

Implementierung eines Schnittalgorithmus für die angereicherte Finite Elemente Methode für Zwei-Phasenströmungen

Markus Sons

12. Juli 2011

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	4
1. Einleitung	5
2. Grundlagen	6
2.1. Navier-Stokes Gleichungen	6
2.1.1. Massenerhaltung	7
2.1.2. Impulserhaltung	7
2.1.3. Rand- und Anfangswertbedingungen	8
2.1.4. Besonderheiten der Zweiphasenströmung	8
2.2. Level-Set-Gleichung	8
2.3. Diskretisierung	9
2.3.1. Schwache Form	9
2.3.2. Galerkin-Approximation	10
2.3.3. Räumliche Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen	10
2.3.4. Level-Set-Gleichung	11
2.3.5. eXtended Finite Element Method	11
2.3.6. Zeitintegration	11
3. Schnitalgorithmus	12
3.1. Vorhandene Algorithmen	12
3.1.1. Tetgen	12
3.1.2. Hexahedra	12
3.2. Implementierter Algorithmus	12
3.2.1. Zerlegung in Tetraeder	12
3.2.2. Schnittfälle	13
4. Ergebnisse	16
4.1. Zalesaks-Disk	16
4.1.1. Problemstellung	16
4.1.2. Ergebnisse	16
4.1.2.1. Massenverlust	16
4.1.2.2. Geometrieerhaltung	16
4.2. Aufsteigende Blase	16
4.3. Rayleigh-Taylor-Instabilität	16
4.4. Dammbruch	16
4.4.1. Problemstellung	16

4.4.2. Ergebnisse	17
5. Ausblick	19
A. Code	20
B. Bilder	21
Literaturverzeichnis	22

Abbildungsverzeichnis

2.1. Skizze der Domäne nach [1]	6
3.1. Zerlegungsmöglichkeiten	13
3.2. Zerlegung in sechs Tetraeder	14
3.3. Schnittfälle I	15
3.4. Schnittfälle II	15
4.1. Skizze des Zalesaks-Disk-Problems	16
4.2. Skizze des Dammbruch-Problems	17
4.3.	18
4.4.	18

1. Einleitung

2. Grundlagen

Das Berechnungsgebiet Ω ist dreidimensional und wird begrenzt durch den Rand $\Gamma = \partial\Omega$. Der Rand teilt sich auf in einen Dirichletrand Γ_g und einem Neumannrand Γ_h . Der Neumann-Rand tritt im Folgenden nur als sogenannte “do-nothing”-Bedingung auf.

Da sich die Arbeit mit Problemen der Zweiphasenströmungen beschäftigt, muss das Gebiet in zwei Teilgebiete Ω^+ und Ω^- aufgeteilt werden. Ihre gemeinsame Grenzfläche, im Folgenden auch Interface genannt, wird mit Γ_d bezeichnet.

Abbildung 2.1 stellt das Berechnungsgebiet dar und fasst alle in diesem Zusammenhang verwendeten Begriffe zusammen.

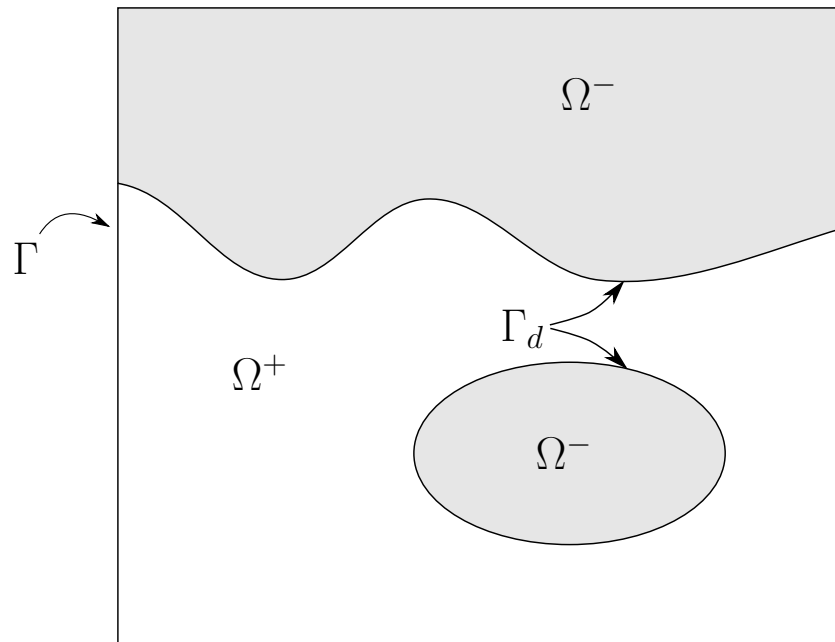


Abbildung 2.1.: Skizze der Domäne nach [1]

