

Technische Universität Graz
Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung
Inffeldgasse 25 F
8010 Graz



Heininger Bernhard

Aufprall von Flüssigkeitsstrahlen auf eine ruhende, flüssige Spiegeloberfläche

Masterarbeit

Betreuer: Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Helfried Steiner
Institutsleiter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Günter Brenn

Graz, Oktober 2020

” *Wenn Du ein Schiff bauen willst, dann trommle nicht Männer zusammen um Holz zu beschaffen, Aufgaben zu vergeben und die Arbeit einzuteilen, sondern lehre die Männer die Sehnsucht nach dem weiten, endlosen Meer.*

- Antoine de Saint-Exupéry

“

Deutsche Fassung:
Beschluss der Curricula-Kommission für Bachelor-, Master- und Diplomstudien vom 10.11.2008
Genehmigung des Senates am 1.12.2008

EIDESSTÄTTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am

.....
(Unterschrift)

Englische Fassung:

STATUTORY DECLARATION

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources / resources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

.....
date

.....
(signature)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich allem voran besonders bei Herrn Professor *Helfried Steiner* für die tatkräftige Unterstützung während des Erstellens dieser Arbeit bedanken. Die Tatsache, dass Sie jederzeit ein offenes Ohr für etwaige Anliegen und Fragen bezüglich diverser Problemstellungen und Ungewissheiten hatten, machte die Durchführung dieser Arbeit sehr angenehm. Auch möchte ich mich ausdrücklich beim Institutsleiter, Herrn Professor *Günter Brenn*, für die Bereitstellung eines hervorragenden Arbeitsplatzes direkt am Institut, inklusive sämtlicher nötiger Arbeitsmaterialien, während der gesamten Durchführungsdauer, bedanken.

Weiteren Dank möchte ich Herrn Professor *Walter Meile* für diverse fachliche Ratschläge als auch den Universitäts- bzw. Projektassistenten und Doktoranden *Dino Zrnic*, *Lorenzo Sufra*, *Thomas Müller*, *Gregor Plohl*, *Christoph Irrenfried* und *Hannes Hinterbichler* für etwaige Ratschläge und Hilfen aussprechen. Den beiden letztgenannten möchte ich zusätzlich noch für ihre EDV-technische Unterstützung, vor allem bezüglich des Betriebssystems Linux und der institutseigenen Serverstruktur, danken.

Neben den bereits genannten Personen spreche ich gerne auch ein großes Dankeschön der Institutssekretärin, Frau *Sabine Gruber*, aus für die äußerst sympathische Art und Weise, meiner Wenigkeit gegenüber, während der am Institut verbrachten Zeit.

Bernhard Heininger, Graz am 24. Oktober 2020

Kurzfassung

Trifft ein Flüssigkeitsstrahl senkrecht auf eine ruhende Spiegeloberfläche, zeigt sich bei bestimmten Strahlzuständen ein interessantes Wellenphänomen. Es treten auf der Strahloberfläche Kapillarwellen auf, welche sich räumlich stromauf vom Aufprallpunkt mit der selben Geschwindigkeit wie jene des Flüssigkeitsstrahles ausbreiten, wodurch diese als stehende Wellen erscheinen. Inhalt dieser Arbeit ist die numerische Simulation dieses Wellenphänomens für drei unterschiedliche Fluide, gefolgt von einem Vergleich mit Resultaten aus analytisch/theoretisch gewonnenen Dispersionsrelationen, sowie einem Vergleich mit Versuchsergebnissen aus einer experimentellen Vorläuferarbeit zu diesem Thema. Die untersuchten Flüssigkeiten sind Wasser, eine elf-prozentige Glycerol/Wasser-Lösung, sowie eine Prästol 2540/Wasser-Lösung mit drei unterschiedlichen Prästol-Massenanteilen. Die letztgenannte Flüssigkeit stellt hierbei ein nicht-NEWTONsches viskoelastisches Fluid dar. Sämtliche Simulationen wurden mehrphasig mit der Volume-of-fluid Methode durchgeführt, wobei Luft das Umgebungsmedium ist. Als Simulationsprogramm wurde die freie CFD-Software OpenFOAM verwendet.

Die vorliegende Arbeit soll im Wesentlichen untersuchen, inwieweit die verwendete numerische Simulationsmethode in der Lage ist, das betrachtete Wellenphänomen korrekt abzubilden, sowie allfällige Unterschiede zu entsprechenden Vorhersagen aus den analytisch/theoretischen Beschreibungen darlegen. Die numerischen Ergebnisse zeigen im vorhergesagten ungestörten Grundzustand des durch Schwerkraft beschleunigten Freistrahls generell sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Vorhersage basierend auf der BERNOULLI-Gleichung. Die Wellenlängen der simulierten stehenden Kapillarwellen liegen im Mittel durchwegs sehr nahe an den analytischen und experimentellen Vergleichswerten, wobei die Simulationswerte fallweise eine relativ große Streubreite aufweisen. Die Simulationen geben ebenso die bei steigender WEBERzahl analytisch vorhergesagte und experimentell beobachtete zusehends stärkere räumliche Konzentration des welligen Bereichs in der Nähe des Auftreffpunkts tendenziell korrekt wider. Im Gegensatz zu den Vorhersagen aus den analytisch/theoretischen Dispersionsrelationen werden die Amplituden der simulierten Oberflächenwellen allerdings nur relativ schwach stromauf gedämpft. Als Ursache für diesen signifikanten Unterschied wird der durch die Schwerkraft beschleunigte Grundzustand des Freistrahls angenommen, welchen die Dispersionsrelationen dagegen als räumlich unveränderlich voraussetzen. Zur Bestätigung dieser Hypothese wären in weiterführenden Arbeiten die analytisch/theoretischen Beschreibungen entsprechend zu erweitern, um diesen Beschleunigungseffekt ebenso abbilden und seine Auswirkungen gezielt untersuchen zu können.

Abstract

A liquid jet which vertically impinges on a liquid pool may produce an interesting wave phenomenon. Under certain oncoming flow conditions, capillary surface waves emerge from the impingement point and further propagate upstream exactly at the local jet speed, so that they appear as standing waves. The numerical simulation of this phenomenon is the subject of the present work considering three different types of liquids, being pure water, an 11 Vol% mixture of glycerol and water, and a Non-NEWTONian visco-elastic fluid composed of water and a small amount of Prästol 2540, which has been varied. The simulations were carried out with the open-source CFD-software OpenFOAM modelling the two-phase flow with the Volume-of-Fluids method, where the ambient air represents the gaseous phase. The obtained numerical results are compared against analytical solutions from dispersion relations as well as data acquired in a previous experimental study on this subject. The present study essentially aims to investigate the scope and limits of the applied numerical computational approach in describing accurately the considered wave phenomenon, highlighting possible discrepancies to predictions from theoretical/analytical computations as well. The numerical results generally show agreement for the predicted base flow conditions of the gravitationally accelerated liquid jet, when compared against an analytical solution based on BERNOULLI's equation. The predicted wave lengths of the standing waves are on average very close to the corresponding analytical results and experimental data, in some cases the predictions considerably scatter around the mean values though. The simulations also reflect correctly the analytically predicted and experimentally observed local concentration of the wavy region towards the point of impingement for increasing WEBER number. However, in contrast to the predictions from the theoretical/analytical dispersion relations, the simulated waves are much less dampened in amplitude for increasing upstream distance from the impingement point. This significant difference is supposed to be due to the gravitationally accelerated base flow conditions, which is not included into theoretical/analytical description assuming axially uniform base flow for the unperturbed state. This hypothesis remains to be further inspected in future work by extending the theoretical/analytical computations so as to account for an axial acceleration of the jet.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Physikalisches Modell	3
2.1	Fluidstrahl	3
2.2	Kapillarwellen nicht-viskoser und viskoser Fluide	4
2.2.1	RAYLEIGHscher Strahlzerfall und die Dispersionsrelation von nicht-viskosen Fluiden	4
2.2.2	Dispersionsrelation viskoser Fluide	13
2.3	Nicht-NEWTONsche, viskoelastische Fluide	14
2.3.1	Konstitutives Modell	16
2.3.2	Dispersionsrelation viskoelastischer Fluide	16
2.4	Stehende Wellen	23
2.5	Verwendete Fluide und ihre Stoffeigenschaften	24
2.5.1	Wasser	24
2.5.2	Glycerol/Wasser-Lösung	24
2.5.3	Prästol 2540/Wasser-Lösung	25
2.5.4	Umgebungsmedium Luft	26
3	Mathematisches Modell	27
3.1	Rechengebiet	27
3.2	Randbedingungen	28
3.2.1	Der Einlass Γ_{ein}	28
3.2.2	Die Atmosphäre Γ_a	30
3.2.3	Die Wand Γ_w	31
3.2.4	Der Auslass Γ_{aus}	31
3.2.5	Die Seitenflächen Γ_{sf1} und Γ_{sf2}	32
3.3	Erhaltungsgleichungen	32
3.3.1	Volume of Fluid-Methode	33
3.3.2	Viskoelastischer Spannungstensor	35
3.3.3	Kopplungen	37
3.4	Diskretisierung	40
3.4.1	Finite-Volumen-Methode	40
3.4.2	Diskretisierung der auftretenden Terme	40
3.4.3	Transportgleichung der Farbfunktion	47
3.5	Lineares Gleichungssystem	48
3.5.1	Vorkonditionierung	48
3.5.2	Lösungsalgorithmen	50
3.5.3	Unterrelaxation im iterativen Lösungsprozess	53
4	Numerische Ergebnisse	55
4.1	Übersicht	55

Inhaltsverzeichnis

4.2	Auswertemethodik der numerischen Ergebnisse	56
4.2.1	Ausgangspunkt	56
4.2.2	Gestörter Strahlradius	57
4.2.3	Mittlerer Strahlradius	57
4.2.4	Mittlere WEBERzahl	58
4.2.5	Wellenlängen	59
4.2.6	Amplitude der Störung des Flüssigkeitsradius'	60
4.3	Ergebnisse	62
4.3.1	Wasser	62
4.3.2	Glycerol/Wasser-Lösung	72
4.3.3	Prästol 2540/Wasser-Lösung	81
4.3.4	Darstellung der Ergebnisse im VON OHNESORGE-Diagramm	91
5	Zusammenfassung	93
A	Preprocessing	95
A.1	Netzgenerierung	95
A.1.1	Erstellung der Geometrie	95
A.1.2	Vernetzung der Geometrie	96
A.1.3	Erstellung der verwendeten Gruppen in der Simulation	98
A.1.4	Generierung des dreidimensionalen Netzes	98
A.1.5	Konvertierung des erstellten Netzes nach polyMesh	99
A.2	Erstellung der Simulationsdateien	99
A.2.1	Initialisierungszustand	100
A.2.2	Verwendete Konstanten	112
A.2.3	System	116
A.3	Verwendete Solver	126
A.3.1	interFoam	127
A.3.2	rhoInterFoam	127
A.4	Verwendete Software	127
B	Performance-Test	129
B.1	Modell	129
B.2	Ergebnisse	130

Glossar

Das *Glossar* enthält sämtliche in dieser Arbeit vorkommende Zeichen, welche vorrangig in den Kapiteln der physikalischen und mathematischen Modellbildung erscheinen. Die Darstellung dieser erfolgt zum einen mit einer Bezeichnung, einer kurzen Beschreibung sowie der zugehörigen Einheit. Auch erfolgt eine Unterteilung in lateinischen, gefolgt von griechischen Symbolen.

Lateinische Symbole

A	Koeffizientenmatrix	[–]
<i>A</i>	Strahloberfläche	[<i>m</i> ²]
<i>Co</i>	COURANT-Zahl	[–]
<i>De</i>	DEBORAHzahl	[–]
D	Diagonalmatrix	[–]
d_h	Residuum der Iteration	[–]
\mathcal{D}	Differentialoperator	[<i>m</i> ^{–1}]
E	Einheitstensor	[–]
e_h	Korrektur	[–]
f^B	Körperkräfte	[<i>m s</i> ^{–2}]
<i>f</i>	Störfunktion	[<i>m</i>]
\bar{f}_n	Amplitude der Störung	[<i>m</i>]
<i>Fr</i>	FROUDEzahl	[–]
<i>g</i>	Gravitation	[<i>m s</i> ^{–2}]
<i>h</i>	Diskretisierung bzw. Elementweite	[<i>m</i>]
<i>I_n</i>	Modifizierte BESSELFunktion erster Art	[–]
<i>k</i>	Wellenzahl	[<i>m</i> ^{–1}]
<i>K</i>	Kinetische Energie	[<i>N m</i>]
<i>K_n</i>	Modifizierte BESSELFunktion zweiter Art	[–]
L	Untere bzw. linke Dreiecksmatrix	[–]
\mathcal{L}_h	Diskr. linear elliptischer Differentialoperator	[<i>m</i> ^{–2}]
\mathcal{L}	Linear elliptischer Differentialoperator	[<i>m</i> ^{–2}]
<i>dm</i>	Differentielles Massenelement	[<i>kg</i>]
<i>m</i>	Massenanteil	[<i>ppm</i>], [%]
<i>N</i> ⁰	Muster der Nichtnulleinträge	[–]
n	Normalvektor	[–]
<i>p_a</i>	Umgebungsdruck	[<i>N m</i> ^{–2}]
<i>p</i>	Skalares Druckfeld	[<i>N m</i> ^{–2}]
<i>p₀</i>	Totaldruck	[<i>N m</i> ^{–2}]
<i>P</i>	Oberflächenenergie	[<i>N m</i>]
<i>Q</i>	Volumenstrom	[<i>m</i> ³ <i>s</i> ^{–1}]
Q	Störvektor	[–]
\hat{r}	Gestörter Strahlradius	[<i>m</i>]
\tilde{r}	Ungestörter Strahlradius	[<i>m</i>]
\bar{r}	Mittlerer Strahlradius	[<i>m</i>]

Glossar

r_0	Radius an der Stelle z_0	[m]
\mathbf{R}	Obere bzw. rechte Dreiecksmatrix	[–]
Re	REYNOLDSzahl	[–]
S^ϕ	Quellterm	[Nm ⁻³]
S_f	Zellgrenzfläche	[m ²]
s	Standardabweichung	[–]
t	Zeit	[s]
\mathbf{t}	Tangentialvektor	[–]
\mathbf{u}	Vektoriellcs Geschwindigkeitsfeld	[ms ⁻¹]
\mathbf{U}	Gemischte Geschwindigkeit	[ms ⁻¹]
u	Radiale Geschwindigkeitskomponente	[ms ⁻¹]
v	Tangentialc Geschwindigkeitskomponente	[ms ⁻¹]
\mathcal{V}	Kontrollvolumen	[m ³]
\mathbf{V}	Verzerrungsratentensor	[s ⁻¹]
w	Axiale Geschwindigkeitskomponente	[ms ⁻¹]
w_0	Geschwindigkeit an der Stelle z_0	[ms ⁻¹]
\bar{w}	Volumenstromäquivalente, mittlere Geschwindigkeit	[ms ⁻¹]
W	Düsenaustrittsgeschwindigkeit	[ms ⁻¹]
We_0	WEBERzahl an der Stelle z_0	[–]
We	WEBERzahl	[–]
Wi	WEISSENBERGzahl	[–]
\bar{x}	Mittelwert	[–]

Griechische Symbole

α	Farbfunktion	[–]
α_k	Volumenanteil der Phase k	[–]
ε	Relative Streuung	[–]
ζ^ϕ	Relaxationsfaktor	[–]
$\dot{\gamma}$	Scherrate	[s ⁻¹]
$\dot{\boldsymbol{\gamma}}$	Scherratentensor	[s ⁻¹]
κ	Mittlere Krümmung	[m ⁻¹]
\varkappa	Konditionszahl der Koeffizientenmatrix	[–]
λ	Wellenlänge	[m]
λ_1	Relaxationszeit	[s]
λ_2	Retardationszeit	[s]
Γ_a	Randbedingung an der Atmosphäre	[–]
Γ_{ein}	Randbedingung am Einlass	[–]
Γ_{sf1}	Randbedingung an der ersten Seitenfläche	[–]
Γ_{sf2}	Randbedingung an der zweiten Seitenfläche	[–]
Γ_w	Randbedingung and der Wand	[–]
Λ	Rechengebiet	[m ³]
$\partial\Lambda$	Rand des Rechengebiets	[m ²]
$\Delta\Lambda$	Finites Volumenelement	[m ³]
μ	Dynamische Viskosität	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]
μ_0	Nullscherviskosität	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]
μ_m	Gemischte dynamische Viskosität	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]

μ_p	Dynamische Viskosität der Polymerlösung	$[kg\ m^{-1}\ s^{-1}]$
μ_s	Dynamische Viskosität des Lösungsmittels	$[kg\ m^{-1}\ s^{-1}]$
ν	Kinematische Viskosität	$[m^2\ s^{-1}]$
Φ	Geschwindigkeitspotential	$[m^2\ s^{-1}]$
ϕ	Generalisierte Flussgröße	$[-],[m\ s^{-1}]$
Φ	Lösungsvektor	$[-]$
$\tilde{\Phi}$	Approximierter Lösungsvektor	$[-]$
Π^ϕ	Allgemeiner Diffusionskoeffizient	$[kg\ m^{-1}\ s^{-1}]$
π	Totaler Spannungstensor	$[N\ m^{-2}]$
Ψ	Stromfunktion	$[m^2\ s^{-1}]$
ψ	Limitierungsfunktion	$[-]$
ρ	Dichte der Flüssigkeit	$[kg\ m^{-3}]$
ρ_G	Dichte des Gases	$[kg\ m^{-3}]$
σ	Oberflächenspannung	$[N\ m^{-1}]$
τ	Spannungstensor	$[N\ m^{-2}]$
τ_p	Spannungstensor der Polymerlösung	$[N\ m^{-2}]$
τ_s	Spannungstensor des Lösungsmittels (Solvent)	$[N\ m^{-2}]$
ϑ_a	Umgebungstemperatur	$[^\circ C]$
Θ	Natürlicher Logarithmus des Konformationstensors	$[-]$
ω	Kreisfrequenz	$[s^{-1}]$
Ω	Kreisfrequenz	$[s^{-1}]$
ω^*	Dimensionslose Kreisfrequenz	$[-]$

Glossar

Einleitung

Beim Auftreffen eines achssymmetrischen Flüssigkeitsstrahls auf eine ruhende Flüssigkeitsoberfläche kommt es innerhalb eines bestimmten Bereichs der Strahlgeschwindigkeit bei einem entsprechenden Strahldurchmesser zu einem interessanten Phänomen. Es treten stehende *Kapillarwellen* auf der Strahloberfläche in der Nähe des Aufprallpunktes auf. Dies kann beispielsweise auch ganz einfach experimentell mittels eines Wasserstrahls aus einem Wasserhahn, welcher auf einen Finger fließt, beobachtet werden. Kapillarwellen wurden in der Vergangenheit bereits intensiv von vielen Persönlichkeiten untersucht, wobei LORD RAYLEIGH in seiner Veröffentlichung von 1878 „*On the Instability of Jets*“ [18] Pionierarbeit leistete. Das Ziel dieser klassischen Untersuchungen war unter anderem die Bestimmung der *Dispersionsrelation*, um das Wellenverhalten charakterisieren zu können. Die erwähnte Dispersionsrelation beschreibt dabei die zeitliche (oder räumliche) Änderung der Störwellenamplitude in Abhängigkeit von der Frequenz der Welle.

JOHN H. LIENHARD untersuchte in [11] an einem einfachen Versuchsaufbau den Einfluss der WE-BERZahl des Flüssigkeitsstrahls auf die dimensionslose Wellenzahl in analytischer sowie experimenteller Form.

MATTHEW J. HANCOCK und JOHN W. M. BUSH untersuchten in [10] zusätzlich den Einfluss von Tensiden auf die Entstehung bzw. Wellenlängen von Kapillarwellen.

K. M. AWATI und T. HOWES untersuchten in [2] unter anderem den Einfluss der Viskosität auf die stehenden Kapillarwellen. Hierbei stützten sie sich auf die ebenfalls von LORD RAYLEIGH in einer späteren Arbeit [17] abgeleitete Dispersionsrelation eines viskosen Fluidstrahls und ermittelten so den viskosen Dämpfungseinfluss auf die stationären Wellen.

Gegenstand dieser Arbeit ist eine numerische Strömungssimulation der oben beschriebenen stehenden Kapillarwellen mittels der freien CFD-Software OpenFOAM. Eine bereits im Jahre 2012 durchgeführte Bachelorarbeit mit dem Titel „*Untersuchung des Auftreffverhaltens vertikaler Flüssigkeitsstrahlen auf ein Reservoir mit freier Spiegeloberfläche*“ von REINHARD RATZBERGER bildet den experimentellen Hintergrund der vorliegenden rechnerischen Studie. Es soll insbesondere gezeigt werden, wie genau die verwendete numerische Lösungsmethode sowohl analytisch gewonnene als auch die experimentell erhaltenen Daten beschreiben kann.

In dieser vorliegenden Arbeit werden mehrere Fälle mit variiertem Düsenaustrittsgeschwindigkeit für drei verschiedene Flüssigkeiten simuliert und analysiert. Die verwendeten Flüssigkeiten sind hierbei *Wasser*, eine *Glycerol/Wasser-Lösung* und eine *Prästol 2540/Wasser-Lösung*, wobei letztere ein nicht-NEWTONsches, viskoelastisches Fluid darstellt. Diese genannten Fluide sind jeweils von Luft umgeben, welche in der Simulation ebenso berücksichtigt wird.

In **Kapitel 2** wird auf die analytische Beschreibung der Kapillarwellen, mit vorheriger Charakterisierung des Fluidstrahls, eingegangen. Als Erstes wird die *Dispersionsrelation* für ein nicht-viskoses Fluid hergeleitet. Diese Betrachtung wird anschließend auf viskose Fluide und schließlich auf nicht-NEWTONsche bzw. viskoelastische Fluide erweitert. Abschließend werden die verwendeten Flüssigkeiten und ihre Stoffeigenschaften beschrieben.

Kapitel 1. Einleitung

Kapitel 3 enthält eine detaillierte mathematische Beschreibung der numerisch simulierten Problemstellung. Ausgehend vom betrachteten Rechengebiet werden die verwendeten Randbedingungen beschrieben, um die Strömung möglichst genau abbilden zu können. Danach werden die auftretenden Erhaltungsgleichungen hergeleitet und die durchgeführte Diskretisierung erklärt. Letztlich wird das in den vorherigen Schritten entstandene lineare Gleichungssystem bezüglich der Konditionierung und Lösung diskutiert.

Das anschließende **Kapitel 4** erörtert sämtliche Simulationsergebnisse und liefert als erstes auch eine Erklärung und Beschreibung der Auswertemethodik für eine nachvollziehbare Analyse. Die Simulationsergebnisse werden sukzessive für alle drei untersuchten Fluide dargestellt und diskutiert.

Kapitel 5 gibt eine Zusammenfassung der gesamten Arbeit, inhaltlich unterteilt in eine Übersicht der geforderten Ziele, die wesentlichen erhaltenen numerischen Ergebnisse, und einen Ausblick auf mögliche weiterführende Untersuchungen.

Im **Anhang** werden spezielle Punkte der numerischen Bearbeitung der Problemstellung, wie etwa das *Preprocessing*, darunter die Generierung des Netzes mit der verwendeten Software Salome und die Erstellung der nötigen Skriptdateien in OpenFOAM für die entsprechenden durchgeführten Simulationen, sowie ein kurzer *Performance-Test* von OpenFOAM bezüglich der Rechenzeit eines Testfalles, behandelt. Die verwendeten Skriptdateien werden hierbei mit kurzen Erläuterungen der wichtigsten Befehle bzw. Parameter versehen und es wird auf die theoretischen Grundlagen aus den Kapiteln 2 und 3 verwiesen, um eine gute Nachvollziehbarkeit zu garantieren. Am Ende des ersten Teils des Anhangs werden die verwendeten Solver mit ihrer entsprechenden Definition der Entwickler erläutert, gefolgt von einer Auflistung aller zum Einsatz gekommenen Softwarepakete bzw. Programmiersprachen, zuzüglich den jeweiligen Versionshinweisen.

Physikalisches Modell

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen, welche die Entstehung der Kapillarwellen beim Auftreffen eines Flüssigkeitsstrahls auf eine ruhende Flüssigkeitsoberfläche erklären, beschrieben. Zu Beginn wird das physikalische Modell des Fluidstrahls selbst dargestellt, gefolgt von Betrachtungen der Dispersion von Störwellen am idealisierten nicht-viskosen, als auch am viskosen Fluidstrahl, sowie für ein nicht-NEWTONsches viskoelastisches Fluid. Die für diese Fluidtypen hergeleiteten *Dispersionsbeziehungen* dienen grundsätzlich zur Untersuchung der Stabilität des Flüssigkeitsstrahls unter Einbringung einer kleinen harmonischen Störung. Es lassen sich mit diesen Beziehungen aber auch sehr gut die in der vorliegenden Arbeit betrachteten stehenden Wellen vor dem Auftreffpunkt des Strahls auf der freien Flüssigkeitsoberfläche beschreiben. Am Ende des Kapitels befindet sich eine Beschreibung der in der Simulation betrachteten Fluide mit ihren jeweiligen Stoffeigenschaften.

2.1. Fluidstrahl

Die betrachtete Flüssigkeitsströmung besteht grundsätzlich, wie HANCOCK und BUSH in [10] zeigen, aus einem stationären, laminaren, achssymmetrischen, vertikalen Freistrahls mit einer Referenzhöhe z_0 , wie in Abbildung 2.1 dargestellt. Da der Fluidstrahl stationär ist, ist der Volumenstrom Q über die Höhenkoordinate z konstant. Somit ergibt sich

$$Q = 2\pi \int_0^{\tilde{r}} w(r, z) r dr = \pi \tilde{r}^2(z) \bar{w}(z) = \pi r_0^2 w_0 \quad (2.1)$$

mit $w(r, z)$ als lokale, axiale Geschwindigkeitskomponente an der Stelle (r, z) und $w_0 = \bar{w}(z_0)$ als volumenstromäquivalente, mittlere Geschwindigkeit an der Stelle $z = z_0$, wo der Radius $\tilde{r}(z_0) = r_0$ ist. Nimmt man des weiteren eine reibungsfreie Strömung entlang des Fluidstrahls an, so kann der weitere Verlauf des ungestörten Strahlradius $\tilde{r}(z)$ und die entsprechende axiale Geschwindigkeitskomponente $\bar{w}(z)$ aus der BERNOULLI-Gleichung

$$\frac{\bar{w}^2(z)}{2} + \frac{\sigma}{\rho \tilde{r}(z)} - gz = \frac{w_0^2}{2} + \frac{\sigma}{\rho r_0} - gz_0 \quad (2.2)$$

ermittelt werden. Dabei ergibt sich nach Umformung für das Verhältnis der Geschwindigkeiten

$$\frac{\bar{w}(z)}{w_0} = \sqrt{1 + Fr^{-1} - \frac{2}{We_0} \left(\frac{r_0}{\tilde{r}(z)} - 1 \right)}, \quad (2.3)$$

mit $Fr^{-1} = 2g(z - z_0)/w_0^2$ als die inverse FROUDEZahl und $We_0 = \rho r_0 w_0^2 / \sigma$ als WEBERZahl an der Stelle z_0 . Für das Verhältnis der Strahlradien lässt sich nach weiterem Umformen

$$\frac{\tilde{r}(z)}{r_0} = \left[1 + Fr^{-1} - \frac{2}{We_0} \left(\frac{r_0}{\tilde{r}(z)} - 1 \right) \right]^{-\frac{1}{4}} \quad (2.4)$$

angeben. Mit diesen Gleichungen können nun der Strömungszustand und die entsprechenden WEBERZahlen We entlang des Fluidstrahls berechnet werden.

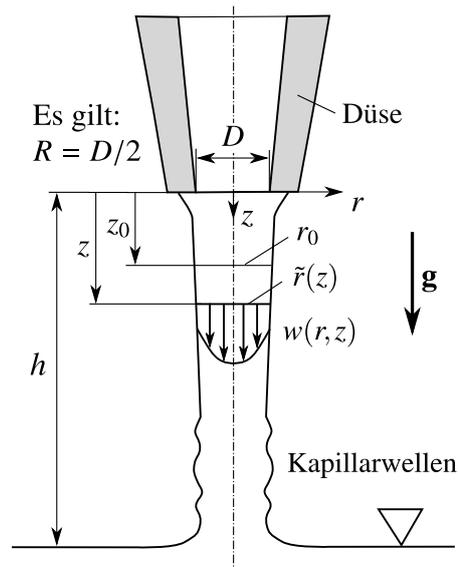


Abbildung 2.1 Schematische Darstellung der zu untersuchenden Strömung.

Des weiteren sei zu erwähnen, dass in der BERNOULLI-Gleichung für das Geschwindigkeitsprofil stromab vom Referenzpunkt $z = z_0$ näherungsweise eine rechteckige Form angenommen wurde, was sich aufgrund der Verwendung einer Düse am Strahlaustritt, vertreten lässt.

2.2. Kapillarwellen nicht-viskoser und viskoser Fluide

In diesem Abschnitt wird die klassische analytische Beschreibung der zu untersuchenden Kapillarwellen vorgestellt. Dabei wird vom von LORD RAYLEIGH in [18] erforschten Strahlzerfall und der daraus hervorgehenden Dispersionsbeziehung an einem nicht-viskosen Fluidstrahl ausgegangen. Anschließend wird der viskose Fluidstrahl, zur Berücksichtigung des Viskositätseinflusses auf die Kapillarwellen, als auch der viskoelastische Fluidstrahl, untersucht.

2.2.1. RAYLEIGHSCHER STRAHLEZERFALL UND DIE DISPERSIONSRELATION VON NICHT-VISKOSEN FLUIDEN

Die Voraussetzungen zur Berechnung des Strahlzerfalls nach LORD RAYLEIGH sind zum einen, dass es sich um eine, idealisiert betrachtet, nicht-viskose Flüssigkeit in einer evakuierten Umgebung handelt. Des weiteren wird der Strahl als unendlich lang angenommen, und es werden nur Kapillarkräfte

berücksichtigt. Außerdem wird die Annahme kleiner Verformungen des Strahles getroffen.

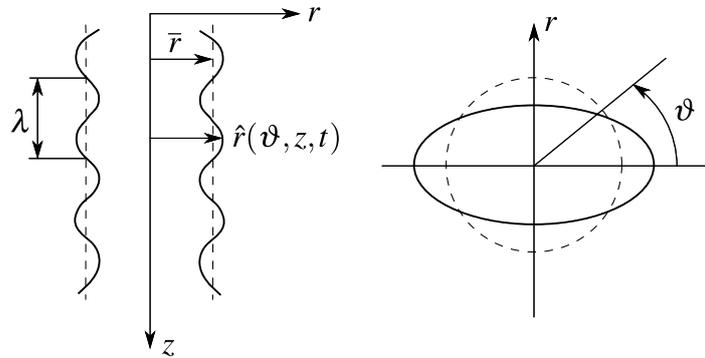


Abbildung 2.2 Störung der Strahloberfläche des betrachteten Fluidstrahles.

Die Idee zur Herleitung der gesuchten *Dispersionsrelation* basiert auf der Bilanzierung der Oberflächenenergie P , also jener Arbeit die aufgewendet wird um die Oberfläche zu erzeugen, und der kinetischen Energie K des Fluidstrahles. Die Summe dieser beiden Energien bleibt dabei zeitlich unveränderlich.

Strahloberfläche A

Der gestörte Strahlradius $\hat{r}(\vartheta, z, t)$ ergibt sich aus zwei Anteilen, dem mittleren Strahlradius \bar{r} (berechnet aus dem Strahlvolumen \mathcal{V}) und einer wellenförmigen Störfunktion $f(\vartheta, z, t)$ zu

$$\begin{aligned}\hat{r}(\vartheta, z, t) &= \bar{r} + f(\vartheta, z, t) = \\ &= \bar{r} + \bar{f}_n(t) \cos(n\vartheta) \cos(kz), \quad f(\vartheta, z, t) \ll \bar{r}, \quad n \in \mathbb{N}_0,\end{aligned}\quad (2.5)$$

mit der Amplitude der Störung $\bar{f}_n(t)$ und der Zeit t . Dieser Zusammenhang lässt sich aus Abbildung 2.2 ableiten, wobei $k = 2\pi/\lambda \in \mathbb{R}$ die Wellenzahl, mit der Wellenlänge λ , darstellt. Die folgende Volumsbilanz wird auf das Kontrollvolumen \mathcal{V} angewendet. Unter Einführung des differentiellen Volumenelements $d\mathcal{V}$ des gestörten Strahles

$$d\mathcal{V} = \hat{r}(\vartheta, z, t) d\vartheta dr dz$$

erhält man durch Integration und Verwendung von (2.5)

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &= \frac{1}{2} \int_{z=0}^{\lambda} \int_{\vartheta=0}^{2\pi} \hat{r}^2(\vartheta, z, t) d\vartheta dz = \\ &= \frac{1}{2} \int_{z=0}^{\lambda} \int_{\vartheta=0}^{2\pi} \left(\bar{r}^2 + 2\bar{r}\bar{f}_n(t) \cos(n\vartheta) \cos(kz) + \bar{f}_n^2(t) \cos^2(n\vartheta) \cos^2(kz) \right) d\vartheta dz,\end{aligned}$$

was schließlich zu folgendem Endergebnis für das Volumen führt

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &= \lambda \left(\pi\bar{r}^2 + \frac{\pi}{4}\bar{f}_n^2(t) \right), \quad \forall n \neq 0 \\ \mathcal{V} &= \lambda \left(\pi\bar{r}^2 + \frac{\pi}{2}\bar{f}_0^2(t) \right), \quad n = 0.\end{aligned}$$

Aus diesen Beziehungen kann nun mit dem äquivalenten Volumen $\mathcal{V} = \pi \bar{r}^2 \lambda = \text{const.}$ der mittlere Strahlradius \bar{r} mit dem ungestörten Strahlradius \tilde{r} ausgedrückt werden. Somit ergibt sich

$$\bar{r} = \tilde{r} \sqrt{1 - \frac{\bar{f}_n^2(t)}{4\tilde{r}^2}} \approx \tilde{r} \left(1 - \frac{\bar{f}_n^2(t)}{8\tilde{r}^2} \right), \quad \forall n \neq 0$$

$$\bar{r} = \tilde{r} \sqrt{1 - \frac{\bar{f}_0^2(t)}{2\tilde{r}^2}} \approx \tilde{r} \left(1 - \frac{\bar{f}_0^2(t)}{4\tilde{r}^2} \right), \quad n = 0.$$

Mit dem Flächenintegral erster Art (vgl. BARTSCH [4]), mit anschließender Annäherung durch Reihenentwicklung nach TAYLOR mit Abbruch nach dem ersten Term¹, kann nun die Strahloberfläche A als

$$A = \int_z \int_{\vartheta} \sqrt{1 + \left(\frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \hat{r}}{\partial \vartheta} \right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{r}}{\partial z} \right)^2} \tilde{r} d\vartheta dz \approx$$

$$\approx \int_z \int_{\vartheta} \left[1 + \frac{1}{2\tilde{r}^2} \left(\frac{\partial \hat{r}}{\partial \vartheta} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{r}}{\partial z} \right)^2 \right] \tilde{r} d\vartheta dz$$

angegeben werden was nach Integration zu

$$A = \lambda \left[\underbrace{2\pi\tilde{r}}_{\text{unverformter Anteil}} + \underbrace{\frac{\pi \bar{f}_n^2(t)}{4\tilde{r}} (k^2\tilde{r}^2 + n^2 - 1)}_{\text{Verformungsanteil}} \right], \quad \forall n \neq 0, \quad \text{bzw.} \quad (2.6)$$

$$A = \lambda \left[2\pi\tilde{r} + \frac{\pi \bar{f}_0^2(t)}{2\tilde{r}} (k^2\tilde{r}^2 - 1) \right], \quad n = 0 \quad (2.7)$$

führt, welcher Ausdruck wie ersichtlich aus einem unverformten Anteil und einem Verformungsanteil besteht.

Oberflächenenergie P

Aus der Strahloberfläche A lässt sich nun durch Multiplikation des Verformungsanteiles aus Gleichung (2.6) mit der Oberflächenspannung σ die Oberflächenenergie P ausdrücken. Dies ergibt

$$P = \lambda \frac{\pi \bar{f}_n^2(t)}{4\tilde{r}} (k^2\tilde{r}^2 + n^2 - 1) \sigma, \quad \forall n \neq 0 \quad (2.8)$$

$$P = \lambda \frac{\pi \bar{f}_0^2(t)}{2\tilde{r}} (k^2\tilde{r}^2 - 1) \sigma, \quad n = 0. \quad (2.9)$$

¹TAYLORreihenentwicklung: $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x$

2.2. Kapillarwellen nicht-viskoser und viskoser Fluide

Es zeigt sich, dass wenn $P < 0$ ist, die Bewegung instabil ist. Nur für eine rotationssymmetrische Störung ($n = 0$) kann daher der Strahl instabil werden. Das heißt

$$P < 0 \quad \text{für} \quad k^2 \tilde{r}^2 - 1 < 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{2\pi \tilde{r}}{\lambda} < 1 \Rightarrow \lambda > 2\pi \tilde{r}.$$

Für den nicht rotationssymmetrischen Fall, also $n \geq 1$, ist der Strahl stabil, da in diesem Fall $P > 0$ ist.

Kinetische Energie K

Die differentielle kinetische Energie dK am differentiellen Massenelement dm lässt sich als

$$dK = \frac{1}{2} dm \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$$

mit der Geschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ anschreiben. Durch Einführung einer konstanten Dichte ρ und Integration erhält man

$$K = \frac{1}{2} \rho \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V}.$$

Drückt man nun die Geschwindigkeit \mathbf{u} durch den Gradienten einer Potentialfunktion $\Phi(r, \vartheta, z, t)$, mit dem Nabladifferentialoperator $\nabla = [\partial_r, \partial_\vartheta/r, \partial_z]^\top$ in Zylinderkoordinaten aus, d.h

$$\mathbf{u} = \nabla \Phi, \tag{2.10}$$

so ergibt sich für die kinetische Energie K mit Gleichung (2.10)

$$K = \frac{1}{2} \rho \int_{\mathcal{V}} \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi d\mathcal{V}. \tag{2.11}$$

Gleichung (2.11) kann nun mit einer der GREENSchen Formeln (1. GREENSche Identität) entsprechend ARENS et al. [1]

$$\int_{\mathcal{V}} \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi d\mathcal{V} = \int_{\partial \mathcal{V}} \Phi \nabla \Phi \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\mathcal{V}} \Phi \nabla^2 \Phi d\mathcal{V}$$

umgeschrieben werden zu

$$K = \frac{1}{2} \rho \left[\int_{\partial \mathcal{V}} \Phi \nabla \Phi \cdot \mathbf{n} dA - \int_{\mathcal{V}} \underbrace{\Phi \nabla^2 \Phi}_{=0} d\mathcal{V} \right] = \tag{2.12}$$

$$= \frac{1}{2} \rho \int_{\partial \mathcal{V}} \Phi \nabla \Phi \cdot \mathbf{n} dA, \tag{2.13}$$

wobei in der Potentialtheorie wie in Gleichung (2.12) bereits gezeigt die LAPLACE-Gleichung $\nabla^2 \Phi = 0$ gilt, da die Kontinuitätsgleichung im inkompressiblen Fall identisch erfüllt wird, d.h. $\nabla \cdot (\nabla \Phi) \equiv 0$.

Dies ergibt somit in Zylinderkoordinaten für die LAPLACE-Gleichung

$$\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 0. \quad (2.14)$$

Setzt man nun den folgenden Ansatz für das Geschwindigkeitspotential Φ mit

$$\Phi = R(r) T(\vartheta) H(z) \beta(t) \quad (2.15)$$

in Gleichung (2.14) ein, erhält man die partielle Differentialgleichung

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{rR(r)} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \frac{1}{r^2 T(\vartheta)} \frac{\partial^2 T(\vartheta)}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{H(z)} \frac{\partial^2 H(z)}{\partial z^2} = 0. \quad (2.16)$$

Lösungen von Gleichung (2.16) für die einzelnen Teilfunktionen aus dem Ansatz für das Potential $\Phi(r, \vartheta, z, t)$ aus Gleichung (2.15) können mittels des Separationsansatzes (vgl. ARENS et al. [1]) ermittelt werden. Hiermit ergibt sich als erstes

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(r)} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{rR(r)} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 T(\vartheta)}{\partial \vartheta^2} &= -\frac{1}{H(z)} \frac{\partial^2 H(z)}{\partial z^2} = k^2 \\ \frac{\partial^2 H(z)}{\partial z^2} + k^2 H(z) &= 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Die somit erhaltene gewöhnliche Differentialgleichung (2.17) hat eine allgemeine Form der Lösung von

$$H(z) = C_1 \cos(kz) + B_1 \sin(kz). \quad (2.18)$$

Diese allgemeine Lösung (2.18) kann im weiteren Verlauf auf den Anteil

$$H(z) = C_1 \cos(kz) \quad (2.19)$$

reduziert werden, also $B_1 = 0$, welcher konsistent mit den Annahmen der Verformungen in Gleichung (2.5) ist. Für die nächste Funktion $T(\vartheta)$ ergibt sich mittels des Separationsansatzes die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{r^2}{R(r)} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{r}{R(r)} \frac{\partial R(r)}{\partial r} - r^2 k^2 &= -\frac{1}{T(\vartheta)} \frac{\partial^2 T(\vartheta)}{\partial \vartheta^2} = n^2 \\ \frac{\partial^2 T(\vartheta)}{\partial \vartheta^2} + n^2 T(\vartheta) &= 0. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Aus Gleichung (2.20) kann somit wieder eine allgemeine Lösung der Form

$$T(\vartheta) = C_2 \cos(n\vartheta) + B_2 \sin(n\vartheta)$$

gefunden werden, welche analog zu (2.19) als

$$T(\vartheta) = C_2 \cos(n\vartheta) \quad (2.21)$$

geschrieben werden kann, um mit der Verformung (2.5) konsistent zu sein. Mit diesen beiden Gleichungen aus (2.17) und (2.20) kann nun schließlich die BESSELSche Differentialgleichung als

$$r^2 \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + r \frac{dR(r)}{dr} - (n^2 + k^2 r^2) R(r) = 0 \quad (2.22)$$

angeschrieben werden. Die allgemeine Lösung von Gleichung (2.22) kann nun als

$$R(r) = C_3 I_n(kr) + B_3 K_n(kr) \quad (2.23)$$

dargestellt werden, wobei $I_n(kr)$ und $K_n(kr)$ die modifizierten BESSELFunktionen erster und zweiter Art darstellen, welche in den Abbildungen 2.3 und 2.4 ersichtlich sind. Die Reihendarstellung jener modifizierten BESSELFunktion erster Art lautet

$$I_n(kr) = \left(\frac{kr}{2}\right)^n \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j! \Gamma(n+j+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{2j} \quad (2.24)$$

mit $n \in \mathbb{N}_0$ und der Gammafunktion

$$\Gamma(n+j+1) = \int_0^{\infty} t^{j+n} e^{-t} dt, \quad (2.25)$$

wobei $n+j+1 \in \mathbb{R}_{>0}$ ist (vgl. ARENS et al. [1]). Die Variable kr ist hierbei die dimensionslose Frequenz. Eine allgemeine Darstellung der Gleichungen (2.24) und (2.25) ist in Abbildung 2.3 gegeben, wobei für die Gammafunktion zur Verallgemeinerung auch negative Werte im Definitionsbereich ersichtlich sind.

