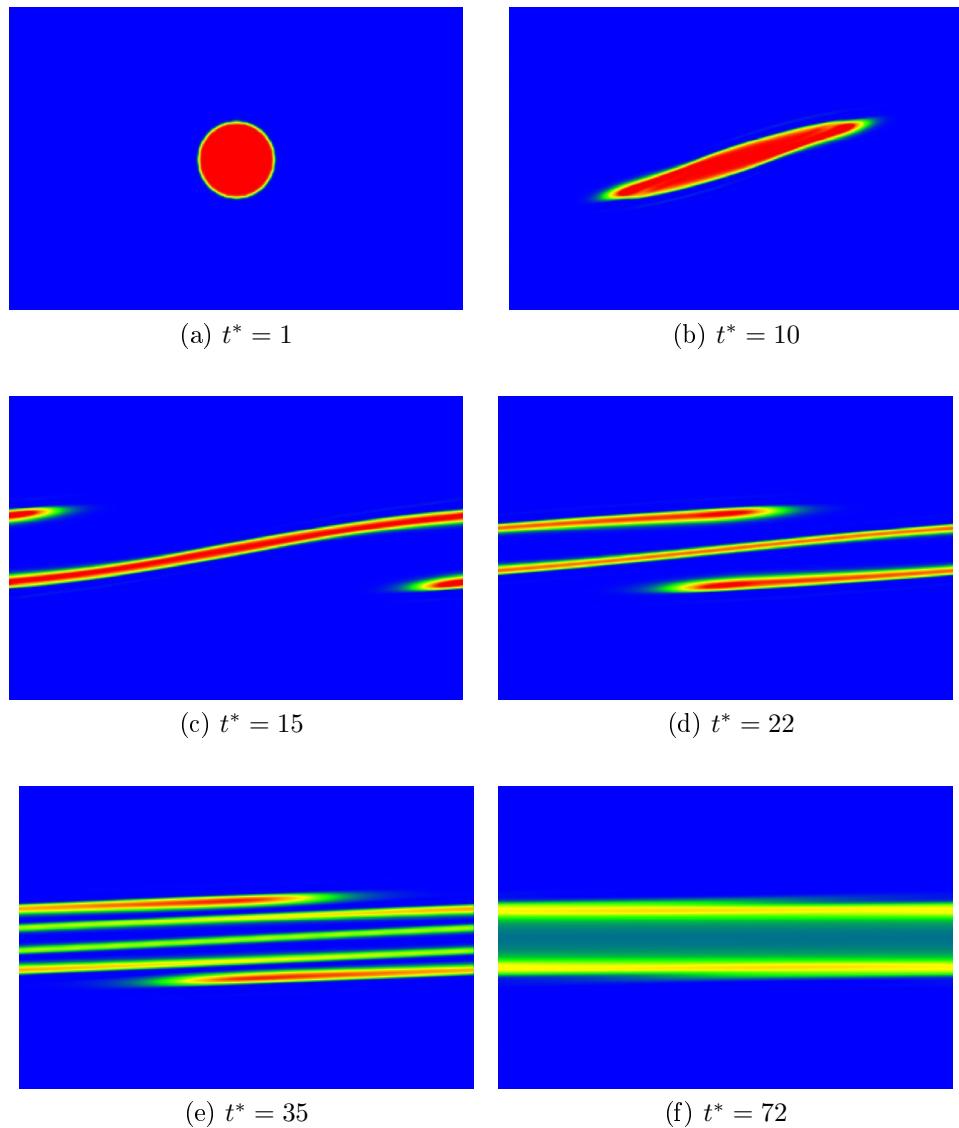


Abbildung 6.1: Deformationsverhalten des dispergierten Fluids für $R = 20$, $Re = 3$ für $t^* \in [0, 72]$.

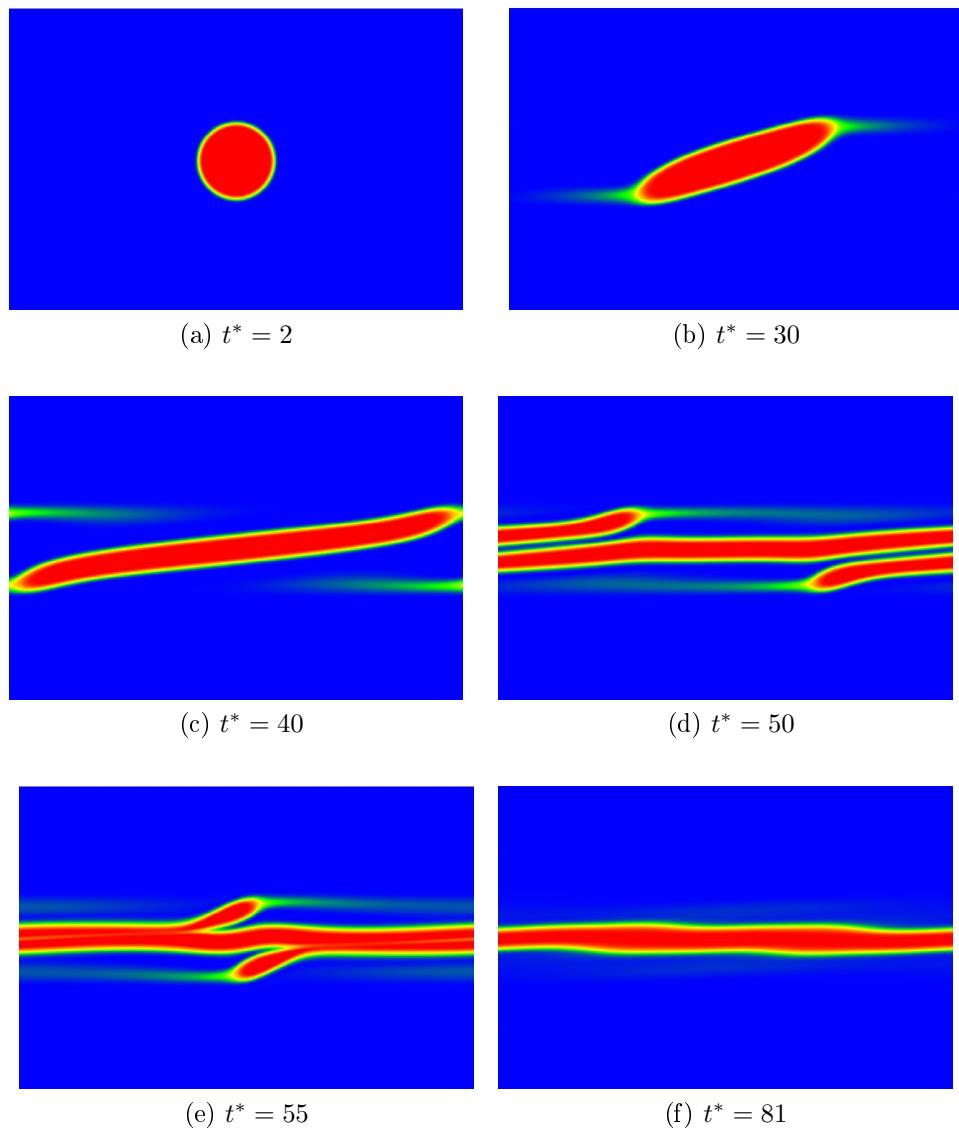


Abbildung 6.2: Deformationsverhalten des dispergierten Fluids für $R = 32$, $Re = 12$ für $t^* \in [0, 81]$.