2.1. Navier-Stokes Gleichungen

Das Strömungsfeld wird durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben, die sich aus der Masse- und Impulserhaltung ergeben. Die Herleitung soll Beispielhaft für die Mas-

senerhaltung gezeigt werden.

2.1.1. Massenerhaltung

Die Massenerhaltung kann geschrieben werden als

$$\frac{DM}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (2.1)$$

mit der Masse M im Volumen V . Unter Anwendung des Reynolds'schen Transporttheorems und der Oberfläche S des Volumens V folgt daraus

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS = 0 \quad (2.2)$$

Durch Anwendung des Divergenztheorems können beide Terme in ein Volumenintegral zusammengefasst werden zur integralen Massenerhaltungsgleichung:

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0 \quad (2.3)$$

Da diese Gleichung für jedes beliebige Volumen gelten muss, muss es auch differentiell gelten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.4)$$

Für inkompressible Strömungen ($d\rho = 0$) vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.5)$$

2.1.2. Impulserhaltung

Aus der Impulserhaltung folgt die differentielle Impulserhaltungsgleichung für inkompressible Strömungen nach der Herleitung in [?] zu

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \mathbf{f}. \quad (2.6)$$

Index i unterscheidet die Größen des jeweiligen Teilgebietes. Diese Aufteilung ist nötig, da sich im Allgemeinen die Dichte ρ und die dynamische Viskosität μ beider Phasen voneinander unterscheiden.

$\underline{\underline{\sigma}}$ ist der Cauchy'sche Spannungstensor und muss durch eine Konstitutivgleichung mit den Feldgrößen verknüpft werden. Im vorliegenden Fall lautet sie

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\mathbf{I} + 2\mu_i \underline{\underline{\varepsilon}}(\mathbf{u}), \quad (2.7)$$

mit $\underline{\underline{\varepsilon}}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$.

2.1.3. Rand- und Anfangswertbedingungen

Für eine vollständige Problemformulierung fehlen noch die Anfangs- und Randbedingungen. Da bei den gerechneten Beispielen keine Neumann-Randbedingungen auftreten, entspricht Γ einem reinen Dirichlet-Rand mit dem vorgeschriebenen Geschwindigkeitsvektor \mathbf{g} :

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \quad \text{auf} \quad \Gamma \times [0, T] \quad (2.8)$$

Die Anfangswertbedingung kann geschrieben werden als

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) \quad \text{auf} \quad \Omega, \quad (2.9)$$

wobei $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld sein muss, um die Massenerhaltung zu erfüllen.

2.1.4. Besonderheiten der Zweiphasenströmung

Die beiden Phasen sind weder ineinander löslich noch mischbar. Eine mögliche Oberflächenspannung zwischen den Phasen wird im Rahmen dieser Arbeit nicht betrachtet.

Am Interface zwischen den Phasen muss die Schubspannung in beiden Gebieten gleich sein, also $\tau_1 = \tau_2$. Im vorliegenden Fall wird mit dem Modell der Newtonschen Flüssigkeiten gearbeitet, weshalb gilt:

$$\tau = \eta_i \cdot \frac{dv}{dy}$$

wenn y die Interface-normale Richtung und v die Geschwindigkeitskomponente in y -Richtung ist. Zusammen folgt daraus:

$$\eta_1 \cdot \frac{dv}{dy} \Big|_{\Omega^+} = \eta_2 \cdot \frac{dv}{dy} \Big|_{\Omega^-}$$

Da sich der Geschwindigkeitsgradient über das Interface ändert, entsteht an dieser Stelle ein Knick im Geschwindigkeitsverlauf. Da sich das Interface im Allgemeinen innerhalb eines Elementes befindet, lässt sich dieser Knick mit den normalen Ansatzfunktionen der FE-Methode nicht darstellen. Deshalb beschäftigen wir uns in Kapitel 2.3.5 mit erweiterten Ansatzfunktionen, die in dieser Arbeit Verwendung finden.