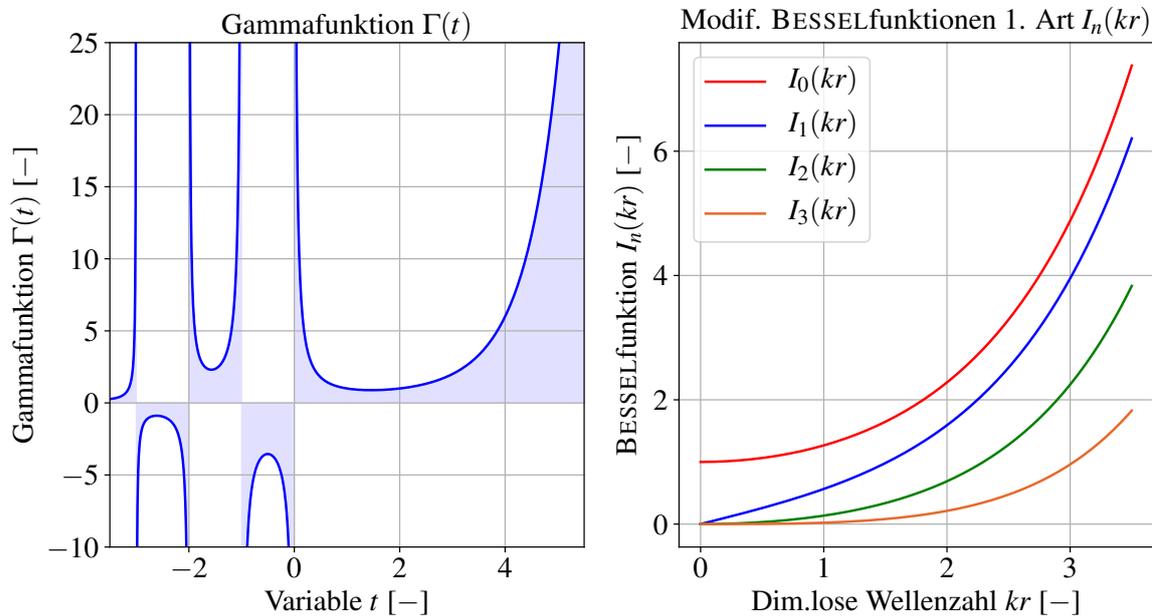


Abbildung 2.3 Allgemeine Darstellungen der Gammafunktion $\Gamma(t)$ und der modifizierten BESSELFunktion erster Art $I_n(kr)$.

Einsetzen der Randbedingung bei $r \rightarrow 0$ führt auf $K_n(0) \rightarrow \infty$. Dieser Umstand bedingt, dass die Konstante $C_4 = 0$ sein muss, um eine reguläre Lösung zu erhalten, womit sich im weiteren

$$R(r) = C_3 I_n(kr) \quad (2.26)$$

schreiben lässt.

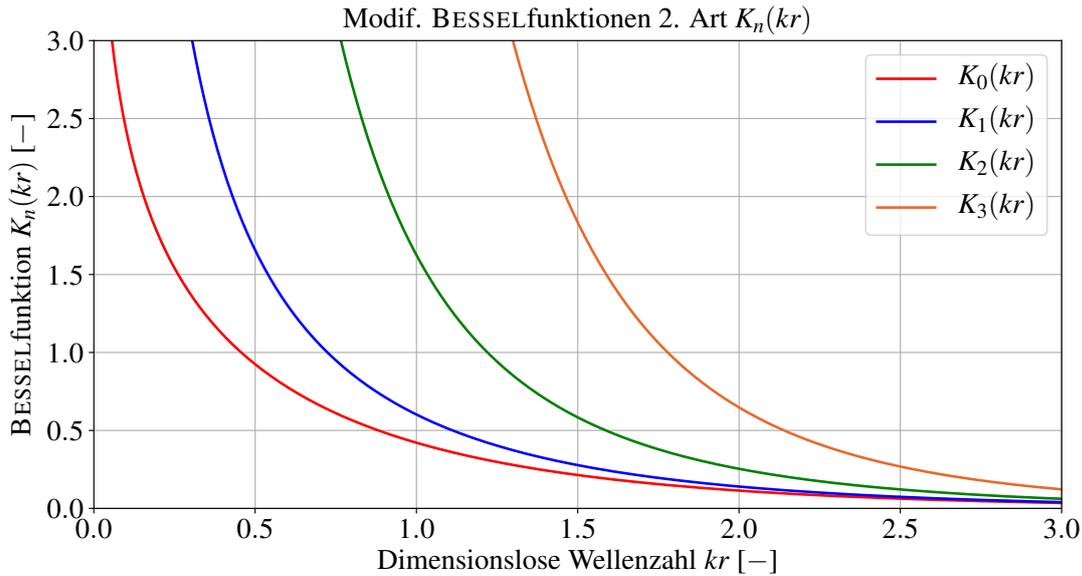


Abbildung 2.4 Allgemeine Darstellung der modifizierten BESSELfunktion zweiter Art $K_n(kr)$.

Somit erhält man zusammenfassend mit den Gleichungen (2.19), (2.21) und (2.26) für das Geschwindigkeitspotential $\Phi(r, \vartheta, z, t)$ die Lösungsfunktion

$$\Phi(r, \vartheta, z, t) = \beta_n(t) I_n(kr) \cos(n\vartheta) \cos(kz). \quad (2.27)$$

Anschließend kann nun mittels der kinematischen Randbedingung, angenähert an der Stelle $r \approx \tilde{r}$, mit

$$\frac{\partial r(\vartheta, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_{r \approx \tilde{r}}$$

ein Zusammenhang zwischen der Amplitude der Störung $\bar{f}_n(t)$ und der Funktion $\beta_n(t)$ hergestellt werden. Dabei ergibt sich durch Gleichsetzen von (2.5) und (2.27) der Ausdruck

$$\frac{d\bar{f}_n(t)}{dt} = k\beta_n(t) I'_n(k\tilde{r}). \quad (2.28)$$

Mit den bisher erhaltenen Beziehungen kann schließlich die kinetische Energie K aus Gleichung

(2.13) mit

$$\begin{aligned}
 K &= \frac{1}{2}\rho \int_{z=0}^{\lambda} \int_{\vartheta=0}^{2\pi} \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_{r \approx \tilde{r}} \tilde{r} d\vartheta dz = \\
 &= \frac{1}{2}\rho \beta_n^2(t) I_n(k\tilde{r}) I_n'(k\tilde{r}) \tilde{r} \int_{z=0}^{\lambda} \int_{\vartheta=0}^{2\pi} \cos^2(n\vartheta) \cos^2(kz) d\vartheta dz = \\
 &= \frac{\lambda}{4} \rho k \tilde{r} \beta_n^2(t) I_n(k\tilde{r}) I_n'(k\tilde{r}) \pi, \quad \forall n \neq 0 \\
 &= \frac{\lambda}{2} \rho k \tilde{r} \beta_0^2(t) I_0(k\tilde{r}) I_0'(k\tilde{r}) \pi, \quad n = 0
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

angegeben werden. Gleichung (2.29) ergibt zusammen mit Gleichung (2.28) den endgültigen Ausdruck für die kinetische Energie K . Diese lässt sich als

$$K = \frac{\pi}{4} \lambda \rho \tilde{r}^2 \frac{I_n(k\tilde{r})}{I_n'(k\tilde{r})} \frac{1}{k\tilde{r}} \left(\frac{d\bar{f}_n(t)}{dt} \right)^2, \quad \forall n \neq 0 \tag{2.30}$$

$$K = \frac{\pi}{2} \lambda \rho \tilde{r}^2 \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_0'(k\tilde{r})} \frac{1}{k\tilde{r}} \left(\frac{d\bar{f}_0(t)}{dt} \right)^2, \quad n = 0 \tag{2.31}$$

darstellen. Somit sind die gesuchten Ausdrücke für die potentielle Energie P und die kinetische Energie K bestimmt und es kann die Energiebilanz betrachtet werden.

Energiebilanz

Die grundlegende Annahme bei der Herleitung der Kapillarwellen ist, dass die Summe der Energien zeitlich unveränderlich ist, d.h.

$$\frac{d}{dt} (P + K) = 0. \tag{2.32}$$

Setzt man also Gleichung (2.8) für die potentielle Energie P und Gleichung (2.30) für die kinetische Energie K in Gleichung (2.32) ein, erhält man

$$\frac{d}{dt} \left[\lambda \frac{\pi}{4} \frac{\bar{f}_n^2(t)}{\tilde{r}} (k^2 \tilde{r}^2 + n^2 - 1) \sigma + \frac{\pi}{4} \lambda \rho \tilde{r}^2 \frac{I_n(k\tilde{r})}{I_n'(k\tilde{r})} \frac{1}{k\tilde{r}} \left(\frac{d\bar{f}_n(t)}{dt} \right)^2 \right] = 0.$$

Durch Differenzieren nach der Zeit t ergibt sich

$$\frac{d^2 \bar{f}_n(t)}{dt^2} + \frac{\sigma}{\rho \tilde{r}^3} k \tilde{r} (k^2 \tilde{r}^2 + n^2 - 1) \frac{I_n'(k\tilde{r})}{I_n(k\tilde{r})} \bar{f}_n(t) = 0, \quad \forall n, \tag{2.33}$$

was eine gewöhnliche Differentialgleichung von $\bar{f}_n(t)$ mit Ableitungen nach der Zeit t darstellt. Mit dem Exponentialansatz

$$\bar{f}_n(t) = C e^{-i\Omega t},$$

mit $\Omega = \Omega_r + i\Omega_i \in \mathbb{C}$, und anschließendem Einsetzen in Gleichung (2.33) erhält man den folgenden gesuchten Ausdruck für die Frequenz Ω der Kapillarwellen

$$\Omega^2 = \frac{\sigma}{\rho\tilde{r}^3} k\tilde{r} (k^2\tilde{r}^2 + n^2 - 1) \frac{I'_n(k\tilde{r})}{I_n(k\tilde{r})}. \quad (2.34)$$

Da nur rotationssymmetrische Störungen zu einem instabilen Strahl führen können, d.h. $n = 0$, müssen nur diese betrachtet werden. Somit ergibt sich der Ausdruck

$$\Omega^2 = \frac{\sigma}{\rho\tilde{r}^3} k\tilde{r} (k^2\tilde{r}^2 - 1) \frac{I'_0(k\tilde{r})}{I_0(k\tilde{r})}, \quad (2.35)$$

wobei gilt, dass

$$\frac{d}{d(k\tilde{r})} I_0(k\tilde{r}) = -I_1(k\tilde{r}).$$

Gleichung (2.35) ist die gesuchte *Dispersionsrelation des nicht-viskosen Flüssigkeitsstrahls*. Im Falle, dass $k\tilde{r} < 1$ bzw. $\lambda > 2\pi\tilde{r}$ ergibt sich eine rein imaginäre Frequenz $\Omega = i\Omega_i$ und somit ein instabiles Anwachsen der Störung. Für $k\tilde{r} > 1$, bzw. $\lambda < 2\pi\tilde{r}$, ergibt sich eine reelle Frequenz $\Omega = \Omega_r$ und eine stabile Wellenbewegung. Eine Darstellung beider Fälle ist in Abbildung 2.5 gezeigt, wobei links die imaginäre Lösung und rechts die reelle Lösung in Abhängigkeit von der dimensionslosen Wellenzahl $k\tilde{r} \in [0, 2.5]$ ersichtlich ist.

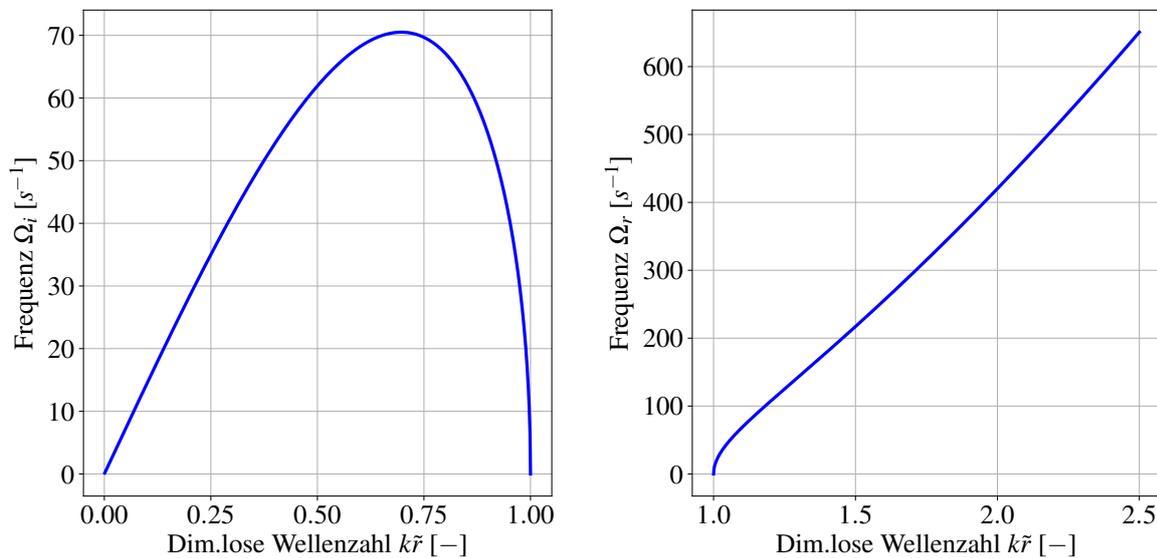


Abbildung 2.5 Allgemeine Darstellungen der Lösung der Dispersionsrelation (2.35) bei einem ungestörten Radius $\tilde{r} = 0.0012\text{m}$ für Wasser.

2.2.2. Dispersionsrelation viskoser Fluide

Die nachfolgende Herleitung der *Dispersionsrelation viskoser NEWTONscher Fluide* basiert im Wesentlichen auf der Arbeit von AWATI und HOWES [2], welche eine theoretisch/analytische Beschreibung der stehenden Kapillarwellen zum Ziel hatte. Die linearisierten NAVIER-STOKES-Gleichungen für einen achssymmetrischen viskosen Fluidstrahl schreiben sich unter Vernachlässigung der Körperkräfte \mathbf{f}^B als

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2 (ru)}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial (ru)}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] \quad (2.36)$$

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right], \quad (2.37)$$

wobei $u(r, z)$ die radiale und $w(r, z)$ die axiale Geschwindigkeitskomponenten sind. Die Gleichungen (2.36) und (2.37) werden hierbei auf ein differentielles Kontrollvolumen $dV = 2\pi r dr dz$ angewendet. Die Kontinuitätsgleichung bei angenommener Inkompressibilität, lautet

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

Die linearisierten Randbedingungen an der Stelle $r = \tilde{r}$ ergeben sich mit f aus Gleichung (2.5) zu

$$-p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{\sigma}{\rho} \left(\frac{f}{\tilde{r}^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) \quad (2.38)$$

und

$$\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) = 0. \quad (2.39)$$

Hierbei ist Gleichung (2.38) das Gleichgewicht der Normalspannungen und Gleichung (2.39) jenes der Tangentialspannungen. Aufgrund der Symmetrie des Problems ist eine Definition einer Stromfunktion $\Psi(r, z, t)$, welche die Kontinuitätsgleichung des Strömungsfeldes identisch erfüllt, möglich. Hierbei ist

$$u = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \quad \text{und} \quad w = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r}.$$

Die Elimination des Druckes aus Gleichung (2.36) und (2.37) führt auf

$$\mathcal{D}^2 \left(\mathcal{D}^2 - \frac{\rho}{\mu} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = 0, \quad (2.40)$$

wobei der Differentialoperator \mathcal{D}

$$\mathcal{D}^2 = r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.41)$$

ist. Unter der Annahme einer Wellenlösung welche sich proportional zu $e^{i(kz-\Omega t)}$ verhält, kann nun gezeigt werden, dass sich für die Stromfunktion der Ausdruck

$$\Psi(r, z, t) = [A_1 r I_1(kr) + A_2 r I_1(k_1 r)] e^{i(kz-\Omega t)} \quad (2.42)$$

mit den Integrationskonstanten A_1, A_2 als auch $k_1 = \sqrt{k^2 - i\Omega\rho/\mu}$ und der Kreisfrequenz Ω , ergibt. Die gesuchte (dimensionslose) *Dispersionsbeziehung für den viskosen Fall* erhält man durch Substitution der Lösung für die Stromfunktion aus (2.42) in die Randbedingungen (2.38) und (2.39) mit anschließender Elimination der Konstanten A_1 und A_2 . Somit ergibt sich bei $r = \tilde{r}$

$$2(k\tilde{r})^2 \left(y^2 + (k\tilde{r})^2 \right) \frac{I_1'(k\tilde{r})}{I_0(k\tilde{r})} \left(1 - \frac{2k\tilde{r}y}{y^2 + (k\tilde{r})^2} \frac{I_1(k\tilde{r})I_1'(y)}{I_1'(k\tilde{r})I_1(y)} \right) + \left(y^4 - (k\tilde{r})^4 \right) - \frac{Re^2}{We} \frac{I_1(k\tilde{r})}{I_0(k\tilde{r})} k\tilde{r} \left(1 - (k\tilde{r})^2 \right) = 0 \quad (2.43)$$

mit $y = \sqrt{(k\tilde{r})^2 - i\Omega\tilde{r}^2\rho/\mu} \in \mathbb{C}$, wobei Re die REYNOLDSzahl und We die WEBERzahl entsprechend

$$Re = \frac{\rho\tilde{r}\bar{w}(z)}{\mu} \quad \text{und} \quad We = \frac{\rho\tilde{r}\bar{w}^2(z)}{\sigma}$$

darstellen.

2.3. Nicht-NEWTONSche, viskoelastische Fluide

Nach PIMENTA und ALVES [15] erfolgt ausgehend von den Erhaltungsgleichungen für die Kontinuität und dem Impuls für eine einphasige, laminare, instationäre Strömung eines inkompressiblen Fluids in vektorieller Form

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.44)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f}^B \quad (2.45)$$

eine Aufspaltung des Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}$ in eine NEWTONSche Komponente $\boldsymbol{\tau}_s$ und eine nicht-NEWTONSche Komponente $\boldsymbol{\tau}_p$. In obigen Gleichungen ist p das skalare Druckfeld, \mathbf{u} das Geschwindigkeitsvektorfeld und \mathbf{f}^B die Körperkräfte. Die genannte Aufspaltung des Spannungstensors ergibt

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p,$$

wobei sich ersteres auf das Fluid des Lösungsmittels (Solvent) und letzteres auf das Fluid des Polymeres bzw. der Polymerlösung bezieht. Damit eine geschlossene Lösung der Erhaltungsgleichungen (2.44) und (2.45) möglich ist, muss ein konstitutives Gesetz für beide Tensorkomponenten $\boldsymbol{\tau}_s$ und $\boldsymbol{\tau}_p$ formuliert werden. Dieses kann nach PIMENTA und ALVES [14] allgemein für eine Vielzahl von

viskoelastischen Modellen als

$$\boldsymbol{\tau}_s = \mu_s(\dot{\gamma}) \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top \right) = 2\mu_s(\dot{\gamma}) \mathbf{V} \quad (2.46)$$

$$f(\boldsymbol{\tau}_p) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(\dot{\gamma}) \boldsymbol{\tau}_p^\nabla + \mathbf{h}(\boldsymbol{\tau}_p) = \mu_p(\dot{\gamma}) \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top \right) = 2\mu_p(\dot{\gamma}) \mathbf{V} \quad (2.47)$$

formuliert werden, mit dem Geschwindigkeitsvektor \mathbf{u} und dem Verzerrungsratentensor \mathbf{V} als

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

beziehungsweise

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top \right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

für inkompressible Fluide, d.h. für den kompressiblen Anteil gilt

$$-\frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{E} = \mathbf{0}$$

mit dem Einheitstensor \mathbf{E} entsprechend

$$\mathbf{E} = \text{diag}(1, 1, 1).$$

In den Gleichungen (2.46) und (2.47) ist μ_s die dynamische Viskosität der Lösung, μ_p jene des Polymers, λ_1 die Relaxationszeit, $\dot{\gamma}$ die Scherrate, $f(\boldsymbol{\tau}_p)$ eine allgemeine skalare Funktion abhängig von einer Invariante von $\boldsymbol{\tau}_p$ und $\mathbf{h}(\boldsymbol{\tau}_p)$ eine tensorwertige Funktion. Die kontravariante OLDROYD-Ableitung des Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}_p$ schreibt sich als

$$\boldsymbol{\tau}_p^\nabla = \frac{D\boldsymbol{\tau}_p}{Dt} - \left(\nabla \mathbf{u}^\top \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \cdot \nabla \mathbf{u} \right)$$

mit der substantiellen Ableitung

$$\frac{D\boldsymbol{\tau}_p}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_p,$$

unter der Definition des Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u} bzw. allgemein eines Tensorfeldes 2. Stufe \mathbf{T} , mit der kanonischen Basis $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k$ mit $i, j, k = 1, \dots, 3$

$$\nabla \mathbf{u} = \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad \text{bzw.} \quad \nabla \mathbf{T} = \sum_{i,j,k=1}^3 \frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \quad (2.49)$$

2.3.1. Konstitutives Modell

Das verwendete konstitutive Modell um das viskoelastische Verhalten des Polymers zu beschreiben ist der OLDROYD-B-LOG Ansatz. AL-BALDAWI beschreibt in [3] auf Seite 44, dass bei der OLDROYD-Verallgemeinerung des MAXWELL-Modells davon ausgegangen wird, dass die viskoelastische Flüssigkeit in einer Trägerflüssigkeit mit NEWTONSchen Verhalten gelöst ist und eine „Gedächtnisgleichung“ berücksichtigt wird.

Gemäß PIMENTA und ALVES [14] wird der Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}_s$ für den Anteil des Lösungsmittels (*Wasser*), definiert in Gleichung (2.46), mit konstanter Zähigkeit μ_s zu

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\mu_s \mathbf{V}$$

und jener Anteil der Polymerlösung (*Prästol 2540/Wasser-Lösung*) $\boldsymbol{\tau}_p$ aus Gleichung (2.47) entsprechend zu

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1 \boldsymbol{\tau}_p^\nabla = 2\mu_p \mathbf{V},$$

wobei die Relaxationszeit λ_1 und die dynamische Viskosität μ_p (sowie μ_s) nicht von der Scherrate $\dot{\gamma}$ abhängen, also konstant sind. Als Konsequenz kann das strukturviskose Verhalten der *Prästol 2540/Wasser-Lösung* nicht abgebildet werden.

Eine tabellarische Auflistung der verwendeten Stoffwerte für das OLDROYD-B-LOG Modell ist in 2.5.3 auf Seite 25 gegeben.

2.3.2. Dispersionsrelation viskoelastischer Fluide

Die im folgenden gezeigte Herleitung der *Dispersionsrelation viskoelastischer Fluide* beruht auf einer theoretisch/analytischen Studie von BRENN, LIU und DURST [5] zum kapillaren Zerfall viskoelastischer Freistrahlen. Ähnlich wie in den Abschnitten 2.2.1 und 2.2.2 wird auch in diesem Fall von einem achssymmetrischen Strahl ausgegangen, jedoch für ein nicht-NEWTONSches Fluid mit der Dichte ρ , der Oberflächenspannung σ und dem Radius \tilde{r} . Der Strahl bewegt sich mit der Geschwindigkeit \bar{w} durch ein nicht-viskoses Gas mit der Dichte ρ_G .

Flüssige Phase und Druckverteilung

Die grundlegenden Erhaltungsgleichungen für die Massenerhaltung und den Impuls des Flüssigkeitsstrahls sind

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho \mathbf{u} = -\nabla \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho \mathbf{f}^B \quad (2.51)$$

mit der Zeit t , der Geschwindigkeit der Flüssigkeit \mathbf{u} , den Körperkräften \mathbf{f}^B welche nur die Gravitation g in z -Richtung berücksichtigen und $\boldsymbol{\pi}$ als den totalen Spannungstensor der Flüssigkeit, welcher sich als

$$\boldsymbol{\pi} = p\mathbf{E} + \boldsymbol{\tau}$$

darstellt. Die Beschreibung des viskoelastischen Fluids wird mit dem „OLROYD Acht-Konstanten-Modell“ durchgeführt, welches durch die folgende konstitutive Gleichung verkörpert wird

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \boldsymbol{\tau}^\nabla + \frac{1}{2} \tilde{\mu}_0 \text{Sp}(\boldsymbol{\tau}) \dot{\boldsymbol{\gamma}} - \frac{1}{2} \tilde{\mu}_1 (\boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \frac{1}{2} \tilde{\nu}_1 (\boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \mathbf{E} = \\ = -\mu_0 \left[\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_2 \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\nabla - \tilde{\mu}_2 (\dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}) + \frac{1}{2} \tilde{\nu}_2 (\dot{\boldsymbol{\gamma}} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \mathbf{E} \right]. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Hierbei sind μ_0 die Nullscherviskosität, λ_1 die Relaxationszeit und λ_2 die Retardationszeit. Die übrigen 5 Konstanten $\tilde{\mu}_0$, $\tilde{\mu}_1$, $\tilde{\mu}_2$, $\tilde{\nu}_1$ und $\tilde{\nu}_2$ beziehen sich auf nicht-lineare Terme. Das einfache (innere) Punktprodukt zweier Tensoren 2. Stufe, wie etwa jenes von $\boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}$ schreibt sich mit Hilfe der EINSTEINSchen Summenkonvention² als

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \tau_{ij} \dot{\gamma}_{kl} \delta_{jk} = \tau_{ij} \dot{\gamma}_{jl} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$$

und das doppelte (innere) Punktprodukt zweier Tensoren 2. Stufe stellt sich als

$$\boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \tau_{ij} \dot{\gamma}_{kl} \delta_{ik} \delta_{jl} = \tau_{ij} \dot{\gamma}_{ij} \in \mathbb{R}$$

dar, wobei mit δ_{ik} das KRONECKER-Delta entsprechend

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i \neq k \end{cases}$$

angegeben ist. Die kontravariante OLDROYD Ableitung, hier exemplarisch bezogen auf den Scherrentensor $\dot{\boldsymbol{\gamma}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, schreibt sich als

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}^\nabla = \frac{D\dot{\boldsymbol{\gamma}}}{Dt} - \left(\nabla \mathbf{u}^\top \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} - \dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \nabla \mathbf{u} \right),$$

mit der substantiellen Ableitung

$$\frac{D\dot{\boldsymbol{\gamma}}}{Dt} = \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\gamma}}.$$

Analoges zu obigen Gleichungen gilt für die kontravariante und substantielle Ableitung des Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}$. Die Spur $\text{Sp}(\boldsymbol{\tau})$ wird allgemein als Summe der Diagonalelemente des quadratischen Spannungstensors zweiter Stufe $\boldsymbol{\tau}$ mit

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{rr} & \tau_{r\vartheta} & \tau_{rz} \\ \tau_{\vartheta r} & \tau_{\vartheta\vartheta} & \tau_{\vartheta z} \\ \tau_{zr} & \tau_{z\vartheta} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$

²Die Auswertung der Tensoroperationen erfolgt vereinfacht dargestellt in der Art, dass über gemeinsam auftretende Indizes innerhalb eines Terms summiert wird. Auch werden das Summenzeichen und die Standardbasisvektoren für eine übersichtlichere Darstellung weggelassen.

als

$$\text{Sp}(\boldsymbol{\tau}) = \sum_{i=1}^3 \tau_{ii} \in \mathbb{R}$$

berechnet. Unter der Annahme von Inkompressibilität für die Flüssigkeit erhält man unter zusätzlicher Vernachlässigung der nicht-linearen Terme und der Körperkräfte die linearisierten Gleichungen aus (2.50) und (2.51)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \right) &= -\nabla \cdot (p\mathbf{E} + \boldsymbol{\tau}) \\ \boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial z} \right) &= -\mu_0 \left[\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_2 \left(\frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial z} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Die Geschwindigkeit \bar{w} ist hierbei jene des Fluidstrahles bzw. auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Kapillarwellen. Die z -Koordinate ist relativ zu einem mit der Geschwindigkeit des Fluidstrahls \bar{w} bewegten Koordinatensystem definiert. Deren Zusammenhang mit der raumfesten axialen Koordinate z' lautet dementsprechend $z = z' - \bar{w}t$. Der momentane radiale Abstand $\hat{r}(\vartheta, z, t)$ der Oberfläche des Fluidstrahls von der Strahlachse schreibt sich als

$$\hat{r}(\vartheta, z, t) = \tilde{r} + f(\vartheta, z, t),$$

wobei \tilde{r} den Gleichgewichtsradius bzw. ungestörten Radius und f die Störung der Oberfläche bedeutet (analog zu Gleichung (2.5) und Abbildung 2.2). Das Strömungsfeld muss des weiteren die kinematische und die dynamische Randbedingung zwischen dem Gas und der Flüssigkeit, angenähert an der Stelle $r = \tilde{r}$, erfüllen. Damit ergibt sich für die kinematische Randbedingung

$$u = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial f}{\partial z}$$

und für die dynamische Randbedingung

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi}_G) \cdot \mathbf{t} &= \mathbf{0} && \text{Tangentialspannungen,} \\ (\boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi}_G) \cdot \mathbf{n} + \sigma(\nabla \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} &= \mathbf{0} && \text{Normalspannungen,} \end{aligned}$$

wobei der Index G die Gasphase beschreibt, \mathbf{n} der Normalvektor, \mathbf{t} der Tangentialvektor ist, und σ die Oberflächenspannung darstellt. Diese Randbedingungen werden nun wie obige Gleichungen linearisiert und es ergibt sich

$$\begin{aligned} u|_{r=\tilde{r}} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial f}{\partial z} \\ \pi_{rz}|_{r=\tilde{r}} &= -\mu(\omega) \left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) = 0 \\ (\pi_{rr} - \pi_{G,rr} + p\sigma)|_{r=\tilde{r}} &= 0 \end{aligned} \quad (2.54)$$

mit π_{rr} als der Normalspannung der Flüssigkeit und $\pi_{G,rr}$ als jene Normalspannung des Gases. Als

2.3. Nicht-NEWTONSche, viskoelastische Fluide

ω wird die Frequenz, wie in den Gleichungen (2.35) und (2.43), bezeichnet. Der Druck p_σ ist der Druck welcher durch die Oberfläche induziert wird. Der Geschwindigkeitsvektor \mathbf{u} besteht in der Problemstellung aus zwei Komponenten entlang der r - und der z -Richtung entsprechend

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, z, t) = \begin{bmatrix} u(r, z, t) \\ 0 \\ w(r, z, t) \end{bmatrix}.$$

Um nun die Wellenbewegung des Fluides zu eruieren werden Lösungen des Geschwindigkeitsvektors in der Form von

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}(r)e^{ikz + \omega t} \quad (2.55)$$

gesucht. Hierbei bedeutet $\bar{\mathbf{u}}$ die Amplitude der Welle, k die Wellenzahl und ω , wie zuvor bereits erwähnt, die komplexe Frequenz $\omega = \omega_r + i\omega_i$. Ähnliche Ausdrücke wie für die Geschwindigkeit aus Gleichung (2.55) gelten auch für den Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$, den Scherratentensor $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$, den Druck p und der Störung f . Diese sind

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \bar{\boldsymbol{\tau}}(r)e^{ikz + \omega t} \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}} &= \dot{\bar{\boldsymbol{\gamma}}}(r)e^{ikz + \omega t} \\ p &= \bar{p}(r)e^{ikz + \omega t} \\ f &= \bar{f}_0e^{ikz + \omega t} \end{aligned}$$

mit \bar{f}_0 als Amplitude der Störung welche als viel kleiner in Bezug auf den Radius angenommen wird, d.h. $\bar{f}_0 \ll \bar{r}$. Mit k wird die Wellenzahl bezeichnet. Setzt man diese Ansätze nun in die Bewegungsgleichung (2.53) ein erhält man gewöhnliche Differentialgleichungen welche nur mehr abhängig von der radialen Koordinate r sind. Die entsprechenden Konstanten werden aus den gegebenen Randbedingungen berechnet. Somit ergibt sich für die Geschwindigkeiten u und w , als auch den Druck p

$$\begin{aligned} u|_{r \leq \bar{r}} &= \left[\frac{l^2 + k^2}{I_1(k\bar{r})} I_1(kr) - \frac{2k^2}{I_1(l\bar{r})} I_1(lr) \right] \frac{\mu(\omega)}{\rho} \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t} \\ w|_{r \leq \bar{r}} &= i \left[\frac{l^2 + k^2}{I_1(k\bar{r})} I_0(kr) - \frac{2kl}{I_1(l\bar{r})} I_0(lr) \right] \frac{\mu(\omega)}{\rho} \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t} \\ p|_{r \leq \bar{r}} &= -\frac{l^2 + k^2}{kI_1(k\bar{r})} I_0(kr) \mu(\omega) (\omega + ik\bar{w}) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}, \end{aligned}$$

wobei

$$l^2 = k^2 + \frac{\rho(\omega + ik\bar{w})}{\mu(\omega)}$$

und

$$\mu(\omega) = \mu_0 \frac{1 + \lambda_2(\omega + ik\bar{w})}{1 + \lambda_1(\omega + ik\bar{w})}$$

sind. Diese Gleichungen gelten für die Geschwindigkeiten u , w und den Druck p der flüssigen Phase. Die Gasphase wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

Gasförmige Phase und Druckverteilung

Das Gas um den bewegten Fluidstrahl wird als nicht-viskos und inkompressibel angenommen und es bewegt sich mit der Geschwindigkeit \bar{w}_G in die selbe Richtung wie der Flüssigkeitsstrahl. Die grundlegenden Gleichungen, also die Kontinuitätsgleichung und die Impulsgleichungen in linearisierter Form, schreiben sich als

$$\frac{1}{r} \frac{\partial r u_G}{\partial r} + \frac{\partial w_G}{\partial z} = 0$$

$$\rho_G \left(\frac{\partial u_G}{\partial t} + \bar{w}_G \frac{\partial u_G}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p_G}{\partial r} \quad (2.56)$$

$$\rho_G \left(\frac{\partial w_G}{\partial t} + \bar{w}_G \frac{\partial w_G}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p_G}{\partial z} \quad (2.57)$$

mit dem Index G für die Gasphase. Die linearisierten Randbedingungen dieser gasförmigen Phase sind

$$u_G|_{r=\bar{r}} = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{w}_G \frac{\partial f}{\partial z}$$

$$u_G|_{r \rightarrow \infty} = 0$$

$$\pi_{G,rr}|_{r=\bar{r}} = p_G. \quad (2.58)$$

Analog zur flüssigen Phase werden auch hier entsprechende Lösungen bezüglich der Wellenbewegung für die Geschwindigkeiten u , w und den Druck p_G definiert. Diese können als

$$u_G = \bar{u}_G(r) e^{ikz + \omega t}$$

$$w_G = \bar{w}_G(r) e^{ikz + \omega t}$$

$$p_G = \bar{p}_G(r) e^{ikz + \omega t}$$

dargestellt werden. Setzt man diese Ansätze in die Bewegungsgleichungen (2.56) und (2.57) ein ergeben sich zusammen mit den Randbedingungen zur Ermittlung der Konstanten

$$u_G|_{r \geq \bar{r}} = \frac{\omega + ik\bar{w}_G}{K'_0(k\bar{r})} K_0(kr) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}$$

$$w_G|_{r \geq \bar{r}} = i \frac{\omega + ik\bar{w}_G}{K'_0(k\bar{r})} K_0(kr) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}$$

$$p_G|_{r \geq \bar{r}} = - \frac{\rho_G (\omega + ik\bar{w}_G)^2}{k K'_0(k\bar{r})} K_0(kr) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}.$$

Somit sind die Geschwindigkeitskomponenten der jeweiligen Phase als auch die Druckverteilung dieser bestimmt und es kann die gesuchte *Dispersionsrelation* hergeleitet werden. In obigen Glei-

chungen stellt $K_n(kr)$ die modifizierte BESSELFunktion zweiter Art der Ordnung n entsprechend

$$K_n(kr) = \frac{\pi I_{-n}(kr) - I_n(kr)}{2 \sin(n\pi)}$$

dar, wobei gilt, dass

$$\frac{d}{d(kr)} K_0(kr) = -K_1(kr).$$

Eine Darstellung von $K_n(kr)$ ist in Abbildung 2.4 gegeben.

Dispersionsrelation

Die Dispersionsrelation der flüssigen Phase wird mittels der Randbedingung laut Gleichung (2.54), welche das Gleichgewicht der Normalspannungen beschreibt, ermittelt. Diese ergibt durch Einsetzen der in den vorherigen Abschnitten hergeleiteten Geschwindigkeits- und Druckbeziehungen

$$\begin{aligned} \pi_{rr} &= p + \tau_{rr} = p - 2\mu(\omega) \frac{\partial u}{\partial r} = \\ &= - \left\{ \frac{l^2 + k^2}{I_1(k\tilde{r})} \left[\frac{\rho}{k} (\omega + ik\bar{w}) I_0(kr) + 2k\mu(\omega) I_1'(kr) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{4k^2 l \mu(\omega)}{I_1(l\tilde{r})} I_1'(lr) \right\} \frac{\mu(\omega)}{\rho} \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Aus der analogen Randbedingung aus Gleichung (2.58) für die Gasphase, welche ebenfalls das Gleichgewicht der Normalspannungen beschreibt, erhält man

$$\pi_{G,rr} \Big|_{r \geq \tilde{r}} = - \frac{\rho_G (\omega + ik\bar{w}_G)^2}{k K_0'(k\tilde{r})} K_0(kr) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}. \quad (2.60)$$

Der Druck p_σ welcher durch die Oberflächenspannung induziert wird schreibt sich in erster Ordnung in f als

$$p_\sigma = \frac{\sigma}{\tilde{r}^2} \left(f + \tilde{r}^2 \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) = \frac{\sigma}{\tilde{r}^2} (1 - k^2 \tilde{r}^2) \bar{f}_0 e^{ikz + \omega t}. \quad (2.61)$$

Setzt man nun die erhaltenen Ausdrücke für π_{rr} , $\pi_{G,rr}$ und p_σ aus den Gleichungen (2.59), (2.60) und (2.61) in die Randbedingung (2.54) ein, erhält man die *Dispersionsrelation viskoelastischer Fluide* als

$$\begin{aligned}
 & \omega^2 \left[\frac{k\tilde{r}}{2} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} + \frac{k\tilde{r}}{2} \frac{\rho_G}{\rho} \frac{K_0(k\tilde{r})}{K_1(k\tilde{r})} \right] + \omega \left\{ 2ik\bar{w}_R \frac{k\tilde{r}}{2} \frac{\rho_G}{\rho} \frac{K_0(k\tilde{r})}{K_1(k\tilde{r})} + \right. \\
 & \left. + \frac{\mu_0}{\rho\tilde{r}^2} \frac{1 + \lambda_2(\omega + ik\bar{w}_R)}{1 + \lambda_1(\omega + ik\bar{w}_R)} k^2 \tilde{r}^2 \left[2k\tilde{r} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} \frac{l^2}{l^2 - k^2} - 1 - 2l\tilde{r} \frac{I_0(l\tilde{r})}{I_1(l\tilde{r})} \frac{k^2}{l^2 - k^2} \right] \right\} = \\
 & = \frac{\sigma}{2\rho\tilde{r}^3} k^2 \tilde{r}^2 (1 - k^2 \tilde{r}^2) + \frac{\rho_G}{\rho} \frac{\bar{w}_R^2}{2\tilde{r}^2} k^3 \tilde{r}^3 \frac{K_0(k\tilde{r})}{K_1(k\tilde{r})}, \tag{2.62}
 \end{aligned}$$

ausgedrückt mit einer relativen Geschwindigkeit $\bar{w}_R = \bar{w} - \bar{w}_G$ zwischen dem Gas und der Flüssigkeit. Wegen des geringen Dichteverhältnisses $\rho_G/\rho \ll 1$ kann der Einfluss der Umgebungsluft vernachlässigt werden, sodass $\rho_G/\rho \approx 0$ und $\bar{w}_R = \bar{w}$. Damit wird die Dispersionsrelation zu

$$\begin{aligned}
 & \omega^2 \frac{k\tilde{r}}{2} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} + \omega \frac{\mu_0}{\rho\tilde{r}^2} \frac{1 + \lambda_2(\omega + ik\bar{w})}{1 + \lambda_1(\omega + ik\bar{w})} k^2 \tilde{r}^2 \left[2k\tilde{r} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} \frac{l^2}{l^2 - k^2} - 1 - 2l\tilde{r} \frac{I_0(l\tilde{r})}{I_1(l\tilde{r})} \frac{k^2}{l^2 - k^2} \right] = \\
 & = \frac{\sigma}{2\rho\tilde{r}^3} k^2 \tilde{r}^2 (1 - k^2 \tilde{r}^2) \tag{2.63}
 \end{aligned}$$

Durch entsprechende Parametersetzung deckt die Dispersionsrelation (2.63) naturgemäß ebenso den Fall des viskosen, nicht-elastischen Fluids (Nullsetzen der elastischen Zeitmaßstäbe $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$), sowie den reibungsfreien, nicht-viskosen Flüssigkeitsstrahl ($\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ und dynamische Zähigkeit $\mu_0 = 0$) ab. Daher wird diese Gleichung (2.63) fortan in voller bzw. entsprechend reduzierter Form zur Validierung der Simulationsergebnisse in Kapitel 4 verwendet.

2.4. Stehende Wellen

Mithilfe der vorhergehenden Abschnitt hergeleiteten Dispersionsrelationen, insbesondere mit der fortan für alle analytischen Berechnungen verwendeten Formulierung (2.63), lassen sich für den stabilen Fall die vorliegend untersuchten stehenden Kapillarwellen, welche sich stromauf vom Auftreffpunkt des Strahls ausbilden, geeignet beschreiben. Wir gehen zunächst von Gleichung (2.63) geschrieben in dimensionsloser Form als

$$\begin{aligned} \omega^* \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} + 2\omega^* \frac{k\tilde{r}}{Re} \left[2k\tilde{r} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} \frac{l^2}{l^2 - k^2} - 1 - 2l\tilde{r} \frac{I_0(l\tilde{r})}{I_1(l\tilde{r})} \frac{k^2}{l^2 - k^2} \right] \frac{1 + De_2(\omega^* + ik\tilde{r})}{1 + De_1(\omega^* + ik\tilde{r})} = \\ = \frac{k\tilde{r}}{We} (1 - k^2\tilde{r}^2) \end{aligned} \quad (2.64)$$

mit

$$(l\tilde{r})^2 = (k\tilde{r})^2 + \frac{Re(\omega^* + ik\tilde{r})}{1 + De_2(\omega^* + ik\tilde{r})} [1 + De_1(\omega^* + ik\tilde{r})].$$

aus. Darin bedeuten $\omega^* = \omega\tilde{r}/\bar{w}$ die dimensionslose Kreisfrequenz, $Re = \rho\bar{w}\tilde{r}/\mu_0$ die REYNOLDSZahl, $We = \rho\tilde{r}\bar{w}^2/\sigma$ die WEBERZahl und $De_1 = \lambda_1\bar{w}/\tilde{r}$ bzw. $De_2 = \lambda_2\bar{w}/\tilde{r}$ die DEBORAHzahlen für die elastischen Zeitmaße. Der zur Herleitung der Dispersionsrelation (2.64) verwendete Störansatz für den Strahlradius lautet angeschrieben in raumfesten Koordinaten $z' = z + \bar{w}t$,

$$\begin{aligned} f(z', t) &= \bar{f}_0 e^{ik(z' - \bar{w}t) + \omega t} = \\ &= \bar{f}_0 e^{ikz'} e^{(\omega - ik\bar{w})t}. \end{aligned}$$

Als *stehende Welle* muss diese unabhängig von der Zeit t sein, sodass

$$f(z') = \bar{f}_0 e^{ikz'}, \quad (2.65)$$

was auf folgenden, festen Zusammenhang der komplexen Kreisfrequenz ω mit der Wellenzahl k führt

$$\begin{aligned} \omega &= ik\bar{w} \quad \text{bzw.} \\ \omega^* &= ik\tilde{r} \end{aligned} \quad (2.66)$$

Setzt man den Zusammenhang (2.66) in (2.64) ein, ergibt sich schlussendlich

$$\begin{aligned} -(k\tilde{r})^2 \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} + 2i \frac{(k\tilde{r})^2}{Re} \left[2k\tilde{r} \frac{I_0(k\tilde{r})}{I_1(k\tilde{r})} \frac{l^2}{l^2 - k^2} - 1 - 2l\tilde{r} \frac{I_0(l\tilde{r})}{I_1(l\tilde{r})} \frac{k^2}{l^2 - k^2} \right] \frac{1 + 2i(k\tilde{r})De_2}{1 + 2i(k\tilde{r})De_1} = \\ = \frac{k\tilde{r}}{We} (1 - k^2\tilde{r}^2), \end{aligned} \quad (2.67)$$

mit

$$(l\tilde{r})^2 = (k\tilde{r})^2 + 2i(k\tilde{r})Re \frac{1 + 2i(k\tilde{r})De_1}{1 + 2i(k\tilde{r})De_2}.$$

Gleichung (2.67) wird für gegebene Parameter We , Re , De_1 und De_2 nach der komplexen, dimensionslosen Wellenzahl $k\tilde{r} = k_r\tilde{r} + ik_i\tilde{r} \in \mathbb{C}$ gelöst. Eingesetzt in die stehende Störwelle, repräsentiert durch (2.65), ergibt sich

$$f(\tilde{r}, z') = \bar{f}_0 e^{ik_r\tilde{r}\left(\frac{z'}{\tilde{r}}\right)} e^{-k_i\tilde{r}\left(\frac{z'}{\tilde{r}}\right)}. \quad (2.68)$$

Demgemäß liefert der Realteil der Lösung die *relative Wellenlänge*

$$\frac{\lambda}{\tilde{r}} = \frac{2\pi}{k_r\tilde{r}}$$

und der Imaginärteil der Lösung die *räumliche Dämpfung* δ in Achsrichtung stromauf vom Auftreffpunkt

$$\delta = k_i\tilde{r}, \quad \text{wobei gilt } \delta < 0.$$

2.5. Verwendete Fluide und ihre Stoffeigenschaften

In diesem Abschnitt werden die untersuchten Flüssigkeiten mit ihren Stoffeigenschaften, welche in der Simulation verwendet wurden, erläutert. Untersucht wurden die Fluide *Wasser*, eine viskose *Glycerol/Wasser-Lösung* und eine *Prästol 2540/Wasser-Lösung*. Letztere ist hierbei eine nicht-NEWTONsche, viskoelastische Flüssigkeit. Auch wird die umgebende *Luft* mit den entsprechend angewendeten Stoffdaten aufgeführt.