6.3 Quantitative Auswertung der Momentendichte

Um die Tropfendeformation auch analytisch und quantitativ auswertbar zu machen, wurde eine Funktion implementiert, die zu jedem Zeitpunkt t^* an jeder Stelle x einen Datensatz für ϕ und ρ nach Formel 3.22 und 3.23 abspeichert und somit durch Plots visualisiert werden können. Dabei werden die Werte linear über zwei eingestellte Linien innerhalb der Domain $\Omega(R)$ gemessen, der Centerline und Upperline, mit

$$\vec{r}_{Center} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{H}{2} \\ \frac{B}{2} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{r}_{Upper} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{H}{2} + 0.35R \\ \frac{B}{2} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Es gilt $\lambda \in [0, L]$ mit Länge $L = x_{max}$, Höhe $H = y_{max}$, Breite $B = z_{max}$ für $\Omega(R) = L \times H \times B$. Visualisiert ist dies für den Raum $\Omega = 12R \times 8R \times 4R$ in Abbildung 6.3 als Normale der z -Richtung.

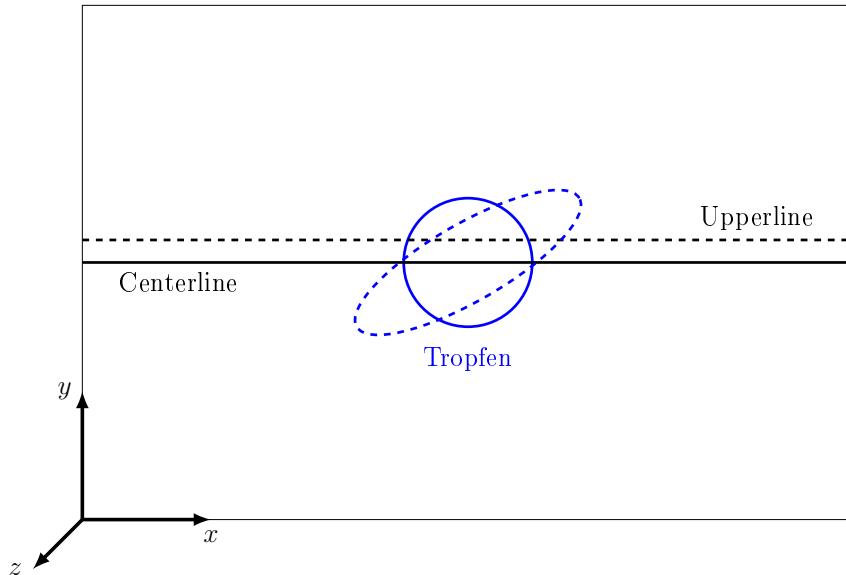


Abbildung 6.3: Visualisierung der Centerline und Upperline bei $\Omega(R)$.

Eine beispielhafte Darstellung von $\phi(t^*, x)$ ist in Abbildung 6.4 zu sehen. Dort ist für den Fall $Re = 0.0625$ und $R = 20$ zum Zeitpunkt $t^* = 50$ die weitere Deformation nach dem Abriss aus Abbildung 5.6 anhand der Centerline zu betrachten. Der Ordnungsparameter ϕ stellt mit $\phi = C_1 - C_2$ als Differenz der Komponentendichten C_i eine akkurate Möglichkeit dar, den Abbruch und die Deformation quantitativ darzustellen und auszuwerten. Dabei wird zu jedem Zeitschritt t^* für jeden x -Wert ein Wert für $\phi(t^*, x)$ gespeichert und letztlich graphisch dargestellt.

Mit der Komponentendichte des kontinuierlichen Fluids $C_1 = 1$ und des dispergierten Fluids $C_2 = 1$ sind der Wertebereich $\phi \in [-1, 1]$ und der $\phi(t^*, x)$ Verlauf von Interesse. Geht die eingeführte Messlinie durch den Tropfen in der Domain, so wird $\phi = 0 - 1 = -1$, während außerhalb des Tropfens $\phi = 1 - 0 = 1$ gilt. Anhand der Spitzen, Absenkungen und der Änderungsrate kann die Tropfendynamik beschrieben werden. Da sich für die Dichte $\rho = C_1 + C_2 = 1 = \text{const}$ ergibt, kann im Folgenden auf eine graphische Gegenüberstellung verzichtet werden.

Für Abbildung 6.4 zeigt $\phi \approx -1$ die Stellen, an denen die Tropfen der dispergierten Phase lokalisiert sind. Außerdem ist bei $x \approx 0$ eine Ausbildung eines weiteren Tropfenabisses zu vermuten, da $\phi \rightarrow -1$, während $\phi(x \approx 20)$ und $\phi(x \approx 220)$ ansteigen und beim Tropfenabriß $\phi \rightarrow 1$ wird. Die ausgebildete Oberflächenspannung kann ϕ beeinflussen, so dass lokal $\phi \in [-1, 1]$ über- oder unterschritten wird.

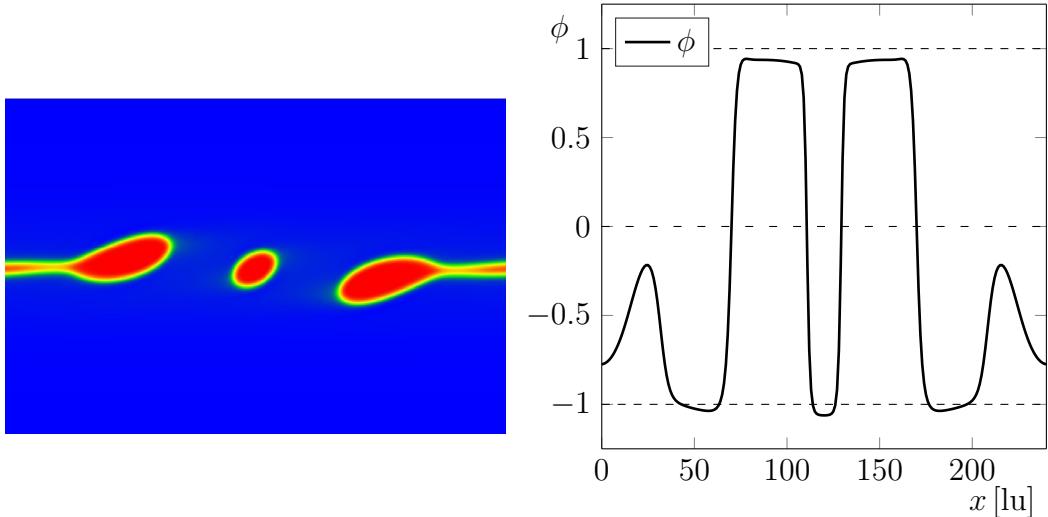


Abbildung 6.4: Tropfendeformation nach dem Abriss bei $Re = 0.0625$, $R = 20$ zum Zeitpunkt $t^* = 50$ mit der Darstellung von ϕ über der Centerline.

Bei der Auswahl der abgebildeten, charakteristischen Zeitschritte liegt für alle Testfälle ein besonderer Fokus auf der Darstellung von Anfangs- und Endzustand, so wie den charakteristischen Deformationsprozessen dazwischen. Dabei beziehen sich die abgebildeten $\phi(t^*, x)$ immer auf die visuell dargestellten Zeitpunkte aus Abbildung 5.6, 6.1 und 6.2.