2.2. Level-Set-Gleichung

Zur Beschreibung des Interfaces kann entweder eine Interface Tracking- oder eine Interface Capturing-Methode verwendet werden.

Bei der Interface-Tracking-Methode wird das Interface explizit durch die Vernetzung beschrieben, das heißt das Netz wird mit dem Interface weiterbewegt. Ein Problem dieser Methode ist, dass Topologie-Änderungen wie z.B. das Rekombinieren von zwei Blasen zu einer Größeren nicht dargestellt werden können.

Im vorliegenden Fall wird eine Interface-Capturing-Methode genutzt. Bei dieser wird das Interface implizit durch eine zusätzliche Feldvariable ausgedrückt. Die Änderung des Feldes unterliegt einer Konvektionsgleichung. Diese Methode lässt jegliche Art von Topologie-Änderungen zu.

Speziell kommt die Level-Set-Methode mit der Feldvariablen ϕ zum Einsatz. Das Interface befindet sich dort bei $\phi = 0$, es kann also als Isolinie des ϕ -Feldes aufgefasst werden.

Die Konvektionsgleichung, mit der das Interface transportiert wird, lautet

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0, \quad (2.10)$$

außerdem soll die Signed-Distance-Eigenschaft

$$\phi(\mathbf{x}) = \pm \min_{\mathbf{x}_d \in \Gamma_d} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_d\|, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.11)$$

erfüllt werden, sodass an jedem Punkt \mathbf{x} in Ω der Wert $\phi(\mathbf{x})$ den Abstand zum Interface repräsentiert. Das Vorzeichen richtet sich nach der jeweiligen Subdomäne in der \mathbf{x} liegt. Ein positives Vorzeichen repräsentiert dabei Ω^+ , ein negatives Vorzeichen Ω^- .

Da die Transportgleichung der Level-Set-Funktion diese Eigenschaft nicht aufrechterhält, muss in regelmäßigen Abständen reinitialisiert werden. Dabei wird über eine Funktion der Abstand von jedem Punkt in Ω der Abstand zum Interface berechnet. Zu beachten ist, dass die Funktion sehr viel Rechenzeit in Anspruch nimmt.

2.3. Diskretisierung

2.3.1. Schwache Form

Die FEM¹ lässt sich schematisch mit den Schritten

$$(s) \iff (w) \approx (G) \iff (M)$$

darstellen, wobei (s) die starke Formulierung aus Kapitel ?? bezeichnet, (w) die sogenannte schwache Formulierung, (G) die Galerkin-Approximation (hier entsteht der erste methodische Fehler) und (M) das resultierende Gleichungssystem, das mit Methoden der linearen Algebra gelöst wird.

Man kann jede DGL so umstellen, dass die rechte Seite zu null wird. Die linke Seite wird dabei als Residuum R bezeichnet. Diese starke Formulierung erfordert dass das Residuum an jeder Stelle im Rechengebiet Ω zu null verschwindet. Die gewichtete Residuenformulierung fordert dies, durch Integration über Ω , nur im globalen Sinn:

¹Finite-Elemente-Methode

$$\int_{\Omega} R d\Omega = 0 \quad (2.12)$$

Zusätzlich wird eine Wichtungsfunktion w eingeführt:

$$\int_{\Omega} w R d\Omega = (w, R) = 0 \quad (2.13)$$

der mittlere Ausdruck stellt dabei eine vereinfachte Schreibweise der linken Seite dar, von der weiter unten wiederholt Gebrauch gemacht wird.

Wird in das Residuum die richtige Lösung eingesetzt, muss die linke Seite für jede beliebige Wichtungsfunktion zu null verschwinden. Wenn in der DGL eine räumliche Ableitung einer Feldvariablen vorliegt, so kann diese anschließend durch partielle Integration um eine Ordnung reduziert werden. Dadurch verringern sich die Anforderungen an die Variable.