2.5.1. Wasser

Die erste untersuchte bzw. simulierte Flüssigkeit in dieser Arbeit ist exemplarisch *Wasser*. *Wasser* ist bekanntermaßen eine NEWTONsche Flüssigkeit. Die Stoffwerte sind der Tabelle 2.1 zu entnehmen.

Tabelle 2.1 Stoffwerte von *Wasser* bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ \text{C}$.

Dichte ρ [kg m ⁻³]	Kinematische Zähigkeit ν [m ² s ⁻¹]	Oberflächenspannung σ [Nm ⁻¹]
998.21	1.004 · 10 ⁻⁶	0.07275

2.5.2. Glycerol/Wasser-Lösung

Dem Wasser folgend wurde eine *Glycerol/Wasser-Lösung* mit einem Gewichtsanteil von 11% in entionisiertem Wasser simuliert. Hierbei handelt es sich um ein viskoses, NEWTONsches Fluid, welches vorrangig deshalb betrachtet wurde, um den Viskositätseinfluss auf die Kapillarwellen zu untersuchen. Die zugehörigen Stoffwerte sind der Tabelle 2.2 zu entnehmen.

2.5. Verwendete Fluide und ihre Stoffeigenschaften

Tabelle 2.2 Stoffwerte der 11% Glycerol/Wasser-Lösung bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$ nach RATZBERGER [16].

Dichte ρ [kgm ⁻³]	Kinematische Zähigkeit ν [m ² s ⁻¹]	Oberflächenspannung σ [Nm ⁻¹]
1024.6	$1.3052 \cdot 10^{-6}$	0.07224

2.5.3. Prästol 2540/Wasser-Lösung

Zur Untersuchung der Kapillarwellen eines strukturviskosen (scherverdünnenden), viskoelastischen Fluids wurde eine stark verdünnte *Prästol 2540/Wasser-Lösung* verwendet. *Prästol 2540* ist ein lineares Polyacrylamid. Die für die Simulation verwendeten Massenkonzentrationen liegen bei 10 ppm, 25 ppm und 60 ppm. Die verwendeten Stoffwerte für die Simulation sind in Tabelle 2.3, 2.4 sowie 2.5 dargestellt und beziehen sich auf die in RATZBERGER [16] ermittelten Messwerte bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$.

Tabelle 2.3 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 10 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$.

Dichte ρ [kgm ⁻³]	Kinematische Zähigkeit (Polymerlösung) ν_p [m ² s ⁻¹]	Oberflächenspannung σ [Nm ⁻¹]	Relaxationszeit λ_1 [s]	Dynamische Viskosität (Polymerlösung) μ_p [kgm ⁻¹ s ⁻¹]	Dynamische Viskosität (Lösungsmittel) μ_s [kgm ⁻¹ s ⁻¹]
998.21	$1.09186 \cdot 10^{-6}$	0.07274	$4.97 \cdot 10^{-3}$	$1.0899 \cdot 10^{-3}$	$1.002 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 2.4 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 25 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$.

Dichte ρ [kgm ⁻³]	Kinematische Zähigkeit (Polymerlösung) ν_p [m ² s ⁻¹]	Oberflächenspannung σ [Nm ⁻¹]	Relaxationszeit λ_1 [s]	Dynamische Viskosität (Polymerlösung) μ_p [kgm ⁻¹ s ⁻¹]	Dynamische Viskosität (Lösungsmittel) μ_s [kgm ⁻¹ s ⁻¹]
998.21	$1.32471 \cdot 10^{-6}$	0.07274	$7.36 \cdot 10^{-3}$	$1.3223 \cdot 10^{-3}$	$1.002 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 2.5 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 60 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$.

Dichte ρ [kg m ⁻³]	Kinematische Zähigkeit (Polymerlösung) ν_p [m ² s ⁻¹]	Oberflächen- spannung σ [Nm ⁻¹]	Relaxationszeit λ_1 [s]	Dynamische Viskosität (Polymerlösung) μ_p [kg m ⁻¹ s ⁻¹]	Dynamische Viskosität (Lösungsmittel) μ_s [kg m ⁻¹ s ⁻¹]
998.21	$1.85061 \cdot 10^{-6}$	0.07274	$11.6 \cdot 10^{-3}$	$1.8473 \cdot 10^{-3}$	$1.002 \cdot 10^{-3}$

2.5.4. Umgebungsmedium Luft

Das den in den vorherigen Abschnitten genannten Fluiden umgebende Medium ist Luft. Der Einfluss der Luft wurde im verwendeten Mehrphasenströmungsmodell der Simulation berücksichtigt. Die Stoffwerte für Luft sind in Tabelle 2.6 ersichtlich.

Tabelle 2.6 Stoffwerte von Luft bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ\text{C}$ und einem Umgebungsdruck $p_a = 1\text{ bar}$.

Dichte ρ [kg m ⁻³]	Kinematische Zähigkeit ν [m ² s ⁻¹]
1.188	$15.35 \cdot 10^{-6}$

Mathematisches Modell

Dieses Kapitel beinhaltet die mathematische Beschreibung des Simulationsmodells. Anfangs wird das Rechengebiet Λ bzw. das verwendete Netz erläutert. Dabei erfolgt eine Erklärung und Darstellung der verwendeten Randbedingungen Γ_i , welche in der Berechnung implementiert wurden. Des Weiteren wird die verwendete Diskretisierungsmethode, die *Finite-Volumen-Methode* demonstriert. Anschließend erfolgt eine Herleitung der zu diskretisierenden Gleichungen für die in dieser Arbeit diskutierte Problemstellung wie etwa die *Druckkorrekturgleichung* sowie die Erhaltungsgleichungen der Zweiphasenströmung mittels der *Volume-of-Fluid-Methode*. Anschließend wird die Diskretisierung der auftretenden Terme und die in der verwendeten Software implementierten numerischen Lösungsverfahren genau beschrieben. Abschließend erfolgt eine Dokumentation der konkret verwendeten Lösungsverfahren zur Berechnung des Lösungsvektors des durch die Diskretisierung erhaltenen Gleichungssystems.

3.1. Rechengebiet

Die Modellierung des Netzes bzw. des dreidimensionalen Rechengebietes $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ erfolgte, wie in Abbildung 3.1 ersichtlich, an einem Sektorelement des gesamten zylindrischen Reservoirs. Grund für dieses Vorgehen ist eine drastische Reduktion der Anzahl der Netzelemente verglichen mit der Modellierung des gesamten Reservoirs, um akzeptable Rechenzeiten zu erhalten. Möglich wird diese Art der Modellierung durch die Rotationssymmetrie des Problems, d.h. keine azimutale Veränderlichkeit

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} = 0$$

von allen Feldgrößen wie z.B. dem Druck p oder der Geschwindigkeit \mathbf{U} . Die Realisierung dieser Rotationssymmetrie wird mit entsprechend vordefinierten Randbedingungen für die Seitenflächen des Rechengebiets in der verwendeten Simulationssoftware OpenFOAM durchgeführt.

Das verwendete Netz ist in Abbildung 3.2 ersichtlich. Hierbei ist zu erläutern, dass eine deutliche Verfeinerung im Bereich des Flüssigkeitsspiegels als auch im Bereich des Fluidstrahls vorhanden ist, um die auftretenden Effekte an der Phasengrenzfläche möglichst genau erfassen zu können. Der Winkel des Sektors wurde mit einem Grad festgelegt, was im Durchschnitt über die gesamte Geometrie hinweg eine bessere Netzqualität als mit einem größeren Winkel ergibt. Es wurden mehrere verschiedene Netze mit unterschiedlichen Elementgrößen für diverse WEBERzahlen erstellt und untersucht, wobei schließlich jenes ausgewählt wurde, welches eine Größe der kleinsten Elemente mit einer Seitenlänge von 0.05 mm aufweist. Die Netzgenerierung ging von den feinsten Elementen aus mit einer relativen Vergrößerung der Elemente um 1% gemäß einer geometrischen Reihe. Die Netzgenerierung erzeugte zur Gänze Hexaederelemente, ausgenommen die Elemente entlang der z -Achse, welche sich bedingt durch die Geometrie als Prismen ergaben. Eine genaue Beschreibung

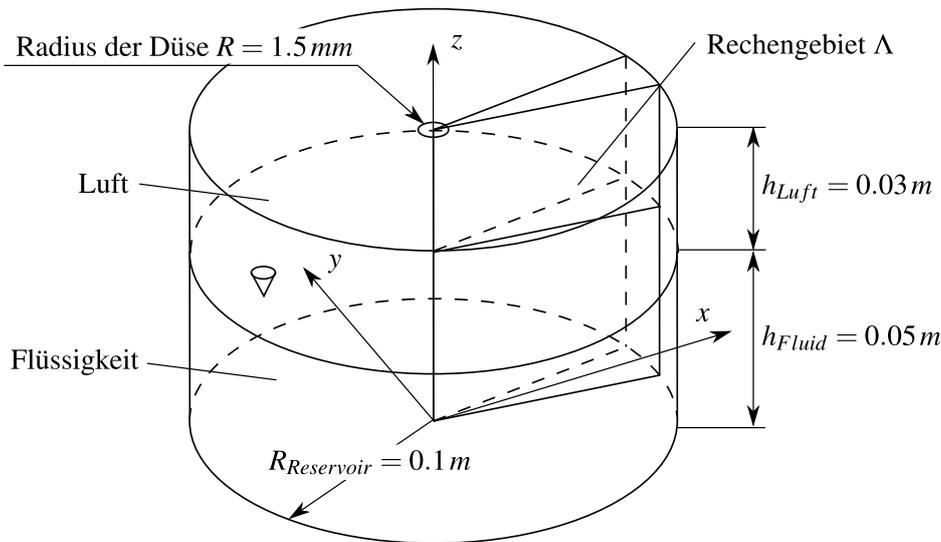


Abbildung 3.1 Darstellung des Rechengebiets Λ als Teil des gesamten Reservoirs.

der Erstellung des in der Simulation verwendeten Netzes ist in Abschnitt A.1 gegeben.

3.2. Randbedingungen

Die in der Modellierung verwendeten Randbedingungen Γ_j mit $j \in M = \{ein, a, w, aus, sf1, sf2\}$ für den Rand $\partial\Lambda$ sind in Abbildung 3.2 dargestellt. Hierbei stellt Γ_{ein} den Austritt der Düse also den Einlass in das Rechengebiet, Γ_a den Übergang des Rechengebietes zur Atmosphäre, Γ_w die Wände des Reservoirs und Γ_{aus} den Auslass, dar. Mit Γ_{sf1} und Γ_{sf2} wurde die gesamte Vorderseite bzw. die gesamte Hinterseite des Rechengebietes gekennzeichnet. Es gilt demnach

$$\bigcup_{j \in M} \Gamma_j = \partial\Lambda \subset \Lambda.$$

Eine genaue Erläuterung der Implementierung dieser Randbedingungen in der verwendeten Software ist in Abschnitt A.2 ersichtlich.

Für jede der implementierten Randbedingungen wurden der *gemischte Geschwindigkeitsvektor* \mathbf{U} und die *Phasenanteile* α_k sowie der *Druck* p , wie in Kapitel 3.3.1 auf Seite 33 beschrieben, angegeben. Im Falle der viskoelastischen Simulationen wurden zusätzlich der *polymere Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ und der *natürliche Logarithmus des Konformationstensors* $\boldsymbol{\Theta}$ initialisiert.

3.2.1. Der Einlass Γ_{ein}

⇨ **Geschwindigkeit:** Für den Einlass wurde bezüglich des *vektoriellen Geschwindigkeitsfeldes* \mathbf{U} die DIRICHLET-Randbedingung verwendet. Hierbei wurde die entsprechende Geschwindigkeit in Richtung der negativen z -Achse mit dem gewünschten Wert der Düsenaustrittsgeschwindigkeit¹ W

¹für die gewählten Werte sei auf Kapitel 4, Tabelle 4.1 auf Seite 55 verwiesen

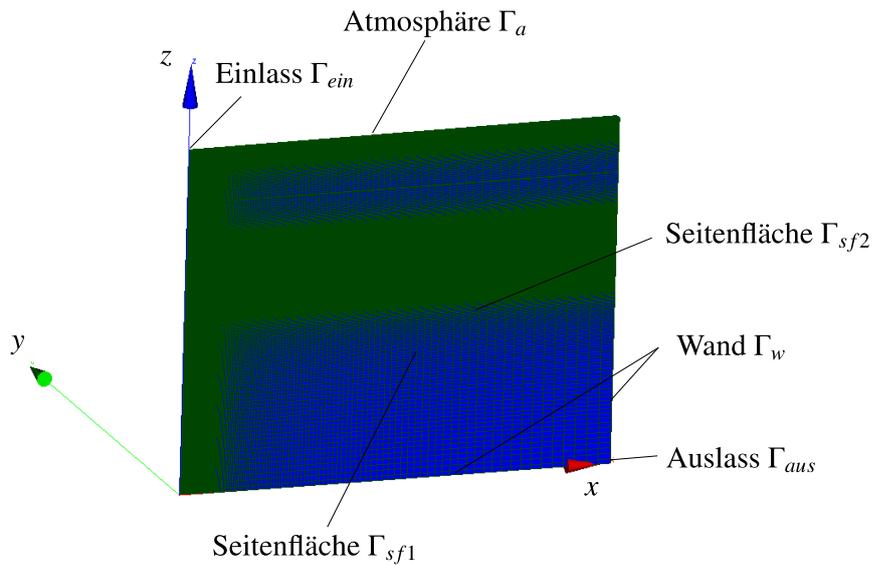


Abbildung 3.2 Die Randbedingungen Γ_j im verwendeten Rechengebiet Λ bzw. am Rand $\partial\Lambda$.

als Blockprofil vorgegeben. Somit ergibt sich

$$\mathbf{U}|_{\Gamma_{ein}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -W \end{bmatrix}.$$

⇨ **Druck:** Für das *skalare Druckfeld* p wurde die NEUMANN-Randbedingung verwendet. Angeschrieben ergibt sich für die Richtungsableitung entlang des Normalvektors \mathbf{n} (vgl. BARTSCH [4])

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla p)|_{\Gamma_{ein}} = 0,$$

wobei eine besondere, in OpenFOAM implementierte Form verwendet wurde, welche auftretende Gravitations- und Oberflächenspannungseffekte berücksichtigt (vgl. GREENSHIELDS [9]).

⇨ **Phasen:** Die *skalaren volumetrischen Phasenanteile* α_1 (Flüssigkeit) und α_2 (Luft) wurden wie die Geschwindigkeit ebenfalls mit einer DIRICHLET-Randbedingung versehen. Dabei wurden

$$\alpha_1|_{\Gamma_{ein}} = 1 \quad \text{und} \quad \alpha_2|_{\Gamma_{ein}} = 0$$

implementiert.

⇨ **Spannungen:** Der *Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ des Polymers bei der Simulation mit einem viskoelastischen Fluid an der Randfläche Γ_{ein} , wird entsprechend dem dort nicht vorhandenen Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \mathbf{U}$ auf einen fixen Wert von $\mathbf{0}$ gesetzt. Dadurch ergibt sich

$$\boldsymbol{\tau}_p|_{\Gamma_{ein}} = \mathbf{0}.$$

⇨ **Konformationstensor:** Für den *natürlichen Logarithmus des Konformationstensors* $\boldsymbol{\Theta}$ lässt sich unter Berücksichtigung der Gleichungen (3.15) und (3.16) auf Seite 36 schließlich ebenfalls eine

DIRICHLET-Randbedingung analog zum obigen Spannungstensor als

$$\mathbb{C}|_{\Gamma_{ein}} = \mathbf{0}$$

formulieren.

3.2.2. Die Atmosphäre Γ_a

⇨ **Geschwindigkeit:** Bezüglich des *Geschwindigkeitsfeldes* \mathbf{U} wurde für die Atmosphäre eine spezielle, in OpenFOAM implementierte, Bedingung gewählt, welche grundsätzlich der NEUMANN-Randbedingung

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{U})|_{\Gamma_a} = \mathbf{0}$$

entspricht, mit dem Unterschied, dass die tangentielle Komponente, für den Fall des Hineinfließens, einen fixen Wert $U_t = 0$ hat (vgl. GREENSHIELDS [9]).

⇨ **Druck:** Das *Druckfeld* p wird durch

$$p|_{\Gamma_a} = \begin{cases} p_0 & \text{für das Herausfließen} \\ p_0 - \frac{1}{2} \|\mathbf{U} \cdot \mathbf{U}\| & \text{für das Hineinfließen} \end{cases}$$

angegeben, wobei der Totaldruck p_0 vorgegeben wird. Gemäß GREENSHIELDS [9] besteht die Idee hinter dieser Kombination der Randbedingungen an der Atmosphäre Γ_a von Druck und Geschwindigkeit, dass im Falle des Hineinfließens von Außen über die Atmosphäre die Normalgeschwindigkeit U_n ihren eigenen Wert finden kann. Unter diesen Umständen kann die Gefahr eines schnellen Steigens der Geschwindigkeit, was zu Instabilitäten führen kann, reduziert werden.

⇨ **Phasen:** Die *skalaren volumetrischen Phasenanteile* α_1 (Flüssigkeit) und α_2 (Luft) wurden mit einer Randbedingung deklariert, welche im Falle des Herausfließens der NEUMANN-Bedingung

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_1)|_{\Gamma_a} = 0 \quad \text{und} \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_2)|_{\Gamma_a} = 0$$

entspricht und im Falle des Hineinfließens einer DIRICHLET-Bedingung

$$\alpha_1|_{\Gamma_a} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \alpha_2|_{\Gamma_a} = 1$$

genügt, wobei in diesem Fall eine rein einphasige Einströmung von Luft vorgegeben wurde. Auch dies stellt nach GREENSHIELDS [9] einen Spezialfall einer Randbedingung in OpenFOAM dar, welcher speziell für das Vorhandensein einer Atmosphäre implementiert wurde.

⇨ **Spannungen:** Der *Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ wird als NEUMANN-Randbedingung implementiert, d.h. es gilt

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_p)|_{\Gamma_a} = \mathbf{0}.$$

⇨ **Konformationstensor:** Der *natürliche Logarithmus des Konformationstensors* \mathbb{C} erhielt eben-

falls wie der Spannungstensor eine NEUMANN-Randbedingung entsprechend

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Theta)|_{\Gamma_a} = \mathbf{0}.$$

3.2.3. Die Wand Γ_w

⇨ **Geschwindigkeit:** Das *Geschwindigkeitsfeld* \mathbf{U} erhielt hier die „No-slip“-Bedingung, d.h. es gilt

$$\mathbf{U}|_{\Gamma_w} = \mathbf{0}.$$

⇨ **Druck:** Der *Druck* p wurde in Konsistenz mit der Randbedingung für die Geschwindigkeit mit der NEUMANN-Bedingung

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla p)|_{\Gamma_w} = 0$$

versehen.

⇨ **Phasen:** Für die *skalaren volumetrischen Phasenanteile* α_1 (Flüssigkeit) und α_2 (Luft) wurde ebenfalls jeweils eine NEUMANN-Randbedingung

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_1)|_{\Gamma_w} = 0 \quad \text{und} \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_2)|_{\Gamma_w} = 0$$

angewendet.

⇨ **Spannungen:** Der *Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ des Polymers, bei der Simulation des viskoelastischen Fluids, wird mittels linearer Extrapolation, wie in PIMENTA und ALVES [15] gezeigt, entsprechend

$$\boldsymbol{\tau}_p|_f = \boldsymbol{\tau}_{p,C} + (\nabla \boldsymbol{\tau}_p)_C \cdot \mathbf{d}_{Cf}, \quad f \in \Gamma_w$$

festgelegt. Hierbei ist mit f die Fläche an Γ_w , d.h. $f \in \Gamma_w$, für ein Element und C der Mittelpunkt jenes Elements gemeint. Der Vektor \mathbf{d}_{Cf} repräsentiert den Abstand zwischen C und der Wandfläche (vgl. mit Abbildung 3.3 auf Seite 42).

⇨ **Konformationstensor:** Bezogen auf den Spannungstensor erhält der *natürliche Logarithmus des Konformationstensors* Θ eine NEUMANN-Randbedingung entsprechend

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Theta)|_{\Gamma_w} = \mathbf{0}.$$

3.2.4. Der Auslass Γ_{aus}

⇨ **Geschwindigkeit:** Das *Geschwindigkeitsfeld* \mathbf{U} wurde mit einer Randbedingung versehen, welche einen konstanten Massenfluss zwischen dem Einlass und dem Auslass garantiert, sodass die globale Kontinuität aufrecht erhalten bleibt und sich der Flüssigkeitsspiegel bezüglich der z -Koordinate nicht verändert.

⇨ **Druck:** Das *Druckfeld* p wurde wie im Falle des Einlasses mit der NEUMANN-Randbedingung

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla p)|_{\Gamma_{aus}} = 0,$$

welche besonders Gravitations- und Oberflächeneffekte berücksichtigt, versehen.

⇨ **Phase:** Die *skalaren volumetrischen Phasenanteile* α_1 (Flüssigkeit) und α_2 (Luft) wurden analog zum Einlass mit einer DIRICHLET-Randbedingung versehen. Dabei wurden

$$\alpha_1|_{\Gamma_{aus}} = 1 \quad \text{und} \quad \alpha_2|_{\Gamma_{aus}} = 0,$$

also 100% Flüssigkeit, implementiert.

⇨ **Spannungen:** Der *Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ des Polymers am Auslass wurde analog zum Einlass bezüglich des nicht-präsenten Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \mathbf{U}$ mit einer DIRICHLET-Randbedingung versehen. Diese lautet

$$\boldsymbol{\tau}_p|_{\Gamma_{aus}} = \mathbf{0}.$$

⇨ **Konformationstensor:** Analog zum Einlass wurde der *natürliche Logarithmus des Konformationstensors* $\boldsymbol{\Theta}$ unter Berücksichtigung der Gleichungen (3.15) und (3.16) auf Seite 36 als

$$\boldsymbol{\Theta}|_{\Gamma_{aus}} = \mathbf{0}$$

festgelegt.

3.2.5. Die Seitenflächen Γ_{sf1} und Γ_{sf2}

Das *Geschwindigkeitsfeld* \mathbf{U} an den jeweiligen Seitenflächen Γ_{sf1} und Γ_{sf2} wurde mit einer periodischen Randbedingung in Umfangsrichtung versehen. Analoges gilt für das *Druckfeld* p , die *volumetrischen Phasenanteile* α_k und im Falle des viskoelastischen Fluides für den *Spannungstensor* $\boldsymbol{\tau}_p$ und den *natürlichen Logarithmus des Konformationstensors* $\boldsymbol{\Theta}$.

3.3. Erhaltungsgleichungen

Dieser Abschnitt behandelt die Herleitung aller nötigen Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung der Mehrphasen-Strömung (*Volume of Fluid-Methode*) bei NEWTONScher und nicht-NEWTONScher Flüssigkeit. Auch wird die Druckkorrekturgleichung für die vorliegende Mehrphasenströmung genau erörtert. In den folgenden Gleichungen, welche stets eine sehr ähnliche Struktur haben, stellt p das skalare Druckfeld, \mathbf{u} bzw. \mathbf{U} das vektorielle Geschwindigkeitsfeld

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} u(\mathbf{x}, t) \\ v(\mathbf{x}, t) \\ w(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1(\mathbf{x}, t) \\ u_2(\mathbf{x}, t) \\ u_3(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} U(\mathbf{x}, t) \\ V(\mathbf{x}, t) \\ W(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1(\mathbf{x}, t) \\ U_2(\mathbf{x}, t) \\ U_3(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix}$$

mit dem Ortsvektor \mathbf{x} als

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

dar. Die Körperkräfte \mathbf{f}^B , welche nur die Gravitation g in z -Richtung beinhalten, schreiben sich als

$$\mathbf{f}^B = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{bmatrix}.$$

Des weiteren ist der Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$, wie bereits in Abschnitt 2.3.2 abgebildet, als

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$

definiert.

3.3.1. Volume of Fluid-Methode

Die *Volume of Fluid-Methode* ist das zugrunde liegende Modell zur Beschreibung der Zweiphasenströmung zwischen der umgebenden Luft und der jeweiligen Flüssigkeit in dieser Arbeit. Dieser Abschnitt, basierend auf DAMIAN [8], beschreibt die Herleitung der nötigen Erhaltungsgleichungen, in der Form, in welcher sie im verwendeten Solver implementiert sind.

Ausgangspunkt zur Herleitung der *Volume of Fluid-Methode* ist das *Algebraic Slip Mixture Model* (ASMM). Das ASM-Modell leitet sich vom *Multi-fluid Model* ab, welches für jede einzelnen Phase k eine separate Massen- und Impulserhaltungsgleichung löst. Das ASM-Modell jedoch betrachtet die k Phasen als eine durchdrungene Mischung und löst eine Massenerhaltungsgleichung, eine Impulserhaltungsgleichung für die Mischung und $k - 1$ Erhaltungsgleichungen für den volumetrischen Phasenanteil, jeweils ausgedrückt mit einer Farbfunktion $\alpha_k(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}$. Die Erhaltungsgleichungen des ASMM, in „center of volume“-basierter Darstellung lauten für zwei Phasen

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \mathbf{u}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m \otimes \mathbf{u}_m) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho_m \mathbf{f}^B - \nabla \cdot \left[\alpha(1 - \alpha) \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_m} \mathbf{u}_{12} \otimes \mathbf{u}_{12} \right] \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = -\nabla \cdot [\alpha(1 - \alpha) \mathbf{u}_{12}]. \quad (3.4)$$

In diesen Gleichungen ist p der gemischte Druck², welcher für beide Phasen als gleich angenommen wird, d.h. $p_1 = p_2 = p$ und \mathbf{U} die Geschwindigkeit in „center of volume“-Darstellung entsprechend

$$\mathbf{U} = \sum_{k=1}^2 \alpha_k \mathbf{u}_k \quad \text{mit} \quad k = \begin{cases} 1 \rightarrow \text{Flüssigkeit} \\ 2 \rightarrow \text{Luft} \end{cases}$$

und den volumetrischen Phasenanteilen α_k . Diese sind für die Flüssigkeit $\alpha_1 = \alpha$ und für die Luft $\alpha_2 = 1 - \alpha$. Die „center of mass“-Geschwindigkeit der Mischung \mathbf{u}_m schreibt sich als

$$\mathbf{u}_m = \frac{\sum_{k=1}^2 \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\rho_m}$$

²Für den gemischten Druck gilt analog zur Geschwindigkeit $p = \sum_{k=1}^2 \alpha_k p_k$

mit der gemischten Dichte

$$\rho_m = \sum_{k=1}^2 \alpha_k \rho_k.$$

Die relative Geschwindigkeit \mathbf{u}_{12} berechnet sich als Geschwindigkeitsdifferenz der Phasen entsprechend

$$\mathbf{u}_{12} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2.$$

Um nun von der ASMM-Formulierung zur gesuchten *Volume of Fluid*-Formulierung zu kommen wird der Umstand ausgenutzt, dass die *Volume of Fluid*-Methode, im Gegensatz zur ASMM, ein stetiges Geschwindigkeitsfeld an der Phasengrenzfläche voraussetzt, was konsistent mit der tatsächlichen Physik der Fluide ist. Dies impliziert, dass die relative Geschwindigkeit $\mathbf{u}_{12} = \mathbf{0}$ sein muss. Mit der in DAMIAN [8] auf Seite 88 angeführten Beziehung zwischen der „center of mass“-Geschwindigkeit und der „center of volume“-Geschwindigkeit erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_m &= \mathbf{U} + \alpha(1 - \alpha) \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_m} \mathbf{u}_{12} \quad \text{mit} \quad \mathbf{u}_{12} = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \mathbf{u}_m = \mathbf{U}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die Modellierung von Phasengrenzflächeneffekten wird mit dem „Continuum Surface Model“ (CSF) durchgeführt. Hierbei wird auf der rechten Seite der Impulsgleichung der Term

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (3.6)$$

als volumetrische Kraft hinzugefügt, wobei κ die mittlere Krümmung der Phasengrenzfläche entsprechend

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad \text{mit} \quad \mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|}$$

ist. Um weiters die Stabilität der Lösung zu verbessern, wird der Druck p mit einem modifizierten Druck p_{rgh} entsprechend

$$p_{rgh} = p - \rho_m \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x}$$

ausgedrückt. Anschließende Gradientenbildung führt auf

$$-\nabla p = -\nabla p_{rgh} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m - \rho_m \mathbf{f}^B,$$

was im weiteren Verlauf durch Umstrukturierung den Ausdruck

$$-\nabla p + \rho_m \mathbf{f}^B = -\nabla p_{rgh} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m \quad (3.7)$$

ergibt. Mit Gleichung (3.7) kann schließlich der Druckgradient und der Term der Körperkräfte in der Impulsgleichung (3.3) ersetzt werden. Im weiteren Verlauf schreiben sich die Kontinuitätsgleichung (3.2), die Impulsgleichung (3.3) und die Transportgleichung (3.4) mit der Bedingung $\mathbf{u}_m = \mathbf{U}$ aus

Gleichung (3.5) und der Oberflächenkraft \mathbf{F}_σ aus Gleichung (3.6) als

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p_{rgh} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = -\nabla \cdot [\alpha(1-\alpha)\mathbf{u}_{12}]. \quad (3.10)$$

Die Kontinuitätsgleichung (3.8), die Impulsgleichung (3.9) und die Transportgleichung der Farbfunktion (3.10) sind jene, welche in OpenFOAM mit dem verwendeten Solver `interFoam` gelöst werden. Auch der im Falle des für viskoelastische Fluide verwendeten Solvers der RheoTool - Toolbox `rheoInterFoam` basiert entsprechend COMMINAL et al. [6] auf `interFoam`.

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass der Term auf der rechten Seite in Gleichung (3.10), trotz verschwindender Relativgeschwindigkeit \mathbf{u}_{12} , als Modellterm bewusst beibehalten wird. Nach DAMIAN [8] ist der Zweck dieses Terms eine Kompression der Phasengrenzfläche.

⇒ **Modellierung des Spannungstensors:** Der Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ in der Impulsgleichung (3.9) wurde im Falle von *Wasser* und der *Glycerol/Wasser-Lösung*, also den Fluiden mit NEWTONschem Verhalten, als

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_m (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^\top) \quad (3.11)$$

mit der gemischten dynamischen Viskosität beider Phasen

$$\mu_m = \sum_{k=1}^2 \alpha_k \mu_k \quad (3.12)$$

modelliert.

Lösung der Transportgleichung der Farbfunktion

Die Lösung der Transportgleichung der Farbfunktion α entsprechend Gleichung (3.10) wurde mit dem expliziten MULES³-Solver durchgeführt. Dieser ist in Abschnitt 3.4.3 beschrieben.

3.3.2. Viskoelastischer Spannungstensor

Nach PIMENTA und ALVES [14] erfolgt im Falle viskoelastischer Fluide eine Aufspaltung des Spannungstensors in einen Anteil des Lösungsmittels (Solvent) und des Polymers entsprechend

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p.$$

³engl.: Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution

Das konstitutive Gesetz für die jeweilige Tensorkomponente, wie in den Gleichungen (2.46) und (2.47) bereits dargestellt schreibt sich allgemein als

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_s &= \mu_s(\dot{\gamma}) \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^\top \right) \quad \text{bzw.} \\ f(\boldsymbol{\tau}_p) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(\dot{\gamma}) \boldsymbol{\tau}_p^\nabla + \mathbf{h}(\boldsymbol{\tau}_p) &= \mu_p(\dot{\gamma}) \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^\top \right). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Der polymere Anteil beschrieben durch (3.13) wurde, wie in Abschnitt 2.3.1 bereits ausgeführt, mit dem OLDROYD-B-LOG Modell durch die Beziehung

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1 \boldsymbol{\tau}_p^\nabla = \mu_p \left(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^\top \right),$$

modelliert.

Die Divergenz des Spannungstensors $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ in der Impulsgleichung (3.9) lässt sich entsprechend NIETHAMMER et al. [13], mit den Indizes 1 für die Flüssigkeit und 2 für die umgebende Luft, als

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \sum_{k=1}^2 \nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\tau}_{s,k}) + \nabla \cdot (\alpha_1 \boldsymbol{\tau}_{p,1}) \quad (3.14)$$

modellieren, wobei sich in Gleichung (3.14) der erste Term auf der rechten Seite analog zu (3.11) mit (3.12) als

$$\sum_{k=1}^2 \nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\tau}_{s,k}) = \nabla \cdot \mu_m (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^\top)$$

schreiben lässt. Der polymere Anteil $\nabla \cdot (\alpha_1 \boldsymbol{\tau}_{p,1})$ in Gleichung (3.14), welcher nur in der viskoelastischen Phase auftritt, wird aus Gründen der Stabilität mit einem sogenannten Konformationstensor⁴ \mathbf{K} nach Gleichung (3.15) ausgedrückt. Gemäß PIMENTA und ALVES [14] lautet diese Beziehung

$$\boldsymbol{\tau}_p = \frac{\mu_p}{\lambda_1} (\mathbf{K} - \mathbf{E}) \quad (3.15)$$

mit dem Einheitstensor \mathbf{E} , der Relaxationszeit λ_1 und der dynamischen Viskosität der Polymerlösung μ_p .

Im weiteren Verlauf wird dieser Tensor \mathbf{K} entsprechend dem „log-conformation tensor approach“ ausgedrückt. Sinn dieses Ansatzes ist es, den numerischen Instabilitäten, welche bei höheren WEISSENBERGzahlen Wi auftreten, Herr zu werden. Es wird ein neuer Tensor $\boldsymbol{\Theta}$ als natürlicher Logarithmus von \mathbf{K} entsprechend

$$\boldsymbol{\Theta} = \ln(\mathbf{K}) = \mathbf{S} \cdot \ln(\boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{S}^\top \quad (3.16)$$

definiert. In Gleichung (3.16) wurde der Konformationstensor als $\mathbf{K} = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Lambda} \cdot \mathbf{S}^\top$ diagonalisiert, wobei gilt, dass $\boldsymbol{\Lambda} = \text{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3)$ ist, mit den Eigenwerten Λ_i für $i = 1, \dots, 3$ von \mathbf{K} . Der Tensor \mathbf{S} schreibt sich als $\mathbf{S} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$, mit den orthogonalen⁵ Eigenvektoren \mathbf{v}_i bezüglich $i = 1, \dots, 3$.

⁴engl.: Conformation tensor

⁵Daraus lässt sich schließen, dass der Konformationstensor \mathbf{K} ein symmetrischer Tensor sein muss. (vgl. BARTSCH [4])

Anschließend wird Gleichung (3.13) mit (3.16) ausgedrückt was zum Ausdruck

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \Theta = \mathbf{\Omega} \Theta - \Theta \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} + \frac{1}{\lambda_1} \mathbf{g}(\Theta) \quad (3.17)$$

führt, wobei $\mathbf{g}(\Theta)$ eine modell-spezifische Tensorfunktion in Abhängigkeit von Θ ist. Die übrigen Elemente in Gleichung (3.17) schreiben sich als

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mathbf{S} \cdot \begin{bmatrix} m_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{S}^\top, \\ \mathbf{\Omega} &= \mathbf{S} \cdot \begin{bmatrix} 0 & \omega_{xy} & \omega_{xz} \\ -\omega_{xy} & 0 & \omega_{yz} \\ -\omega_{xz} & -\omega_{yz} & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{S}^\top, \\ \mathbf{M} &= \mathbf{S} \cdot \nabla \mathbf{U}^\top \cdot \mathbf{S}^\top = \begin{bmatrix} m_{xx} & m_{xy} & m_{xz} \\ m_{yx} & m_{yy} & m_{yz} \\ m_{zx} & m_{zy} & m_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{und} \\ \omega_{ij} &= \frac{\Lambda_j m_{ij} + \Lambda_i m_{ji}}{\Lambda_j - \Lambda_i}. \end{aligned}$$

Gleichung (3.17) wird schließlich nach Θ gelöst und in der Form

$$\Theta = \mathbf{S} \cdot \mathbf{\Lambda}^\Theta \cdot \mathbf{S}^\top$$

diagonalisiert. Der gesuchte Konformationstensor \mathbf{K} berechnet sich nun aus der inversen Beziehung von Gleichung (3.16) gemäß

$$\mathbf{K} = \exp(\Theta) = \mathbf{S} \cdot \exp(\mathbf{\Lambda}^\Theta) \cdot \mathbf{S}^\top,$$

womit schließlich der polymere Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}_p$ berechnet und zur Lösung der Impulsgleichung (3.9) verwendet werden kann.

Both-sides-diffusion technique

Die obige Erhaltungsgleichung des Impulses (3.9) wird zur Verbesserung der Stabilität modifiziert. Dieses Vorgehen nennt sich *both-sides-diffusion technique* (BSD). Dabei wird entsprechend PIMENTA und ALVES [15] ein diffuser Term $\nabla \cdot \mu_p \nabla \mathbf{U}$ auf beiden Seiten addiert, mit dem Unterschied, dass dieser auf der linken Seite implizit und auf der rechten Seite explizit formuliert ist. Sobald der stationäre Zustand erreicht ist, kürzen sich die beiden Terme exakt heraus.

3.3.3. Kopplungen

Dieser Abschnitt beschreibt die Herleitung der mehrphasigen Druckkorrekturgleichung, sowie die in den viskoelastischen Simulationen verwendete Spannungs-/Geschwindigkeitskopplung.

Die Druckkorrekturgleichung

Die Strömung des vorliegenden Problems dieser Arbeit ist von inkompressibler Natur, wodurch zur Berechnung des Druckes eine *Druckkorrekturgleichung* nötig ist. Zur Ermittlung dieser wird zuerst der nicht-lineare, konvektive Term $\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})$ der NAVIER-STOKES-Gleichungen, wie DAMIAN [8] zeigt, linearisiert. Dieser kann unter der Annahme kleiner COURANT-Zahlen $Co < 1$, wodurch sich $\mathbf{U}^n \approx \mathbf{U}^{n-1}$ ergibt, am aktuellen Zeitpunkt n als

$$\begin{aligned} \int_{\Delta\Lambda} \nabla \cdot (\mathbf{U}_C^n \otimes \mathbf{U}_C^{n-1}) dV &\approx \sum_f (\mathbf{U}_f^n \otimes \mathbf{U}_f^{n-1}) \cdot \mathbf{n}_f S_f = \\ &= a_C^U \mathbf{U}_C^n + \sum_f a_F^U \mathbf{U}_F^n \end{aligned} \quad (3.18)$$

für das diskrete Kontrollvolumen $\Delta\Lambda$ formuliert werden. In Gleichung (3.18) beschreibt \mathbf{U}^{n-1} die Geschwindigkeit des vorherigen Zeitpunktes, a_C^U den Koeffizienten der betrachteten Zelle, a_F^U die Koeffizienten der benachbarten Zelle und f eine Seitenfläche S_f des Kontrollvolumens (vergleiche hierzu mit Abschnitt 3.4.1 auf Seite 40). Die Koeffizienten a_C^U und a_F^U hängen hierbei von den Geschwindigkeiten im vorherigen Zeitschritt \mathbf{U}^{n-1} ab.

Durch diese Linearisierung ist es nun möglich die Impulsgleichung (3.9) in einer halb-diskretisierten Form, ähnlich Gleichung (3.26) auf Seite 40, als

$$a_C^U \mathbf{U}_C = \mathcal{L}\{\mathbf{U}\} - \nabla p_{rgh} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (3.19)$$

zu formulieren, wobei die letzten drei Terme auf der rechten Seite von Gleichung (3.19) nicht diskretisiert sind. Der Operator $\mathcal{L}\{\mathbf{U}\}$ beinhaltet hierbei den konvektiven Anteil, alle diffusiven Anteile, alle Quellterme, sowie den Term $\mathbf{U}^{n-1}/\Delta t$ des instationären Anteils des vorherigen Zeitschrittes der Impulsgleichung. Zusammengefasst lässt sich somit

$$\mathcal{L}\{\mathbf{U}\} = - \sum a_F^U \mathbf{U}_F + \frac{\mathbf{U}^{n-1}}{\Delta t}$$

schreiben. Betrachtet man nun die Kontinuitätsgleichung und diskretisiert diese mit den gemäß der *Finite-Volumen-Methode* in Abschnitt 3.4.1 auf Seite 40 gezeigten Methoden, erhält man

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \sum_f \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{n}_f S_f = 0. \quad (3.20)$$

Die Geschwindigkeit im Zellzentrum C lässt sich aus der Impulsgleichung (3.19) als

$$\mathbf{U}_C = \frac{1}{a_C^U} \left[(\mathcal{L}\{\mathbf{U}\} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha) - \nabla p_{rgh} \right]$$

ermitteln. Die Geschwindigkeiten an den Seitenflächen f ergeben sich durch Interpolation, was zur Darstellung

$$\mathbf{U}_f = \left[\frac{1}{a_C^U} (\mathcal{L}\{\mathbf{U}\} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha) \right]_f - \left[\frac{1}{a_C^U} \nabla p_{rgh} \right]_f \quad (3.21)$$

führt. Setzt man Gleichung (3.21) anschließend in die Kontinuitätsgleichung (3.20) ein erhält man schließlich die gesuchte *Druckkorrekturgleichung*

$$\sum_f \left[\frac{1}{d_C^{\mathbf{U}}} \nabla p_{rgh} \right]_f \cdot \mathbf{n}_f S_f = \sum_f \left[\frac{1}{d_C^{\mathbf{U}}} (\mathcal{L}\{\mathbf{U}\} - \mathbf{f}^B \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha) \right]_f \cdot \mathbf{n}_f S_f \quad (3.22)$$

in diskretisierter Form.