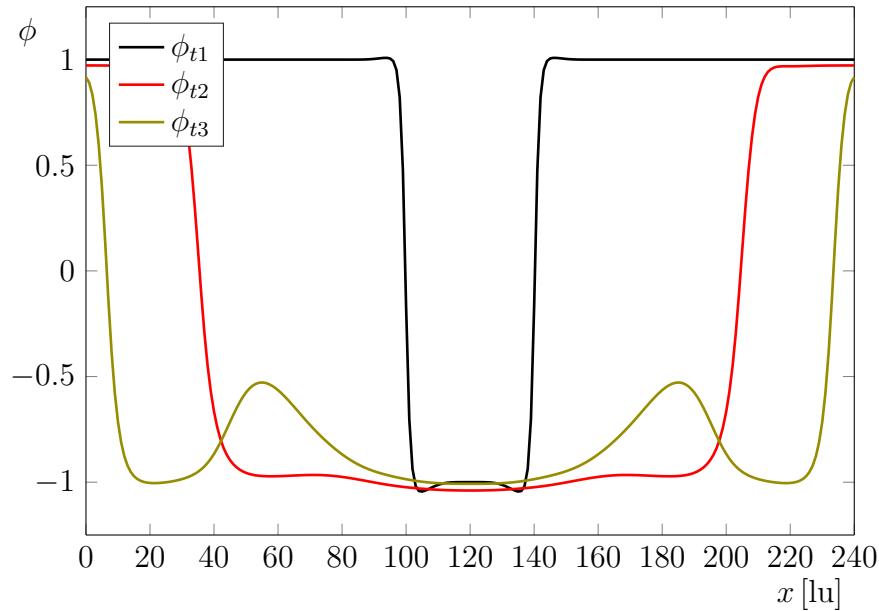
Auswertung von $Re = 0.0625$

In Abbildung 6.5 für $Re = 0.0625$, anhand der Centerline, ist der Tropfenabriss auch analytisch eindeutig zu beobachten. Zu Beginn der Simulation ist bei $t_1^* = 1$ an den Übergangstellen von Tropfen zu kontinuierlicher Phase, bei $x \approx 100$ und $x \approx 140$, anhand leichter Erhöhungen und Erniedrigungen, das ausgebildete Interface zu beobachten. Mit steigender Simulationszeit t^* verbreitert sich der Tropfen des dispergierten Fluids gemäß Abbildung 5.6 zunehmend, bis schließlich bei $\phi(t_3^* = 28)$ lokale Maxima von ϕ symmetrisch zum Mittelpunkt des Tropfens bei $x_1 \approx 55$ und $x_2 \approx 185$ zu beobachten sind. Diese Erhöhung ist das Resultat des beginnenden TropfenabrisSES. Der Tropfen wird zunehmend dünner, die Grenzflächen nähern sich einander an und C_2 nimmt ab, so dass ϕ ansteigt.

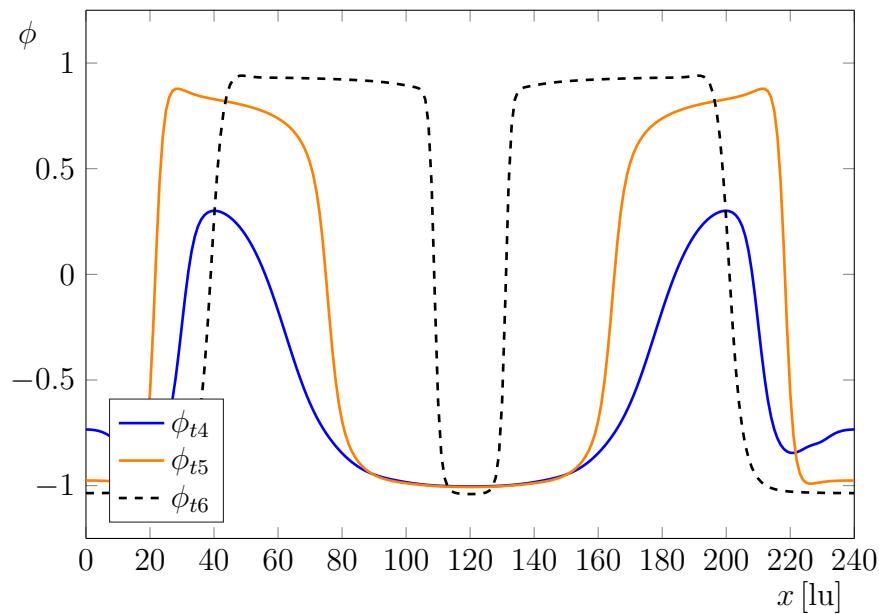
Für die darauffolgenden Zeitschritte nähert sich ϕ symmetrisch zum Initialtropenzustand wieder $\phi \rightarrow 1$, so dass ausschließlich kontinuierliche Phase vorliegt. Der Tropfen ist bei $t_6^* = 38$ und $\phi(t_6^*)$ komplett abgerissen und der Satellittropfen [20] inmitten der Domain Ω hat sich bereits erneut in sphärischer Form angeordnet. Der Satellittropfen hat nun einen signifikant kleineren Radius als der Initialtropfen. Mit $\phi = 1$ ist im Bereich $x \approx 50 - 115$ und $x \approx 125 - 190$ reine kontinuierliche Phase auf Höhe der Centerline angelagert. Besonders im Endzustand $t_6^* = 38$ gleichen sich die dargestellten $\phi(t^*, x)$ für Centerline und Upperline, während sich die Darstellungen für die Zeitschritte dazwischen deutlich unterscheiden. Die Centerline hat einen Verlauf symmetrisch zum Tropfenumprung aufgezeigt. Da die Upperline räumlich um $0.35R$ nach oben verschoben wurde, kann hier ein anderer Deformationsverlauf beobachtet werden. Die dargestellte Kurve bewegt sich nach rechts, in Richtung der beeinflussenden Wandbewegung. Im Zustand $t_4^* = 30$ ist inmitten der Domain Ω die Upperline zu hoch, um den langgezogenen Tropfen darzustellen, so dass dort nur die weitaus dickeren Tochtertropfen im Ein- und Ausflussbereich der Domain zu sehen ist. Sobald der Tropfenabriss erfolgt, ist auch der Satellittropfen bei $x \approx 120$ wieder sichtbar. Aufgrund des geringen Radius R des neuen Tropfens, kann jedoch $\phi \approx -0.7$ nicht mehr $\phi = C_2 = -1$ erreichen, da die örtlich in y -Richtung verschobene Upperline nur noch den oberen Rand des Tropfens mit ausgeprägtem Interface trifft.

Sei ein späterer Zeitpunkt mit $t^* = 50$ in Abbildung 6.4 Gegenstand der Betrachtung, so wird deutlich, dass die größeren Tochtertropfen [20] sich weiter deformieren und anschließend erneut abreissen, was an den Erhöhungen für $\phi(t^* = 50)$ bei $x \approx 20$, $x \approx 220$ deutlich zu erkennen ist. Der wesentlich kleinere Satellittropfen bleibt aufgrund seines Verhältnis aus Interfacedicke und Tropfengröße stabil. Umso kleiner der Tropfen, bei denselben Interface Parametern, desto höhere äußere Kräfte sind nötig, um den Tropfen zu deformieren und schließlich zu zerreißen. Die Art des TropfenabrisSES der beiden Tochtertropfen ist identisch zu dem des Initialtropfens für $Re = 0.0625$.