2.3.2. Galerkin-Approximation

2.3.3. Räumliche Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen

Mit den Lösungsfunktionenräumen $\mathcal{S}_{\mathbf{u}}$ für \mathbf{u} und \mathcal{S}_p für p und den Wichtungsfunktionsräumen $\mathcal{V}_{\mathbf{u}}$ für \mathbf{v} und \mathcal{V}_p für q ist eine schwache Form von ?? und ?? gegeben durch:

Finde $\mathbf{u} \in \mathcal{V}_{\mathbf{u}}$ und $p \in \mathcal{S}_p$ so, dass

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}, \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}) + (\mathbf{v}, \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) + (\varepsilon(\mathbf{v}), 2\mu \varepsilon(\mathbf{u})) \\ = (\mathbf{v}, \rho \mathbf{g}) + (\mathbf{v}, \mathbf{h}_u)_{\Gamma_N} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_{\mathbf{u}} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$(q, \nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad \forall q \in \mathcal{V}_p \quad (2.15)$$

Der Oberflächenspannungsterm, der sich bei der partiellen Integration über das Randintegral ergibt wurde weggelassen, da in den gerechneten Beispielen keine Oberflächenspannung auftritt.

Die Galerkin-Formulierung ist für konvektionsdominierte Gleichungen instabil und muss daher stabilisiert werden. Der Druck p und die Geschwindigkeit \mathbf{u} werden für die Diskretisierung zerlegt in

$$p = p^h + \hat{p} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^h + \hat{\mathbf{u}} \quad (2.17)$$

wobei \hat{p} und $\hat{\mathbf{u}}$ jeweils die Anteile darstellen, die von der Galerkin-Approximation mit dem gegebenen Netz nicht aufgelöst werden. Sie werden approximiert zu

$$\hat{p} = -\tau_C \mathcal{R}_C^h \quad (2.18)$$

$$\hat{\mathbf{u}} = -\tau_M \mathcal{R}_M^h \quad (2.19)$$

\mathcal{R}_C^h und \mathcal{R}_M^h sind die jeweiligen diskreten Residuen der Gleichungen ?? und ?. Einsetzen dieser Zerlegung in Gleichungen ?? und ?? ergibt nach partieller Integration einiger Terme laut [?] die Formulierung: Finde $\mathbf{u}^h \in \mathcal{V}_u^h$ und $p^h \in \mathcal{S}_p^h$ so, dass

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{v}^h, \rho \frac{\partial \mathbf{u}^h}{\partial t} \right) + (\mathbf{v}^h, \rho \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{u}^h) - (\nabla \cdot \mathbf{v}^h, p^h) + (\varepsilon(\mathbf{v}^h), 2\mu \varepsilon(\mathbf{u}^h)) \\ & + (\nabla \cdot \mathbf{v}^h, \tau_C \mathcal{R}_C^h) + (\rho \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h, \tau_M \mathcal{R}_M^h) \\ & = (\mathbf{v}^h, \rho \mathbf{g}) + (\mathbf{v}^h, \mathbf{h}_u)_{\Gamma_N} \quad \forall \mathbf{v}^h \in \mathcal{V}_u^h, \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$(q^h, \nabla \cdot \mathbf{u}^h) + (\nabla q^h, \tau_M \mathcal{R}_M^h) = 0 \quad \forall q^h \in \mathcal{V}_p^h. \quad (2.21)$$

Die zusätzlichen Ausdrücke stellen Stabilisierungsterme dar. Diese sind notwendig, da die Galerkin-FEM-Methode, bei denen die Wichtungsfunktionen den Lösungsfunktionen entsprechen, bei konvektionsdominierten Gleichungen Instabilitäten aufweisen. Zudem haben die verwendeten Lösungsfunktionen für Druck und Geschwindigkeit bei der gewählten Vernetzung die gleichen Knoten und die gleiche Polynomordnung. Die sog. inf-sup-Bedingung ist damit nicht erfüllt und daher ist ein PSPG²-Stabilisierungsterm notwendig, der sich ebenfalls bei der Mehrskalen-Methode ergibt.

2.3.4. Level-Set-Gleichung

Mit geeignetem Lösungs- und Wichtungsfunktionenraum \mathcal{S}_ϕ und \mathcal{V}_ϕ für ϕ beziehungsweise w lässt sich eine schwache Form schreiben als: Finde $\phi \in \mathcal{S}_\phi$ so, dass

2.3.5. eXtended Finite Element Method

2.3.6. Zeitintegration

²Pressure Stabilizing Petrov-Galerkin

3. Schnittalalgorithmus

In BACI sind bereits zwei verschiedene Schnittalgorithmen implementiert. Der gewünschte Algorithmus kann über den Parameter

3.1. Vorhandene Algorithmen

3.1.1. Tetgen

3.1.2. Hexahedra

3.2. Implementierter Algorithmus

Da das Hex8-Element mit linearen Formfunktionen beschrieben wird, kann das ϕ -Feld an jeder Kante höchstens eine Nullstelle und damit maximal einen Schnittpunkt haben. Beim Schnitt des Interfaces mit einem Hex8-Element müssen trotzdem viele Schnittfälle unterscheiden werden.