⇒ **Iterative Lösungsalgorithmen:** Bei der *Druck-/Geschwindigkeitskopplung* für die Flüssigkeiten *Wasser* und der *Glycerol/Wasser-Lösung* wurde der PIMPLE-Algorithmus verwendet, welcher eine Kombination von PISO⁶ und SIMPLE⁷ verkörpert.

Für den viskoelastischen Fall der *Prästol 2540/Wasser-Lösung* wurde bei der *Kopplung von Geschwindigkeit und Druck* in PIMPLE der SIMPLEC⁸-Algorithmus anstelle von SIMPLE verwendet. Obwohl dieser für stationäre Problemstellungen konzipiert ist, hat er sich gemäß PIMENTA und ALVES [14], basierend auf diversen Benchmark-Fällen, besonders für viskoelastische Strömungen mit instationärer Natur bei niedrigen REYNOLDSZahlen bezüglich Stabilität und Genauigkeit bewiesen. Die vorliegenden REYNOLDSZahlen dieser Arbeit belaufen sich für alle zu simulierenden Fälle in der Größenordnung $Re \approx \mathcal{O}(10^2)$ bis $\mathcal{O}(10^3)$ (vgl. hierzu mit Abbildung 4.29 auf Seite 91).

Spannungs-/Geschwindigkeitskopplung

Nach PIMENTA und ALVES [15] kann es bei nicht-NEWTONschen, viskoelastischen Fluiden zur Entkopplung der Spannungen von den Geschwindigkeiten kommen, d.h. die Geschwindigkeit im Zellzentrum C verliert den dynamischen Zusammenhang mit den auf das Kontrollvolumen wirkenden Kräften, wie etwa den polymeren Extraspannungen oder des Drucks. Dies geschieht für gewöhnlich durch die Interpolation von Strömungsgrößen vom Zentrum der Zelle C zum Zentrum der Seitenfläche f . Für die elastischen Spannungen kann diesem Problem durch Bestimmung des polymeren Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}_{p,f}$ gemäß

$$\boldsymbol{\tau}_{p,f} = \overline{\boldsymbol{\tau}}_{p,f} + \mu_p \left[(\nabla \mathbf{U}|_f + (\nabla \mathbf{U}|_f)^\top) - \left(\overline{\nabla \mathbf{U}}|_f + \overline{(\nabla \mathbf{U}|_f)^\top} \right) \right] \quad (3.23)$$

entgegengewirkt werden. Alle Terme in Gleichung (3.23), welche mit einem Überstrich versehen sind, werden durch lineare Interpolation der Werte in den Zellzentren, welche an beiden Seiten der betrachteten Seitenfläche f liegen, ermittelt und auf den Flächenmittelpunkt bezogen. Für die Terme ohne Überstrich werden die Werte direkt im Zellzentrum ohne Interpolation mit der Nachbarzelle verwendet und danach ebenfalls auf den Mittelpunkt der Seitenfläche f bezogen.

⁶ engl.: Pressure Implicit with Splitting of Operator

⁷ engl.: Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations

⁸ engl.: Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations-Consistent

3.4. Diskretisierung

Dieser Abschnitt behandelt die Diskretisierung der oben hergeleiteten Erhaltungsgleichungen. Dabei wird die basierend auf dem Prinzip der *Finite-Volumen-Methode* durchgeführte Diskretisierung der auftretenden Terme in den Erhaltungsgleichungen, wie in MOUKALLED et al. [12] gezeigt, beschrieben.

3.4.1. Finite-Volumen-Methode

Das zugrunde liegende numerische Diskretisierungsverfahren basiert auf der in der numerischen Strömungsmechanik üblichen *Finite-Volumen-Methode*. Hierbei werden die Erhaltungsgleichungen, welche im vorherigen Abschnitt hergeleitet wurden, über ein diskretes Volumenelement $\Delta\Lambda$ (finites Volumen) integriert, wobei Volumenintegrale bestimmter Flussterme mittels des Satzes von GAUSS in Oberflächenintegrale überführt werden. Die grundlegende Erhaltungsgleichung für eine generalisierte Transportgröße $\phi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R} \vee \phi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^3$ schreibt sich als

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{\text{Instationärer Term}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u})}_{\text{Konvektiver Term}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Pi^\phi \nabla \phi)}_{\text{Diffusiver Term}} + \underbrace{S^\phi}_{\text{Quellterm}}. \quad (3.24)$$

Durch die genannte Anwendung des Satzes von GAUSS auf (3.24) mit dem Normalvektor \mathbf{n}

$$\int_{\Delta\Lambda} \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) \, dV = \oint_{\partial(\Delta\Lambda)} (\rho \phi \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dA$$

und anschließender Integration über das Kontrollvolumen $\Delta\Lambda$ erhält man die gewünschte Form der Erhaltungsgleichung (3.24) als

$$\int_{\Delta\Lambda} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \, dV + \oint_{\partial(\Delta\Lambda)} (\rho \phi \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dA = \oint_{\partial(\Delta\Lambda)} (\Pi^\phi \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\Delta\Lambda} S^\phi \, dV \quad (3.25)$$

Die Integrale in dieser Gleichung werden nun entsprechend angenähert, und es ergibt sich schließlich die verwendete Form

$$\frac{\Delta_t \rho \phi}{\Delta t} \Delta\Lambda_m + \sum_f (\rho \phi \mathbf{u})_f \cdot \mathbf{n}_f S_f = \sum_f (\Pi^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{n}_f S_f + S^\phi \Delta\Lambda_m, \quad (3.26)$$

wobei der Index m das m -te diskrete Volumenelement und f die f -te Zellgrenzfläche S_f des Volumenelementes beschreiben.

3.4.2. Diskretisierung der auftretenden Terme

Die Diskretisierung der jeweiligen auftretenden Terme in den Abschnitten 3.4.1 bei der *Finite-Volumen-Methode*, in 3.3.3 bei der Druckkorrekturgleichung und in 3.3.1 bei den Gleichungen der *Volume of Fluid-Methode* wird in diesem Abschnitt besprochen. Eine allgemeine Form der in dieser Arbeit vorkommenden Erhaltungsgleichungen, ist unter Verwendung einer generalisierten skalaren

Transportgröße ϕ , wie oben dargestellt, als

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{\text{Instationärer Term}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u})}_{\text{Konvektiver Term}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Pi^\phi \nabla \phi)}_{\text{Diffusiver Term}}$$

darstellbar unter Vernachlässigung des Quellterms S^ϕ .

Instationärer Term

Die Diskretisierung der zeitlichen Ableitung bzw. des instationären Terms aus Gleichung (3.24) erfolgte ausschließlich mit dem *impliziten EULER-Verfahren*⁹ erster Ordnung. Die Zeitpunkte werden mit dem hochgestellten Index n bzw. $n + 1$ bezeichnet, wobei gilt, dass $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ mit $\Delta t = (T - t_0)/N$, $N \in \mathbb{N}$ und t_0 den Anfangszeitpunkt und T den Endzeitpunkt bezeichnen. Allgemein lässt sich nun Gleichung (3.24) als

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \mathcal{L}\{\phi\} = 0$$

mit dem Differentialoperator \mathcal{L} , welcher den konvektiven und diffusiven Term enthält, formulieren. Integration über das finite Volumen $\Delta\Lambda$ liefert

$$\int_{\Delta\Lambda} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{\Delta\Lambda} \mathcal{L}\{\phi\} dV = 0$$

und anschließende räumliche Diskretisierung führt zu

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \Delta\Lambda + \mathcal{L}_h\{\phi\}^n = 0, \quad (3.27)$$

wobei \mathcal{L}_h den diskreten Differentialoperator und n den aktuellen Zeitschrittindex bezeichnet. Wendet man nun das genannte *implizite EULER Verfahren* auf die partielle Ableitung an, erhält man

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \approx \frac{(\rho \phi)^{n+1} - (\rho \phi)^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Eingesetzt in (3.27) ergibt sich die diskrete Gleichung

$$\frac{(\rho \phi)^{n+1} - (\rho \phi)^n}{\Delta t} \Delta\Lambda + \mathcal{L}_h(\phi)^{n+1} = 0.$$

Gradient

Die Berechnung der auftretenden Gradiententerme, wie etwa jene des Druckgradienten ∇p erfolgt mit dem GAUSS/GREEN-Schema mit linearer Interpolation der Werte zwischen dem Zellmittelpunkt und dem Seitenflächenmittelpunkt. Der Gradient einer allgemeinen Größe ϕ in einem Kontrollvolu-

⁹engl.: Forward EULER Scheme

men $\Delta\Lambda$ mit dem Mittelpunkt C und den Seitenflächen S_f schreibt sich als

$$\nabla\phi_C \approx \frac{1}{(\Delta\Lambda)_C} \sum_f \phi_f \mathbf{n}_f S_f.$$

Hierbei müssen die Werte des Flusses an den Seitenflächen ϕ_f jedoch noch entsprechend definiert werden. Für den zweidimensionalen Fall und unter der vereinfachten Annahme dass der Flächenmittelpunkt f auf der Strecke $\Delta\mathbf{x}_{CF}$ liegt, entsprechend Abbildung 3.3, ergibt sich eine einfache Approximation des Seitenflächenwertes ϕ_f . Hierbei wird ein Durchschnittswert der beiden Zellen definiert, welche die jeweilige Seitenfläche teilen. Somit ergibt sich

$$\phi_f = g_C \phi_C + (1 - g_C) \phi_F$$

mit dem benachbarten Zellmittelpunkt F und dem Gewichtungsfaktor g_C entsprechend

$$g_C = \frac{\|\mathbf{x}_F - \mathbf{x}_f\|}{\|\mathbf{x}_F - \mathbf{x}_C\|} = \frac{d_{Ff}}{d_{FC}}.$$

Es sind \mathbf{x} der Ortsvektor und d die skalare Distanz zwischen den beiden jeweiligen Punkten.

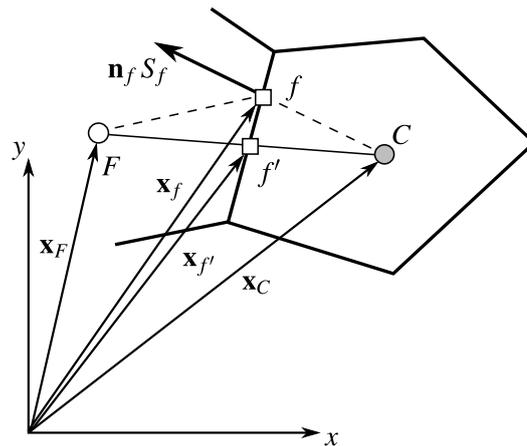


Abbildung 3.3 Geometrische Bedingungen zur Herleitung des Gradienten.

Liegt der Flächenmittelpunkt f jedoch nicht auf der Strecke $\Delta\mathbf{x}_{CF}$, was im Allgemeinen der Fall ist, d.h es ergibt sich ein Punkt f' auf eben dieser Strecke, so muss der Fluss an der Stelle f mit einer Korrektur aus f' berechnet werden. Dies ergibt

$$\phi_f = \phi_{f'} + \underbrace{(\nabla\phi)_{f'} \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{f'})}_{\text{Korrektur}}.$$

Ausgeschrieben lässt sich der korrigierte Gradienten als

$$\begin{aligned} \phi_f &= g_C [\phi_C + (\nabla\phi)_C \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_C)] + (1 - g_C) [\phi_F + (\nabla\phi)_F \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_F)] = \\ &= \phi_{f'} + g_C (\nabla\phi)_C \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_C) + (1 - g_C) (\nabla\phi)_F \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_F) \end{aligned}$$

angeben.

Ein ähnlicher Zusammenhang kann an der Seitenfläche w angeschrieben werden. Dabei erhält man

$$\dot{m}_w \phi_w = (\rho \phi \mathbf{u})_w \cdot \mathbf{n}_w S_w = \max\{\dot{m}_w, 0\} \phi_C - \max\{-\dot{m}_w, 0\} \phi_W \quad (3.30)$$

Setzt man die Gleichungen (3.29) und (3.30) in (3.28) ein, so resultiert

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0.$$

⇨ **High Resolution Schemes (HRS):** Den Ausgangspunkt dieser Verfahren stellen dabei die Gleichungen (3.24) und (3.26) des konvektiven Termes in analytischer und in diskretisierter Form dar. Nach PIMENTA und ALVES [14] ist die grundlegende Intention der HRS-Verfahren, Stabilität und Genauigkeit bestimmter Verfahren zu kombinieren. Hierbei wird die Transportgröße ϕ_f an der Seitenfläche definiert als

$$\tilde{\phi}_f = \alpha \tilde{\phi}_C + \beta$$

mit den Definitionen

$$\tilde{\phi}_f \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\phi_f - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad \text{und} \quad \tilde{\phi}_C \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}$$

In obigen Gleichungen beschreiben α und β skalare Größen welche sich für unterschiedliche HRS-Verfahren unterscheiden und von $\tilde{\phi}_C$ abhängen können. Die Indizes sind ausgehend von einer Zelseitenfläche f so definiert, dass C die Zelle beschreibt, woher der Fluss kommt (*Upstream*), D beschreibt die Zelle, wohin der Fluss geht (*Downstream*), und U bezieht sich auf die Zelle welche sich weiter stromaufwärts (*far-Upstream*) von C befindet (vergleiche hierzu Abbildung 3.4 mit $f \rightarrow e, C \rightarrow C, D \rightarrow E$ und $W \rightarrow U$).

Das für den beschriebenen viskoelastischen Fall verwendete Verfahren hat in OpenFOAM den Namen `GaussDefCmpw cubista`¹⁰. Die skalaren Parameter entsprechend PIMENTA und ALVES [14] sind in Tabelle 3.1 gelistet.

Tabelle 3.1 Werte für die Parameter α und β von `GaussDefCmpw cubista`.

Parameter α [-]		Parameter β [-]	
$\begin{cases} 1, & \text{falls } \tilde{\phi}_C \leq 0 \vee \tilde{\phi}_C \geq 1 \\ 7/4, & \text{falls } 0 < \tilde{\phi}_C < 3/8 \\ 3/4, & \text{falls } 3/8 \leq \tilde{\phi}_C \leq 3/4 \\ 1/4, & \text{falls } 3/4 < \tilde{\phi}_C < 1 \end{cases}$		$\begin{cases} 0, & \text{falls } \tilde{\phi}_C \leq 0 \vee \tilde{\phi}_C \geq 1 \\ 0, & \text{falls } 0 < \tilde{\phi}_C < 3/8 \\ 3/8, & \text{falls } 3/8 \leq \tilde{\phi}_C \leq 3/4 \\ 3/4, & \text{falls } 3/4 < \tilde{\phi}_C < 1 \end{cases}$	

⇨ **Das VAN LEER-Verfahren:** Das VAN LEER Schema zählt ebenfalls zu den „High Resolution Schemes (HRS)“. Dabei wird der „Total Variation Diminishing (TVD)“-Ansatz verwendet, d.h.

$$TV = \sum_i |\phi_{i+1} - \phi_i|,$$

¹⁰engl.: **Componentwise Deferred correction handling of HRS's**

mit i als Index einer Zelle. Ein numerisches Verfahren wird als TVD bezeichnet, falls die gesamte Variation der Lösung in Abhängigkeit von der Zeit t nicht ansteigt, d.h.

$$TV\{\phi|^{n+1}\} \leq TV\{\phi|^{n}\}$$

mit $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. Sieht man sich nun den konvektiven Term an, so zeigt sich, dass das Upwind-Verfahren erster Ordnung sehr diffusiv und das zentrale Finite-Differenzen-Verfahren hoch dispersiv ist. Ziel ist es nun ein Verfahren zu erhalten welches zwischen den beiden genannten liegt, d.h. ein Verfahren welches die Stabilität der Upwind-Methode und die Genauigkeit der zentralen Finite-Differenzen-Methode aufweist. Dies kann durch

$$\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_D + \phi_C) = \underbrace{\phi_C}_{\text{Upwind}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\phi_D - \phi_C)}_{\text{Anti-Diffusions-Term}} \quad (3.31)$$

erreicht werden, wobei mit C der Upwindpunkt und mit D der Downwindpunkt bezeichnet werden (vergleiche hierzu Abbildung 3.4 mit $f \rightarrow e$, $C \rightarrow C$ und $D \rightarrow E$). Der Anti-Diffusions-Term aus Gleichung (3.31) gibt dem Schema dabei eine Genauigkeit zweiter Ordnung, was erwünscht ist. Ein unerwünschter Nebeneffekt sind dadurch jedoch unphysikalische Oszillationen aufgrund der Reduktion der numerischen Diffusion. Um diesem Nachteil nun ideal entgegenwirken zu können wird eine *Limitierungsfunktion* $\psi(r_f) \in \mathbb{R}$ eingeführt, welche in Regionen an welchen Oszillationen auftreten können den Anti-Diffusions-Term minimiert und vice versa maximiert. Damit lässt sich Gleichung (3.31) schließlich als

$$\phi_f = \phi_C + \frac{1}{2}\psi(r_f)(\phi_D - \phi_C)$$

formulieren. Für die genannte VAN LEER-Methode wird die Limitierungsfunktion $\psi(r_f)$ als

$$\psi(r_f) = \frac{r_f + |r_f|}{1 + |r_f|} \quad \text{mit} \quad r_f = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_C}$$

definiert.

Diffusiver Term

Die Diskretisierung des Diffusionsterm $\nabla \cdot (\Pi^\phi \nabla \phi)$ der Erhaltungsgleichung (3.24) wird an dieser Stelle am zweidimensionalen Fall gezeigt. Entsprechend der *Finite-Volumen* Diskretisierung von Gleichung (3.26) lässt sich über die Seitenflächen f

$$\int_{\Delta\Lambda} \nabla \cdot (\Pi^\phi \nabla \phi) dV = \oint_{\partial(\Delta\Lambda)} (\Pi^\phi \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dA \approx \sum_f (\Pi^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{n}_f S_f$$

schreiben, was für alle Seitenflächen in zwei Dimensionen den folgenden Ausdruck ergibt

$$\begin{aligned} \sum_f (\Pi^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{n}_f S_f &= (\Pi^\phi \nabla \phi)_e \cdot \mathbf{n}_e S_e + (\Pi^\phi \nabla \phi)_w \cdot \mathbf{n}_w S_w + (\Pi^\phi \nabla \phi)_n \cdot \mathbf{n}_n S_n + \\ &+ (\Pi^\phi \nabla \phi)_s \cdot \mathbf{n}_s S_s. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Betrachtet man nun in Gleichung (3.32) beispielsweise den Term der Seitenfläche e in Richtung Osten wie in Abbildung 3.5 gezeigt, so ergibt sich mit den Einheitsvektoren \mathbf{e}_x und \mathbf{e}_y in x und y -Richtung

$$\begin{aligned} (\Pi^\phi \nabla \phi)_e \cdot \mathbf{n}_e S_e &= \Pi_e^\phi S_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \phi}{\partial y} \mathbf{e}_y \right)_e \cdot \mathbf{e}_x = \\ &= \Pi_e^\phi (\Delta y)_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Der Gradient in Gleichung (3.33) an der Seitenfläche e kann als

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_C}{(\delta x)_e}$$

angeschrieben werden¹¹. Dieser Ausdruck eingesetzt in (3.33) ergibt im weiteren Verlauf

$$\Pi_e^\phi (\Delta y)_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Pi_e^\phi \frac{(\Delta y)_e}{(\delta x)_e} (\phi_E - \phi_C). \quad (3.34)$$

Für den Ausdruck $(\Delta y)_e / (\delta x)_e$ kann noch allgemein angegeben werden

$$\frac{(\Delta y)_e}{(\delta x)_e} = \frac{\|\mathbf{n}_e S_e\|}{\|\mathbf{d}_{CE}\|}. \quad (3.35)$$

Die Herangehensweise für die anderen Terme in die restlichen Richtungen ist völlig analog. Setzt man also die Gleichungen (3.34) und (3.35) für die jeweilige Richtung in die algebraische Gleichung (3.32) ein, ergibt sich schlussendlich

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_S \phi_S + a_N \phi_N = 0$$

mit den Koeffizienten a_F für den jeweiligen Nachbarpunkt F von C

$$a_F = \Pi_f^\phi \frac{\|\mathbf{n}_f S_f\|}{\|\mathbf{d}_{CF}\|} (\phi_F - \phi_C).$$

Die entsprechenden Indizes dieser Herleitung sind in Abbildung 3.5 ersichtlich.

¹¹Dies ist in diesem Fall eines strukturierten kartesischen Koordinatensystem möglich. Für ein allgemeines Rechengebiet erfolgt die Berechnung des Gradienten nach Abschnitt 3.4.2 - Gradient

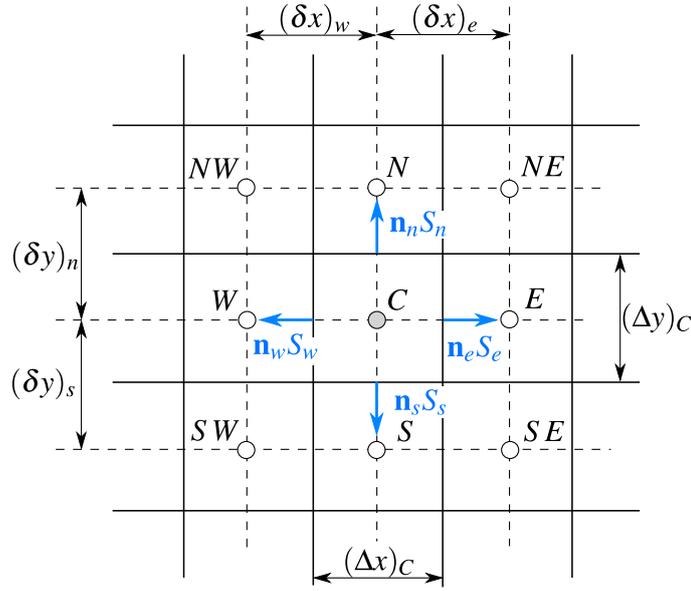


Abbildung 3.5 Zweidimensionales Problem zur Herleitung des diskreten Diffusionsterms.

3.4.3. Transportgleichung der Farbfunktion

Die Lösung der Transportgleichung der Farbfunktion α erfolgt für den verwendeten Solver mit dem MULES¹²-Algorithmus, wie DAMIAN [8] zeigt. Hierbei wird die Transportgleichung (3.10) als

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \sum_f (\alpha \mathbf{U})_f \cdot \mathbf{n}_f S_f + \sum_f \left[\alpha (1 - \alpha) \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_m} \mathbf{u}_{12} \right] \cdot \mathbf{n}_f S_f = 0$$

angeschrieben (vergleiche hierzu mit Abschnitt 3.4.1 auf Seite 40). Dieser Ausdruck kann schließlich in Abhängigkeit des Flusses $\mathcal{F} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} S$ über die Seitenflächen f mit einem expliziten Integrationschema als

$$\frac{\alpha^{n+v+1} - \alpha^n}{\Delta t} \Delta \Lambda + \sum_f \left\{ (\alpha^{n+v})_f \mathcal{F}^{L,n+v} + [\alpha^{n+v} (1 - \alpha^{n+v})]_f \mathcal{F}^{NL,n+v} \right\} = 0 \quad (3.36)$$

umformuliert werden, wobei v die Anzahl der Iterationen¹³ innerhalb des Zeitschrittes Δt , zur Berechnung der nicht-linearen Flüsse, ist. In Gleichung (3.36) sind $\mathcal{F}^{L,n} = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{n}_f S_f$ der Fluss bezüglich der „center of volume“-Geschwindigkeit \mathbf{U} und $\mathcal{F}^{NL,n} = \mathbf{u}_{12} \cdot \mathbf{n}_f S_f$ der Fluss bezogen auf die relative Geschwindigkeit¹⁴ \mathbf{u}_{12} . Diese Geschwindigkeit wird nicht explizit berechnet, sondern mit Hilfe des Flusses

$$\mathcal{F}^{NL,n} = n_f \min \left\{ C_\alpha \frac{|\Phi^{L,n}|}{\|\mathbf{n}_f S_f\|}, \max \left\{ \frac{|\Phi^{L,n}|}{\|\mathbf{n}_f S_f\|} \right\} \right\} \quad \text{mit} \quad n_f = \frac{(\nabla \alpha)_f}{\|(\nabla \alpha)_f + \delta_n\|} \cdot \mathbf{n}_f S_f. \quad (3.37)$$

¹²MULES (Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution) ist die Bezeichnung der FCT-Methode (Flux Corrected Transport) in OpenFOAM

¹³Für die Laufvariable v gilt $0 < v < n\text{AlphaCorr}$, wobei $n\text{AlphaCorr}$ in der jeweiligen `fvSolution`-Datei, wie in Anhang A gezeigt, festgelegt wird.

¹⁴Diese Geschwindigkeit verursacht an der Phasengrenzfläche eine künstliche Kompression.

In Gleichung (3.37) stellt C_α eine Konstante, n_f den Einheitsnormalfluss über die Fläche f und δ_n einen Stabilisationsfaktor, um eine Division durch Null zu verhindern, dar. Der Ausdruck $\Phi^{L,n}$ beschreibt den Fluss über die Seitenfläche f innerhalb des aktuellen Iterationsschrittes des verwendeten Druck-/Geschwindigkeits-Kopplungsalgorithmus’.

Im Anschluss wird die Transportgleichung (3.36) entsprechend der FCT-Methode (**F**lux **C**orrected **T**ransport) `nAlphaCorr`-mal gelöst, wodurch schließlich die Farbfunktion α bekannt ist. Die FCT-Methode stellt hierbei ein Verfahren dar, welches den gesuchten Fluss \mathcal{F} mit einem numerischen Verfahren niedriger Ordnung und einem Verfahren hoher Ordnung berechnet. Aus diesen beiden wird anschließend ein korrigierter Fluss mit einem Parameter λ errechnet.

3.5. Lineares Gleichungssystem

Durch die Diskretisierung der in den vorherigen Abschnitten besprochenen Gleichungen, wie der Druckkorrekturgleichung, den Erhaltungsgleichungen gemäß der *Volume-of-Fluid-Methode* für die betrachteten NEWTONschen und viskoelastischen Fluide, resultiert jeweils ein lineares Gleichungssystem in der Form

$$\mathbf{A} \cdot \Phi = \mathbf{Q} \quad (3.38)$$

mit der Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, dem Lösungsvektor $\Phi \in \mathbb{R}^N$ und dem Störvektor $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^N$. Ausgeschrieben ergibt sich gemäß MOUKALLED et al. [12]

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N-1} & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N-1} & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{N-11} & a_{N-12} & \cdots & a_{N-1N-1} & a_{N-1N} \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN-1} & a_{NN} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_{N-1} \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ \vdots \\ Q_{N-1} \\ Q_N \end{bmatrix}.$$

Die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} ist aufgrund dessen, dass eine Zelle nur mit wenigen Nachbarn verbunden ist, *dünnbesetzt*¹⁵, d.h., dass nur wenige Elemente von Null verschieden sind.

In den folgenden Abschnitten werden die verwendeten Lösungsmethoden und Vorkonditionierer zur Lösung dieses Gleichungssystems bzw. zur Bestimmung des Lösungsvektors Φ , sowie das Prinzip des hierbei verwendeten Relaxationsfaktors ζ^ϕ beschrieben.

3.5.1. Vorkonditionierung

Zur Vorkonditionierung bzw. zur Verbesserung der Konditionszahl $\kappa(\mathbf{A}) \in \mathbb{R}$ der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} des zu lösenden Gleichungssystems gemäß Gleichung (3.38), welche man gemäß DAHMEN und REUSKEN [7] durch

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty \|\mathbf{A}\|_\infty \quad (3.39)$$

¹⁵engl.: sparse

definiert, wurden zwei Verfahren für die unterschiedlichen Feldgrößen verwendet. Diese sind in den folgenden Abschnitten erläutert. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass die Norm $\|\mathbf{A}\|_\infty$ der Matrix \mathbf{A} in Gleichung (3.39) die sogenannte *Zeilensummennorm* darstellt (vgl. DAHMEN und REUSKEN [7]), d.h.

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{i=1,\dots,N} \sum_{j=1}^N |a_{ij}|.$$

Die unten beschriebenen Vorkonditionierungsmethoden wurden jeweils bei der Verwendung des Lösungsalgorithmus nach der *Methode der konjugierten Gradienten* (PCG) bzw. (PBiCG), siehe Abschnitt 3.5.2, eingesetzt.

Unvollständige CHOLESKY-Zerlegung (DIC)

Die *Vorkonditionierung* des linearen Gleichungssystems der zu lösenden Feldgrößen des Druckes bzw. auch der Druckkorrektur erfolgte in der Regel mit der *diagonal-basierten, unvollständigen CHOLESKY-Zerlegung* (DIC¹⁶).

Nach DAHMEN und REUSKEN [7] gilt, dass jede s.p.d¹⁷ Matrix \mathbf{A} sich in der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{L}^\top \quad (3.40)$$

mit Hilfe einer unteren Dreiecksmatrix \mathbf{L} und einer Diagonalmatrix \mathbf{D} ausdrücken lässt. Für eine Zerlegung mittels einer *dünnbesetzten* unteren Dreiecksmatrix nutzt man die bereits genannte *unvollständige CHOLESKY-Zerlegung*. Hierbei wird eine näherungsweise Zerlegung durchgeführt, d.h., dass an jenen Stellen wo in \mathbf{A} eine Null steht die Eintragung unterdrückt wird. Es wird somit eine näherungsweise Faktorisierung konstruiert, welche ein Muster der Nichtnulleinträge N^0 entsprechend

$$N^0 := \{(i, j) | a_{ij} \neq 0\}, \quad N^0 \subset \{1, 2, \dots, N\} \times \{1, 2, \dots, N\}$$

berücksichtigt, d.h., dass beispielsweise für die Komponenten der angenäherten linken Dreiecksmatrix $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{l}_{ij})$ gilt $\tilde{l}_{ij} = 0, \forall (i, j) \in N^0$. Die näherungsweise Faktorisierung der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} ist somit

$$\mathbf{A} \approx \tilde{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \tilde{\mathbf{L}}^\top. \quad (3.41)$$

Unvollständige LR-Zerlegung (DILU)

Es ist auch möglich die Zerlegung von Gleichung (3.40) in der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{R}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{R} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{L}^\top \quad (3.42)$$

¹⁶engl.: **D**iagonal-based **I**ncomplete **C**holesky decomposition

¹⁷ $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ heißt *symmetrisch positiv definit (s.p.d)*, falls $\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}$ (Symmetrie) und $\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} > 0$ (positiv definit) für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N | \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ (vgl. BARTSCH [4]).

durchzuführen, wie DAHMEN und REUSKEN [7] zeigt. Eine *unvollständige LR-Zerlegung* (DILU¹⁸) wird nun wieder unter Berücksichtigung des Musters der Nichtnulleinträge N^0 durchgeführt. Dadurch ergibt sich für \mathbf{A} wieder

$$\mathbf{A} \approx \tilde{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{R}}. \quad (3.43)$$

3.5.2. Lösungsalgorithmen

Zur Lösung der von Gleichung (3.38) allgemein repräsentierten linearen Gleichungssysteme wurden die folgenden, in diesem Abschnitt erklärten Verfahren angewendet. Diese sind das GAUSS-SEIDEL-Verfahren, die *Multigrid-Methode*, sowie die *Methode der konjugierten Gradienten*. Das GAUSS-SEIDEL-Verfahren wurde vorrangig zur Lösung der Transportgleichung für die Farbfunktion α verwendet, sowie als „smoother“ für die *Multigrid-Methode* GAMG¹⁹. Das GAMG-Verfahren wurde für alle übrigen Gleichungssysteme verwendet, mit Ausnahme der Berechnung des natürlichen Logarithmus des Konformationstensors Θ , des Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}$ sowie des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{U} im viskoelastischen Fall. Hier wurde die *Methode der konjugierten Gradienten* verwendet. Die Implementierung der Zuweisungen dieser Verfahren in der entsprechenden `fvSolution`-Datei ist in Abschnitt A.2.3 ab Seite 123 gezeigt.

GAUSS-SEIDEL-Verfahren

Das GAUSS-SEIDEL-Verfahren zählt zu den *iterativen linearen Gleichungslösern*. Im Allgemeinen wird hier die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} entsprechend

$$\mathbf{A} \cdot \Phi = \mathbf{Q} \quad \Rightarrow \quad (\mathbf{N} - \mathbf{P}) \cdot \Phi = \mathbf{Q}$$

aufgeteilt, wobei die Matrix \mathbf{N} „nahe“ \mathbf{A} ist, d.h. $\|\mathbf{N}\| \approx \|\mathbf{A}\|$ und einfach zu zerlegen ist.

Beim GAUSS-SEIDEL-Verfahren werden die oben genannten Matrizen als

$$\mathbf{N} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \tilde{\mathbf{L}}_0, \quad \mathbf{P} = \tilde{\mathbf{R}}_0 \quad (3.44)$$

dargestellt, wobei mit $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{A})$ eine Diagonalmatrix, mit \mathbf{E} der Einheitstensor, mit $\tilde{\mathbf{L}}_0$ und $\tilde{\mathbf{R}}_0$ die linke und rechte Dreiecksmatrix bezeichnet werden, wobei der Index 0 charakterisiert, dass die jeweilige Hauptdiagonale mit 0 besetzt ist. Die Berechnungsvorschrift der einzelnen Elemente des Lösungsvektors Φ ist

$$\Phi_i^{n+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(Q_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \Phi_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} \Phi_j^n \right), \quad (3.45)$$

wobei sich erkennen lässt, dass das GAUSS-SEIDEL-Verfahren für den aktuellen Rechenschritt $n+1$ alle bereits berechneten Werte Φ_j^{n+1} von diesem verwendet.

¹⁸engl.: **D**agonal-based **I**ncomplete **L**ower **U**pper decomposition.

¹⁹engl.: **G**eometric-**A**lgebraic **M**ulti-**G**rid method.

Multigrid-Methode

Betrachtet man das elliptische Modellproblem

$$\mathcal{L}\Phi = \mathbf{Q}$$

mit dem linear elliptischen Differentialoperator \mathcal{L} lässt sich in diskretisierter Form mit der angenommen konstanten Elementweite h

$$\mathcal{L}_h\Phi_h = \mathbf{Q}_h \quad (3.46)$$

schreiben. Nimmt man nun als $\tilde{\Phi}$ eine Approximation der exakten Lösung Φ von (3.46) an, ergibt sich mit der Korrektur \mathbf{e}_h

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \mathbf{e}_h.$$

Das Residuum bzw. der Fehler \mathbf{d}_h der Iteration schreibt sich somit als

$$\mathbf{d}_h = \mathcal{L}_h\tilde{\Phi} - \mathbf{Q} \quad (3.47)$$

was des weiteren aufgrund der Linearität von \mathcal{L}_h ein lineares Gleichungssystem für die Korrektur

$$\mathcal{L}_h\mathbf{e}_h = -\mathbf{d}_h \quad (3.48)$$

liefert. Gleichung (3.48) lässt sich bei einem größeren Netz mit größerer Elementgröße H analog als

$$\mathcal{L}_H\mathbf{e}_H = -\mathbf{d}_H \quad (3.49)$$

formulieren. Die Berechnung einer neuen Lösung $\tilde{\Phi}_h^{neu}$ erfolgt nun nach dem folgenden Schema. Erst wird der Fehler entsprechend Gleichung (3.47) mit

$$\mathbf{d}_h = \mathcal{L}_h\tilde{\Phi}_h - \mathbf{Q}$$

berechnet. Anschließend wird dieser mit einer Transformationsmatrix \mathbf{r} auf das gröbere Netz mit der Elementweite H transformiert und es ergibt sich

$$\mathbf{d}_H = \mathbf{r} \cdot \mathbf{d}_h.$$

Mit diesem Ergebnis folgt nun die Berechnung der Korrektur \mathbf{e}_H auf dem groben Netz nach Gleichung (3.49). Diese Korrektur wird anschließend mit einer weiteren Transformationsmatrix \mathbf{p} auf das feine Netz mit der Elementweite h entsprechend

$$\mathbf{e}_h = \mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_H$$

transformiert und es kann die neue Lösung des feinen Netzes mit der Elementgröße h als

$$\tilde{\Phi}_h^{neu} = \tilde{\Phi}_h + \mathbf{e}_h$$

ermittelt werden. Durch mehrmalige Durchführung der Vergrößerungs- und Verfeinerungsschritte mit obigen Transformationsmatrizen können unterschiedlich strukturierte Formen der *Multigrid-Methode* realisiert werden.

Das zur Lösung der einzelnen Problemstellungen dieser Arbeit verwendete Multigrid-Verfahren ist das GAMG²⁰-Verfahren, wie in MOUKALLED et al. [12] dargestellt. Hierbei wird das gröbere Netz nicht durch topologische oder geometrische Informationen des feineren Netzes generiert, sondern durch Agglomeration der vorhandenen feinen Netzelemente. Dies führt dazu, dass die GAMG-Methode hoch effizient und robust ist.

Methode der konjugierten Gradienten (PCG/PBiCG)

Die der Lösung von Gleichung (3.38) zugrunde liegende Vorgehensweise ist eine Minimierung der Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$

$$f(\Phi) = \frac{1}{2} \Phi \cdot \mathbf{A} \cdot \Phi - \Phi \cdot \mathbf{Q}. \quad (3.50)$$

Jener Vektor Φ , bei welchem die Funktion f ein Minimum entsprechend der Bedingung

$$\nabla f \stackrel{!}{=} \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A} \cdot \Phi - \mathbf{Q} = \mathbf{0}$$

annimmt, kann als Lösung des linearen Gleichungssystems (3.38) angesehen werden, wobei \mathbf{A} symmetrisch, positiv definit sein muss (siehe hierzu auch Abschnitt 3.5.1). Die Findung einer Lösung wird ausgehend einer Initialisierungslösung Φ_0 Schritt für Schritt mit den weiteren Lösungen $\Phi_1, \dots, \Phi_n, \Phi_{n+1}, \dots$ solange durchgeführt bis $f(\Phi) \rightarrow f_{min}$ gilt, wobei bei jedem Schritt eine „Verbesserung“ der Lösung erfolgen muss, d.h. es muss

$$f(\Phi_{n+1}) \stackrel{!}{\leq} f(\Phi_n)$$

erfüllt sein. Eine neue Lösung Φ_{n+1} wird gefunden indem man von der alten Lösung Φ_n entlang der Richtung \mathbf{u}_n entsprechend

$$\Phi_{n+1} = \Phi_n + \mathbf{u}_n$$

fortschreitet, wobei jeweils ein lokales Minimum erreicht ist, wenn

$$\min_{\mathbf{u}_n} f \quad \Rightarrow \quad \mathbf{u}_n \cdot \nabla f = 0 \quad (3.51)$$

gilt. Die Ermittlung des nächsten sogenannten *konjugierten Vektors* \mathbf{u}_{n+1} erfolgt durch Lösung des Variationsproblems, sodass $\delta(\Phi)$ stets eine Verbesserung des lokalen Minimums (3.51) herbeiführt. Dies führt ausgehend von

$$\delta(\nabla f) = \delta(\mathbf{A} \cdot \Phi - \mathbf{Q}) = \mathbf{A} \cdot \delta(\Phi)$$

²⁰engl.: Geometric-Algebraic MultiGrid Scheme

auf

$$\begin{aligned} & \underbrace{\mathbf{u}_n \cdot [\nabla f + \delta(\nabla f)]}_{=0} = 0 \\ \Rightarrow & \mathbf{u}_n \cdot \delta(\nabla f) = \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{A} \cdot \underbrace{\delta(\Phi)}_{:=\mathbf{u}_{n+1}} = 0. \end{aligned}$$

Dies ist das allgemeine Vorgehen bei der Lösung von (3.38) mittels der Methode der konjugierten Gradienten, wobei eine Vorkonditionierung entsprechend Kapitel 3.5.1 auf das PCG²¹-Verfahren führt.

Eine Erweiterung der konjugierten Gradienten Methode auf eine *nicht-symmetrische Koeffizientenmatrix* \mathbf{A} ist das sogenannte *bikonjugierte Gradienten-Verfahren* (PBiCG²²), wobei auch hier eine Vorkonditionierung entsprechend Abschnitt 3.5.1 erfolgte. Bei dieser Methode wird die unsymmetrische Koeffizientenmatrix \mathbf{A} in ein äquivalentes System mit einer symmetrischen Koeffizientenmatrix entsprechend

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^\top & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi \\ \Phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

überführt mit $\Psi \in \mathbb{R}^N$. Das prinzipielle Vorgehen zur Lösung von Φ entspricht dem oben gezeigten.

3.5.3. Unterrelaxation im iterativen Lösungsprozess

Um eventuell auftretender Divergenz des iterativen Lösungsprozesses entgegenwirken zu können, wurde ein Relaxationsfaktor verwendet, wie MOUKALLED et al. [12] zeigt. Dieser beeinflusst die Änderung von ϕ zwischen den Iterationen, was zu einer Verbesserung der Konvergenz bzw. der Stabilität der iterativen Lösung führt. Das verwendete Prinzip ist daher *Unterrelaxation*. Dieses Prinzip sei im folgenden anhand eines einfachen, verallgemeinerten, expliziten Lösungsverfahrens erklärt. Jede einzelne Gleichung des linearen Gleichungssystems kann allgemein geschrieben werden als

$$a_C \phi_C + \sum_F a_F \phi_F = b_C,$$

wobei hier mit F die Nachbarzellen bezeichnet werden. Umgeformt lässt sich

$$\phi_C = \frac{-\sum_F a_F \phi_F + b_C}{a_C}$$

angeben. Nimmt man nun mit ϕ_C^* den Wert von ϕ_C der vorherigen Iteration an und addiert und subtrahiert man diesen Term auf der rechten Seite, ergibt sich

$$\phi_C = \phi_C^* + \left(\frac{-\sum_F a_F \phi_F + b_C}{a_C} - \phi_C^* \right).$$

²¹engl.: Preconditioned Conjugate Gradient method

²²engl.: Preconditioned Bi-Conjugate Gradient method

Kapitel 3. Mathematisches Modell

Hierbei beschreibt der Term in den Klammern die Änderung von ϕ_C aufgrund der aktuellen Iteration. Die Änderung kann somit mit einem hinzugefügten Parameter $\zeta^\phi \in \mathbb{R}$ modifiziert werden, womit man im Weiteren schreiben kann

$$\phi_C = \phi_C^* + \zeta^\phi \left(\frac{-\sum_F a_F \phi_F + b_C}{a_C} - \phi_C^* \right).$$

Abhängig vom Wert des Relaxationsfaktors ζ^ϕ spricht man zum einen von Unterrelaxation wenn $\zeta^\phi \in (0, 1)$ und zum anderen von Überrelaxation wenn $\zeta^\phi > 1$ ist. In dieser Arbeit wurde jedoch nur Unterrelaxation verwendet. Ein Wert von ζ^ϕ nahe 1 impliziert kleine Unterrelaxation, wobei ein Wert von ζ^ϕ nahe an 0 starke Unterrelaxation zur Folge hat, wodurch sich ϕ_C von Iteration zu Iteration nur sehr wenig ändert.

Numerische Ergebnisse

Dieses Kapitel diskutiert die durch die CFD-Simulationen erhaltenen Ergebnisse für die behandelten Fluide *Wasser*, die *Glycerol/Wasser-Lösung* sowie die *Prästol 2540/Wasser-Lösung*. Zu Beginn erfolgt eine Auflistung aller durchgeführten Simulationen mit den zugehörigen Parametern in einer Tabelle. Dem folgt eine Darstellung der Auswertemethodik, welche zum einen die Ermittlung der analysierten Strömungsgrößen und zum anderen den Vergleich der simulierten Kapillarwellen mit den Vorhersagen der Dispersionsrelationen beschreibt. Im letzten Teil werden schließlich die Ergebnisse grafisch in Diagrammen abgebildet und diskutiert.

4.1. Übersicht

Die nachfolgende Tabelle 4.1 beinhaltet eine übersichtliche Darstellung aller durchgeführten Simulationen. Hierbei wird für die jeweilige Flüssigkeit, mit Ausnahme von *Wasser*, der Massenanteil m in *ppm* (im Falle der *Prästol 2540/Wasser-Lösung*) bzw. in % (im Falle der *Glycerol/Wasser-Lösung*), sowie die gewählte Düsenaustrittsgeschwindigkeit W angegeben.