6 Erhöhung der Reynoldszahl



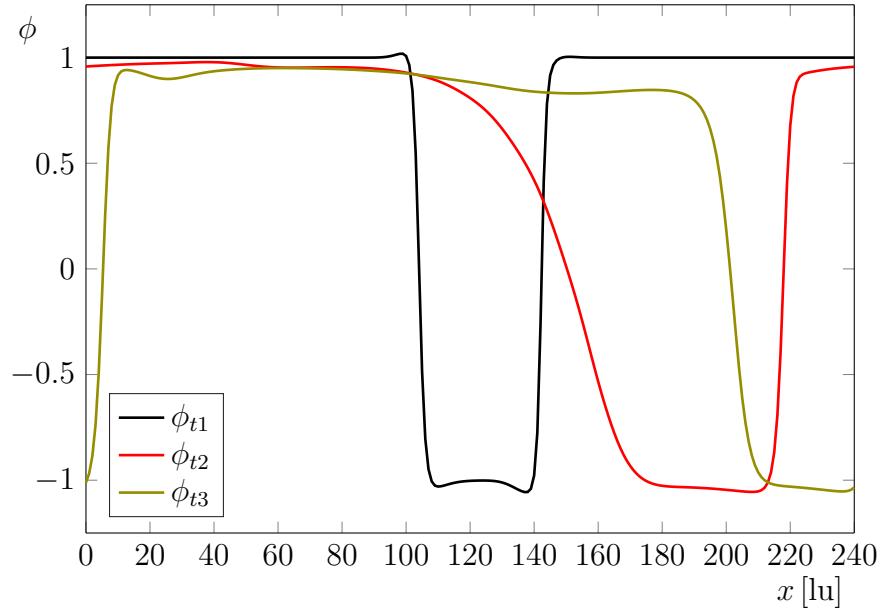
(a) Centerline Teil 1



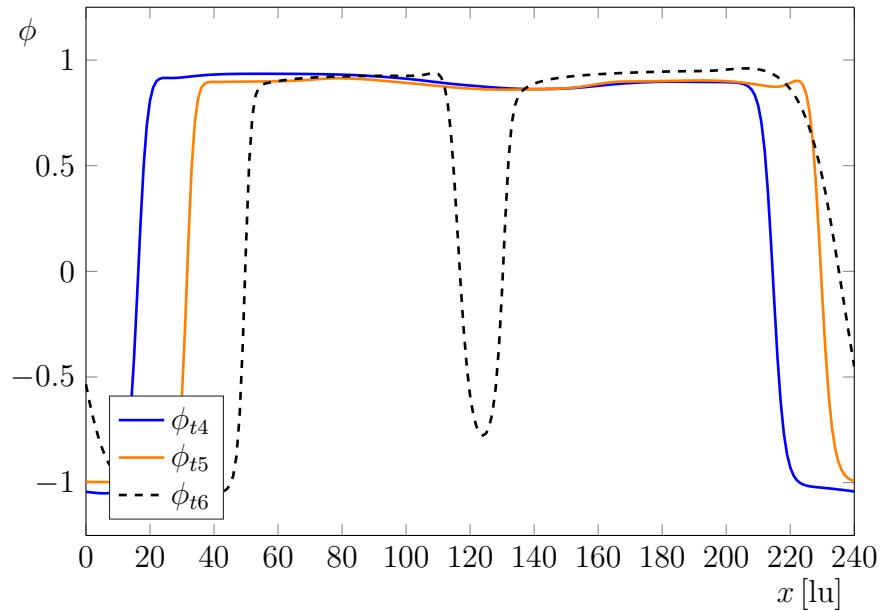
(b) Centerline Teil 2

Abbildung 6.5: Betrachtung des Tropfenabisses bei $Re = 0.0625$ und $R = 20$ anhand der Momentendichte $\phi = C_1 - C_2$ für verschiedene charakteristische Zeitschritte $t_1^* = 1, t_2^* = 22, t_3^* = 28, t_4^* = 30, t_5^* = 32, t_6^* = 38$ aus Abbildung 5.6 anhand der Centerline.

6 Erhöhung der Reynoldszahl



(a) Upperline Teil 1



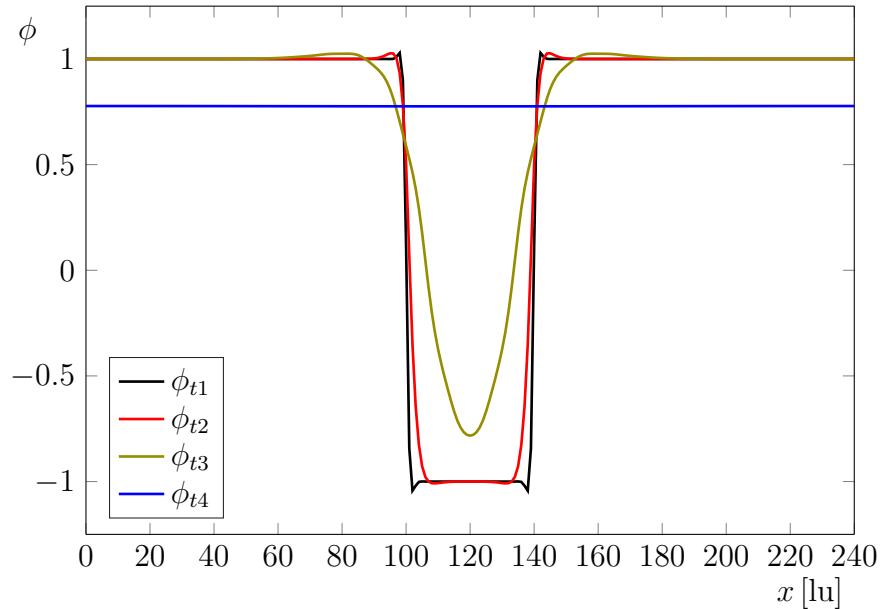
(b) Upperline Teil 2

Abbildung 6.6: Betrachtung der Tropfenabrisse bei $Re = 0.0625$ und $R = 20$ anhand der Momentendichte $\phi = C_1 - C_2$ für verschiedene charakteristische Zeitschritte $t_1^* = 1, t_2^* = 22, t_3^* = 28, t_4^* = 30, t_5^* = 32, t_6^* = 38$ aus Abbildung 5.6 anhand der Upperline.

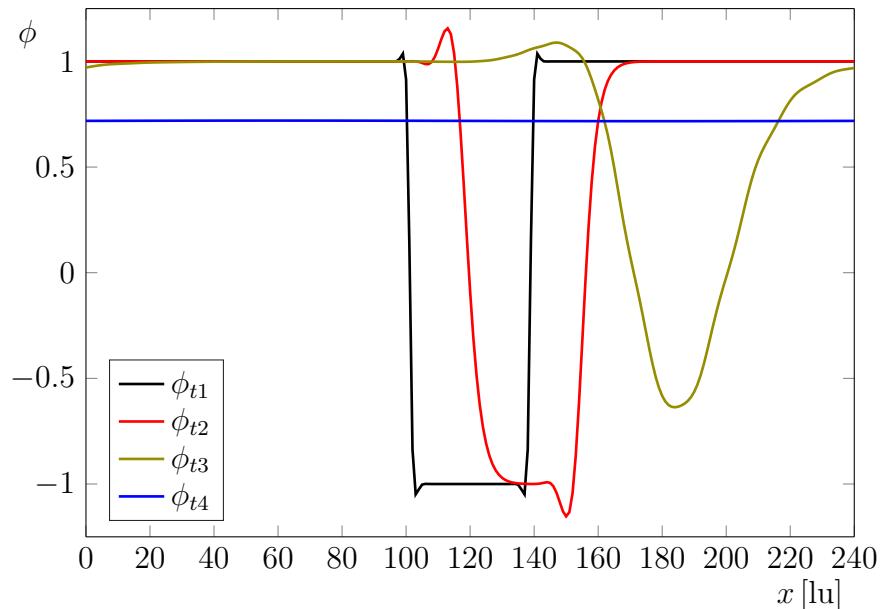
Auswertung von $Re = 3$

Bei der Betrachtung von $Re = 3$ in Abbildung 6.7 wird sowohl auf Höhe der Centerline, als auch auf der Upperline der stationäre Endzustand mit $\phi(t_4^* = 72)$ deutlich mit $\phi(t_4^* = 72) \approx 0.8 = const$ und $\phi_{\frac{d}{dx}} = 0$. Zu Beginn der Deformation ist analog zu $Re = 0.0625$ am Rand des Tropfens zum Übergang der kontinuierlichen Phase eine Erhöhung und Erniedrigung festzustellen. Diese lokalen Extrema sind hier jedoch im direkten Vergleich zu $Re = 0.0625$ deutlich spitzer, trotz gleich eingestellter Interface Parameter. Dies ist auf die Einstellung des Interfaces in stärkerer Strömungsumgebung zurückzuführen. Trotz der sehr deutlichen Deformation in x -Richtung gemäß Abbildung 6.1 verändert sich $\phi(t^*, x)$ anhand der Centerline bis $t_3^* = 22$ nur geringfügig. Derselbe betrachtete Zeitraum über die Upperline macht die Deformation anhand des verschobenen Orts der Messungen deutlicher sichtbar, was die Sinnhaftigkeit zweier verschobener Messlinien nach Gleichung 6.2 unterstreicht. Der Tropfen verschiebt sich zunehmend nach rechts, während sich der Tropfen in Form des Minimum von $\phi = -1$ zu $\phi \approx -0.6$ verändert, da er sehr schmal wird und örtlich nicht mehr vollständig in der Upperline liegt.