Die vielen entstehenden Schnittfälle lassen sich umgehen, indem das Hex8-Element zunächst in sechs Tetraeder-Zellen zerlegt wird und anschließend die einzelnen Tetraeder-Zellen mit dem Interface geschnitten werden. Hierbei reicht die Unterscheidung von fünf Fällen.

3.2.1. Zerlegung in Tetraeder

Es gibt mehrere Möglichkeiten einen Quader in Tetraeder zu zerlegen. Dabei entstehen entweder fünf oder sechs Tetraeder, wenn die Tetraeder nur mit den schon vorhandenen acht Knotenpunkten gebildet werden sollen.

Da, wie bei den Ergebnissen besprochen wird, der Schnittalgorithmus anscheinend zu einer Asymmetrie des Ergebnisses führen kann, ist es von Vorteil die Zerlegung möglichst symmetrisch durchzuführen. Gerade für die quasi-2D Probleme ist es wünschenswert, dass der Schnitt auf den Flächen, die auf der Tiefenachse senkrecht stehen, jeweils gleich ist.

Es gibt drei Zerlegungsfälle, die diese Anforderungen erfüllen. Sie können durch 90°-Drehungen ineinander übergeführt werden. Die drei Fälle sind in Abbildung 3.1 dargestellt. Für die Konstruktion der Tetraeder muss jede Seitenfläche in zwei Dreiecke geteilt

werden. Durch die Ausrichtung der Diagonalen auf jeder Fläche sind die Schnittfälle eindeutig definiert.

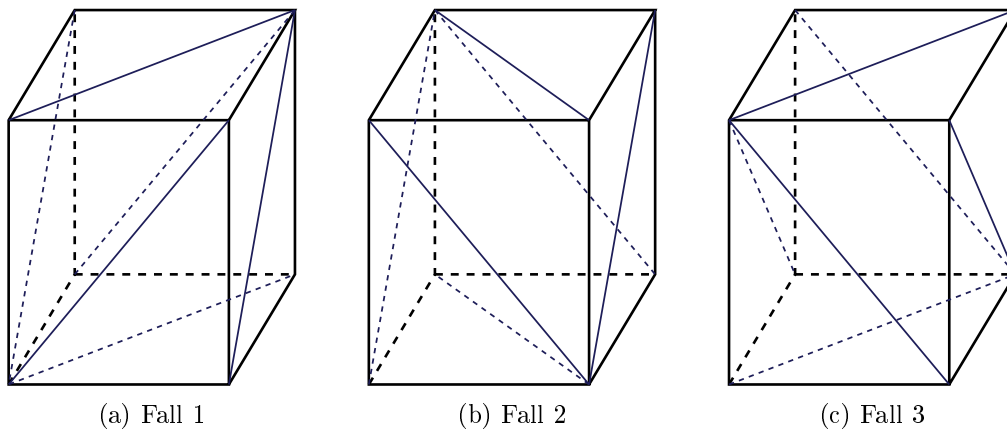


Abbildung 3.1.: Zerlegungsmöglichkeiten

Die Zerlegung ist in Abbildung 3.2 beispielhaft für **Fall 2** dargestellt: Zunächst wird der Quader in zwei Dreiecksprismen zerlegt. Anschließend können beide Prismen wie dargestellt in je drei Tetraeder aufgeteilt werden.

3.2.2. Schnittfälle

Bei dem Schnitt des Tetraeders mit dem Interface werden weitere Tetraeder-Integrationszellen sowie am Interface Flächenintegrationszellen (Dreiecke) erzeugt. Zunächst werden die Schnittpunkte auf allen Kanten des Tetraeders berechnet. Wenn das Interface genau durch einen Knoten des Tetraeders verläuft, wird dies nicht als Schnittpunkt gezählt. Bis auf den Fall mit vier Schnittpunkten wird jedesmal genau eine Flächenintegrationszelle gespeichert, da der Schnitt immer eine dreieckige Fläche erzeugt. Über die Anzahl der Schnittpunkte lässt sich der Schnitt in folgende Fälle aufgliedern:

kein Schnittpunkt (Abbildung 3.3a) Dieser Fall entspricht einer Berührung des Interfaces mit dem Tetraeder. Wenn das Element berührt wird, das heißt das Interface liegt auf einer der Seitenflächen des Quaders, wird die Zelle nicht an den Schnittalgorithmus weitergegeben. Daher kann dieser Fall nur auftreten, wenn die innere Fläche des Tetraeders berührt wird. Der Algorithmus erzeugt hier nur eine Flächenintegrationszelle.