Tabelle 4.1 Übersicht aller durchgeführten Simulationen.

Nr.	Flüssigkeit	Massenanteil im Wasser	Düsenaustrittsgeschwindigkeit W [ms^{-1}]
1	Wasser	-	0.10
2	Wasser	-	0.25
3	Wasser	-	0.40
4	Wasser	-	0.50
5	Glycerol/Wasser-Lösung	11%	0.10
6	Glycerol/Wasser-Lösung	11%	0.25
7	Glycerol/Wasser-Lösung	11%	0.40
8	Prästol 2540/Wasser-Lösung	10 ppm	0.10
9	Prästol 2540/Wasser-Lösung	25 ppm	0.40
10	Prästol 2540/Wasser-Lösung	60 ppm	0.75

4.2. Auswertemethodik der numerischen Ergebnisse

Dieser Abschnitt legt dar, wie, basierend auf den numerischen Ergebnissen, die für die Beschreibung des gestörten Flüssigkeitsstrahls wesentlichen Größen, wie Strahlradius, Strahlgeschwindigkeit oder die daraus abgeleitete Wellenlänge der stehenden Kapillarwellen, bestimmt wurden. Die Spezifikation der aus diesen physikalischen Größen hervorgehenden, den Strahlzustand jeweils charakterisierenden Kennzahlen, welche für den Vergleich mit den analytischen Ergebnissen der Dispersionsrelation benötigt werden, wird ebenso erklärt.

4.2.1. Ausgangspunkt

Bei der Analyse der Simulationsergebnisse wird von der von OpenFOAM gelieferten numerischen Lösung ausgegangen. Die Lösungsgröße welche von maßgeblicher Bedeutung ist, ist die Farbfunktion $\alpha(r, z, t)$. Die Koordinaten (r, z) , sowie das Rechengebiet seien an dieser Stelle noch einmal in Abbildung 4.1 gezeigt, wobei sich die axiale Koordinate z vom Düsenaustritt bis zum Aufprallpunkt über die Höhe $h = 0.03 \text{ m}$ erstreckt.

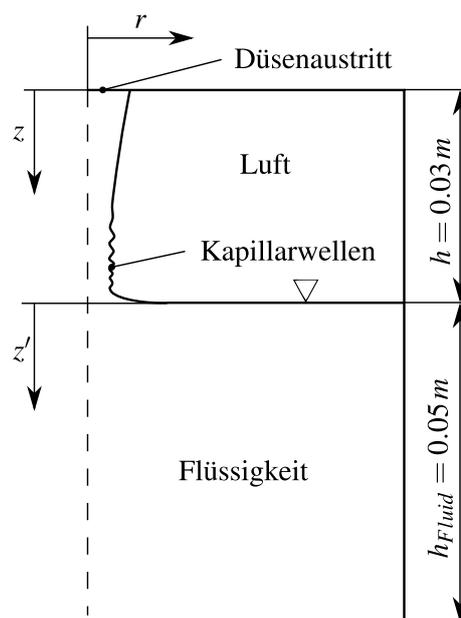


Abbildung 4.1 Darstellung des Rechenmodells bzw. des Koordinatensystems (r, z) .

Da die Kapillarwellen an der Strahloberfläche *stehende Wellen* sind, weist die Bewegung der Flüssigphase konsequenterweise keine Zeitabhängigkeit auf. Entsprechend erreicht die an sich instationär simulierte Verteilung der Farbfunktion nach einer bestimmten Simulationszeit ($\approx 0.5 \text{ s}$ nach Initialisierung) einen zeitunabhängigen stationären Zustand. Die Auswertung der numerischen Ergebnisse erfolgte dann zu einem willkürlich gewählten Zeitpunkt bald nach dem Erreichen der Stationarität, wo $\alpha(r, z, t) = \alpha(r, z)$ gilt.

4.2.2. Gestörter Strahlradius

Mit Hilfe der erhaltenen numerischen Daten der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ wurde der durch die stehenden Kapillarwellen *gestörte Strahlradius* $\hat{r}(z)$, wie im Folgenden in den Abbildungen 4.6, 4.14 und 4.22 grafisch dargestellt, bestimmt. Dabei wurden mit den vorhandenen Postprocessing-Tools von OpenFOAM die Koordinaten in radialer und axialer Richtung (r, z) an allen Stellen, an welchen die Farbfunktion den Wert $\alpha = 0.5$ annimmt, ermittelt. Dadurch konnte die radiale Position der Oberfläche des Fluidstrahles an jeder axialen Position z mit guter Genauigkeit bestimmt werden.

In den bereits erwähnten Abbildungen 4.6, 4.14 und 4.22 wird zusätzlich der *theoretische, ungestörte Strahlradius* $\tilde{r}(z)$, berechnet aus der BERNOULLIgleichung nach (2.4) unter Verwendung des Zustands an der Düse als Referenzzustand, d.h. $z_0 = 0$, $r_0 = R = D/2$ und $w_0 = W$,

$$\tilde{r}(z) = R \left[1 + \frac{2gz}{W^2} - \frac{2\sigma}{\rho RW^2} \left(\frac{R}{\tilde{r}(z)} - 1 \right) \right]^{-\frac{1}{4}},$$

zum Vergleich hinzugefügt.

4.2.3. Mittlerer Strahlradius

Bei der Bestimmung des *mittleren Strahlradius*' $\bar{r}(z)$ über die Strahlhöhe z wurde so vorgegangen, dass die axialen und radialen Koordinaten sämtlicher Minima und Maxima des gestörten Strahlradius' $\hat{r}(z)$ im Bereich der Kapillarwellen ermittelt wurden. Anschließend wird der mittlere Strahlradius als arithmetischer Mittelwert der radialen Koordinaten von jeweils zwei benachbarten Extremstellen berechnet, d.h.

$$\bar{r}(\bar{z}) = \frac{1}{2} \left(\hat{r}(z) \Big|^{min} + \hat{r}(z) \Big|^{max} \right). \quad (4.1)$$

Die zugehörige Höhe \bar{z} in axialer Richtung wurde analog ebenso als arithmetischer Mittelwert

$$\bar{z} = \frac{1}{2} \left(z \Big|^{min} + z \Big|^{max} \right)$$

berechnet. Abbildung 4.2 zeigt dieses Vorgehen schematisch. Die Gesamtheit all dieser so ermittelten Koordinatenpaare ergab schließlich den gesuchten Verlauf des mittleren Strahlradius' $\bar{r}(\bar{z})$ über die Höhenkoordinate. Diese sehr lokale auf unmittelbar benachbarte Wellenberge und Wellentäler basierte Methode bringt erwartungsgemäß keine völlig glatten Verläufe für den mittleren Strahlradius $\bar{r}(\bar{z})$ hervor. Diese methodisch verursachten unphysikalischen Oszillationen in $\bar{r}(\bar{z})$ wurden durch anschließende Filterung¹ weitgehend eliminiert, wodurch sich schließlich die glatten Verläufe in den Abbildungen 4.7, 4.15 und 4.23 für die jeweilige Flüssigkeit ergaben.

¹Verwendet wurde ein einfacher BUTTERWORTH-Filter.

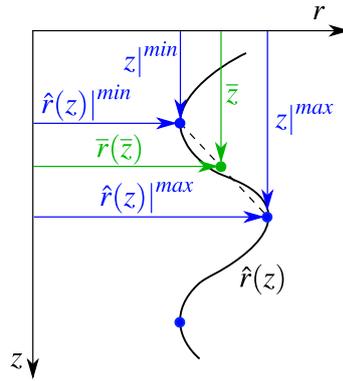


Abbildung 4.2 Prinzipielle Darstellung der Ermittlung des mittleren Strahlradius' $\bar{r}(\bar{z})$ in einem Wellenelement zwischen einem Wellental und einem unmittelbar folgenden Wellenberg.

4.2.4. Mittlere WEBERZahl

Mit Kenntnis des mittleren Strahlradius' $\bar{r}(z)$ aus den Simulationen lässt sich auch der Verlauf der entsprechenden *mittleren WEBERzahl* $\overline{We}(z)$ über die Strahlhöhe z für die jeweilige Flüssigkeit, wie im Kapitel 4.3 in den Abbildungen 4.8, 4.16 und 4.24 gezeigt, berechnen. Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung

$$R^2 \pi W = \bar{r}^2(z) \pi \bar{w}(z)$$

liefert der mittlere Radius $\bar{r}(z)$ die volumenstromäquivalente mittlere Geschwindigkeit

$$\bar{w}(z) = W \left(\frac{R}{\bar{r}(z)} \right)^2.$$

Gemäß ihrer Definition $\overline{We} = \rho \bar{r}(z) \bar{w}^2(z) / \sigma$ berechnet sich die mittlere WEBERzahl als

$$\overline{We}(z) = \frac{\rho W^2 R^4}{\sigma \bar{r}^3(z)}. \quad (4.2)$$

Der Verlauf des auf diese Weise aus der simulierten Farbfunktion gewonnenen wichtigen Strahlparameters wird in der Analyse der Ergebnisse dem Verlauf der *theoretischen WEBERzahl* $We(z)$ aus der BERNOULLIgleichung, gebildet mit dem ungestörten Strahlradius $\tilde{r}(z)$ gemäß (2.4)

$$\tilde{r}(z) = R \left[1 + Fr^{-1} - \frac{2}{We_0} \left(\frac{R}{\tilde{r}(z)} - 1 \right) \right]^{-\frac{1}{4}} \quad (4.3)$$

mit $Fr^{-1} = 2gz/W^2$ und $We_0 = \rho RW^2 / \sigma$ bezogen auf den Düsenaustrittszustand, sodass

$$We(z) = \frac{\rho \tilde{r}(z)}{\sigma} W^2 \left[1 + \frac{2gz}{W^2} - \frac{2\sigma}{\rho RW^2} \left(\frac{R}{\tilde{r}(z)} - 1 \right) \right], \quad (4.4)$$

gegenübergestellt.

4.2.5. Wellenlängen

Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit der analytischen Beschreibung durch die jeweilige Dispersionsrelation mussten aus den Simulationsergebnissen insbesondere die *Wellenlängen* λ der vor dem Auftreffpunkt auftretenden stehenden Kapillarwellen ermittelt werden. Die Wellenlängen werden dabei stets aus der axialen Erstreckung einzelner Wellenpakete bestimmt, welche jeweils von einem Maximum $\hat{r}(z)|_i^{max}$ bis zum unmittelbar nächsten Maximum $\hat{r}(z)|_{i+1}^{max}$ reichen, wie in Abbildung 4.3 gezeigt. Diese Wellenpakete beinhalten damit zwei unmittelbar benachbarte Wellenelemente, jeweils begrenzt durch nebeneinander liegende Extrema $\hat{r}(z)|^{max}$ bzw. $\hat{r}(z)|^{min}$, wie in Abbildung 4.2 skizziert.

Die gesuchte *Wellenlänge* $\lambda(\bar{r}, \bar{z})$ des betrachteten Wellenpakets ergibt sich folglich aus dem axialen Abstand der beiden Maxima i und $i + 1$ zu

$$\lambda(\bar{r}, \bar{z}) = z \Big|_{i+1}^{max} - z \Big|_i^{max}. \quad (4.5)$$

Die zugehörige axiale Position wird wiederum als arithmetischer Mittelwert bestimmt gemäß

$$\bar{z}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(z \Big|_i^{max} + z \Big|_{i+1}^{max} \right). \quad (4.6)$$

Die auf diese Weise an diskreten axialen Positionen bestimmten Wellenlänge weisen für jeden Strahl eine gewisse Variation auf. Auf die Bandbreite dieser Streuung wird in der Diskussion der Ergebnisse der simulierten Strahlen noch näher eingegangen.

Die zum Vergleich der numerischen mit der analytischen Beschreibung herangezogenen Dispersionskorrelationen gehen stets von einem konstanten, räumlich unveränderlichen Grundzustand des ungestörten Flüssigkeitsstrahls aus. Somit berücksichtigen diese keinerlei Einschnürung des Strahls durch die schwerkraftinduzierte Beschleunigung, was eine Charakterisierung des ungestörten Strahlzustands durch einen konstanten ungestörten Strahlradius $\bar{r} = const.$ und einer konstanten Strahlgeschwindigkeit \bar{w} bzw. der daraus hervorgehenden Kennzahlen

$$We = \frac{\rho \bar{r} \bar{w}^2}{\sigma}, \quad Re = \frac{\rho \bar{r} \bar{w}}{\mu}, \quad De_1 = \frac{\lambda_1 \bar{w}}{\bar{r}} \quad \text{und} \quad De_2 = \frac{\lambda_2 \bar{w}}{\bar{r}},$$

ermöglicht.

Für einen sinnvollen Vergleich der analytischen Lösungen mit den Simulationsergebnissen muss daher auch für letztere ein entsprechender Referenzzustand zur Charakterisierung des (durch Einschnürung) räumlich veränderlichen, ungestörten Strahls definiert werden. Hierfür wird der Zustand im Auftreffpunkt des Strahls auf der Spiegeloberfläche, d.h. bei $z = h = 0.03 \text{ m}$, gewählt, da von diesem Punkt die Störung ausgeht, welche die im Strahl stromauf entstehenden Kapillarwellen verursachen. Der an dieser Stelle vorliegende ungestörte Strahlzustand wird theoretisch bestimmt basierend auf der BERNOULLIgleichung (2.3) in Kombination mit der Kontinuitätsbedingung (2.4), ausgewertet bei $z = h$ und unter Verwendung des Düsenaustrittszustands für die Bedingungen bei $z = 0$, d.h. $w_0 = W$ und $r_0 = D/2$.

Die auf diese Weise ermittelten Größen $\bar{r}|_{z=h}$ und $\bar{w}|_{z=h}$ liefern die Kennzahlen

$$We \Big|_{z=h} = \frac{\rho \bar{r}|_{z=h} \bar{w}^2|_{z=h}}{\sigma}, \quad Re \Big|_{z=h} = \frac{\rho \bar{r}|_{z=h} \bar{w}|_{z=h}}{\mu}, \quad De_1 \Big|_{z=h} = \frac{\lambda_1 \bar{w}|_{z=h}}{\bar{r}|_{z=h}}$$

und $De_2 \Big|_{z=h} = \frac{\lambda_2 \bar{w}|_{z=h}}{\bar{r}|_{z=h}}$

zur Charakterisierung der simulierten Strahlen, bzw. die Bezugslänge für die von der Simulation vorhergesagten *relativen Wellenlängen* $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$.

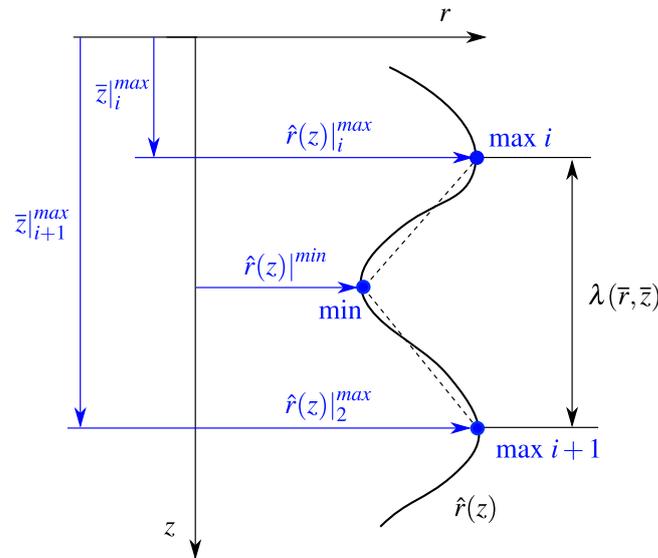


Abbildung 4.3 Schematische Darstellung eines Wellenpaketes zur Ermittlung der Wellenlänge und ihre axiale Position.

4.2.6. Amplitude der Störung des Flüssigkeitsradius'

Der axiale Verlauf der Störung des Strahlradius' $f_{sim}(z) = \hat{r}(z) - \bar{r}(z)$ aus der jeweiligen Simulation wird mit der entsprechenden theoretischen Lösung des Wellenansatzes einer stehenden Welle im ruhenden, laborfesten Koordinatensystem, wie in Kapitel 2.4 unter Gleichung (2.65) bereits angedeutet als

$$f(z') = \bar{f}_0 e^{ikz'} = \bar{f}_0 e^{-k_i \bar{r} \frac{z'}{\bar{r}}} e^{ik_r \bar{r} \frac{z'}{\bar{r}}}$$

verglichen. Darin bedeutet $z' = z - h$ den axialen Abstand zum Auftreffpunkt in raumfesten Koordinaten (vgl. mit Abbildung 4.1). Da z in Strömungsrichtung positiv zählt, gilt für den relevanten Bereich (wo die Kapillarwellen auftreffen) $z' < 0$. Die aus der Lösung von (2.67) für alle betrachteten Fluide analytisch ermittelte *dimensionslose Dämpfung* $\delta = -k_r \bar{r}$ ist in Abbildung 4.4 als Funktion der WEBERZahl We aufgetragen. Die Amplitude der Störung wird offensichtlich räumlich stromauf mit steigender WEBERZahl durchwegs stärker gedämpft. Das Ausmaß der Dämpfung variiert abhängig von den Stoffwerten und der daraus abgeleiteten charakteristischen Kennzahlen Re , De_1 und De_2 . Die Dämpfung ist am geringsten für reines Wasser, am weitest für die *Prästol*

2540/Wasser-Lösung mit 60 ppm. Letztere Vorhersage ist auf die in diesem Fall vorliegende höchste dynamische Viskosität zurückzuführen.

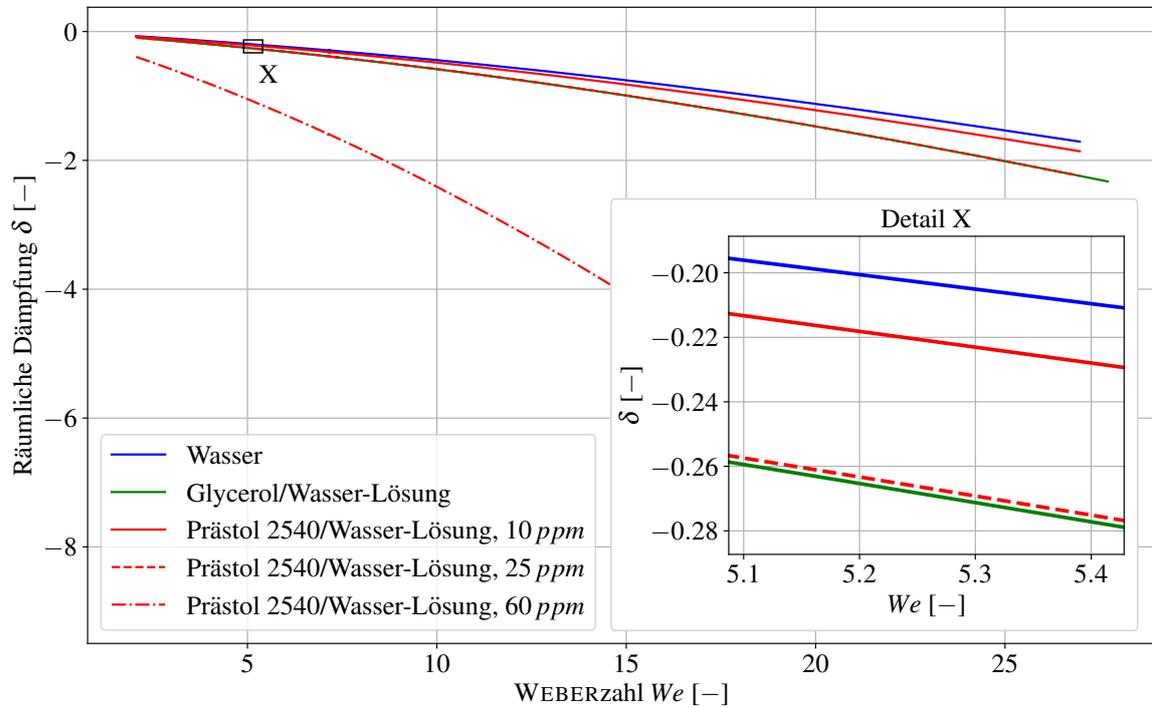


Abbildung 4.4 Darstellung der räumlichen dimensionslosen Dämpfung δ über der WEBERzahl We aller untersuchten Fluide.

Der aus der Simulation gewonnene Verlauf der Störung der Flüssigkeitsoberfläche relativ zur Ausgangsamplitude

$$\frac{f_{sim}(z)}{f_{sim,0}} = \frac{\hat{r}(z) - \bar{r}(z)}{f_{sim,0}}$$

verwendet die Amplitude der ersten klar identifizierbaren Kapillarwelle unmittelbar stromauf vom Auftreffpunkt als Bezugswert $f_{sim,0}$.

4.3. Ergebnisse

Dieser Abschnitt beinhaltet sämtliche Simulationsergebnisse aller drei betrachteten Fluide, ausgewertet mit den Methoden wie sie im vorherigen Kapitel beschrieben wurden. Im jeweiligen Unterkapitel werden wichtige Details der einzelnen durchgeführten Simulationen erwähnt und anschließend anhand der in den Abbildungen gezeigten Diagramme diskutiert. Es werden für die betrachtete Flüssigkeit jeweils Verläufe der Farbfunktion $\alpha(r, z)$, des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$, des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ und der mittleren WEBERZahl $\overline{We}(z)$ gezeigt. Danach werden die relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}(We|_{z=h})$ mit den analytisch-theoretischen Vorhersagen der zugehörigen Dispersionsrelation verglichen. Abschließend wird überdies die räumliche Dämpfung der Wellenamplituden stromauf vom Auftreffpunkt den theoretischen Vorhersagen aus der entsprechenden Dispersionsrelation gegenübergestellt.

4.3.1. Wasser

Die erste Serie an Simulationen wurde mit dem bekanntermaßen NEWTONschen Fluid Wasser durchgeführt. Die Geschwindigkeiten W am Düsenaustritt wurden mit $W = 0.10\text{ms}^{-1}$, $W = 0.25\text{ms}^{-1}$, $W = 0.40\text{ms}^{-1}$ und $W = 0.50\text{ms}^{-1}$ festgelegt, wie in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Abbildung 4.5 zeigt Konturen der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ in der Nähe des Auftreffpunkts für die vier simulierten Fälle. Die verwendete numerische Auflösung in radialer Richtung (Δr) und axialer Richtung (Δz) sind ebenso eingetragen.

Im letzten Fall bei $W = 0.50\text{ms}^{-1}$ war eine sinnvolle statistische Auswertung der Wellenlänge $\lambda(\bar{r}, z)$ mit dem zugehörigen mittleren Radius $\bar{r}(z)$ im Bereich der Kapillarwellen nicht mehr möglich. Grund hierfür ist, dass die in diesem Fall (auch durch die theoretischen Dispersionsrelationen vorhergesagten) Wellenlängen für das verwendete Netz zu klein sind, diese also nicht mehr mit ausreichender Genauigkeit aufgelöst werden können. Abbildung 4.6 zeigt diesen Umstand anhand der axialen Verläufe des gestörten Strahlradius' $\hat{r}(z)$.

Man erkennt deutlich, dass mit steigender Geschwindigkeit W die Wellenlänge abnehmen und die stehenden Kapillarwellen sich zunehmend zum Auftreffpunkt hin konzentrieren. Im Falle mit der höchsten Geschwindigkeit $W = 0.50\text{ms}^{-1}$, dargestellt in Abbildung 4.6d werden die laut Theorie erwarteten kurzwelligen Kapillarwellen räumlich nicht mehr aufgelöst, sondern „verschmelzen“ in Folge der zu geringen numerischen Auflösung zu größeren hier unphysikalischen langwelligen Strukturen.

In Abbildung 4.6c bei $W = 0.40\text{ms}^{-1}$ lässt sich am Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ überdies erkennen, dass ab dem Aufprallpunkt bei $z = 0.03\text{m}$ die Amplitude der Wellen nach oben hin zunächst zunimmt, ab einer gewissen Höhe dann wieder abgedämpft wird.

Der aus den Simulationen gemäß (4.1) gewonnene mittlere Radius $\bar{r}(z)$ sowie die darauf basierte durch (4.2) bestimmte mittlere WEBERZahl $\overline{We}(z)$ werden in Abbildung 4.7 bzw. 4.8 mit den Vorhersagen der Theorie des ungestörten Fluidstrahls nach BERNOULLI, geliefert von (4.3) bzw. (4.4), verglichen. In allen Fällen sind die Abweichungen von den theoretischen Vorhersagen offenbar vernachlässigbar klein. Diese gute Übereinstimmung mit der Theorie rechtfertigt auch die Annahme, dass der mittels BERNOULLIgleichung und Kontinuitätsbedingung analytisch-theoretisch bestimmte Zustand im Auftreffpunkt ebenso zur Charakterisierung des ungestörten Grundzustands für die simulierten Fälle herangezogen werden kann.

Wie bereits in der Beschreibung der Auswertemethodik erwähnt, weisen die aus der Verteilung der Farbfunktion schlussendlich durch (4.5) erhaltenen Wellenlängen eine bestimmte Bandbreite auf. Das Ausmaß der Streuung ist in den Histogrammen für die relative Wellenlänge $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ (bezogen auf den theoretisch durch (4.3) bei $z = h$ vorhergesagten Radius) in Abbildung 4.9 ersichtlich. Es zeigt sich im Falle geringerer Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W eine größere relative Streuung ε , sowie ein allgemein größerer arithmetischer Mittelwert \bar{x} . Letzteres entspricht den Erwartungen.

Der Vergleich der relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ aller ausgewerteten Kapillarwellen aufgetragen über die WEBERZahl $We(z)|_{z=h}$ am Auftreffpunkt in Abbildung 4.10 zeigt, dass, verglichen mit den theoretischen Voraussagen der viskosen Dispersionsrelation, diese für die kleinste Strahlgeschwindigkeit etwas überschätzt, für die beiden höheren Geschwindigkeiten tendenziell unterschätzt werden. Dagegen liegen die experimentellen Daten generell etwas näher der Dispersionsrelation.

Der Verlauf der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ aufgetragen über die Strahlhöhe z wird in Abbildung 4.11 den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden gegenübergestellt. Die simulierten Verläufe entsprechen in keinem der Fälle den theoretischen Vorhersagen. Die Dämpfung der Amplitude mit dem Abstand zum Auftreffpunkt (bei $z = h$) ist in den Simulationen offenbar weit geringer ausgeprägt. Diese starke Diskrepanz deutet auf einen hierbei maßgeblichen Einfluss der Strahleinschnürung hin, welche von der Theorie nicht abgebildet wird. Des weiteren erkennt man, dass der Bereich des Auftretens der Kapillarwellen mit steigender WEBERZahl im Auftreffpunkt $We|_{z=h}$ in den Simulationen vom Auftreffpunkt kürzer wird. Die einen vorgegebenen Schwellenwert von 0.1 überragenden rot markierten Wellenberge in den theoretischen Vorhersagen machen dies deutlich. Diese Tendenz lässt sich auch in den Experimenten von RATZBERGER [16] in Abbildung 4.12 qualitativ erkennen.

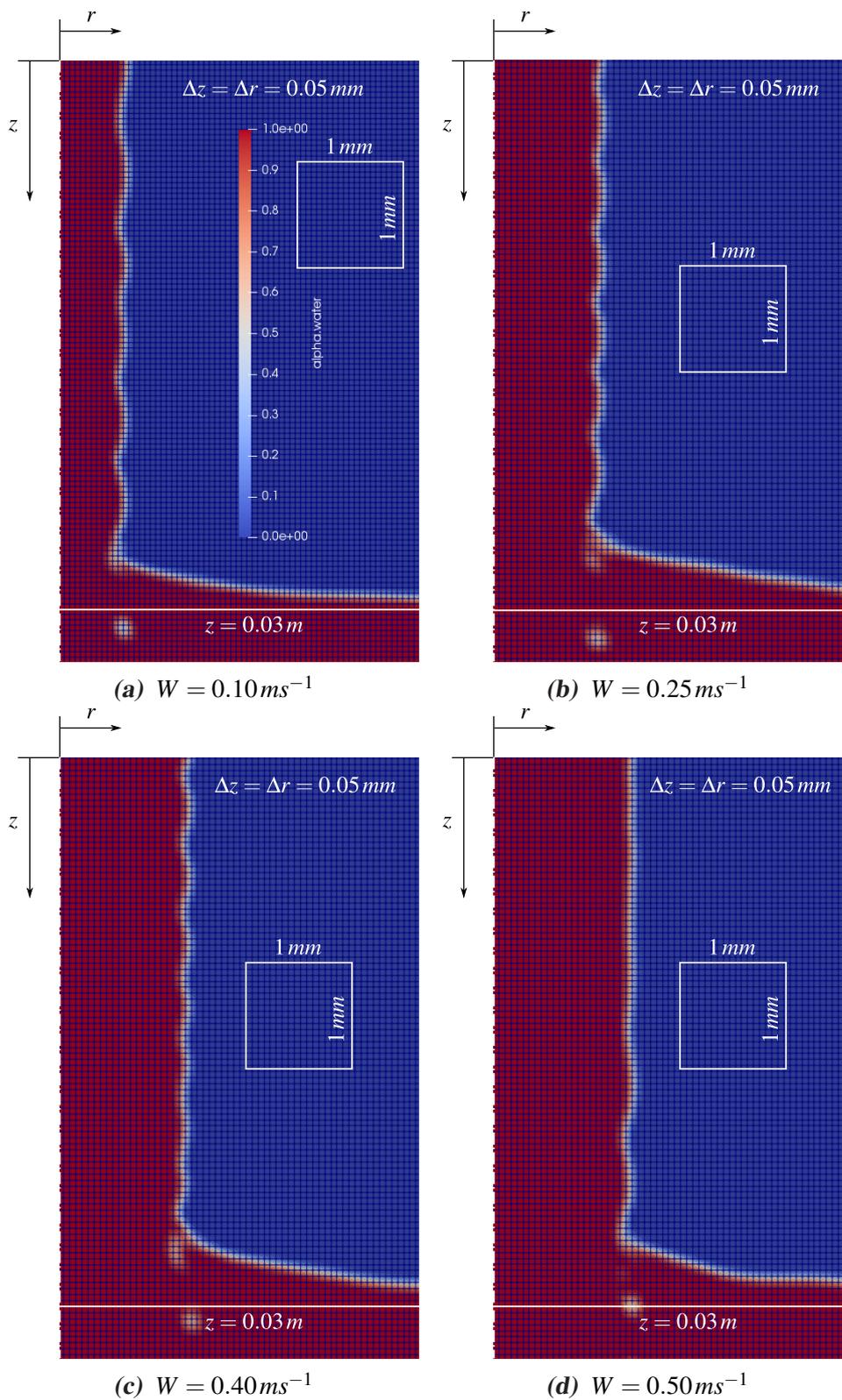


Abbildung 4.5 Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 \text{ m}$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W .

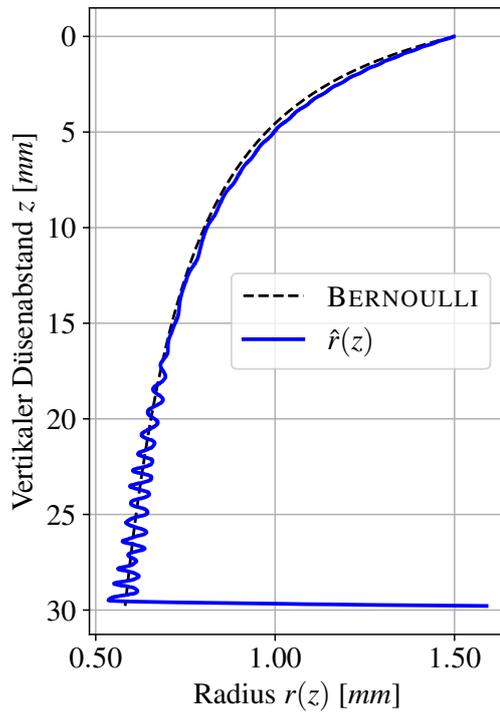
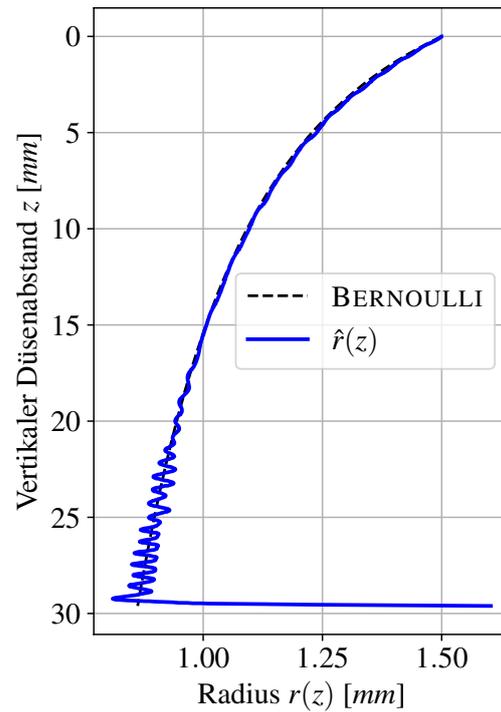
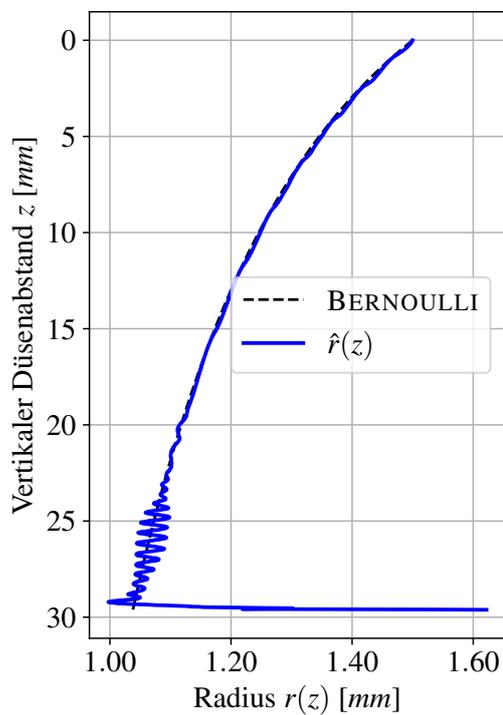
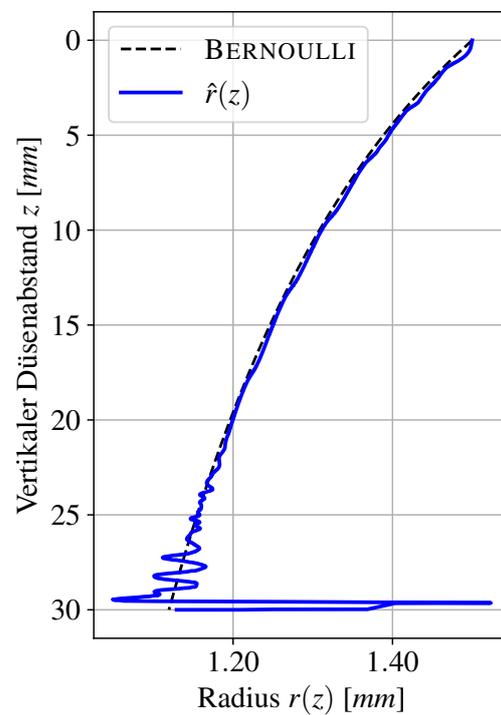
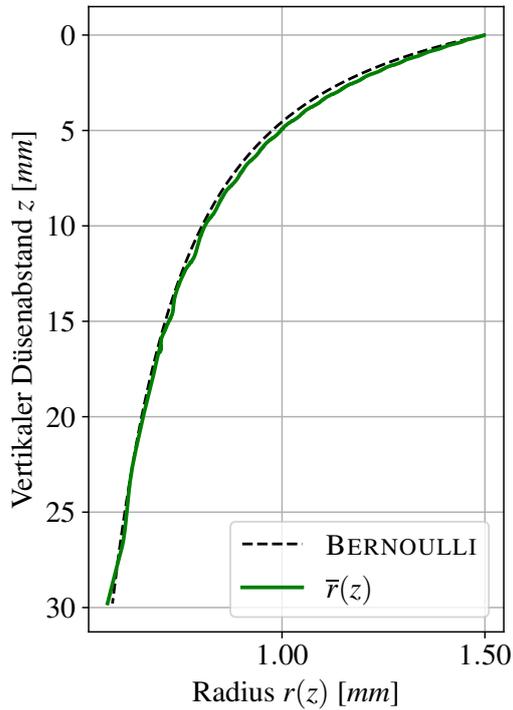
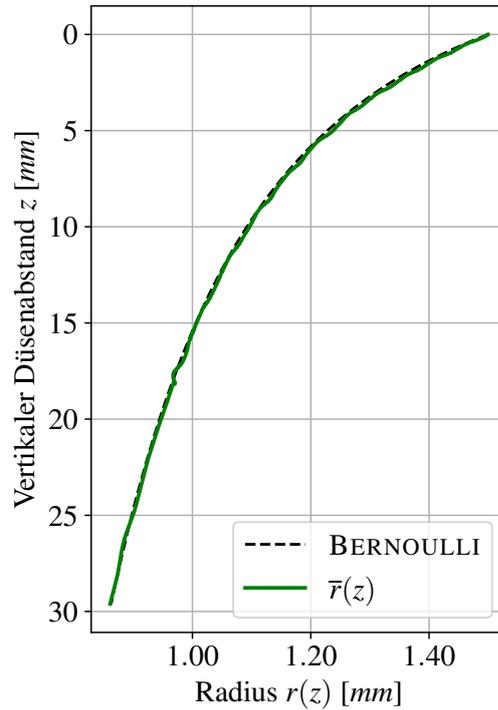
(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$ (b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$ (c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$ (d) $W = 0.50 \text{ ms}^{-1}$

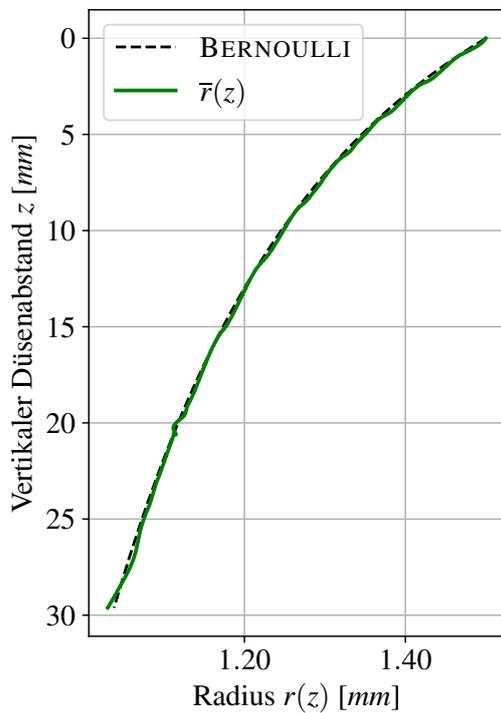
Abbildung 4.6 Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.



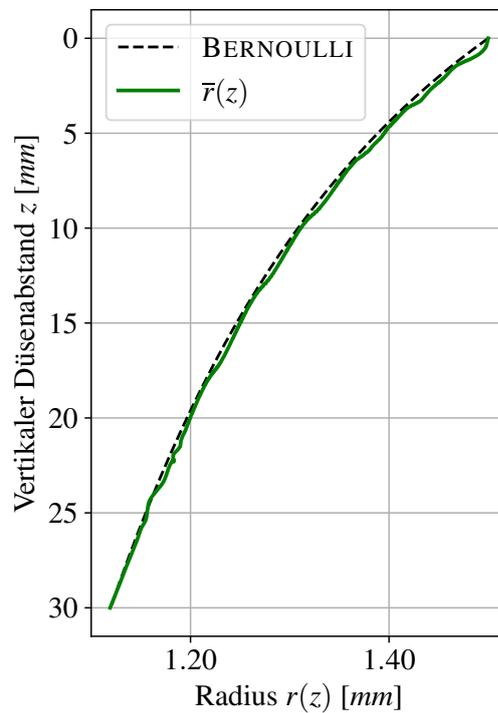
(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$



(b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$



(c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$



(d) $W = 0.5 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.7 Verlauf des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.