Dennoch kann für die charakteristischen Zeitschritte anhand der Centerline ein deutlicher Trend beobachtet werden. Die Momentendichte ϕ nimmt symmetrisch zum Tropfenursprung stetig ab und nähert sich durch ausdünnen an $\phi = const \approx 0.8$ an. Auch die gemessenen ϕ -Werte der Upperline pendeln sich im approximativen stationären Endzustand ein. Allerdings kann hier ein leicht abweichender Wert von $\phi = const \approx 0.7$ festgehalten werden. Diese Abweichung ist der örtlichen Verschiebungen der Messlinien geschuldet.



(a) Centerline



(b) Upperline

Abbildung 6.7: Betrachtung der Tropfendefformation bei $Re = 3$ und $R = 20$ anhand der Momentendichte $\phi = C_1 - C_2$ für verschiedene charakteristische Zeitschritte $t_1^* = 1$, $t_2^* = 10$, $t_3^* = 22$, $t_4^* = 72$ aus Abbildung 6.1 anhand der Centerline und Upperline.

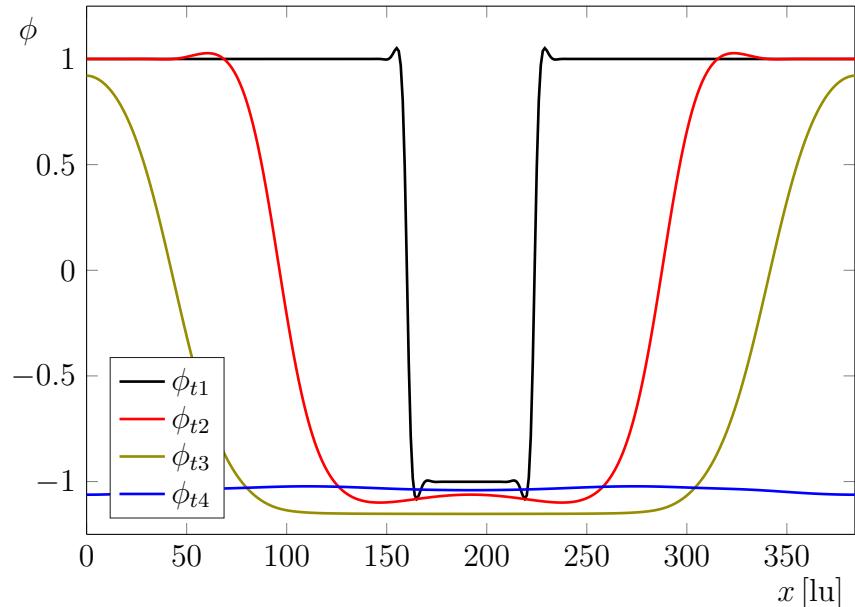
Auswertung von $Re = 12$

Die Tropfendeformation von $Re = 12$ anhand Abbildung 6.8 verläuft vergleichbar mit der von $Re = 3$. Analog zu beiden zuvor diskutierten Testfällen kann auch bei $Re = 12$ zu Beginn der Simulation bei $t_1^* = 2$ beim Übergang von Tropfen zu kontinuierlicher Phase die Ausbildung von ϕ -Spitzen beobachtet werden. Dabei ist besonders auffällig, dass die Ausprägung der lokalen Extrema mit der steigenden Reynoldszahl steigt, was auf einen Zusammenhang zwischen Einstellung des Interfaces, der Phasenkopplung, und den Strömungsbedingungen schließen lässt.

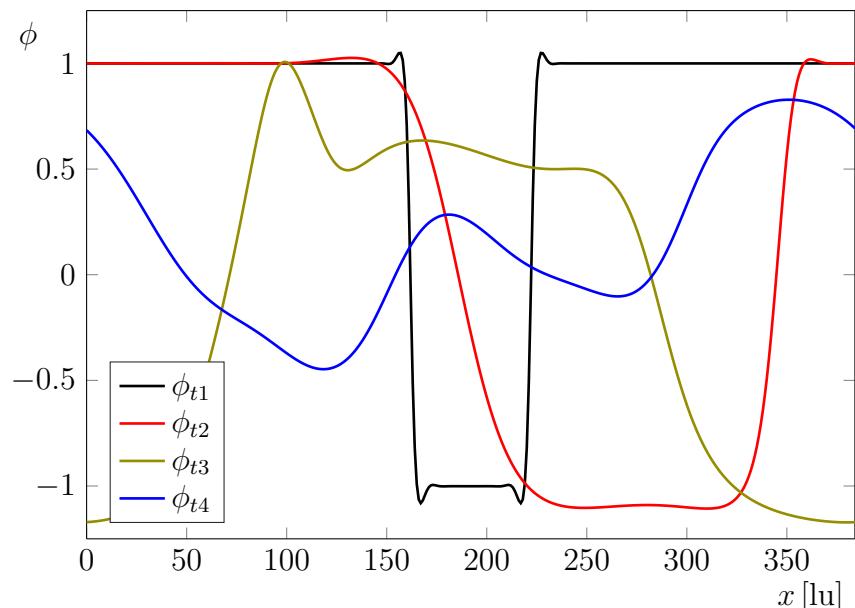
Während $Re = 3$ sich anhand der Centerline ausdünnnt und schmäler wird, verbreitert sich der Initialtropfen bei $Re = 12$ immer weiter, bis sich inmitten der Domain Ω eine stationäre Phase, bestehend aus dem dispergierten Fluid, mit $\phi(t_4^* = 81) = \text{const} \approx -1$ einstellt. Die Tropfenverbreiterung verhält sich symmetrisch zum Tropfenursprung. Der approximativ stationäre Endzustand ist für $Re = 12$ noch nicht konstant. Der langgezogene Tropfen, der sich nun als Phasenmittig im simulierten Bereich angelegt hat, weist noch wellenförmige Einpendelungsmerkmale auf und kann daher nur annäherungsweise als konstant betrachtet werden. Die Tipstreaming Eigenschaften nach Abbildung 6.2 können anhand $\phi(t^*, x)$, aufgrund der Position der Messlinien, nur bedingt nachgewiesen werden. Die Maximalstelle von $\phi(t_3^* = 50, x = 100) = 1$ anhand der Upperline weist darauf hin.

Da diese Einstellung der stationären Endphase örtlich mittig stattfindet, misst die Upperline in diesem Fall von $Re = 12$ verstärkt die Randphase des eingestellten Zustands, die anhand der Wellenform von $\phi(t_4^* = 81)$ die Beobachtung bestätigt. Es ist davon auszugehen, dass bei vollständiger Einstellung bei $t^* \uparrow$ folglich $\phi \frac{d}{dx} = 0$ gilt.

6 Erhöhung der Reynoldszahl



(a) Centerline



(b) Upperline

Abbildung 6.8: Betrachtung der Tropfendefinition bei $Re = 12$ und $R = 32$ anhand der Momentendichte $\phi = C_1 - C_2$ für verschiedene charakteristische Zeitschritte $t_1^* = 2$, $t_2^* = 40$, $t_3^* = 50$, $t_4^* = 81$ aus Abbildung 6.2 anhand der Centerline und Upperline.