1 Schnittpunkt (Abbildung 3.3b) In diesem Fall geht das Interface durch zwei Knotenpunkte hindurch und teilt das Tetraeder in zwei Tetraeder.

2 Schnittpunkte (Abbildung 3.3c) Das Interface zerlegt das Tetraeder in ein Tetraeder und eine Pyramide. Die Pyramide kann durch Teilung der viereckigen Grundfläche

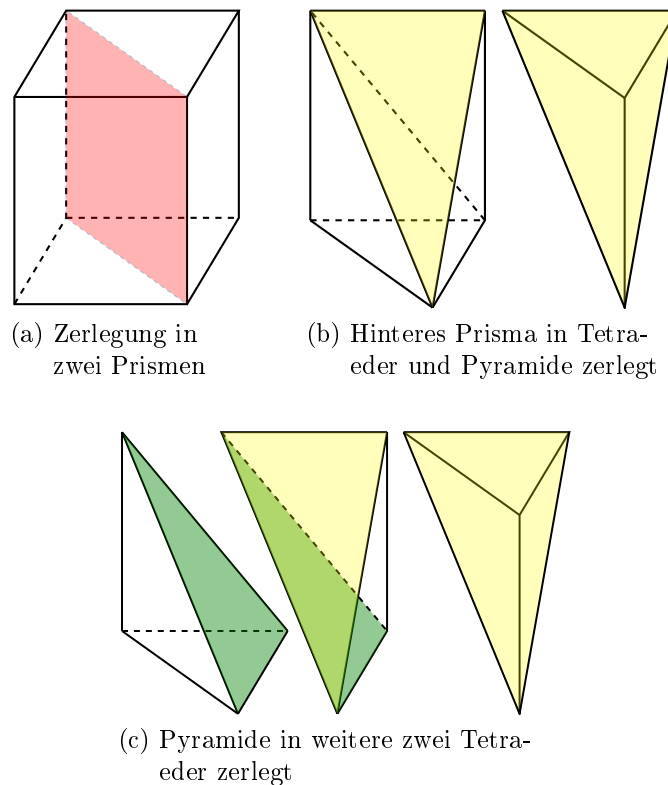


Abbildung 3.2.: Zerlegung in sechs Tetraeder

in zwei Tetraeder zerlegt werden. Hierbei gibt es zwei Möglichkeiten, der Algorithmus richtet sich nach der Knotennummerierung.

3 Schnittpunkte (Abbildung 3.4a) Zerlegung des Tetraeders in ein Tetraeder und ein Dreiecksprisma. Das Prisma kann wie im vorigen Kapitel beschrieben in weitere drei Tetraeder zerlegt werden. Es entstehen vier Tetraeder und eine Flächenintegrationszelle.

4 Schnittpunkte (Abbildung 3.4b) Der Schnitt mit dem Interface ergibt zwei Dreiecksprismen, die wiederum in jeweils drei Tetraeder zerlegt werden. Es resultieren sechs Tetraeder und aufgrund der viereckigen Schnittfläche zwei Flächenintegrationszellen. Alternativ könnte auch ein Viereckselement (quad4) gespeichert werden.