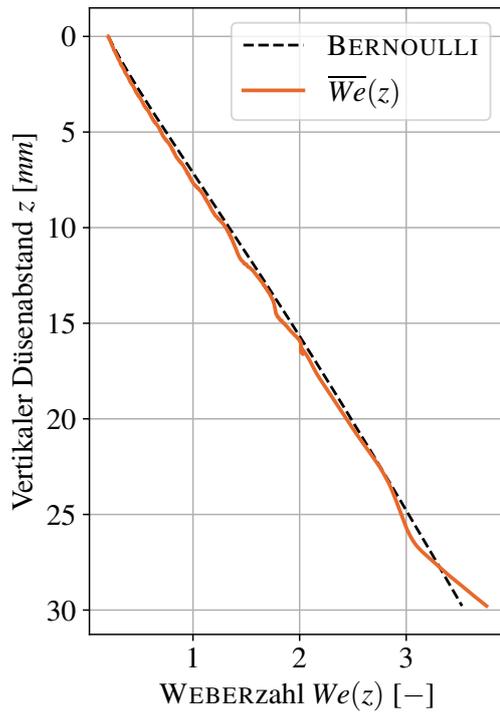
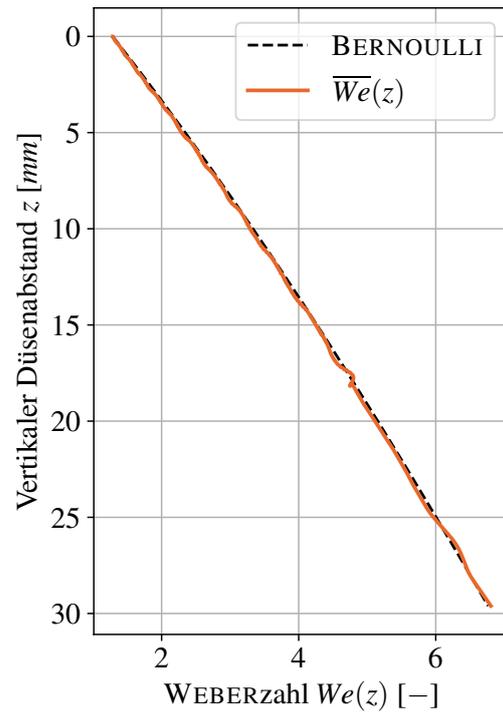
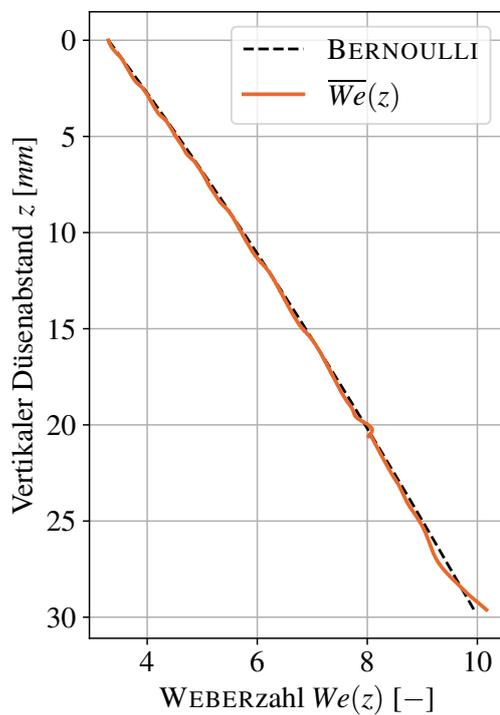
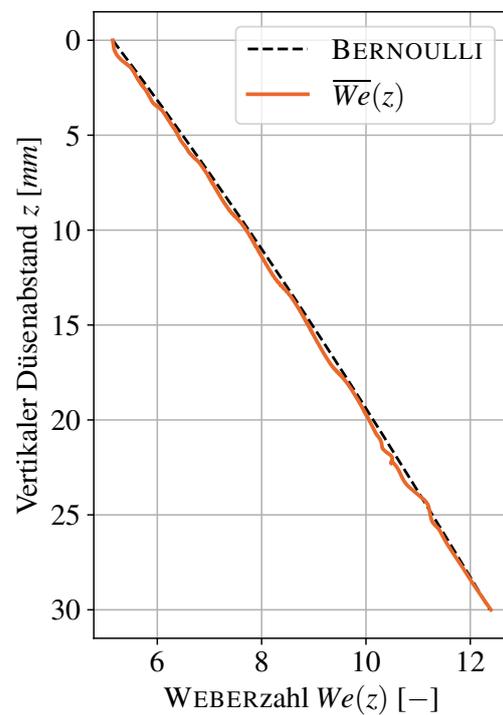
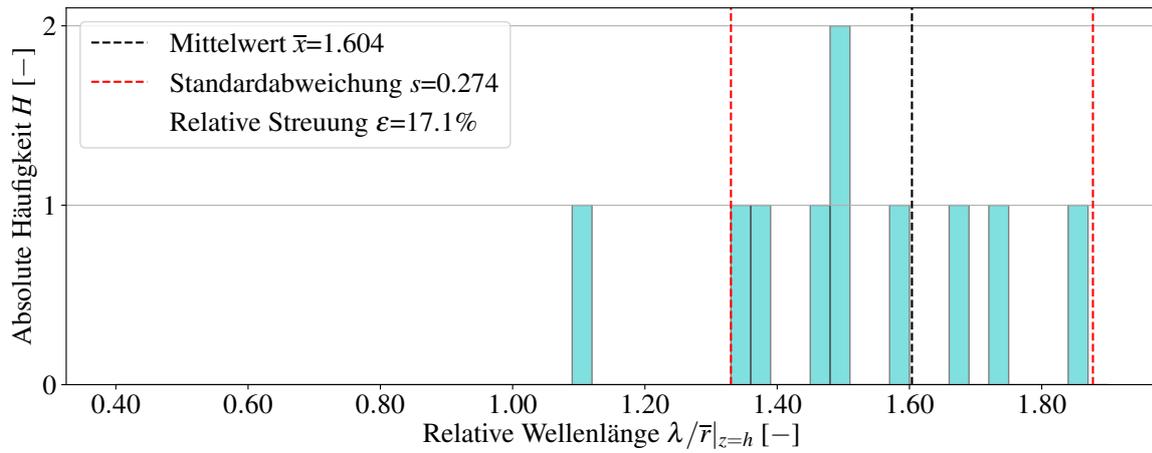
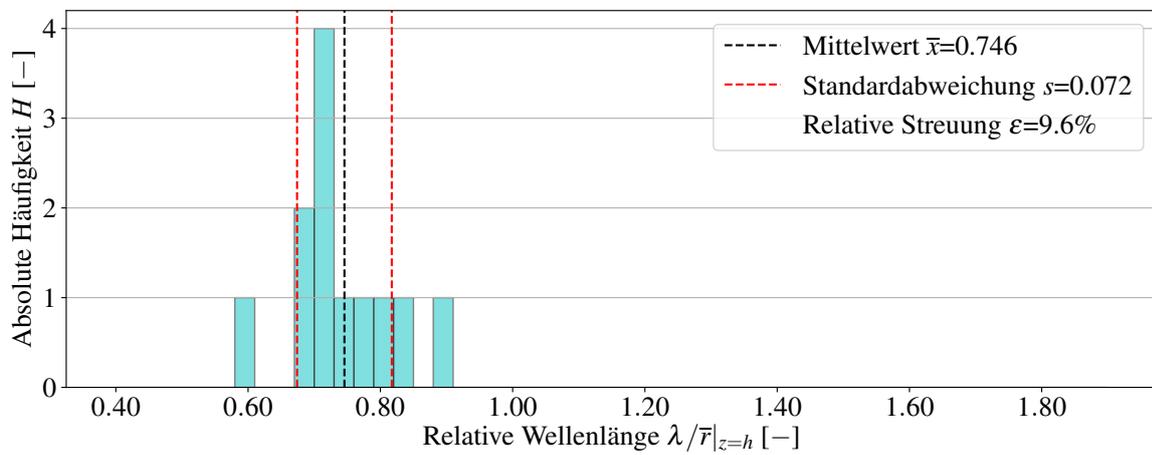
(a) $W = 0.10\text{ms}^{-1}$ (b) $W = 0.25\text{ms}^{-1}$ (c) $W = 0.40\text{ms}^{-1}$ (d) $W = 0.50\text{ms}^{-1}$

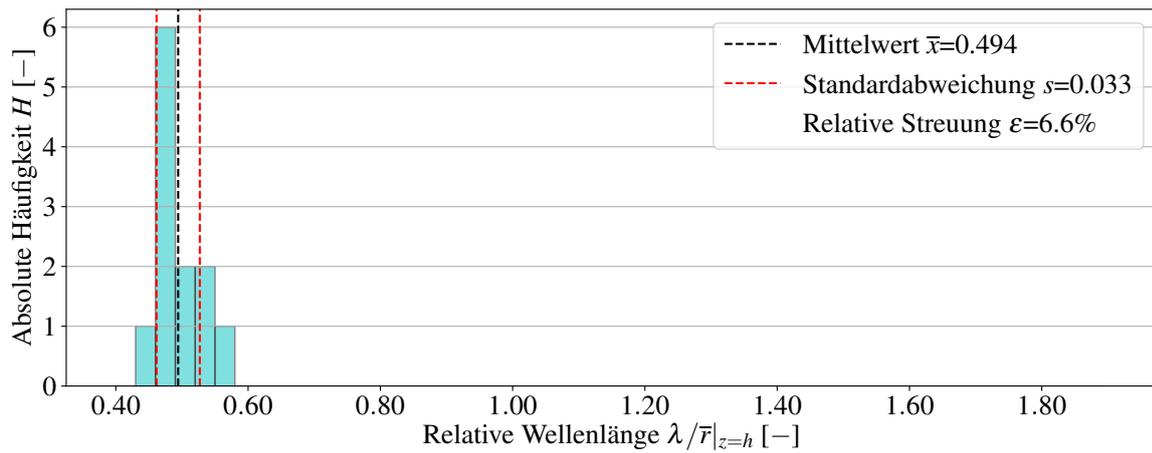
Abbildung 4.8 Verlauf der gemittelten WEBERzahl $\overline{We}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERzahl nach BERNOULLI.



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$



(b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$



(c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.9 Histogramm der aus den Simulationsergebnissen ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ der auftretenden Kapillarwellen für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s .

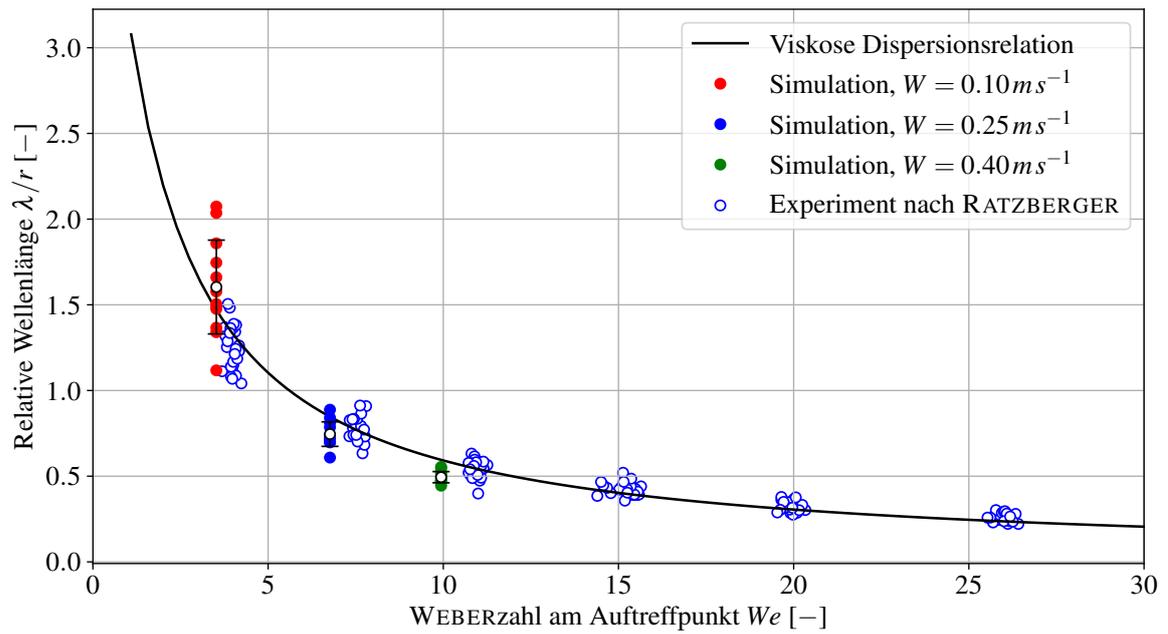
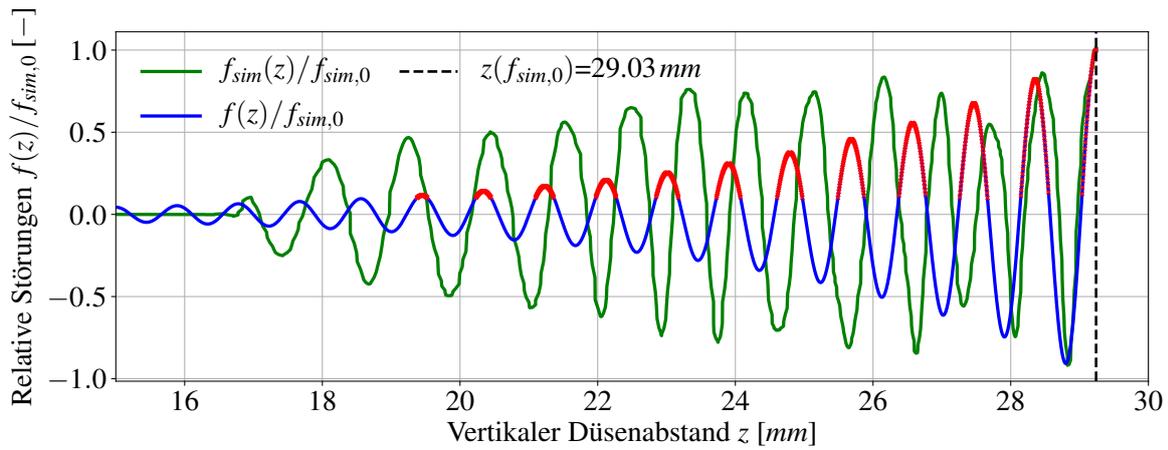
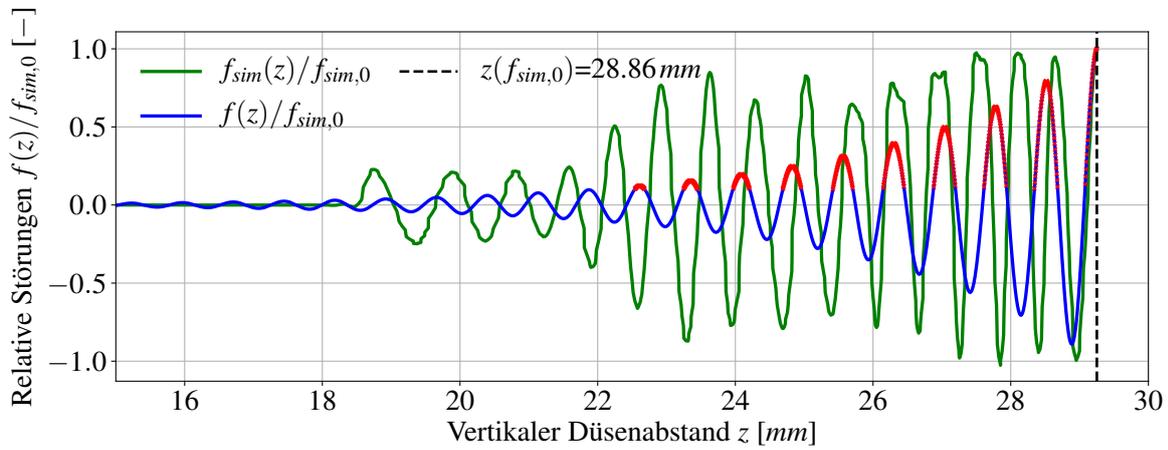


Abbildung 4.10 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskose Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W für Wasser.

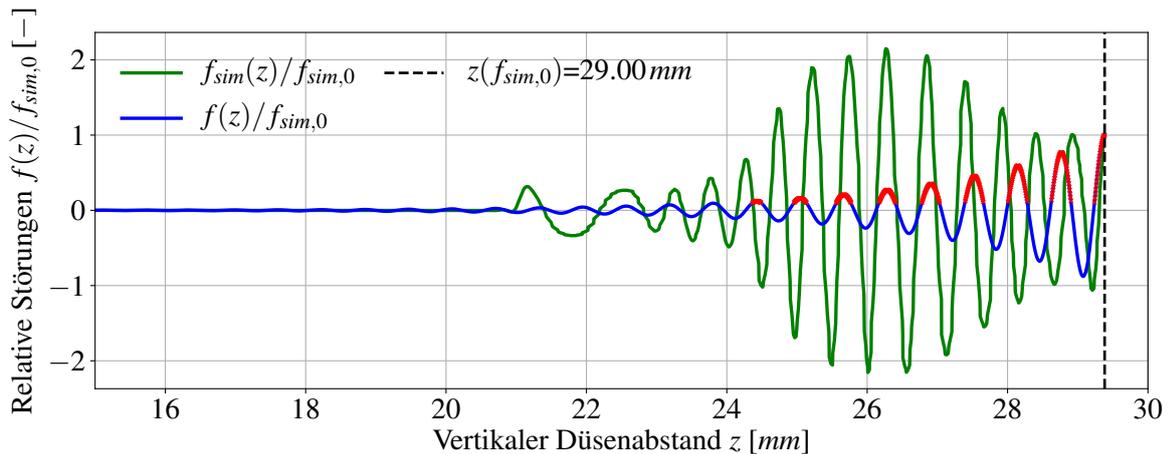
Kapitel 4. Numerische Ergebnisse



(a) $W = 0.10\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 3.52$



(b) $W = 0.25\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 6.77$



(c) $W = 0.40\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 9.94$

Abbildung 4.11 Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für Wasser für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W .

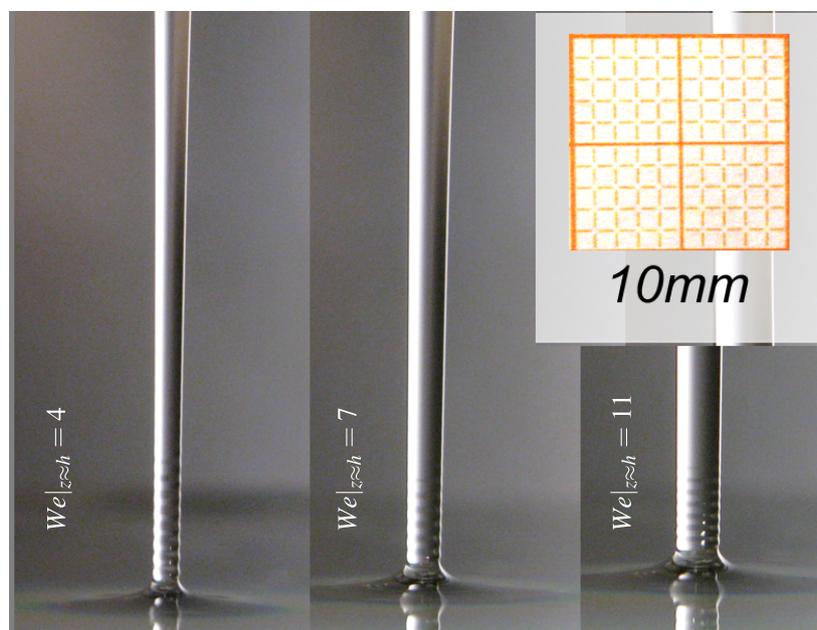


Abbildung 4.12 Fotoaufnahmen aus experimentellen Versuchen mit Wasser von RATZBERGER [16] bei den WEBERzahlen $We|_{z\approx h} = 4, 7, 11$ nahe dem Aufprallpunkt.

4.3.2. Glycerol/Wasser-Lösung

Die Simulationen mit der 11%-igen Glycerol/Wasser-Lösung, welche wie Wasser ein NEWTONsches Fluid darstellt, sollen insbesondere den Viskositätseinfluss auf die Kapillarwellen widerspiegeln. Die Viskosität gegenüber Wasser ist hier um das etwa 1.3-fache höher. Im Falle der Glycerol/Wasser-Lösung wurde die maximale Düsenaustrittsgeschwindigkeit von $W = 0.40 \text{ms}^{-1}$, aufgrund der Erkenntnisse der zuvor mit Wasser durchgeführten Simulationen, nicht überschritten, da die entsprechend den theoretischen Vorhersagen zu erwartenden Wellenlängen mit dem verwendeten Netz numerisch nicht mehr auflösbar sein würden.

Abbildung 4.13 zeigt die Konturen der Farbfunktion nahe dem Aufprallpunkt. Es zeigt sich hier qualitativ kaum ein Unterschied zu den Simulationsfällen für reines Wasser gezeigt in Abbildung 4.5. Wie aus den in Abbildung 4.14 dargestellten Verläufen des gestörten Strahlradius' $\hat{r}(z)$ ersichtlich, nehmen ähnlich zum Fall für reines Wasser bei einer Düsenaustrittsgeschwindigkeit von $W = 0.40 \text{ms}^{-1}$ die Amplituden stromauf vom Auftreffpunkt zunächst etwas zu, bevor sie ab einer gewissen Höhe stromauf gedämpft werden. Für die kleinste Düsenaustrittsgeschwindigkeit $W = 0.10 \text{ms}^{-1}$ erscheint die Dämpfung der Amplituden des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ bei der Glycerol/Wasser-Lösung stärker als bei Wasser, was sich vermutlich durch die höhere Viskosität erklären lässt.

Die Abweichungen des aus der simulierten Farbfunktion gewonnenen mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ in Abbildung 4.15 sowie der darauf basierten mittleren WEBERZahl $\overline{We}(z)$ in Abbildung 4.16 von den entsprechenden theoretischen Vorhersagen nach BERNOULLI fallen wie im Fall von Wasser wieder nur sehr gering aus. Die ungestörte Grundströmung lässt sich offensichtlich auch für das zähere Fluid der Glycerol/Wasser-Lösung sehr genau durch die theoretisch-analytischen Gleichungen nach BERNOULLI beschreiben.

Die Histogramme der relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ in Abbildung 4.17 zeigen auch im Falle der Glycerol/Wasser-Lösung bei niedrigeren Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W eine höhere relative Streuung ε , sowie einen größeren arithmetischen Mittelwert \bar{x} .

Betrachtet man die aus den Simulationen hervorgehenden relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ in Abhängigkeit von der WEBERZahl im Auftreffpunkt $We(z)|_{z=h}$, wie in Abbildung 4.18 dargestellt, so fällt auf, dass die Abweichungen von der theoretischen Vorhersage der viskosen Dispersionsrelation etwas geringer ausfallen, verglichen mit den Simulationen von Wasser. Die experimentellen Daten zeigen auch hier eine etwas bessere Übereinstimmung mit der Theorie, wobei die gemessenen Werte, ähnlich zum Fall von Wasser, stets leicht über den theoretischen Vorhersagen liegen.

Abbildung 4.19 zeigt den Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ gegenüber den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden entlang der axialen Strahlposition z . Ähnlich den Simulationen mit Wasser sagen die Simulationen auch bei der Glycerol/Wasser-Lösung deutlich höhere Amplituden vorher, jedoch eine ähnlich stark ausgeprägte Abnahme des räumlichen Auftretens der Kapillarwellen stromauf vom Aufprallpunkt. Abbildung 4.20 zeigt zudem eine Fotoaufnahme aus den Experimenten von RATZBERGER [16] bei einer WEBERZahl $We|_{z \approx h} = 10$ nahe dem Aufprallpunkt. Man erkennt aus dieser Aufnahme, dass die Wellenamplituden stromauf des Aufprallpunktes monoton abnehmen. Dieses Verhalten, welches auch der theoretisch-analytischen Vorhersage der Dispersionsrelation entspricht, wird von der Simulation bei der selben WEBERZahl am Auftreffpunkt $We|_{z=h} = 10$ nicht in gleicher Weise abgebildet, was sich am gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ in Abbildung 4.14c erkennen lässt.

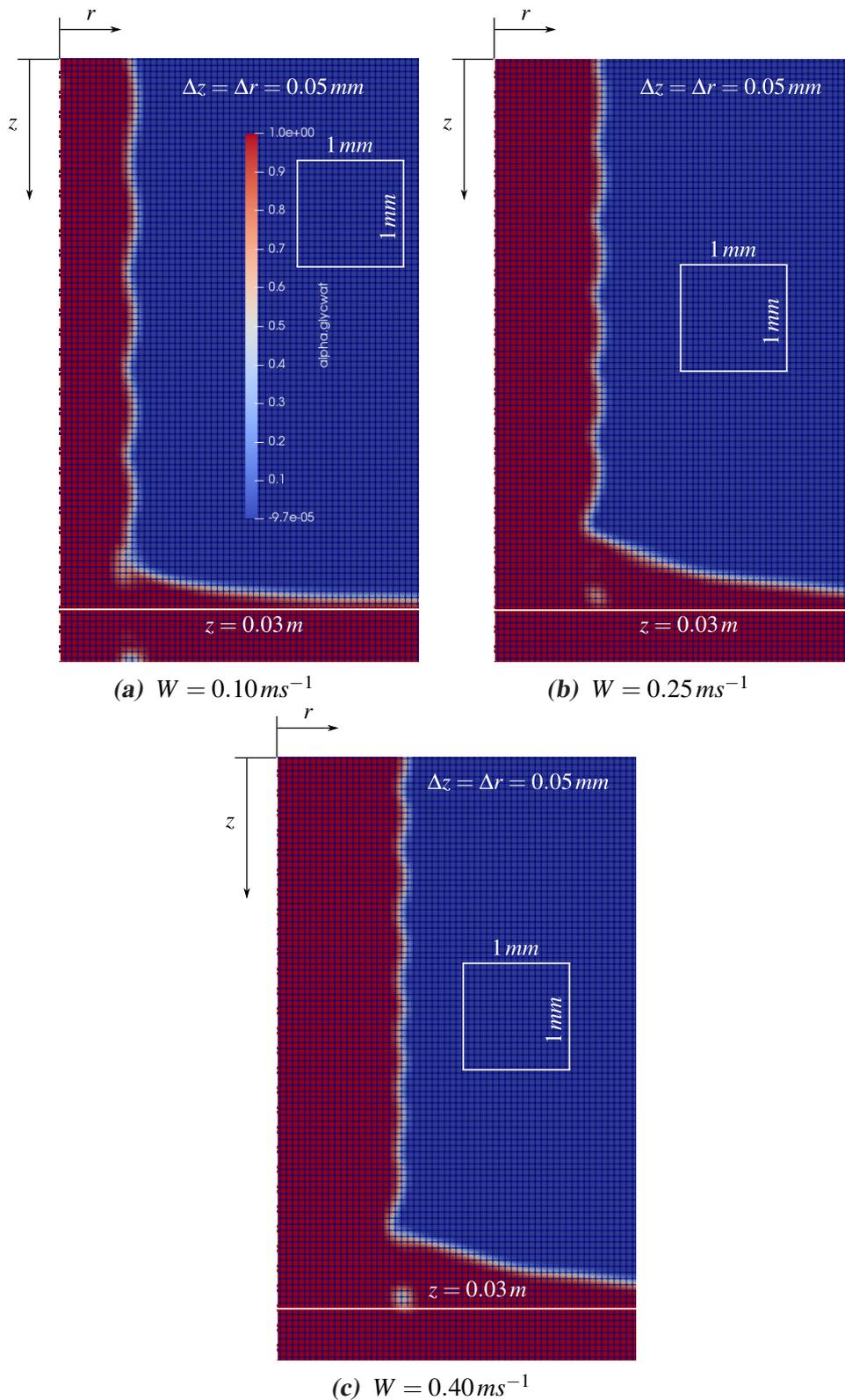
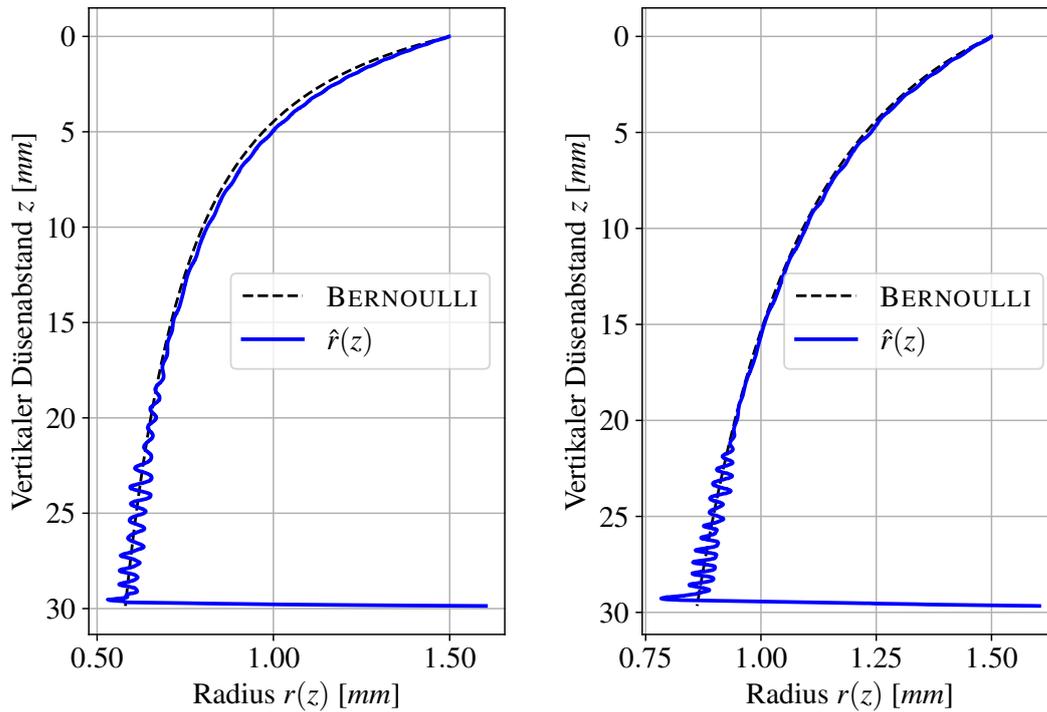
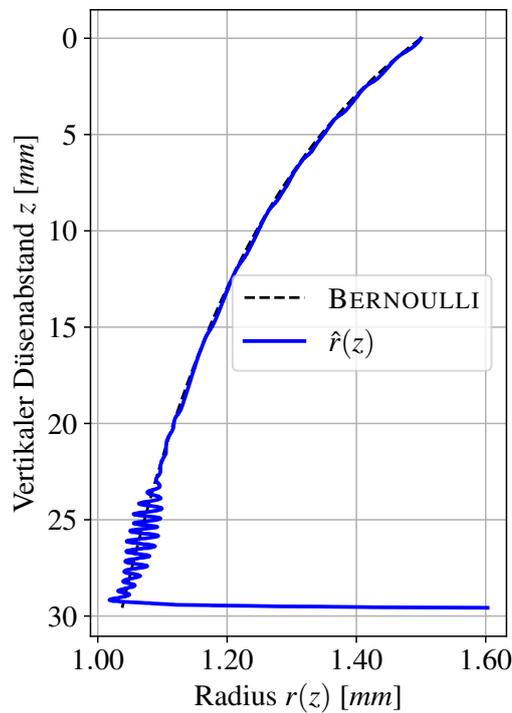


Abbildung 4.13 Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 \text{ m}$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W .



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$

(b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$



(c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.14 Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.

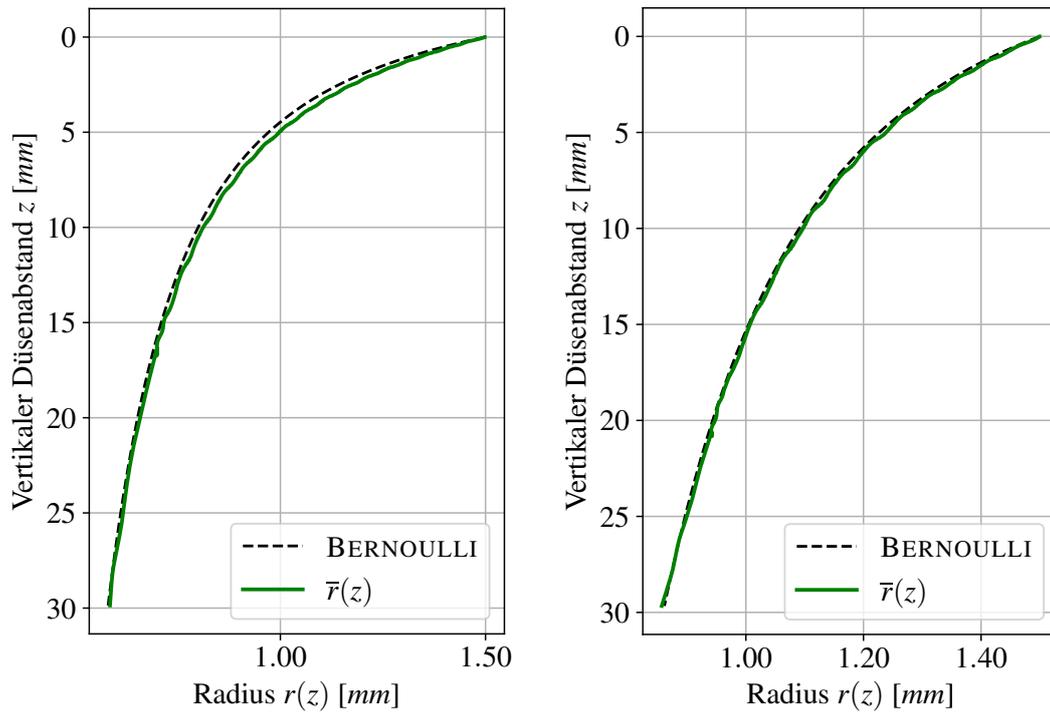
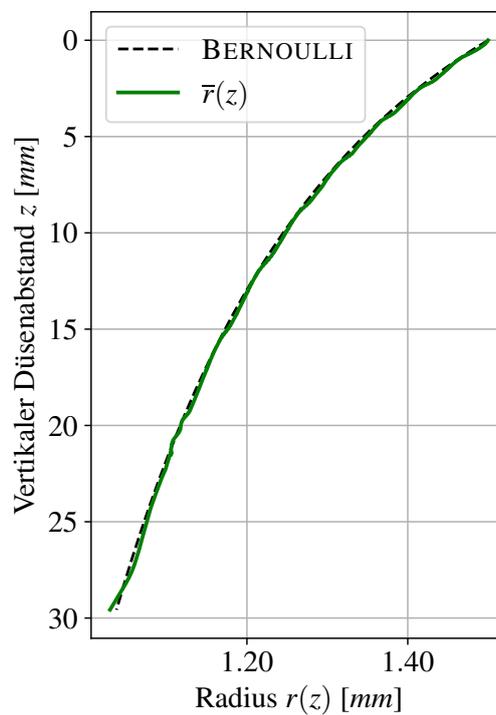
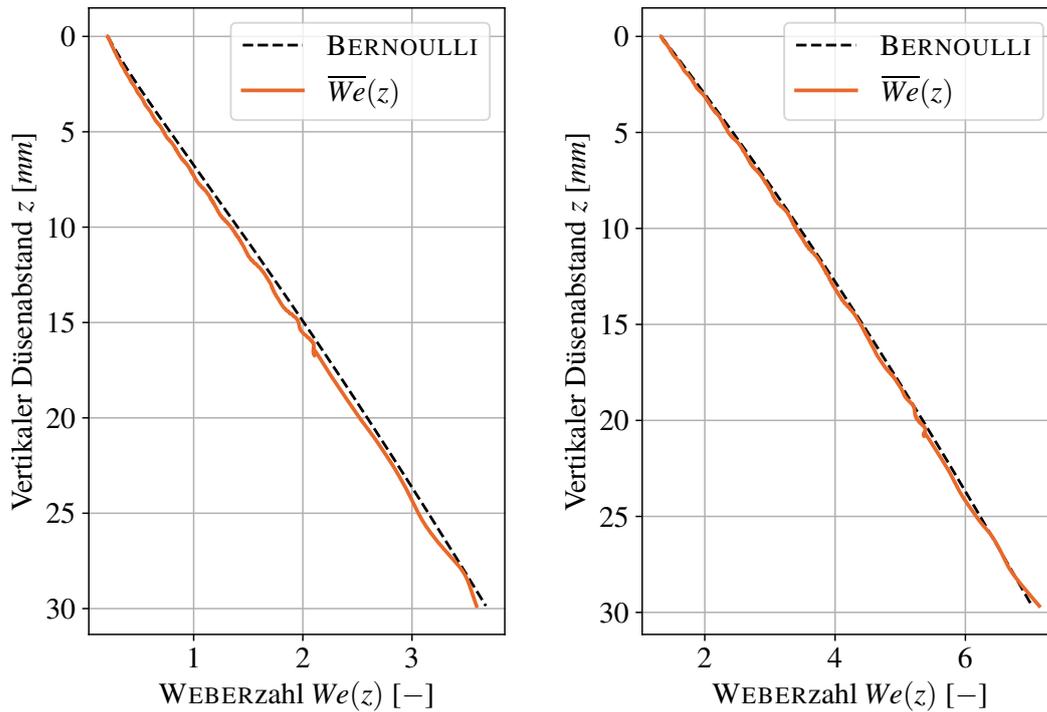
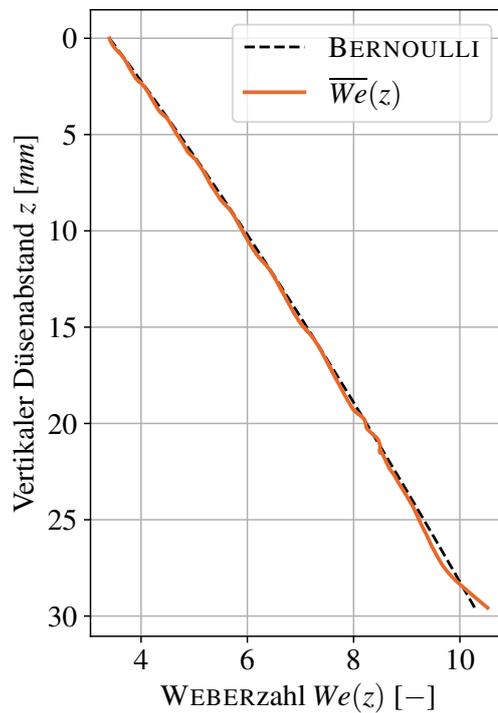
(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$ (b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$ (c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.15 Verlauf des mittleren Radius $\bar{r}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$

(b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$



(c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.16 Verlauf der gemittelten WEBERZahl $\overline{We}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERZahl nach BERNOULLI.

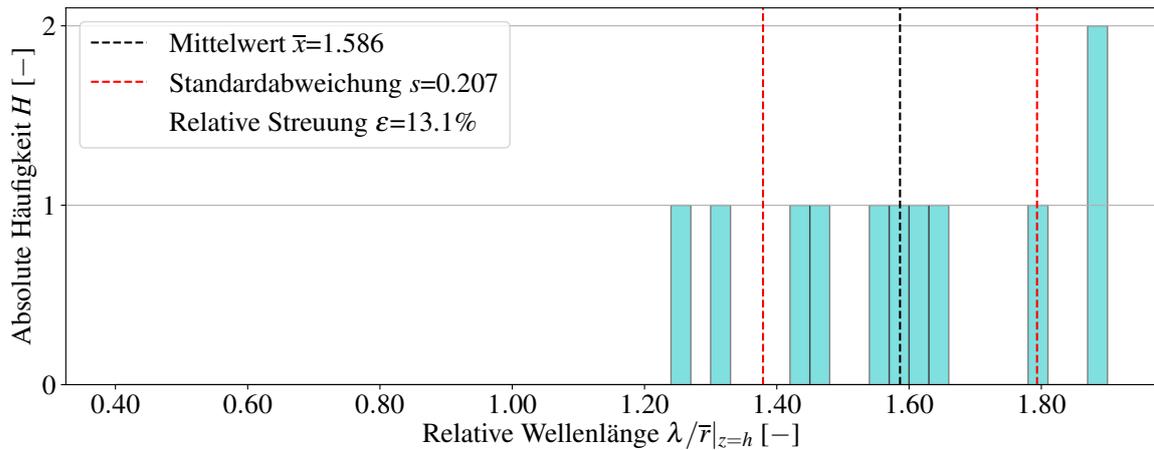
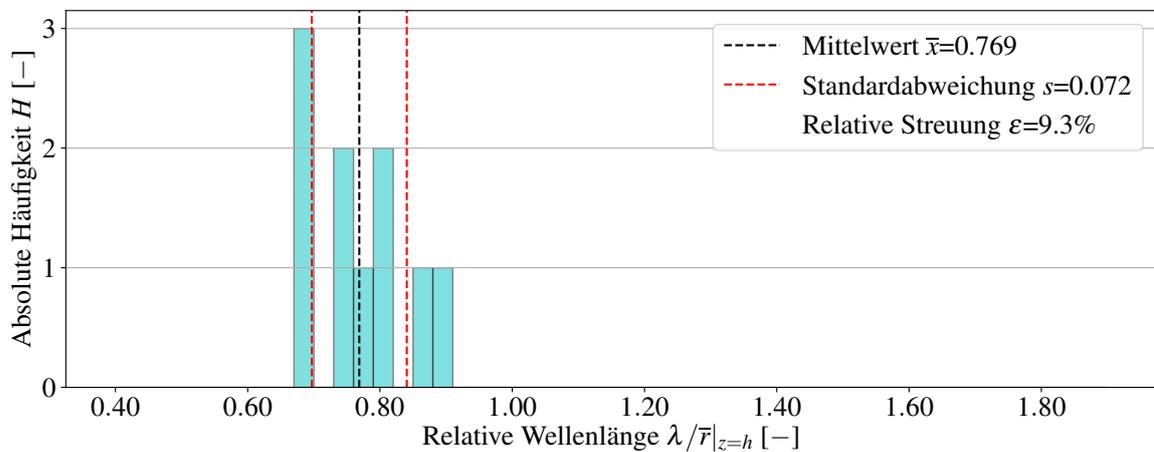
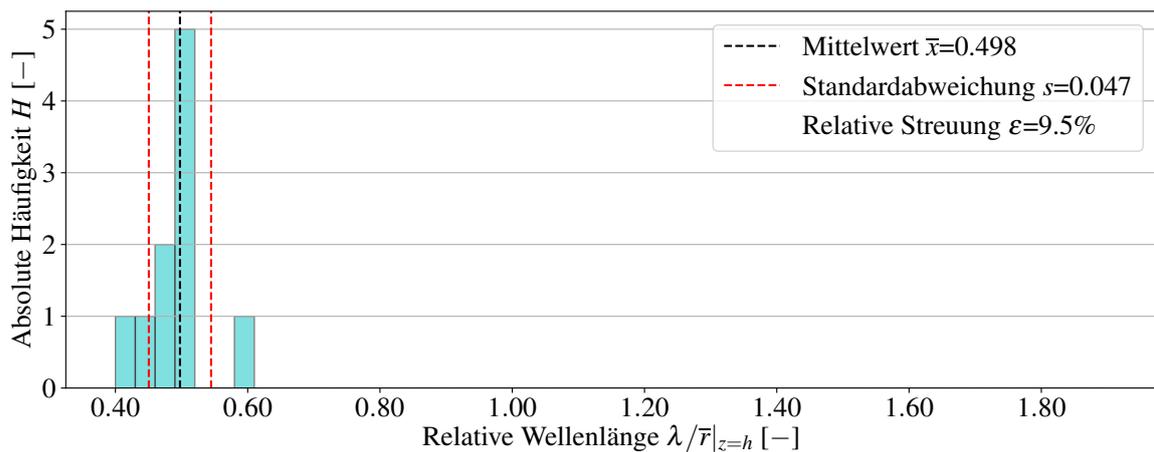
(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$ (b) $W = 0.25 \text{ ms}^{-1}$ (c) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$

Abbildung 4.17 Histogramm der ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{\lambda}|_{z=0.03}$ der auftretenden Kapillarwellen der Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s .

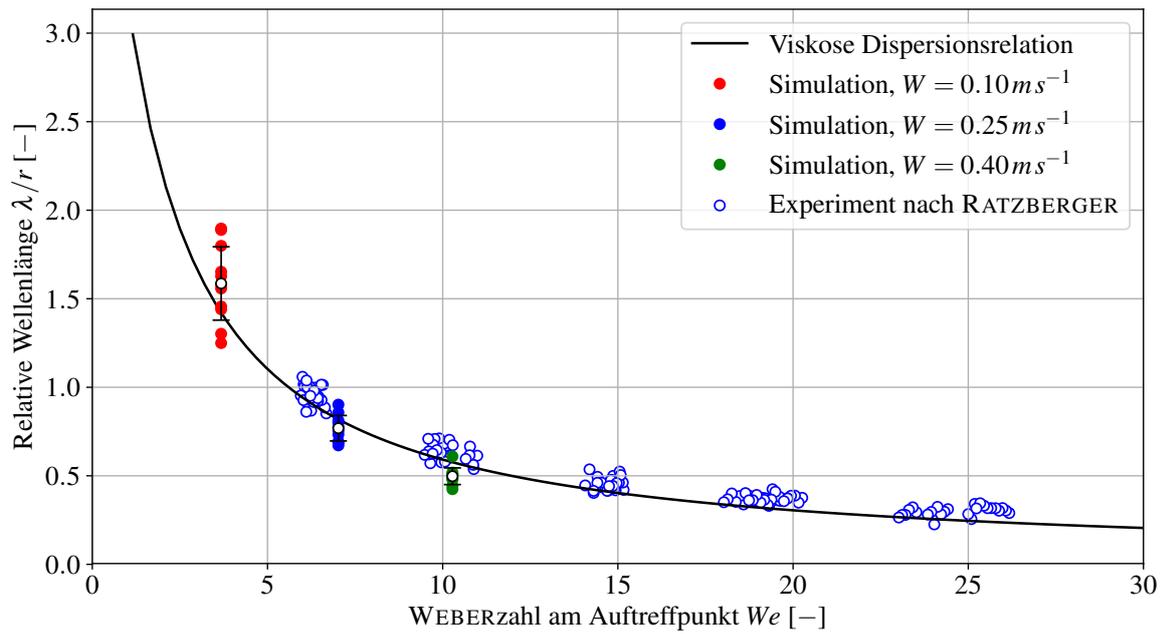


Abbildung 4.18 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskose Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W für die Glycerol/Wasser-Lösung.