6.4 Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Testfälle

Um die Plots von ϕ für die verschiedenen Testfälle akkurat vergleichen zu können, reicht die Betrachtung der normierten Zeit t^* nicht aus, da diese lediglich eine dimensionslose Zeitskala darstellt und für verschiedene Strömungsverhältnisse unterschiedlich sein kann. Beim Vergleich von $Re = 3$ und $Re = 12$ fällt gemäß Abbildungen 6.1 und 6.2 auf, dass beide Testfälle gegen einen stationären Zustand streben, in denen das Fluidverhalten sich nicht mehr verändert und $\frac{d}{dt} \approx 0$ gilt. Um diese Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Testfällen zu ermöglichen, wird im Folgenden eine prozentuale Zeiteinteilung ausgehend vom stationären Zustand vorgeschlagen. Sei in dieser Approximation der Zeitpunkt beim Erreichen dieses stationären Zustands t_{stat}^* , dann gilt

$$\phi(t_{stat}^*) \frac{d}{dt} \approx 0 \quad (6.3)$$

und der Deformationsprozess kann in der vorgeschlagenen Methode zwischen $t^* = 0$ und t_{stat}^* prozentual aufgeteilt und betrachtet werden mit $k \cdot t^*$ und $k \in [0, 1]$. Nachfolgend sind in Abbildung 6.9 und 6.10 die Testfälle $Re = 3$ und $Re = 12$ mit verschiedenen k -Werten, gemäß den Zusammenhängen aus Tabelle 6.2, verglichen.

	$Re = 3$	$Re = 12$
k -Faktor	$k \cdot t_{stat}^*$	$k \cdot t_{stat}^*$
0.25	15	20
0.50	30	40
0.75	45	60
1.00	60	80

Tabelle 6.2: Genormte Zeitschritte t^* zu den jeweiligen prozentualen Schritten von t_{stat}^* mit $k \cdot t_{stat}^*$.

Gemäß Abbildungen 6.9 und 6.10 ist auch analytisch zu erkennen, dass die Verformung für $Re = 12$ deutlich später einsetzt als für $Re = 3$, trotz stärkerer Strömung. Dies bestätigen auch die sichtbaren Deformationen in Abbildung 6.1 und 6.2. Dabei wird im Fall von $Re = 3$ der Tropfen wesentlich länger und schmäler, was besonders für $k = 0.25$ und $k = 0.5$ anhand Abbildung 6.9 zu erkennen ist. Auch der stationäre Endzustand für t_{stat}^* unterscheidet sich signifikant. Während sich das dispergierte Fluid für $Re = 3$ in zwei Phasengrenzen, symmetrisch zu $y = \frac{H}{2}$, aufteilt, fließt im Fall von $Re = 12$ das Fluid wieder ineinander und bildet für t_{stat}^* eine erkennbare Phase mitten im Kanal mit ausgebildeter Phasengrenze aus, siehe

6 Erhöhung der Reynoldszahl

Abbildung 6.2. Hinsichtlich dieses unterschiedlichen Verhaltens sind die Werte von ϕ für $t^* \rightarrow t_{stat}^*$ deutlich, so dass für $Re = 12$ im Bereich der Centerline auf der Höhe $y = \frac{H}{2}$ mit $\phi = C_1 - C_2 \approx -1$ ausschließlich das dispergierte Fluid vorliegt, siehe Abbildung 6.10.

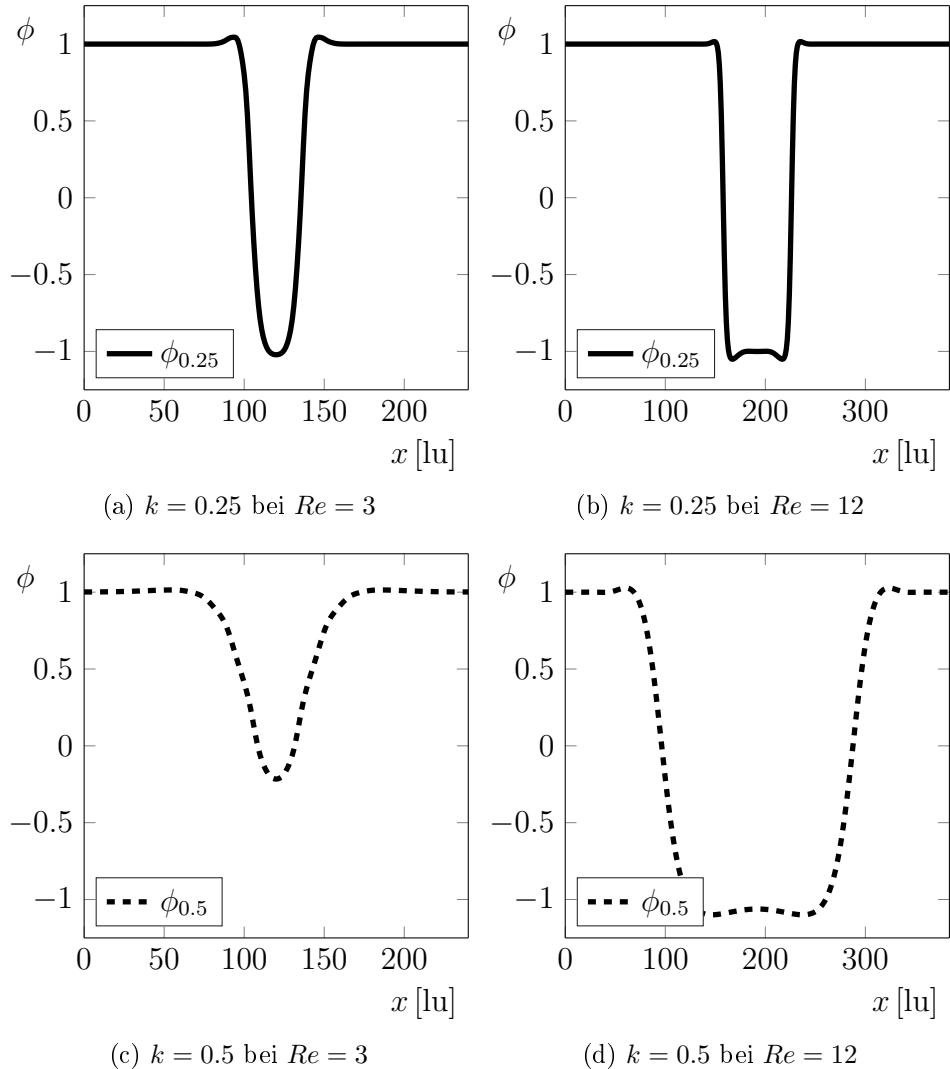


Abbildung 6.9: Vergleich von $Re = 3$ und $Re = 12$ für unterschiedliche k mit $\phi = \phi(k \cdot t_{stat}^*, x)$ anhand der Centerline.