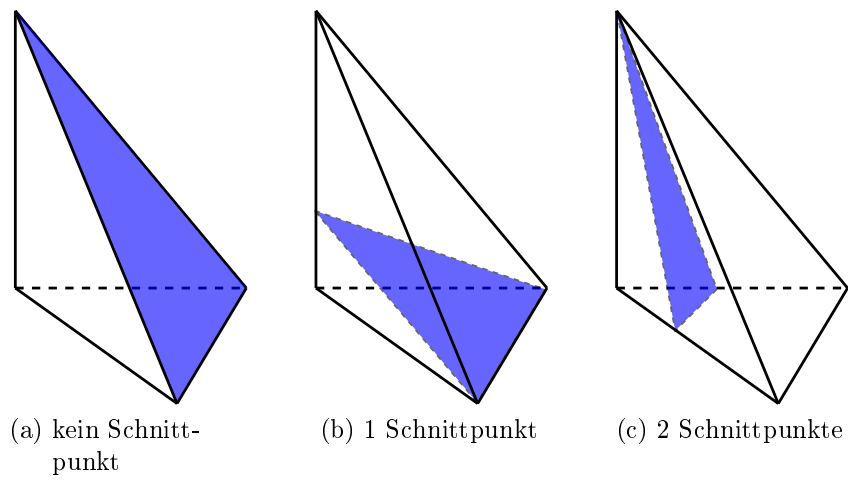


Abbildung 3.3.: Schnittfälle I

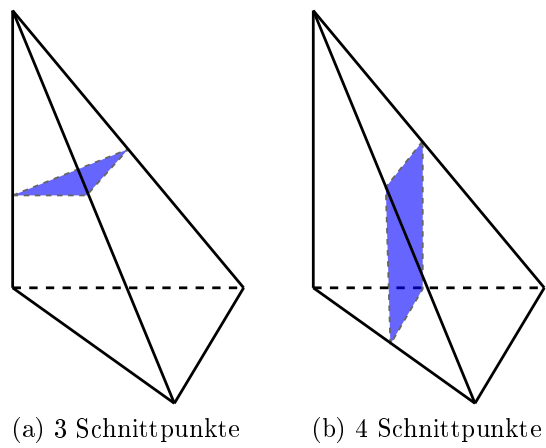


Abbildung 3.4.: Schnittfälle II

4. Ergebnisse

4.1. Zalesaks-Disk

4.1.1. Problemstellung

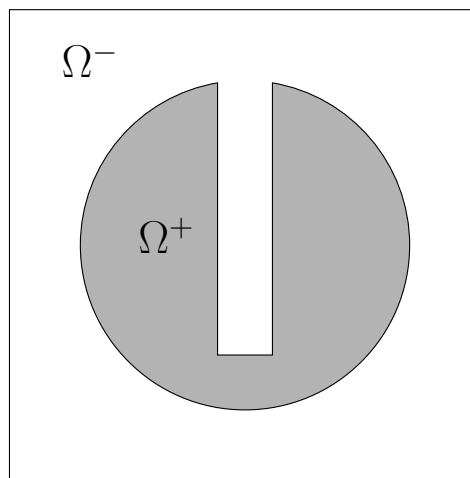


Abbildung 4.1.: Skizze des Zalesaks-Disk-Problems

4.1.2. Ergebnisse

4.1.2.1. Massenverlust

4.1.2.2. Geometrieerhaltung

4.2. Aufsteigende Blase

4.3. Rayleigh-Taylor-Instabilität

4.4. Dammbruch

4.4.1. Problemstellung

Im Anfangszustand befindet sich eine Wassersäule(Ω^+) mit den Maßen $0,146 \times 0,292$ am linken Rand des sonst luftgefüllten(Ω^-) Gebietes. Das Gebiet hat die Abmaße

$0,584 \times 0,292$. Die Materialparameter lauten: $\rho^+ = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\rho^- = 1 \text{ kg/m}^3$, $\mu^+ = 10^{-3} \text{ kg/m/s}$ und $\mu^- = 10^{-5} \text{ kg/m/s}$. Der Volumenkraftsvektor ist $\mathbf{f} = (0, -9,81 \text{ m/s}^2, 0)^T$. Das verwendete Netz ist An allen Wänden gelten Slip¹-Randbedingungen. Der Zeitbereich $t = [0..0,25\text{s}]$ ist in 1000 Zeitschritte unterteilt.