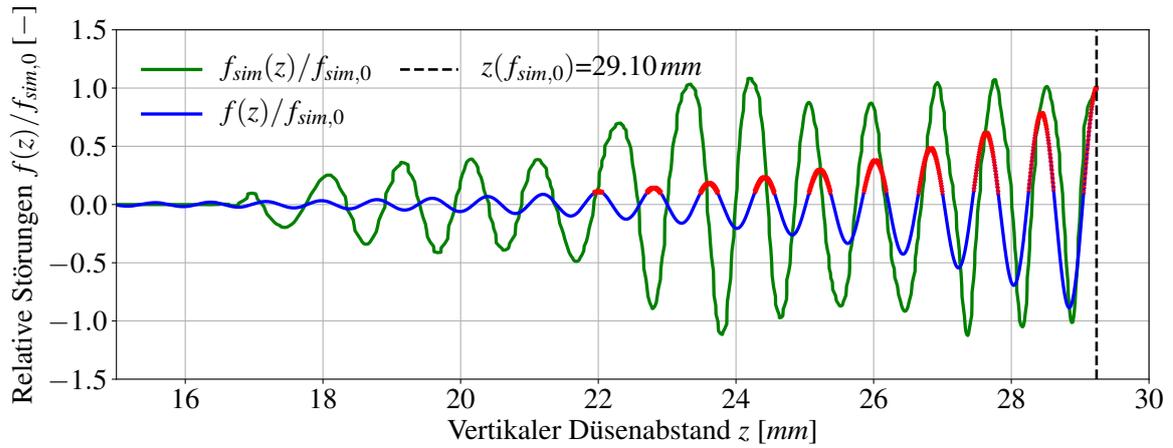
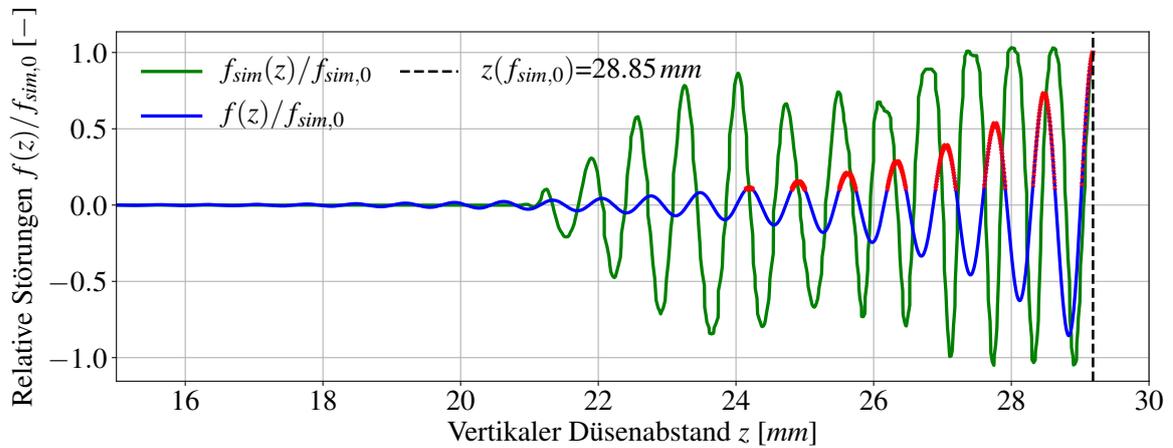
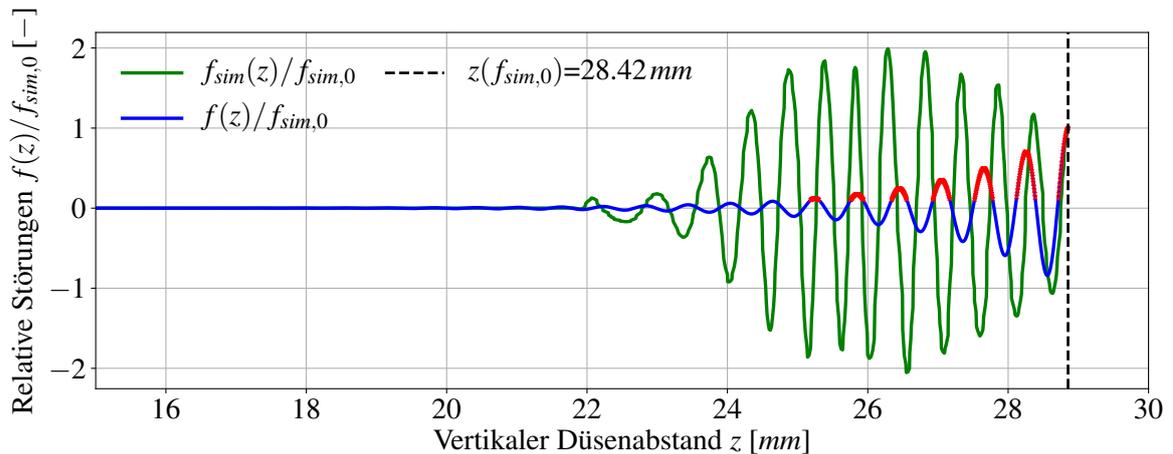
(a) $W = 0.10\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 3.68$ (b) $W = 0.25\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 7.02$ (c) $W = 0.40\text{ ms}^{-1}$, $We|_{z=h} = 10.28$

Abbildung 4.19 Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für die Glycerol/Wasser-Lösung für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W .

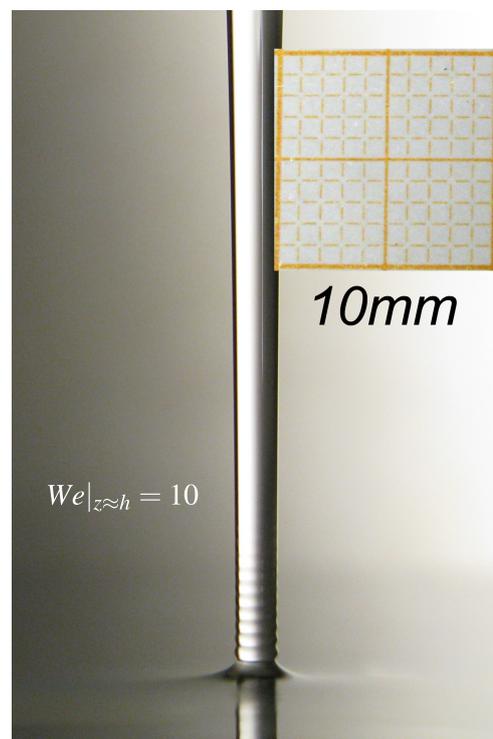


Abbildung 4.20 Fotoaufnahme aus Versuchen mit der Glycerol/Wasser-Lösung von RATZBERGER [16] bei einer WEBERzahl $We|_{z \approx h} = 10$ nahe dem Aufprallpunkt.

4.3.3. Prästol 2540/Wasser-Lösung

Die durchgeführten Simulationen der Prästol 2540/Wasser-Lösung, welche ein nicht-NEWTONsches, viskoelastisches Fluid darstellt, gestalteten sich, verglichen mit Wasser und der Glycerol/Wasser-Lösung, simulationstechnisch deutlich schwieriger. Mit zunehmendem Einfluss der Elastizität, bedingt durch einen höheren Anteil an Prästol 2540, wurde es zusehends schwieriger eine stabile numerische Lösung zu gewährleisten. Diese Problematik ist typisch für die Simulation viskoelastischer Fluide. Wie in Tabelle 4.1 zusammengefasst wurden konkret drei Fälle simuliert, nämlich mit einem Prästol Massenanteil $m = 10 \text{ ppm}$ und einer Düsenaustrittsgeschwindigkeit $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$, einen Massenanteil 25 ppm und $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$, sowie einen Massenanteil $m = 60 \text{ ppm}$ und $W = 0.75 \text{ ms}^{-1}$.

Die in Abbildung 4.21 gezeigten Konturen der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ lassen erkennen, dass sich im letzten Fall bei einem Massenanteil von $m = 60 \text{ ppm}$ und einer Düsenaustrittsgeschwindigkeit $W = 0.75 \text{ ms}^{-1}$ keine klar erkennbaren Kapillarwellen mehr ausbildeten. Der Strahl erscheint in dieser Darstellung als glatt wie in Abbildung 4.21c erkennbar ist. Diese Abwesenheit von stehenden Kapillarwellen bei ähnlichem Auftreffzustand wurde auch in den Experimenten von RATZBERGER [16] beobachtet. Das Nichtauftreten von Kapillarwellen entspricht in diesem Fall mit dem höchsten Prästolanteil offensichtlich der Realität und ist der unzulänglichen numerischen Beschreibung der Phasengrenzfläche anzulasten. Mangels auswertbarer Kapillarwellen wurde dieser Fall schließlich in der weiteren Analyse der Ergebnisse ausgeschlossen.

Abbildung 4.21a und 4.21b lassen überdies erkennen, dass der Flüssigkeitsspiegel, verglichen mit Wasser und der Glycerol/Wasser-Lösung, am Auftreffpunkt bei $z = 0.03 \text{ m}$ durch das Wirken der Kapillarkraft nur wenig bis gar nicht angehoben wird. Diese Beobachtung ist durchaus übereinstimmend mit den experimentellen Ergebnissen von RATZBERGER [16], wo mit steigendem Massenanteil m sogar ein lokales Absinken der Flüssigkeitsoberfläche am Aufprallpunkt unter $z = 0.03 \text{ m}$ auftritt. Dieser augenscheinliche Einfluss der Elastizität wird offenbar auch von der Simulation abgebildet.

Die Verläufe des aus der Simulation erhaltenen mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ in Abbildung 4.23 sowie der darauf basierten mittleren WEBERzahl $\overline{We}(z)$ in Abbildung 4.24 zeigen auch im Fall der Prästol 2540/Wasser-Lösung eine gute Übereinstimmung mit der theoretischen Beschreibung nach BERNOULLI. Die Abweichungen fallen, verglichen mit den beiden NEWTONschen Fluiden, jedoch etwas größer aus.

Die in Abbildung 4.25 dargestellten Histogramme zeigen ähnliche Tendenzen wie für die NEWTONschen Fluide. Die Bandbreite der Streuung der simulatorisch erhaltenen relativen Wellenlängen $\bar{r}/\lambda|_{z=h}$ sinkt mit steigender Düsenaustrittsgeschwindigkeit W bzw. WEBERzahl im Auftreffpunkt.

Die relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r}|_{z=h}$ in Abhängigkeit der WEBERzahlen im Auftreffpunkt $We(z)|_{z=h}$ in Abbildung 4.26 lassen erkennen, dass die Ergebnisse im Mittel, verglichen mit den Fällen der NEWTONschen Fluide, näher an den theoretischen Vorhersagen der entsprechenden viskoelastischen Dispersionsrelation liegen. Im Falle der höheren Düsenaustrittsgeschwindigkeiten $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$ liegt der Mittelwert der numerischen Resultate sogar genau auf dem Wert der theoretischen Vorhersagen, wogegen die experimentellen Daten von RATZBERGER [16] tendenziell durchwegs etwas höher liegen.

Der Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ gegenüber den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden entlang der axialen Strahlposition z , wie in Abbildung 4.27 dargestellt, zeigt auch im Falle der Prästol 2540/Wasser-Lösung durchwegs höher vorhergesagte Amplituden verglichen mit der theoretisch-analytischen Lösung der viskoelastischen Dispersions-

Kapitel 4. Numerische Ergebnisse

relation, d.h. die Dämpfung wird auch im Falle der viskoelastischen Flüssigkeit offenbar geringer vorhergesagt verglichen zur Theorie. Des weiteren zeigt ein optischer Vergleich mit entsprechenden experimentellen Aufnahmen von RATZBERGER [16] in Abbildung 4.28, dass die bei steigender WEBERZahl sowohl numerisch als auch theoretisch vorhergesagte Reduktion des axialen Bereichs, wo die Kapillarwellen auftreten, qualitativ gut mit der Realität übereinstimmt. Die theoretischen Vorhersagen der Dispersionsrelation sagen dabei wiederum eine weitaus stärkere räumliche Abnahme der Wellenamplituden vorher.

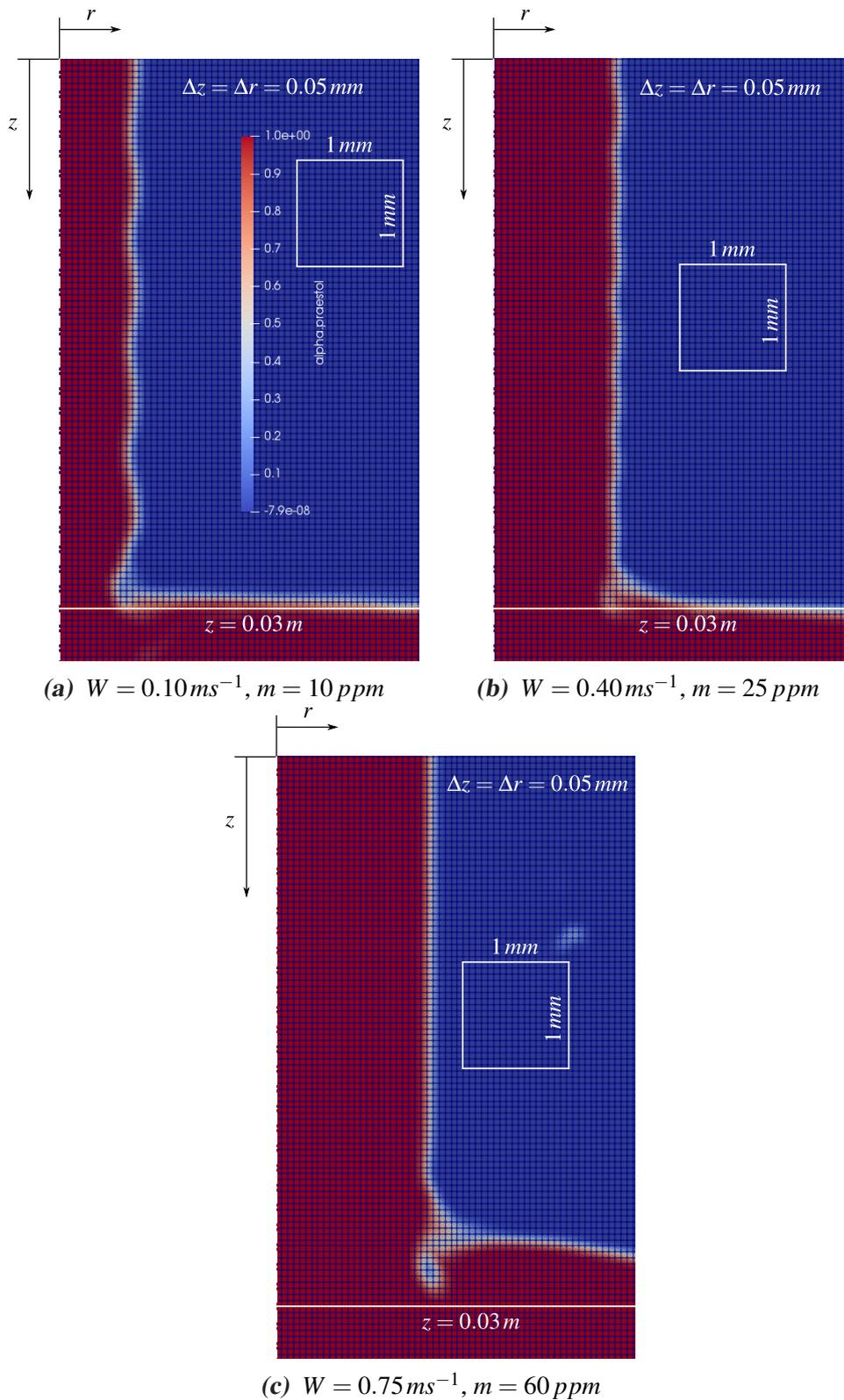
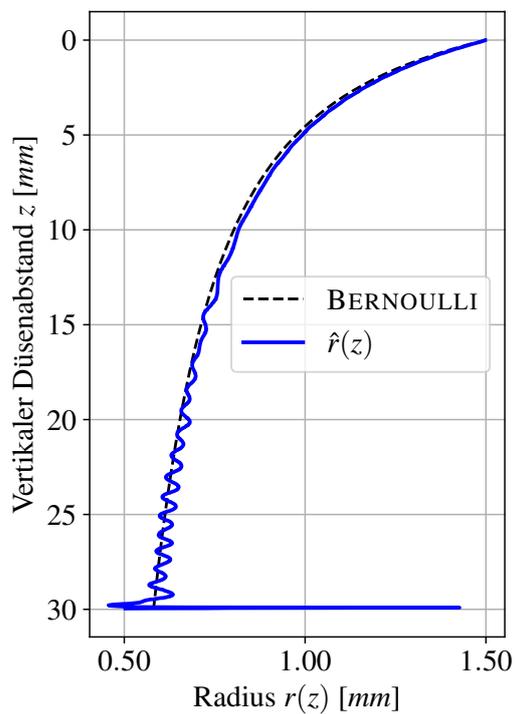
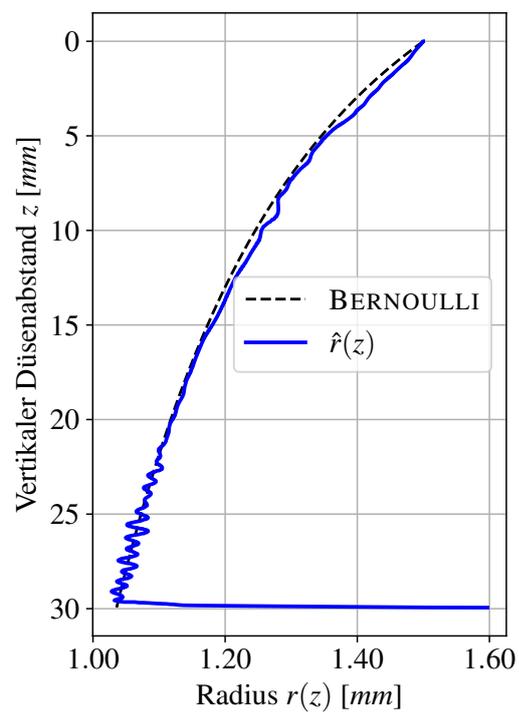


Abbildung 4.21 Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 \text{ m}$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m .



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$, $m = 10 \text{ ppm}$



(b) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$, $m = 25 \text{ ppm}$

Abbildung 4.22 Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.

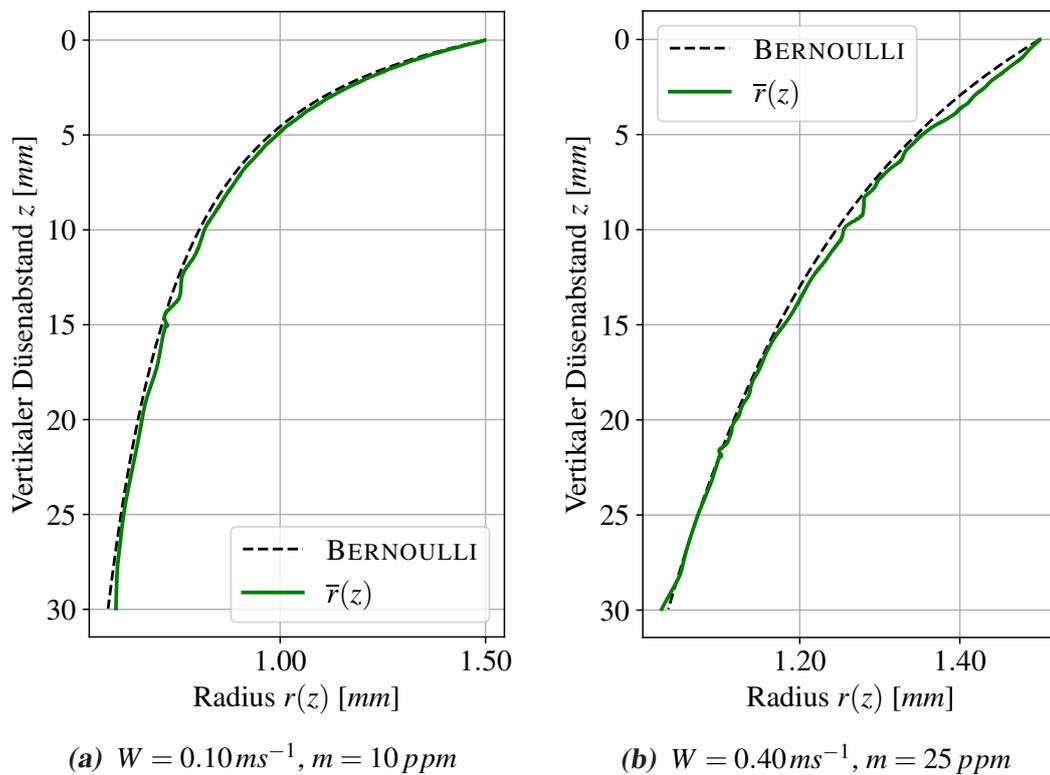
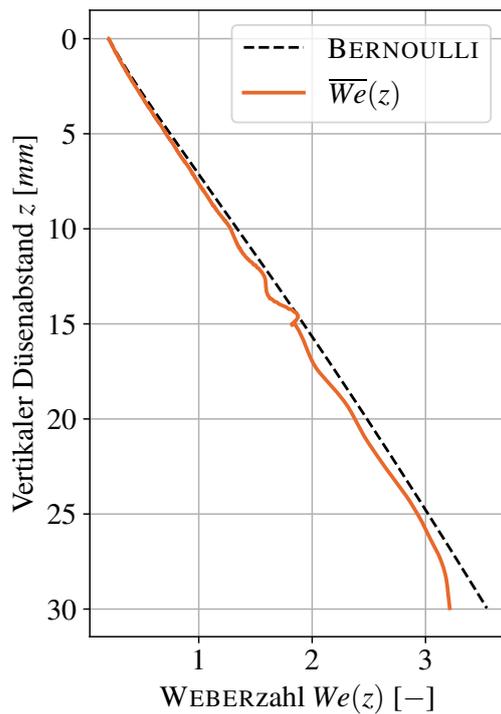
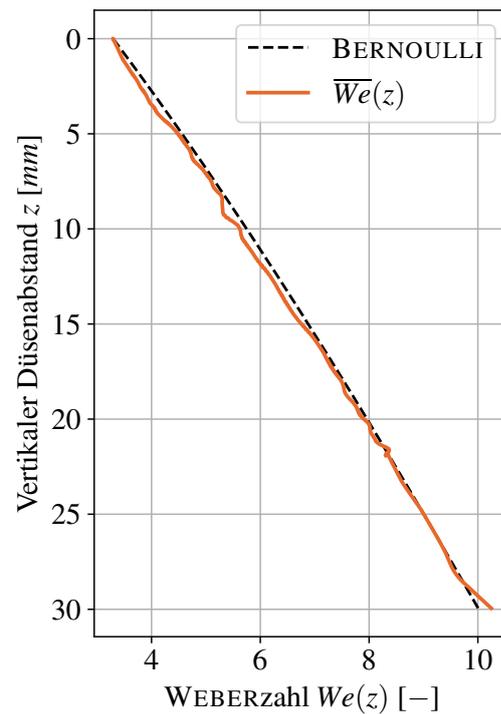


Abbildung 4.23 Verlauf des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ für die Prüstol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$, $m = 10 \text{ ppm}$



(b) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$, $m = 25 \text{ ppm}$

Abbildung 4.24 Verlauf der gemittelten WEBERZahl $\overline{We}(z)$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERZahl nach BERNOULLI.

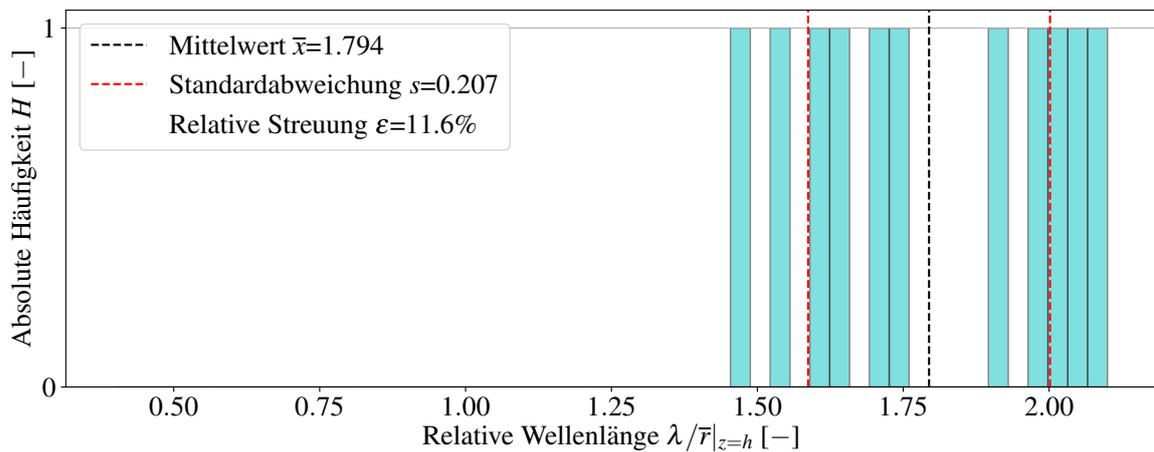
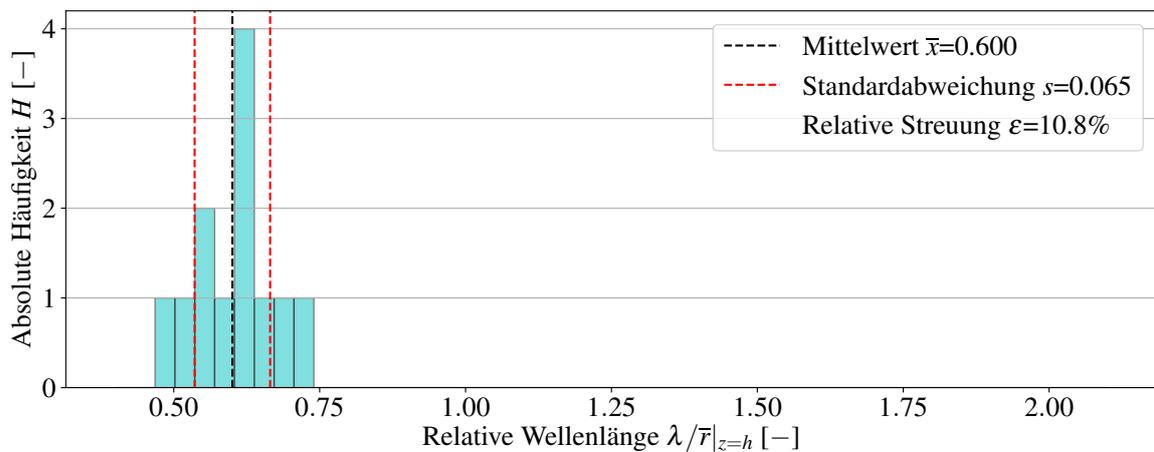
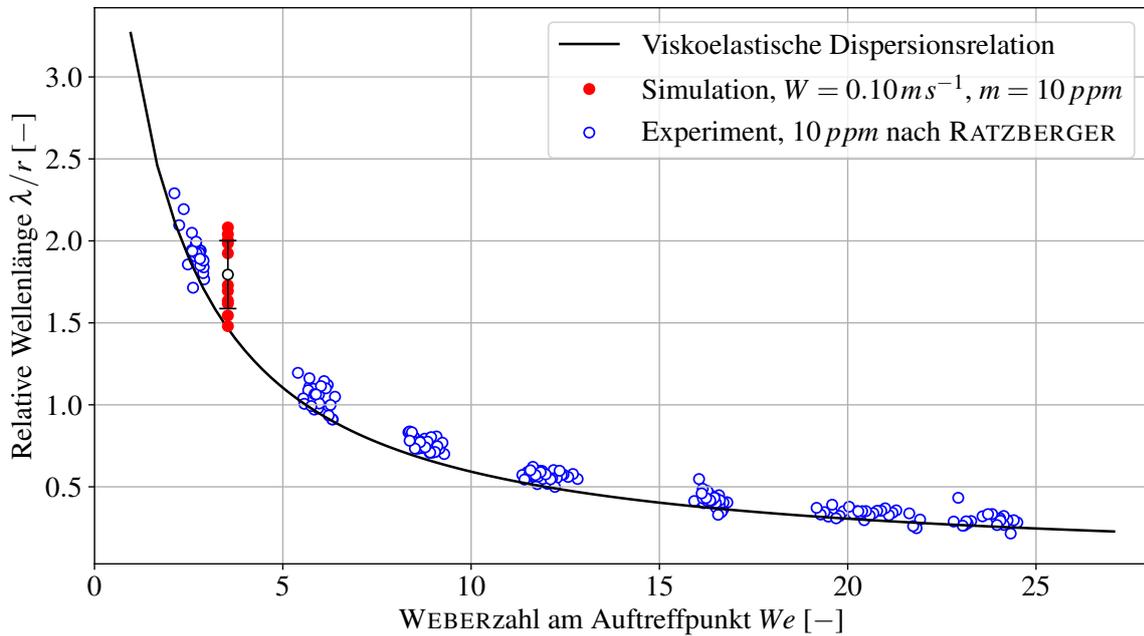
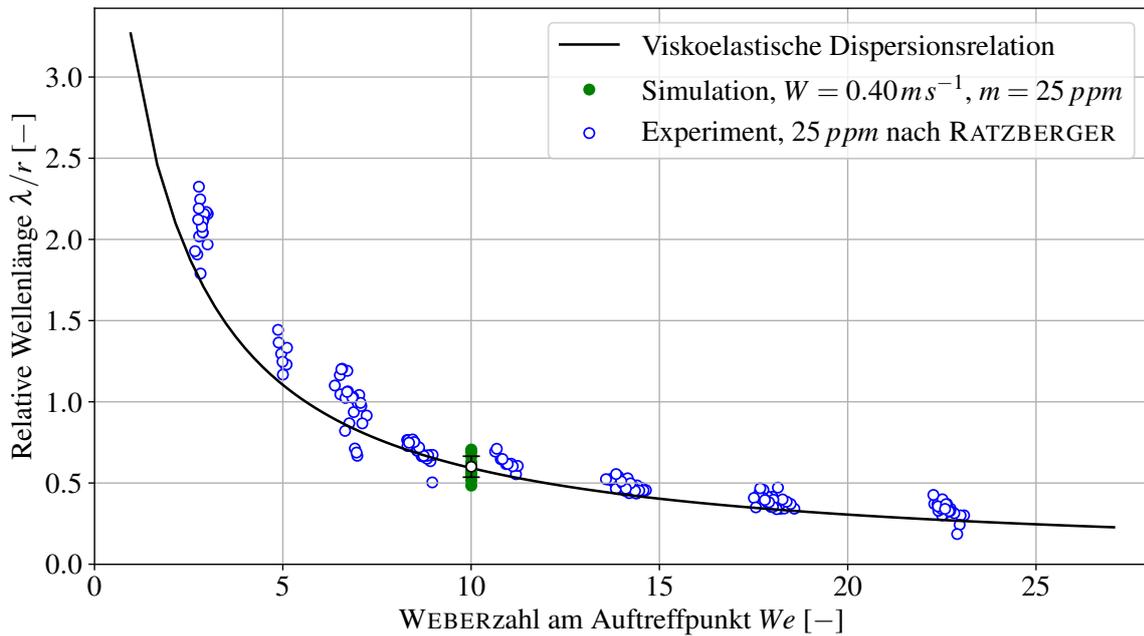
(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}$, $m = 10 \text{ ppm}$ (b) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}$, $m = 25 \text{ ppm}$

Abbildung 4.25 Histogramm der ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/|\bar{r}|_{z=h}$ der auftretenden Kapillarwellen der Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s .



(a) $W = 0.10 \text{ ms}^{-1}, m = 10 \text{ ppm}$



(b) $W = 0.40 \text{ ms}^{-1}, m = 25 \text{ ppm}$

Abbildung 4.26 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskoelastische Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m der Prästol 2540/Wasser-Lösung.

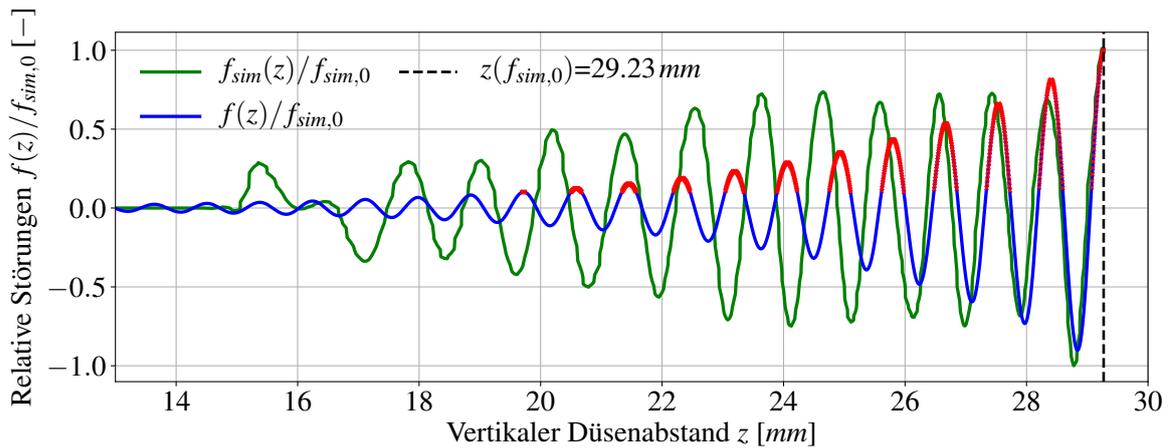
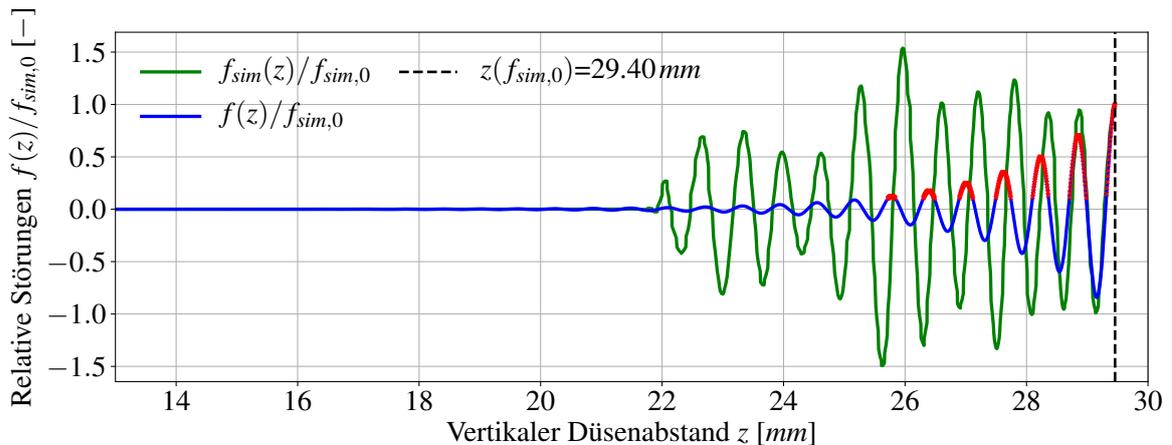
(a) $W = 0.10 \text{ms}^{-1}$, $m = 10 \text{ppm}$, $We|_{z=h} = 3.54$ (b) $W = 0.40 \text{ms}^{-1}$, $m = 25 \text{ppm}$, $We|_{z=h} = 10.00$

Abbildung 4.27 Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für die Prästol 2540/Wasser-Lösung für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteile m .

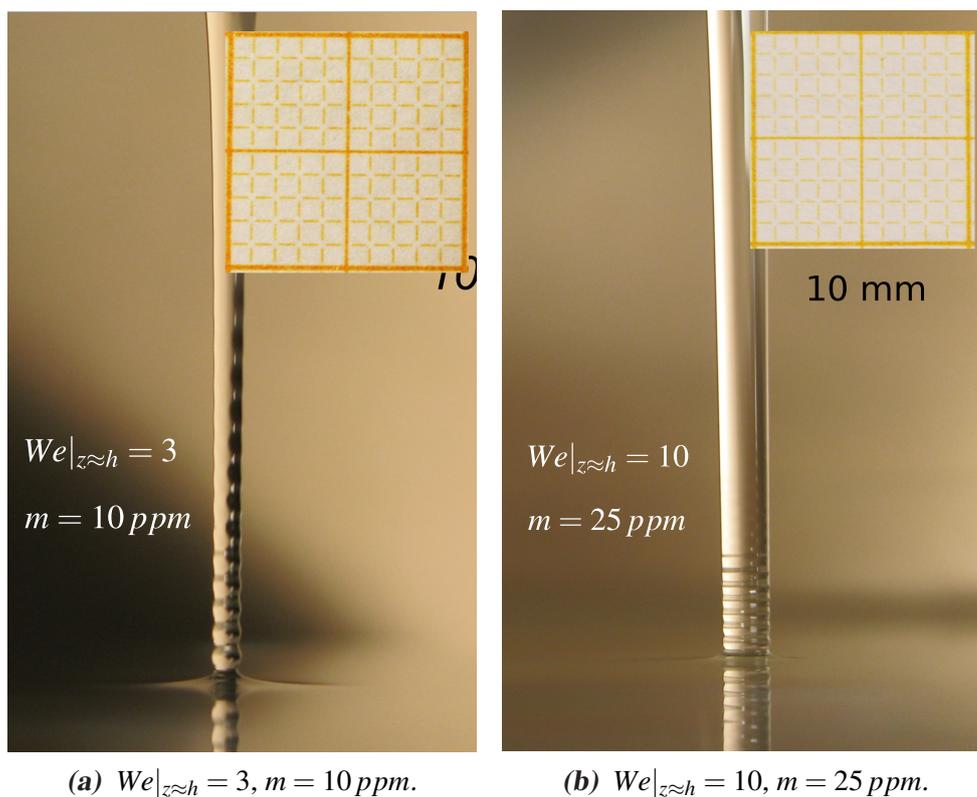


Abbildung 4.28 Fotoaufnahmen aus experimentellen Versuchen mit der Prästol 2540/Wasser-Lösung von RATZBERGER [16] bei unterschiedlichen Massenkonzentrationen m und WEBERzahlen $We|_{z \approx h}$ nahe dem Aufprallpunkt.

4.3.4. Darstellung der Ergebnisse im von OHNESORGE-Diagramm

Untenstehende Abbildung 4.29 zeigt eine Darstellung aller durchgeführten Simulationen im von OHNESORGE-Diagramm. Die Strahlzustände sind jeweils wieder bezogen auf die Bedingungen im Auftreffpunkt beschrieben durch die REYNOLDSzahl $Re|_{z=h}$ und die OHNESORGEzahl $Oh|_{z=h}$ gemäß

$$Re|_{z=h} = \frac{\rho \bar{r}|_{z=h} \bar{w}|_{z=h}}{\mu} \quad \text{bzw.} \quad Oh|_{z=h} = \frac{\mu}{\sqrt{\sigma \rho \bar{r}|_{z=h}}}.$$

Die Lage der Betriebspunkte in diesem Regimediagramm gibt an, welche Form des Strahlzerfalls zu erwarten wäre, wenn der Strahl seinen Zustand im Auftreffpunkt ohne die Störung durch die Spiegeloberfläche beibehalten könnte. Die Betriebspunkte liegen offensichtlich alle im Bereich des kapillaren, sogenannten RAYLEIGHschen Strahlzerfalls. Damit im Einklang steht auch das Auftreten der Kapillarwellen stromauf vom Auftreffpunkt sowie deren gute theoretisch-analytische Beschreibung durch die gestörten linearisierten Bewegungsgleichungen, welche für den kapillaren Strahlzerfall etabliert sind.

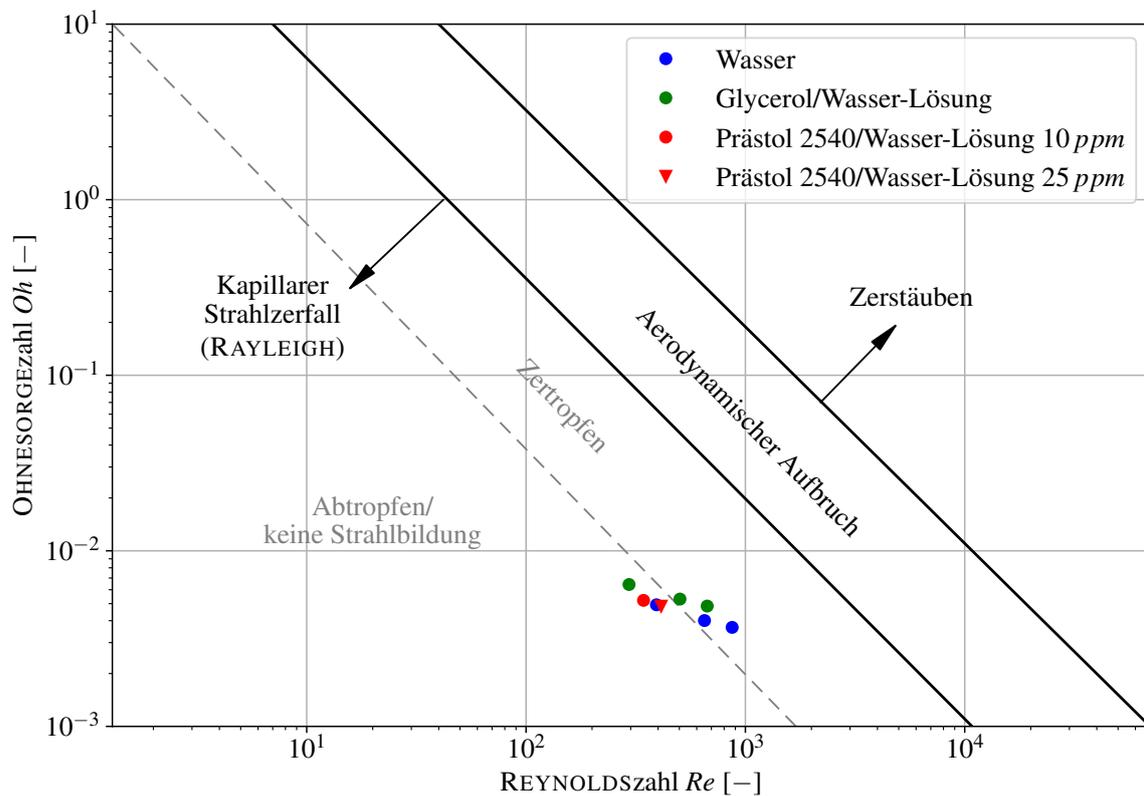


Abbildung 4.29 Darstellung der Simulationsergebnisse im von OHNESORGE-Diagramm.

Kapitel 4. Numerische Ergebnisse

Zusammenfassung

Beim Auftreffen eines Flüssigkeitsstrahles auf eine ruhende Spiegeloberfläche kommt es bei bestimmten Strahlzuständen zur Ausbildung von Kapillarwellen, welche sich stromauf vom Auftreffpunkt ausbreiten. Diese Wellen erscheinen, infolge ihrer räumlichen Ausbreitung stromauf mit der Geschwindigkeit des Fluidstrahles, als stehende Wellen. Eine analytische Beschreibung dieses Wellenphänomens wird durch eine, für den betrachteten Fluidtyp abgeleitete, Dispersionsrelation geliefert.

Ziel dieser Arbeit war es, eine numerische Strömungssimulation (CFD) dieses Wellenphänomens für unterschiedliche Flüssigkeiten durchzuführen und die erhaltenen Ergebnisse mit den jeweiligen theoretischen Vorhersagen der zugehörigen Dispersionsrelation zu vergleichen. Für einen zum Teil auch qualitativen Vergleich wurden zusätzlich experimentelle Beobachtungen aus einer Vorläuferarbeit herangezogen. Untersucht wurden drei unterschiedliche Fluide, wobei die ersten beiden NEWTONsches Verhalten, jedoch unterschiedliche Zähigkeiten aufwiesen. Das dritte war ein viskoelastisches, nicht-NEWTONsches Fluid mit unterschiedlichen Massenanteilen der elastischen Komponente. Insgesamt wurden zehn Simulationen durchgeführt, wobei acht ausgewertet und mit den theoretischen Voraussagen verglichen werden konnten. Die übrigen beiden Fälle, beide mit hohen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten, ermöglichten es nicht, die auftretenden, sehr feinen Strukturen der Kapillarwellen räumlich aufzulösen, da das verwendete Rechengitter hierfür zu grob war, dessen Verfeinerung aber zu einem unakzeptabel hohen Rechenaufwand geführt hätte.