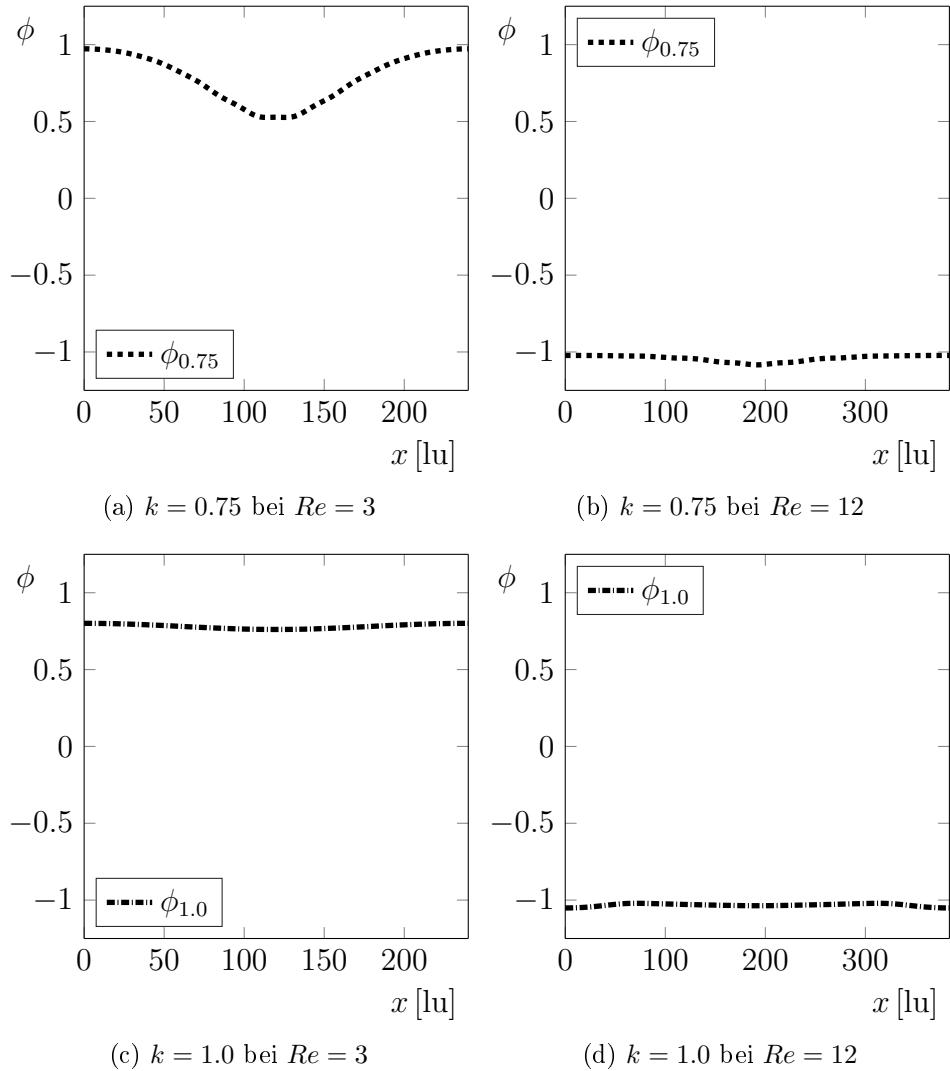


Abbildung 6.10: Vergleich von $Re = 3$ und $Re = 12$ für unterschiedliche $k \in [0, 1]$ mit $\phi = \phi(k \cdot t_{stat}^*, x)$ anhand der Centerline.

7 Ausblick

7.1 Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit war die numerische Simulation des Tropfenaufbruchs in einer binären Scherströmung. Das Tropfenverhalten wurde mittels des Free Energy Lattice-Boltzmann-Modells in der OpenLB Bibliothek für C++ für unterschiedliche Strömungsverhältnisse quantitativ und qualitativ untersucht und ausgewertet. Dabei wurde zunächst auf Grundlage des aktuellen wissenschaftlichen Stands die numerische Methode eingeführt und anhand eines Literaturbeispiels validiert, so dass eine Anpassung der zu simulierenden Strömungsumgebung stattfinden konnte. Die konzipierte Methode konnte in Anlehnung an Komrakova et al. [15] und Semprebron et al. [32] überprüft und bestätigt werden, so dass eine Simulation für den Tropfenabriss bei $Re = 0.0625$ mit übereinstimmenden Ergebnissen erfolgen konnte. Der Tropfenabriss resultierte in zwei Tochtertropfen und einem Satellitttropfen. Zu einem späteren Zeitschritt konnte für denselben Testfall ein erneutes, analoges Aufbruchverhalten der beiden gebildeten Tochtertropfen beobachtet werden. Die Strömungsumgebung wurde daraufhin auf $Re = 3$ und $Re = 12$ erhöht, wo ein abweichendes Deformationsverhalten mit Tendenzen zu Tipstreaming Abbruchverhalten [11] und stationären Endzuständen festgestellt werden konnte. Hierbei konnten deutliche Unterschiede der beiden Testfälle festgestellt werden, die auf die gewählten Interface Parameter zurückzuführen sind. Die Untersuchungen wurden optisch anhand der Dichte des dispergierten Fluids und analytisch mittels Dichte ρ und Ordnungsparameter ϕ , als Differenz der Komponentendichten der verwendeten Rechengitter, ausgewertet.

7.2 Ausblick

Mit dieser Arbeit konnte die entwickelte Simulationsmethode mittels Free Energy LBM in OpenLB erfolgreich für die Simulation der Tropfendeformation und des Tropfenaufbruchs in laminaren Strömungsverhältnissen einer binären Scherströmung verwendet werden. Die qualitativen und quantitativen Ergebnisse stimmen gut mit der Literatur überein, so dass auf der Basis der Methode dieser Arbeit in Zukunft weiter aufgebaut werden kann. Eine Anpassung des Modells an turbulente Strömungsbedingungen konnte aufgrund von Schwierigkeiten bei der Parametereinstellung noch nicht vorgenommen werden. Diese Arbeit stellt die Vorleistung dar, um in Zukunft insbesondere die Nachbildung des Tropfenabisses im turbulenten Regime zu ermöglichen.

Die implementierte Methode zur Auswertung der Momentendichte ist als Grundlage der Vergleichbarkeit der Deformationsverläufe, wie im skizzierten Vorgehen für die Betrachtung stationärer Endzustände, von unterschiedlichen Strömungsumge-

7 Ausblick

bungen essenziell. Die quantitative Auswertung kann künftig weiter ausgebaut werden. Neben der Ausgabe charakteristischer Free Energy LBM Kennwerte, wie ϕ oder ρ , stellt die geometrische Deformation des Tropfens anhand von Elongation und Orientierungswinkel eine weitere Möglichkeit der Auswertung dar. Mit festen Bezugspunkten im Zentrum des Initialtropfens und am Tropfenrand, bei $x = R$ und $y = R$, kann die über die Zeit veränderte Länge L und Breite B im Zusammenhang mit dem Orientierungswinkel θ angegeben werden. Diese Methode ist bereits in der Literatur etabliert nach [15], [29] und stellt eine sinnvolle Ergänzung zur bisher implementierten Methode dar. Um weitere Testfälle betrachten zu können, sollten in Zukunft zudem unterschiedliche Viskositätsverhältnisse Gegenstand der Untersuchung sein, um ein breiteres Bild der Parameterzusammenhänge zu erhalten und auswerten zu können.

Die Abweichung des hier verwendeten Free Energy Modells und anderen Free Energy Modellen, auf denen bisherige Literatur basiert, hat die Parametereinstellung deutlich erschwert. Es muss eine Anpassung oder Erweiterung erfolgen, so dass eine Umrechnung einzelner Parameter möglich ist. In dieser Arbeit konnte durch die Diskrepanz der Definition des chemischen Potentials zu Kendon et al. [12] die Peclet Kennzahl Pe nur in Abhängigkeit eines unbekannten Parameters eingestellt werden. Ein optimiertes Free Energy Modell mit ergänzten Definitionen bezüglich der Pecletzahl könnte mit einer vollständigeren Beschreibung und Umrechnungsmöglichkeiten von unterschiedlichen, gängigen Definitionen somit eine gezieltere Parametereinstellung für gewünschte Kennzahlen gewährleisten. Eine Möglichkeit dies zu bewerkstelligen stellt ein neuer UnitConverter dar, der in OpenLB implementiert werden kann. So müssen einzelne Kennwerte und Parameter nicht für den Testfall per Hand berechnet werden. Die Grundlage für eine solche Umrechnungsfunktion wurde im hier verwendeten Programmcode geleistet und sollte in Zukunft weiter optimiert werden.

Generell ist die Parametereinstellung bei LBM von besonders großer Bedeutung. In diesem Fall sind die Interface Werte α , κ und numerischen Kennzahlen Ca , Ca_{crit} , Ch , Pe von essentieller Bedeutung zur Einstellung der Testfälle. Tieferes Verständnis über die Zusammenhänge der Kennzahlen mit Re und deren korrekte Einstellung kann zu gezielteren numerischen Tests und aussagekräftigeren Ergebnissen führen sowie Instabilitäten vorbeugen. So konnte aufgezeigt werden, dass zu geringe Interface Parameter bei der Erhöhung von Re zu Artefakten bei den Simulationsergebnissen führen.