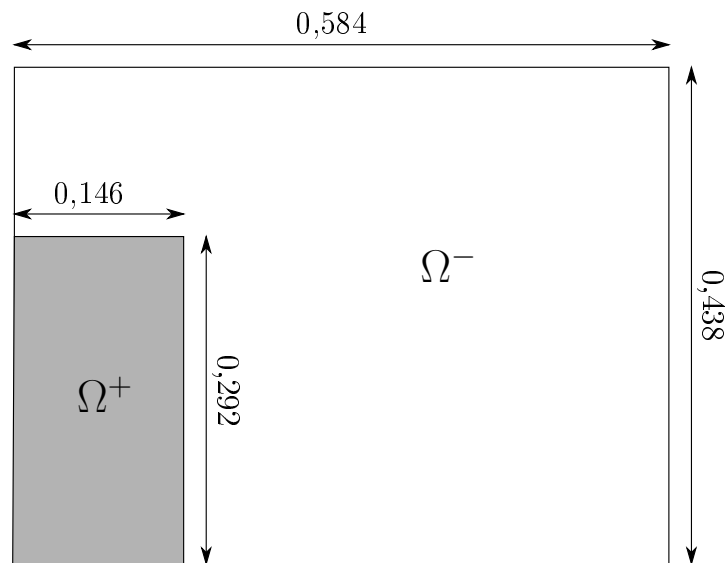


Abbildung 4.2.: Skizze des Dammbruch-Problems

4.4.2. Ergebnisse

¹Alle bis auf die wandparallelen Geschwindigkeitskomponenten werden zu null gesetzt.

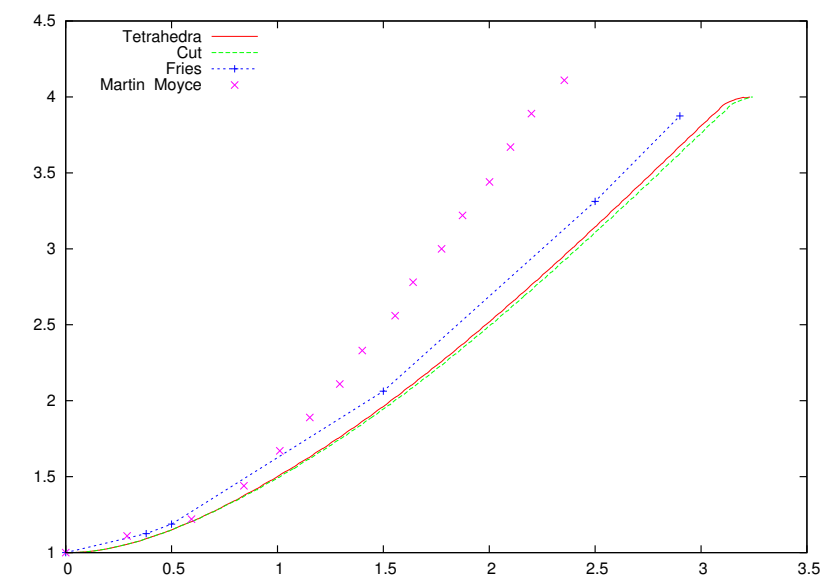


Abbildung 4.3.

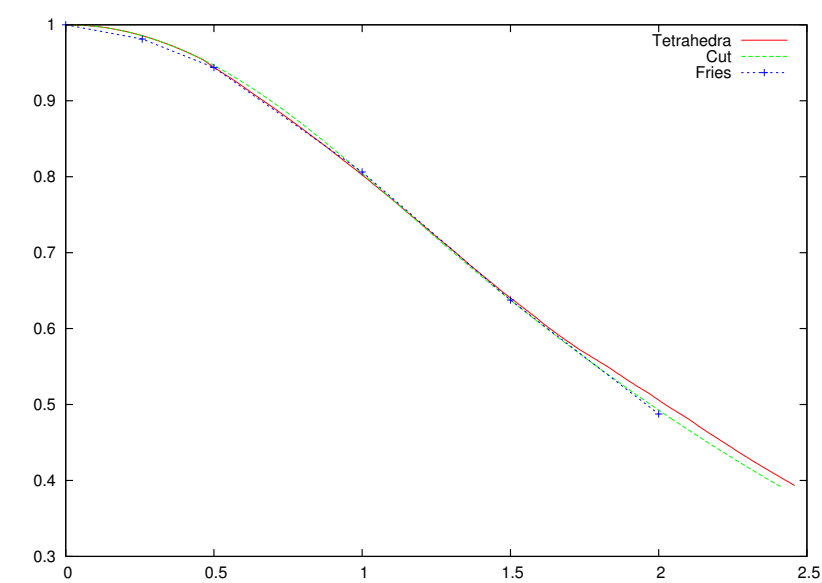


Abbildung 4.4.

5. Ausblick

A. Code

B. Bilder

Literaturverzeichnis

- [1] SAUERLAND, Henning ; FRIES, Thomas-Peter: The extended finite element method for two-phase and free-surface flows: A systematic study. In: *J. Comput. Phys.* 230 (2011), May, 3369–3390. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2011.01.033>. – ISSN 0021–9991