Die in LBM verwendete Einheit Lattice Units [lu] stellt beim Wissenstransfer eine Hürde dar. Während in gängiger Literatur und OpenLB aus mathematischen Gründen stets mit umgerechneten Parametern in Lattice Units gerechnet wird, macht dies die Umsetzung des gewonnenen Wissens und die Kommunikation für die Anwendung in realen Testfällen schwierig und schwer zugänglich für Außenstehende.

7 Ausblick

de. Eine intuitive, dynamische Umrechnungsmethode in physikalische Werte für den jeweiligen Testfall kann somit Parametereinstellung, Datenauswertung und Wissensvermittlung beschleunigen und fördern.

Um die numerischen Experimente allgemein schneller, effizienter und korrekt zu gestalten, sollte in Zukunft eine Optimierung des OpenLB Codes für Phasenkopplung und Free Energy erfolgen. Eine Ergänzung von Turbulenzmodellen der Free Energy LBM ist für die zukünftige Betrachtung höherer Reynoldszahlen notwendig. Besonders die Rechenintensität und Rechendauer kann für bestimmte Testfälle hoch ausfallen.

Grundsätzlich werden die numerischen Simulationen von Turbulenz-Phänomenen zunehmend bedeutender und sind der Schlüssel, um Turbulenz in Zukunft experimentell besser verstehen zu können. Ein tieferes Verständnis für das Deformationsverhalten von Tropfen in zunehmend turbulenten Umgebungen fördert den Wissensstand verfahrenstechnischer Problemstellungen, so dass auch komplexere Mehrphasensysteme und Strömungsbedingungen zukünftig korrekt simuliert werden können, was zu gezielter definierten Produkteigenschaften und effizienteren Produktionsprozessen in der Verfahrenstechnik führt.

Literatur

- [1] Tilo Arens, Frank Hettlich, Christian Karpfinger, Ulrich Kockelkorn, Klaus Lichtenegger, and Hellmuth Stachel. *Mathematik*. Springer, 2015.
- [2] Prabhu L. Bhatnagar, Eugene P. Gross, and Max Krook. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical review*, 94(3):511, 1954.
- [3] Heinz Brauer. *Grundlagen der Einphasen- und Mehrphasenströmungen*. Sauerländer, 1971.
- [4] Christopher E. Brennen. *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2005.
- [5] John W. Cahn and John E. Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *The Journal of Chemical Physics*, 28(2):258–267, 1958.
- [6] Carlo Cercignani. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer, 1988.
- [7] R.A. De Brujin. Tipstreaming of drops in simple shear flows. *Chemical Engineering Science*, 48(2):277–284, 1993.
- [8] Sybren R. De Groot and Peter Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Courier Corporation, 2013.
- [9] Bruno Eck. *Technische Strömungslehre*. Springer, 2013.
- [10] Max Gaedtke, Marc Haußmann, Fabian Klemens, Mathias J. Krause, Marie-Luise Maier, Albert Mink, Markus Mohrhard, Robin Trunk, Nicolas Hafem, Jesse Ross-Jones, and Stephan Simonis. *OpenLB User Guide Associated to Release 1.3: Open Source Lattice Boltzmann Code*. 2019.
- [11] Takaji Inamuro, Takayuki Miyahara, and Fumimaru Ogino. Lattice Boltzmann Simulations of Drop Deformation and Breakup in a Simple Shear Flow. In *Computational Fluid Dynamics 2000*. Springer, 2001.
- [12] Vivien M. Kendon, Michael E. Cates, Ignacio Pagonabarraga, J.C. Desplat, and Peter Bladon. Inertial effects in three-dimensional spinodal decomposition of a symmetric binary fluid mixture: A lattice Boltzmann study. *Journal of Fluid Mechanics*, 440:147–203, 2001.

Literatur

- [13] Karsten Köhler and Heike P. Schuchmann. *Emulgiertechnik: Grundlagen, Verfahren und Anwendungen*. Behr's Verlag DE, 2012.
- [14] Alexandra E. Komrakova. Single Drop Breakup in Turbulent Flow. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2018.
- [15] Alexandra E. Komrakova, Orest Shardt, Dmitry Eskin, and Jos J. Derksen. Lattice Boltzmann simulations of drop deformation and breakup in shear flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 59:24–43, 2014.
- [16] Alexandra E. Komrakova, Orest Shardt, Dmitry Eskin, and Jos J. Derksen. Effects of dispersed phase viscosity on drop deformation and breakup in inertial shear flow. *Chemical Engineering Science*, 126:150–159, 2015.
- [17] Matthias Kraume. *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik: Grundlagen und apparative Umsetzungen*. Springer, 2013.
- [18] Mathias J. Krause. Durch numerische simulation zur wissenschaftlichen erkenntnis. In *Messen und Verstehen in der Wissenschaft*. Springer, 2017.
- [19] Timm Krüger, Halim Kusumaatmaja, Alexandr Kuzmin, Orest Shardt, Goncalo Silva, and Erlend M. Viggen. *The Lattice Boltzmann Method*. Springer, 2017.
- [20] Jie Li, Yuriko Y. Renardy, and Michael Renardy. Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method. *Physics of Fluids*, 12(2):269–282, 2000.
- [21] Leonard B. Loeb. *The Kinetic Theory of Gases*. Courier Corporation, 2004.
- [22] Max Gaedtke, Marc Haußmann, Fabian Klemens, Mathias J. Krause, Marie-Luise Maier, Albert Mink, Markus Mohrhard, Robin Trunk, Nicolas Hafen, Jesse. *Spring School: Lattice Boltzmann Methods with OpenLB Software Lab*. 2018.
- [23] Thomas G. Mezger. *Das Rheologie Handbuch*. Farbe und Lack, 2016.
- [24] Walter Müller. *Mechanische Verfahrenstechnik und ihre Gesetzmäßigkeiten*. Walter de Gruyter, 2014.
- [25] Abdulmajeed A. Mohamad. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications With Computer Codes*. Springer, 2011.
- [26] Herbert Oertel Jr., Martin Böhle, and Thomas Reviol. *Strömungsmechanik: für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer, 2015.

Literatur

- [27] Sandra Petersen. *Bestimmung der Emulgiereffektivität von Emulgatoren am Beispiel der Scheibenemulgierung und Hochdruckhomogenisierung*. PhD thesis, 2012.
- [28] Ludwig Prandtl, Klaus Oswatitsch, and Karl Wieghardt. *Führer durch die Strömungslehre*. Springer, 2013.
- [29] Yuriko Y. Renardy and Vittorio Cristini. Effect of inertia on drop breakup under shear. *Physics of Fluids*, 13(1):7–13, 2001.
- [30] Julius C. Rotta. *Turbulente Strömungen: Eine Einführung in die Theorie und ihre Anwendung*. Springer, 2013.
- [31] Rüdiger Schwarze. *CFD-Modellierung: Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen*. Springer, 2012.
- [32] Ciro Semprebon, Timm Krüger, and Halim Kusumaatmaja. Ternary Free-Energy Lattice Boltzmann Model with Tunable Surface Tensions and Contact Angles. *Physical Review E*, 93(3), 2016.
- [33] Xiaowen Shan and Hudong Chen. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, 47(3):1815, 1993.
- [34] Sauro Succi. *The Lattice Boltzmann Equation: for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press, 2001.
- [35] Peter Weisbrod. Reduction of Unphysical Velocities in a Lattice Boltzmann Multiphase Model. Master's thesis, Karlsruher Institute for Technology, 2015.

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen, als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Ich habe die wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht und die Satzung des Karlsruher Instituts für Technologie zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in der jeweils gültigen Fassung beachtet.

Karlsruhe, den 19. September 2019