Die numerischen Simulationen konnten für alle drei betrachteten Fluidtypen das Auftreten stehender Kapillarwellen grundsätzlich abbilden. Die dabei vorhergesagten Wellenlängen zeigten mitunter eine relativ große Streubreite, lagen im Mittel aber durchwegs nahe an den analytischen und experimentellen Vergleichswerten. Ein Einfluss der Elastizität ist in den Ergebnissen für die viskoelastischen Prästol/Wasser-Lösungen praktisch nicht erkennbar. Die durch die Zugabe von Prästol hervorgerufene Erhöhung der dynamischen Viskosität zeigt hingegen eine weit stärkere Wirkung, insbesondere ersichtlich aus der stärkeren axialen Abnahme der Amplituden der Wellen stromauf. Die mit steigender WEBERzahl sowohl experimentell beobachtete als auch analytisch vorhergesagte zunehmend räumliche Konzentration des welligen Bereichs in Richtung Auftreffpunkt wurde auch von den Simulationen tendenziell korrekt widergegeben. Große Abweichungen zeigten sich hierbei allerdings in den vorhergesagten Amplituden der Oberflächenwellen. Während in der analytischen Lösung die Amplitude stromauf monoton relativ rasch abnimmt, sinkt die Amplitude in der numerischen Lösung zumeist nicht kontinuierlich. Der wellige Bereich weist hier mitunter sogar stromauf einen Anstieg der Amplituden auf bevor diese Oberflächenwellen weiter stromauf gänzlich verschwinden. Der hier beobachtete signifikante Unterschied in der räumlichen Entwicklung der Amplituden der Kapillarwellen deutet auf einen maßgeblichen Einfluss der axialen Veränderlichkeit des ungestörten Grundzustands des Flüssigkeitsstrahls hin. Der Strahl wird in der Simulation ständig durch das Wirken der Gravitationskraft beschleunigt und erfährt dadurch eine axiale Einschnürung seines Querschnitts. Im Gegensatz dazu geht die analytische Beschreibung von einem axial unveränderlichen Bewegungszustand eines mit konstanter Geschwindigkeit bewegten Flüssigkeitszylinders aus. Eine

Kapitel 5. Zusammenfassung

detaillierte Untersuchung des Effekts der Strahlbeschleunigung und -einschnürung durch entsprechend erweiterte analytische Formulierungen wäre ein interessanter Gegenstand für weiterführende Arbeiten auf diesem Gebiet.

Preprocessing

In diesem ersten Kapitel des Anhangs wird das *Preprocessing* erläutert. Hierbei wird auf die Erstellung und die Eigenschaften des verwendeten Netzes für die Berechnung eingegangen. Dem folgt eine ausführliche Erklärung der erstellten Simulationsdateien, welche für die Berechnung in OpenFOAM benötigt werden. Diese Dateien gliedern sich für alle betrachteten Flüssigkeiten in die gewählten Randbedingungen, welche bei der Initialisierung festgelegt werden müssen, in Dateien zur Festlegung benötigter konstanter Werte, sowie in Systemdateien, welche zur Steuerung der Simulationen dienen. Abschließend werden die verwendeten Solver als auch alle Softwarepakete mit den zugehörigen Versionshinweisen erläutert.

A.1. Netzgenerierung

Die Erstellung des verwendeten Netzes wurde in der Open-Source Software Salome bewerkstelligt. Verwendet wurde die Version 8.4.0. Zur Überführung des Netzes in OpenFOAM musste ein spezielles Skript verwendet werden, welches diese Aufgabe übernimmt, da zwischen Salome und OpenFOAM keine direkte Schnittstelle existiert. Die darauf folgenden Abschnitte erläutern schrittweise die Vorgehensweise bis zum fertigen, in der Berechnung verwendeten Netz. Dieses konnte ohne Einschränkungen für alle Berechnungsfälle sämtlicher unterschiedlicher Flüssigkeiten verwendet werden.

A.1.1. Erstellung der Geometrie

Zu Beginn wurde eine Fläche bestehend aus mehreren Teilflächen, wie in Abbildung A.1 ersichtlich, erstellt. Jede einzelne dieser Teilflächen wurde anschließend gesondert mit einem entsprechenden Netz versehen. Die Abmessungen entsprechen jenen des im experimentellen Versuch verwendeten Behälters, ähnlich wie in Abbildung 3.1 dargestellt. Die einzelnen Flächen von eins bis fünf wurden anschließend als Partition zusammengefasst wodurch jede auftretende Schnittfläche einzeln bearbeitet bzw. vernetzt werden konnte. Anschließend erfolgte eine Drehung der gesamten Partition um 0.5° um die z -Achse, damit sich bei der nachfolgenden dreidimensionalen Vernetzung ein, bezüglich der r, z -Ebene, symmetrisches Netz mit einem Winkel von 1° ergibt.

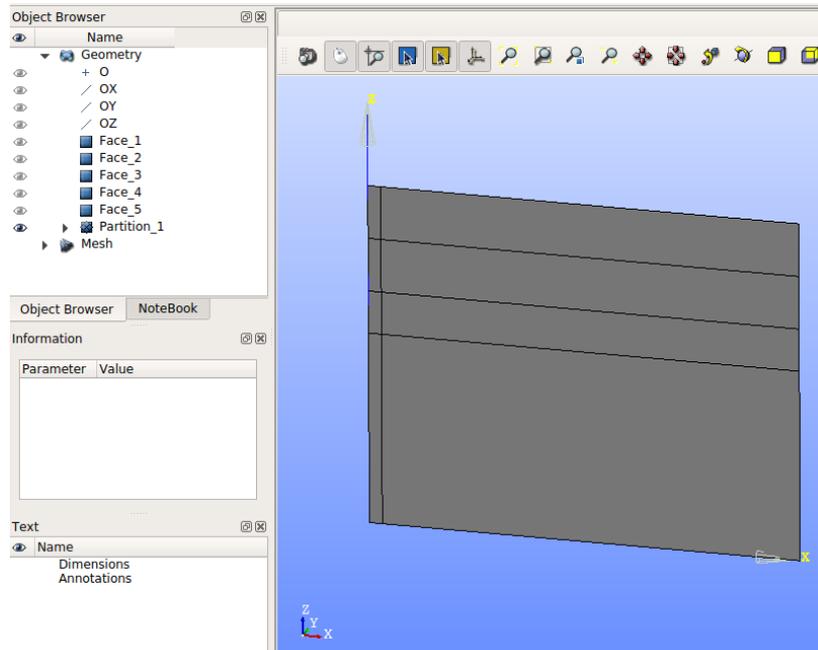
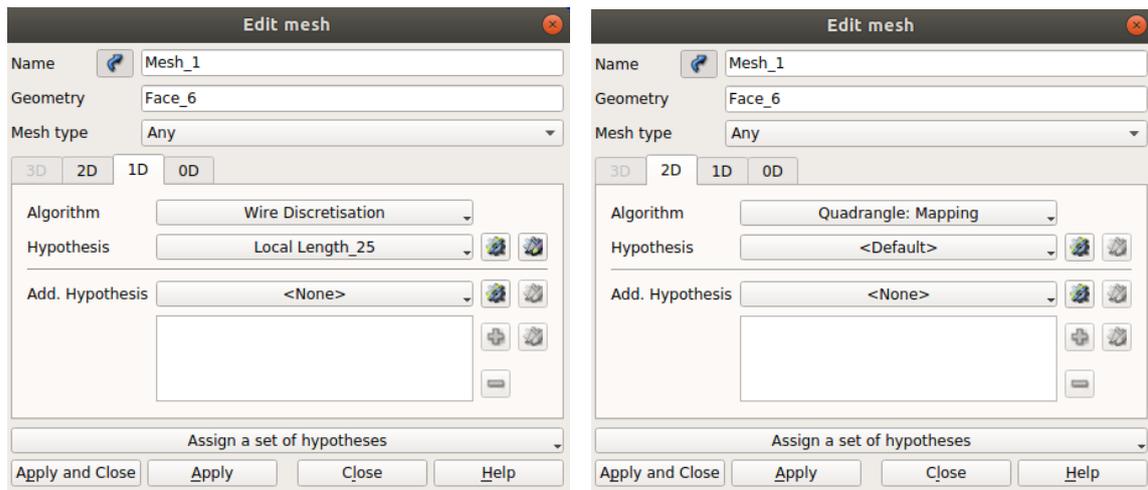


Abbildung A.1 Verwendete zweidimensionale Geometrie zur Erstellung des Netzes.

A.1.2. Vernetzung der Geometrie

Bei der Vernetzung obiger Geometrie wurde wie bereits erwähnt jede Teilfläche gesondert vernetzt und anschließend zusammengeführt. Die einzelnen Flächen wurden dabei mit dem *Mesh*-Modul in Salome vernetzt. Dabei wurde das gewünschte Objekt ausgewählt und bestimmte Vernetzungsalgorithmen angewendet wie in Abbildung A.2 ersichtlich. Hierbei muss zu Beginn ein eindimensionaler Algorithmus, welcher die entsprechenden Kanten der Geometrie diskretisiert, verwendet werden. Dies ist dargestellt in Abbildung A.2a. Der Parameter der lokalen Gitterweite wurde dabei auf 0.05 mm gesetzt. Anschließend wurde ein passender Algorithmus zur zweidimensionalen Diskretisierung gewählt, wie in Abbildung A.2b ersichtlich. Mit dieser *Mapping*-Funktion wurde ein strukturiertes zweidimensionales Netz erstellt.

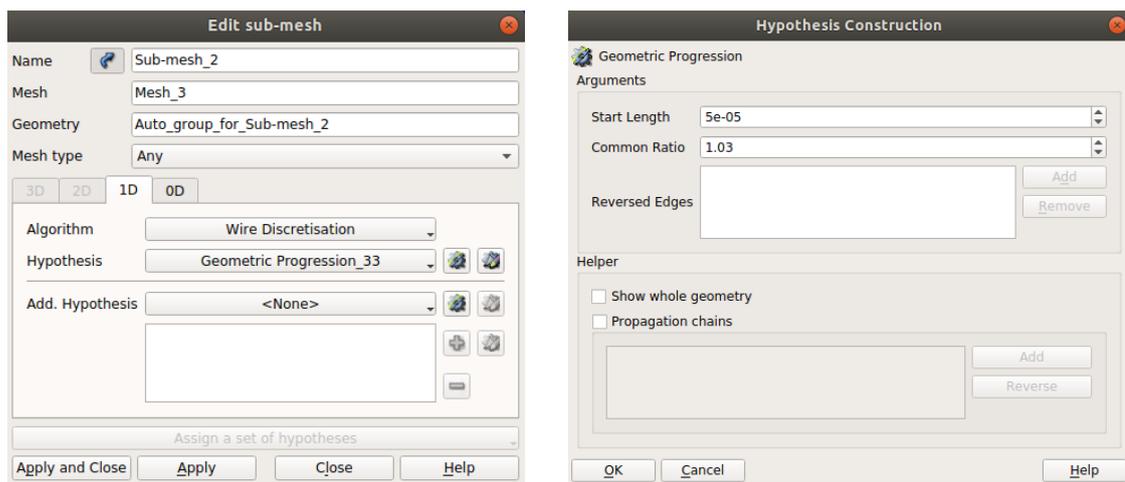


(a) Verwendete Parameter zur eindimensionalen Diskretisierung der Kanten.

(b) Verwendete Parameter zur Erstellung des zweidimensionalen Netzes.

Abbildung A.2 Erstellung des Netzes einer ausgewählten Fläche.

Im Falle der Vernetzung jener Flächen, welche sich nicht im Bereich der auftretenden Kapillarwellen befinden, wurde ein Algorithmus gewählt, welcher den Regeln einer geometrischen Reihe folgt. Dieses Vorgehen wurde zur Minimierung der Elementanzahl angewendet um Rechenleistung in der anschließenden Berechnung zu sparen. Dabei wurde ähnlich wie im obigen Fall zuerst eine eindimensionale Diskretisierung mittels *Wire Discretisation* durchgeführt, mit dem Unterschied, dass hier keine konstante *Local Length* gewählt wurde sondern wie in Abbildung A.3a ersichtlich eine *Geometric Progression*. Die gewählten Parameter zur Erstellung dieser geometrischen Reihe sind in Abbildung A.3b zu entnehmen. Dabei bedeutet der Wert der *Common Ratio* von 1.03 eine Zunahme der Zellgröße von 3% zur vorherigen.



(a) Fenster zur Auswahl der geometrischen Reihe zur eindimensionalen Diskretisierung.

(b) Verwendete Parameter für die geometrische Reihe.

Abbildung A.3 Diskretisierung mittels geometrischer Reihe.

A.1.3. Erstellung der verwendeten Gruppen in der Simulation

Nach der Generierung des zweidimensionalen Netzes wurden die nötigen Gruppen bzw. Randbedingungen in eben diesem Netz erstellt. Dabei wurden jene Netzelemente, welche den in Abschnitt 3.2 beschriebenen Randbedingungen zugehören, in entsprechende Gruppen zusammengefasst. Im Beispiel der Gruppe *atmosphere* wurde die gesamte obere Kante des Netzes, exklusive der Randbedingung des *inlet*, manuell ausgewählt. Dieses Prozedere ist in Abbildung A.4 ersichtlich. Hierbei ist zu erwähnen, dass sich diese eindimensionalen Gruppen nach Erstellung des dreidimensionalen Netzes, was im folgenden Abschnitt behandelt wird, in zweidimensionale Flächenelemente transformieren. Diese Elemente werden in OpenFOAM als solche erkannt.

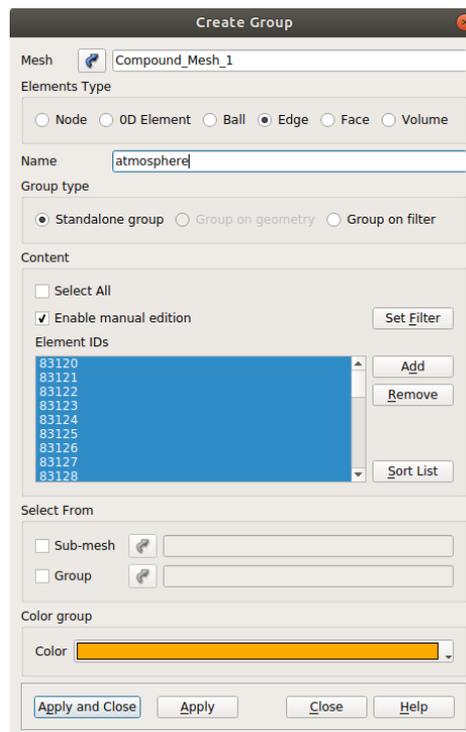


Abbildung A.4 Anlegen der Gruppe *atmosphere*

A.1.4. Generierung des dreidimensionalen Netzes

Um nun aus dem vorhandenen zweidimensionalen Netz ein dreidimensionales zu erstellen, welches für die Simulation in OpenFOAM notwendig ist und jenem aus Abbildung 3.1 entspricht, muss das bisher generierte Netz um die *z*-Achse gedreht werden. Dies wird mittels der Funktion *Revolution* im *Mesh*-Modul von Salome bewerkstelligt. Dabei wurde eine Drehung von 1° durchgeführt. Das dreidimensionale Netz ist in Abbildung A.5 ersichtlich. Dieses enthält nun alle, für die Simulation nötigen, Parameter und Elemente.

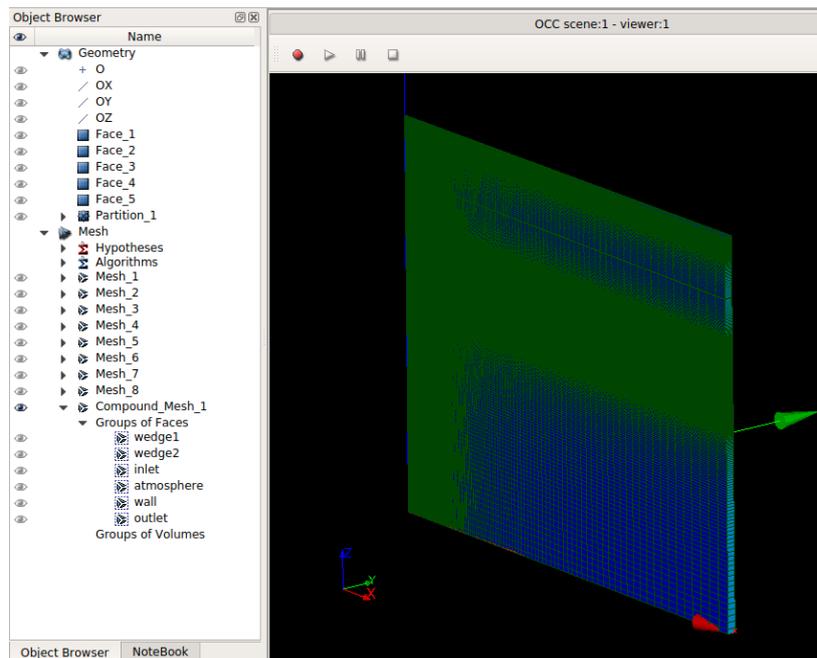


Abbildung A.5 Generiertes dreidimensionales Netz.

A.1.5. Konvertierung des erstellten Netzes nach polyMesh

Das wie in den vorherigen Abschnitten beschrieben, generierte Netz muss nun in ein Format, welches von OpenFOAM gelesen werden kann, überführt werden. Dazu wird ein entsprechendes Python-Skript verwendet. Dieses Skript ermöglicht die Überführung der von Salome erzeugten Projektdaten in ein von OpenFOAM lesbares Dokument `polyMesh`, welches anschließend nur mehr in den `constant`-Ordner der Simulation eingefügt werden muss.

A.2. Erstellung der Simulationsdateien

Jede Simulation besteht bei der Initialisierung aus drei Ordnern. Diese sind der Ordner `0`, `constant` und `system`. Erster enthält die Dateien zur Initialisierung der Strömungsfelder für das Druckfeld $p|_{t=0}$, der Geschwindigkeit $\mathbf{U}|_{t=0}$, den Phasenanteilen $\alpha_k|_{t=0}$ als auch den Spannungen $\boldsymbol{\tau}|_{t=0}$ bzw. dem natürlichen Logarithmus des Konformationstensors $\boldsymbol{\Theta}|_{t=0}$. Im Ordner `constant` sind die in der Berechnung konstanten Elemente wie das Netz, welches sich im Ordner `polyMesh` befindet, die Erdbeschleunigung g , die Transporteigenschaften der verwendeten Fluide, bezeichnet als `transportProperties`, und die nötigen Informationen bezüglich des Strömungszustands (laminar/turbulent) `turbulenceProperties`, enthalten. Der Ordner `system` enthält jene Dateien zur Steuerung der Simulation. Diese sind die Dateien `controlDict`, welche die Bedingungen der Simulation festlegt, die Dateien `decomposePar`, `fvSchemes`, `fvSolution` und `setFieldsDict`, welche weiter unten genauer beschrieben werden.

Für die genaue mathematische Beschreibung der Randbedingungen weiter unten in Abschnitt A.2.1 sei auf Kapitel 3.2 verwiesen. die verwendeten Stoffwerte der modellierten Flüssigkeiten aus den gelisteten Dateien in Abschnitt A.2.2 sind in Abschnitt 2.5 gegeben und die verwendeten Diskreti-

sierungs- und Lösungsverfahren in Abschnitt A.2.3 können in den Abschnitten 3.4 bzw. 3.5.2 im Detail eingesehen werden.

A.2.1. Initialisierungszustand

Zu Beginn der Simulation muss ein Initialisierungszustand definiert werden, d.h. Geschwindigkeit, Druck, etc. müssen bekannt bzw. berechenbar sein. Die folgenden Abschnitte beschreiben die Vorgabe dieser Informationen basierend auf dem OpenFOAM - User Guide von GREENSHIELDS [9] für die verschiedenen Fluide.

Wasser

In den folgenden Listings werden die Initialisierungszustände für *Wasser* gezeigt. Hierfür sind die Dateien `alpha.water` für den Phasenanteil, `U` für die Geschwindigkeit und `p_rgh` für den Druck nötig.

⇒ **Datei `alpha.water`:** Diese Datei beschreibt die Phasenanteile $\alpha_k|_{t=0}$ zwischen *Wasser* und *Luft*.

```
1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format ascii;
5     class volScalarField;
6     object alpha.water;
7 }
8
9 dimensions [0 0 0 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type    fixedValue;
18         value   uniform 1;
19     }
20
21     wall
22     {
23         type    zeroGradient;
24     }
25
26     outlet
27     {
28         type    fixedValue;
29         value   uniform 1;
30     }
31 }
```

```

32 atmosphere
33 {
34     type      inletOutlet;
35     inletValue  uniform 0;
36     value      uniform 0;
37 }
38
39 wedge1
40 {
41     type      wedge;
42 }
43
44 wedge2
45 {
46     type      wedge;
47 }
48 }

```

Für den inlet wurde ein konstanter Wert, also `fixedValue`, von 1 gewählt, was den Einlass reiner Flüssigkeit (in diesem Fall *Wasser*) beschreibt. Analog wurde dies auch am outlet angewendet. Im Falle der atmosphere wurde die `InletOutlet`-Bedingung verwendet, welche im Allgemeinen der einfachen `zeroGradient`-Bedingung beim Hinausfließen des Fluids entspricht. Zusätzlich wird bei einem hineinfließenden Fluid ein `fixedValue` angewendet. Die jeweilige Vorder- und Hinterfläche namens `wedge1` und `wedge2` wird als `wedge`-Randbedingung definiert, welche für die vorhandene Problemstellung konzipiert wurde. Diese `wedge`-Randbedingung ist von `cyclic`-Randbedingung abgeleitet, welche eine periodische Bedingung ist.

⇒ **Datei `p_rgh`:** Hier werden die angewendeten Randbedingungen für das Druckfeld $p|_{t=0}$ erläutert.

```

1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class   volScalarField;
6     object  p_rgh;
7 }
8
9 dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type      fixedFluxPressure;
18         value      $internalField;
19     }
20 }

```

Anhang A. Preprocessing

```
21 outlet
22 {
23     type    fixedFluxPressure;
24     value   $internalField;
25 }
26
27 wall
28 {
29     type    fixedFluxPressure;
30     value   $internalField;
31 }
32
33
34 atmosphere
35 {
36     type    totalPressure;
37     p0     $internalField;
38 }
39
40 wedge1
41 {
42     type    wedge;
43 }
44
45 wedge2
46 {
47     type    wedge;
48 }
49 }
```

Für den inlet, den outlet als auch für die wall wurde die `fixedFluxPressure`-Bedingung verwendet. Diese Randbedingung passt den Druckgradienten an, sodass der Massenfluss am Rand mit der Randbedingung der Geschwindigkeit konsistent ist, speziell für Solver, welche die Gravitation und Oberflächenspannungen berücksichtigen. Für atmosphere wurde die `totalPressure`-Bedingung angewendet, welche einem `fixedValue` entspricht. Diese berechnet den statischen Druck p aus dem angegebenen Totaldruck p_0 und der lokalen Geschwindigkeit U . Die jeweiligen wedge-Flächen wurden wieder mit `wedge` deklariert.

⇒ **Datei U:** Dieses Listing beschreibt die entsprechende Datei der Geschwindigkeit $U|_{t=0}$.

```
1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format ascii;
5     class volVectorField;
6     location "0";
7     object U;
8 }
9
10 dimensions [0 1 -1 0 0 0 0];
11
```

```

12 internalField    uniform (0 0 0);
13
14 boundaryField
15 {
16     inlet
17     {
18         type      fixedValue;
19         value     uniform (0 0 -0.4);
20     }
21
22     outlet
23     {
24         type      matchedFlowRateOutletVelocity;
25         inletPatch inlet;
26         value     uniform (0 0 0);
27     }
28
29     wall
30     {
31         type      noSlip;
32     }
33
34     atmosphere
35     {
36         type      pressureInletOutletVelocity;
37         value     uniform (0 0 0);
38     }
39
40     wedge1
41     {
42         type      wedge;
43     }
44
45     wedge2
46     {
47         type      wedge;
48     }
49 }

```

Am `inlet` wurde die `fixedValue`-Bedingung mit der vorgegebenen konstanten Düsenaustrittsgeschwindigkeit W in z -Richtung angewendet. Der `outlet` wird mit einer Randbedingung versehen, welche den Massenfluss bezüglich des `inlet` konstant hält. Somit wird garantiert, dass der Flüssigkeitsspiegel auf gleichbleibender Höhe gehalten wird. An der `wall` kam die `noSlip`-Bedingung zum Einsatz, welche die Geschwindigkeit an der Wand zu Null setzt. Die `atmosphere` wurde mit `pressureInletOutletVelocity` versehen. Diese wendet im Falle des Hinausfließens bezüglich der Atmosphäre `zeroGradient` an, im Falle des Hineinfließens wird an die orthogonale Geschwindigkeitskomponente ein `fixedValue` übergeben. Auch hier wurde die vordere und hintere `wedge`-Fläche mit der `wedge`-Randbedingung versehen.

Glycerol/Wasser-Lösung

Dieser Abschnitt beinhaltet die Listings der Initialisierungszustände der *Glycerol/Wasser-Lösung*. Auch hier sind wie im Fall von Wasser die Dateien `alpha.glycwat` für den Phasenanteil, `U` für die Geschwindigkeit und `p_rgh` für den Druck nötig.

⇒ **Datei `alpha.glycwat`:** Diese Datei beschreibt die beiden Phasenanteile $\alpha_k|_{t=0}$ zwischen der *Glycerol/Wasser-Lösung* und der umgebenden *Luft*. Die verwendeten Randbedingungen sind völlig analog dem vorherigen Fall von *Wasser* auf Seite 100.

```
1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format ascii;
5     class volScalarField;
6     object alpha.glycwat;
7 }
8
9 dimensions [0 0 0 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type    fixedValue;
18         value    uniform 1;
19     }
20
21     wall
22     {
23         type    zeroGradient;
24     }
25
26     outlet
27     {
28         type    fixedValue;
29         value    uniform 1;
30     }
31
32     atmosphere
33     {
34         type    inletOutlet;
35         inletValue    uniform 0;
36         value    uniform 0;
37     }
38
39     wedge1
40     {
41         type    wedge;
```

```

42     }
43
44     wedge2
45     {
46         type    wedge;
47     }
48 }

```

⇒ **Datei p_rgh:** Den Druck $p|_{t=0}$ der *Glycerol/Wasser-Lösung* beschreibt der folgende Code. Diese Randbedingungen sind völlig analog jenen von *Wasser* auf Seite 101.

```

1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format    ascii;
5     class    volScalarField;
6     object    p_rgh;
7 }
8
9 dimensions    [1 -1 -2 0 0 0 0];
10
11 internalField    uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type    fixedFluxPressure;
18         value    $internalField;
19     }
20
21     outlet
22     {
23         type    fixedFluxPressure;
24         value    $internalField;
25     }
26
27     wall
28     {
29         type    fixedFluxPressure;
30         value    $internalField;
31     }
32
33     atmosphere
34     {
35         type    totalPressure;
36         p0    $internalField;
37     }
38
39     wedge1

```

Anhang A. Preprocessing

```
40     {
41         type    wedge;
42     }
43
44     wedge2
45     {
46         type    wedge;
47     }
48 }
```

⇒ **Datei U:** Das untenstehende Listing zeigt die Randbedingungen für die *Glycerol/Wasser-Lösung* bezüglich der Geschwindigkeit $\mathbf{U}|_{t=0}$. Auch hier ist der Code analog zu jenem von *Wasser* auf Seite 102.

```
1  FoamFile
2  {
3      version    2.0;
4      format     ascii;
5      class      volVectorField;
6      location   "0";
7      object     U;
8  }
9
10 dimensions [0 1 -1 0 0 0 0];
11
12 internalField uniform (0 0 0);
13
14 boundaryField
15 {
16     inlet
17     {
18         type    fixedValue;
19         value   uniform (0 0 -0.4);
20     }
21
22     outlet
23     {
24         type      matchedFlowRateOutletVelocity;
25         inletPatch inlet;
26         value     uniform (0 0 0);
27     }
28
29     wall
30     {
31         type    noSlip;
32     }
33
34     atmosphere
35     {
36         type    pressureInletOutletVelocity;
```

```

37     value    uniform (0 0 0);
38   }
39
40   wedge1
41   {
42     type     wedge;
43   }
44
45   wedge2
46   {
47     type     wedge;
48   }
49 }

```

Prästol 2540/Wasser-Lösung

Die Initialisierungszustände der *Prästol 2540/Wasser-Lösung* sind im folgenden gelistet. Wie im Fall von *Wasser* sind auch hier die Dateien `alpha.praestol` für den Phasenanteil, `U` für die Geschwindigkeit und `p_rgh` für den Druck nötig. Zusätzlich muss jedoch noch der Spannungstensor mit `tau.praestol`, sowie der natürliche Logarithmus des Konformationstensors mit der Datei `theta.praestol`, initialisiert werden.

⇨ **Datei `alpha.praestol`:** Die Phasenanteile $\alpha_k|_{t=0}$ haben auch im viskoelastischen Fall die gleichen Randbedingungen wie jene von *Wasser* auf Seite 100.

```

1 FoamFile
2 {
3   version 2.0;
4   format  ascii;
5   class   volScalarField;
6   object  alpha1;
7 }
8
9 dimensions  [0 0 0 0 0 0 0];
10
11 internalField  uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15   inlet
16   {
17     type     fixedValue;
18     value    uniform 1;
19   }
20
21   wall
22   {
23     type     zeroGradient;
24   }
25 }

```

Anhang A. Preprocessing

```
26 outlet
27 {
28     type    fixedValue;
29     value    uniform 1;
30 }
31
32 atmosphere
33 {
34     type        inletOutlet;
35     inletValue    uniform 0;
36     value        uniform 0;
37 }
38
39 wedge1
40 {
41     type    wedge;
42 }
43
44 wedge2
45 {
46     type    wedge;
47 }
48 }
```

⇒ **Datei p_rgh:** Auch bei der Initialisierung des Druckfeldes $p|_{t=0}$ ergeben sich bezüglich der Randbedingungen keine Veränderungen bei nicht-NEWTONschen Fluiden gegenüber jenen von Wasser auf Seite 101.

```
1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class   volScalarField;
6     object  p_rgh;
7 }
8
9 dimensions  [1 -1 -2 0 0 0 0];
10
11 internalField  uniform 0;
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type    fixedFluxPressure;
18         value    $internalField;
19     }
20
21     outlet
22     {
```

```

23     type    fixedFluxPressure;
24     value   $internalField;
25   }
26
27   wall
28   {
29     type    fixedFluxPressure;
30     value   $internalField;
31   }
32
33
34   atmosphere
35   {
36     type    totalPressure;
37     p0     $internalField;
38   }
39
40   wedge1
41   {
42     type    wedge;
43   }
44
45   wedge2
46   {
47     type    wedge;
48   }
49 }

```

⇒ **Datei U:** Die Randbedingungen der Geschwindigkeit $\mathbf{U}|_{t=0}$ haben auch im Falle der *Prästel 2540/Wasser-Lösung* die gleiche Gestalt entsprechend jener auf Seite 102, was im folgenden Listing gezeigt wird.

```

1 FoamFile
2 {
3   version 2.0;
4   format  ascii;
5   class   volVectorField;
6   object  U;
7 }
8
9 dimensions [0 1 -1 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform (0 0 0);
12
13 boundaryField
14 {
15   inlet
16   {
17     type    fixedValue;
18     value   uniform (0 0 -0.40);

```

Anhang A. Preprocessing

```
19     }
20
21     outlet
22     {
23         type            matchedFlowRateOutletVelocity;
24         inletPatch      inlet;
25         value            uniform (0 0 0);
26     }
27
28     wall
29     {
30         type            fixedValue;
31         value            uniform (0 0 0);
32     }
33
34     atmosphere
35     {
36         type            pressureInletOutletVelocity;
37         value            uniform (0 0 0);
38     }
39
40     wedge1
41     {
42         type            wedge;
43     }
44
45     wedge2
46     {
47         type            wedge;
48     }
49 }
```

⇒ **Datei tau.praestol:** Gegenüber den NEWTONschen Fluiden, welche zuvor beschrieben wurden, muss in diesem Fall der Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}|_{t=0}$ initialisiert werden. Der folgende Code beschreibt die applizierten Randbedingungen.

```
1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class   volSymmTensorField;
6     object  tau;
7 }
8
9 dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform (0 0 0 0 0 0);
12
13 boundaryField
14 {
```

```

15  inlet
16  {
17      type    fixedValue;
18      value   uniform (0 0 0 0 0 0);
19  }
20
21  outlet
22  {
23      type    fixedValue;
24      value   uniform (0 0 0 0 0 0);
25  }
26
27  wall
28  {
29      type    linearExtrapolation;
30      value   uniform (0 0 0 0 0 0);
31  }
32
33  atmosphere
34  {
35      type    zeroGradient;
36  }
37
38  wedge1
39  {
40      type    wedge;
41  }
42
43  wedge2
44  {
45      type    wedge;
46  }
47  }

```

Der inlet und der outlet wurden mit einer fixedValue-Bedingung versehen, welche alle Komponenten des Spannungstensor zu Null setzt. Die wall erhielt die in Abschnitt 3.2 beschriebene linearExtrapolation-Randbedingung. Diese Randbedingung berechnet den gesuchten Wert der entsprechenden Feldgröße an der Randfläche mittels linearer Extrapolation des Wertes unter Verwendung des Gradienten der selben Feldgröße vom zugehörigen Zellzentrum.

⇒ **Datei theta.praestol:** Ebenfalls muss im Falle des nicht-NEWTONschen Fluids der natürliche Logarithmus des Konformationstensors $\Theta|_{t=0}$ angegeben werden. Hierbei wird auf den Spannungstensor und den Gleichungen (3.15) und (3.16) Bezug genommen.

```

1  FoamFile
2  {
3      version 2.0;
4      format  ascii;
5      class   volSymmTensorField;
6      object  theta;
7  }

```

Anhang A. Preprocessing

```
8
9 dimensions [0 0 0 0 0 0 0];
10
11 internalField uniform (0 0 0 0 0 0);
12
13 boundaryField
14 {
15     inlet
16     {
17         type    fixedValue;
18         value   uniform (0 0 0 0 0 0);
19     }
20
21     outlet
22     {
23         type    fixedValue;
24         value   uniform (0 0 0 0 0 0);
25     }
26
27     wall
28     {
29         type    zeroGradient;
30     }
31
32     atmosphere
33     {
34         type    zeroGradient;
35     }
36
37     wedge1
38     {
39         type    wedge;
40     }
41
42     wedge2
43     {
44         type    wedge;
45     }
46 }
```

Die Randbedingungen sind hierbei identisch mit jenen der Datei `tau.praestol`. Der einzige Unterschied besteht an der `wall`, also an der Behälterwand, an welcher `zeroGradient` anstelle von `linearExtrapolation` verwendet wurde.

A.2.2. Verwendete Konstanten

Die für die Berechnung nötigen Konstanten sind in diesem Abschnitt im jeweiligen Listing dargestellt. Dazu gehören, wie weiter oben bereits beschrieben, die Konstanten zur Festlegung der Gravitation, der Stoffwerte und des Strömungszustands, wobei in dieser Arbeit durchgehend laminare Strömung angenommen wurde.

Flüssigkeitsunabhängige Konstanten

Die *flüssigkeitsunabhängigen Konstanten* sind jene, welche nicht mit der zu simulierenden Flüssigkeit einhergehen, wie etwa die Gravitation g . Diese werden in den folgenden Listings beschrieben und sind somit bei allen simulierten Flüssigkeiten ident.

⇒ **Datei g** : Die Beschreibung der Datei, welche die Gravitation g definiert wird in diesem Abschnitt besprochen.

```

1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        uniformDimensionedVectorField;
6     location     "constant";
7     object       g;
8 }
9
10 dimensions     [0 1 -2 0 0 0 0];
11
12 value          (0 0 -9.81);

```

Es wurde entsprechend obigen Listing ein üblicher Wert von $g = 9.81 \text{ ms}^{-2}$ entgegen der z -Achse definiert. Dieser Wert wird für die Berechnungen anschließend verwendet. Würde man die Gravitation in z -Richtung 0 setzen, so ergäbe sich keine Einschnürung des Fluidstrahles, was auch durch Gleichung (2.4) gezeigt werden kann.

⇒ **Datei `turbulenceProperties`**: Da es sich in den behandelten Problemstellungen um rein laminare Strömungsprobleme handelt, vereinfacht sich diese Datei stark. Es muss lediglich für den Parameter `simulationType` der Wert `laminar` angegeben werden.

```

1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "constant";
7     object       turbulenceProperties;
8 }
9
10 simulationType laminar;

```

Flüssigkeitsabhängige Konstanten

Im folgenden werden die *flüssigkeitsabhängigen Konstanten* erläutert. Diese sind die Stoffwerte der NEWTONschen Flüssigkeiten *Wasser* und der *Glycerol/Wasser-Lösung* und der nicht-NEWTONschen Flüssigkeit - der *Prästol 2540/Wasser-Lösung*.

⇒ **Datei `transportProperties (Wasser)`**: Mit dieser Datei werden die Stoffwerte von *Wasser* und der umgebenden *Luft* festgelegt. Das Listing zeigt die entsprechenden übergebenen Stoffwerte (vgl. mit Abschnitt 2.5). Für beide Phasen wurde ein NEWTONsches Fluid angenommen, mit den

entsprechenden Werten für die kinematische Viskosität ν , der Dichte ρ und der Oberflächenspannung σ .

```
1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "constant";
7     object       transportProperties;
8 }
9
10 phases (water air);
11
12 water
13 {
14     transportModel  Newtonian;
15     nu              1.004e-06;
16     rho             998.21;
17 }
18
19 air
20 {
21     transportModel  Newtonian;
22     nu              1.535e-05;
23     rho             1.188;
24 }
25
26 sigma 0.07275;
```

⇒ **Datei transportProperties (Glycerol/Wasser-Lösung):** Nachfolgende Datei zeigt analog zu obigem Listing die Stoffwerte der *Glycerol/Wasser-Lösung* und der umgebenden Luft (vgl. mit Abschnitt 2.5). Auch hier wurde für beide Phasen ein NEWTONsches Fluid angenommen.

```
1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "constant";
7     object       transportProperties;
8 }
9
10 phases (glycwat air);
11
12 glycwat
13 {
14     transportModel  Newtonian;
15     nu              1.3052e-06;
16     rho             1024.6;
17 }
```

```

18
19 air
20 {
21     transportModel  Newtonian;
22     nu              1.535e-05;
23     rho             1.188;
24 }
25
26 sigma 0.07224;

```

⇒ **Datei `constitutiveProperties` (Prästol 2540/Wasser-Lösung):** Diese Datei enthält sämtliche Koeffizienten um das viskoelastische Fluid bzw. die konstitutive Beziehung zwischen den Spannungen und den Geschwindigkeiten zu modellieren (vgl. mit Abschnitt 2.5). Der prinzipielle Aufbau entspricht jenem der oben beschriebenen Dateien der `transportProperties` von *Wasser* und der *Glycerol/Wasser-Lösung*. In diesem konkreten Fall ist jene Lösung mit einem Massenanteil von $m = 10$ ppm gezeigt.

```

1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     object       constitutiveProperties;
7 }
8
9 phases (praestol air);
10
11 praestol
12 {
13     parameters
14     {
15         type      Oldroyd-BLog;
16
17         rho       rho [1 -3 0 0 0 0 0] 998.21;
18         etaS      etaS [1 -1 -1 0 0 0 0] 1.002e-3;
19         etaP      etaP [1 -1 -1 0 0 0 0] 1.08991e-3;
20         lambda    lambda [0 0 1 0 0 0 0] 4.97e-3;
21         stabilization coupling;
22     }
23 }
24
25 air
26 {
27     parameters
28     {
29         type      Newtonian;
30         rho       rho [1 -3 0 0 0 0 0] 1.188;
31         eta       eta [1 -1 -1 0 0 0 0] 15.35e-6;
32     }
33 }

```

```
34
35 passiveScalarProperties
36 {
37     solvePassiveScalar off;
38     D D [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1e-9;
39 }
40
41 sigma sigma [ 1 0 -2 0 0 0 0 ] 0.07274;
```

A.2.3. System

Nachfolgend werden die nötigen Dateien bezüglich der Steuerung der Simulation, der Diskretisierung und den gewählten Solvern, der Initialisierung der Zellen mit der jeweiligen Phase als auch der Prozessoraufteilung gelistet. Auch hier erfolgt wie im obigen Abschnitt eine Unterteilung in Dateien, welche abhängig bzw. nicht abhängig der jeweiligen Flüssigkeit sind.

Flüssigkeitsunabhängige Dateien

Flüssigkeitsunabhängige System-Dateien sind zum einen die Aufteilung des Rechengebietes auf mehrere Prozessoren und zum anderen die Initialisierung der Zellen mit der jeweiligen Phase. Diese sind in allen Simulationen ident.

⇨ **Datei `decomposeParDict`:** Diese Datei dient zur Zerlegung des gesamten Rechengebietes bzw. Netzes für die parallele Rechnung mittels `mpirun`.

```
1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "system";
7     object       decomposeParDict;
8 }
9
10 numberOfSubdomains 8;
11
12 method scotch;
13
14 simpleCoeffs
15 {
16     n      (4 1 2);
17     delta  0.001;
18 }
19
20 hierarchicalCoeffs
21 {
22     n      (1 1 1);
23     delta  0.001;
24     order  xyz;
```

```

25 }
26
27 manualCoeffs
28 {
29     dataFile    "";
30 }
31
32 distributed no;
33
34 roots    ( );

```

Als Methode der Zerlegung des Rechengebiets wurde die `scotch`-Methode verwendet ohne weiterer Spezifizierung. Die Zerlegung erfolgte hierbei in 8 Teile, ersichtlich unter dem Parameter mit der Bezeichnung `numberOfSubdomains`. Im Falle der nicht-NEWTONschen Flüssigkeit wurden 16 Prozessoren verwendet.

⇨ **Datei `setFieldsDict`:** Diese Datei dient zur Initialisierung der Phasen am Beginn der Simulation. Hiermit wurde das mit Flüssigkeit gefüllte Becken definiert, welches von Luft umgeben ist. Bis auf den Parameter `volScalarFieldValue` welcher hier mit dem Wort `alpha.water` (analog `alpha.glycwat` und `alpha.praestol`) gesetzt wurde, ist auch diese Datei für alle Flüssigkeiten ident, jedoch mit der entsprechenden Adaption.

```

1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "system";
7     object       setFieldsDict;
8 }
9
10 defaultFieldValues
11 (
12     volScalarFieldValue alpha.water 0
13 );
14
15 regions
16 (
17     boxToCell
18     {
19         box (-0.05 -0.05 0) (0.15 0.15 0.05);
20         fieldValues
21         (
22             volScalarFieldValue alpha.water 1
23         );
24     }
25 );

```

Mittels `boxToCell` wird das von der Flüssigkeit gefüllte Gebiet in der Geometrie erfasst. Dabei muss der Anfangs- und Endpunkt des Quaders angegeben werden. Dies wird mittels `box` bewerkstelligt.

Flüssigkeitsabhängige Dateien

Die *flüssigkeitsabhängigen System-Dateien* beinhalten die Kontrolldateien zur Steuerung der Simulation als auch die gewählten Solver und Diskretisierungsmethoden, welche für die verwendeten Flüssigkeiten unterschiedlich sind.

⇒ **Datei controlDict (Wasser):** Diese Datei dient zur Steuerung der kompletten Simulation und wird in diesem Abschnitt für *Wasser* genauer erläutert.

```
1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "system";
7     object       controlDict;
8 }
9
10 application      interFoam;
11
12 startFrom        latestTime;
13
14 startTime        0;
15
16 stopAt           endTime;
17
18 endTime          1;
19
20 deltaT           0.001;
21
22 writeControl     adjustableRunTime;
23
24 writeInterval    0.01;
25
26 purgeWrite       0;
27
28 writeFormat      ascii;
29
30 writePrecision   6;
31
32 writeCompression uncompressed;
33
34 timeFormat       general;
35
36 timePrecision    6;
37
38 runTimeModifiable yes;
39
40 adjustTimeStep   yes;
41
42 maxCo            1;
```

```

43
44 maxAlphaCo          1;
45
46 maxDeltaT           1;
47
48 functions
49 {
50     #includeFunc singleGraph
51
52     /*fileUpdate1
53     {
54         type          timeActivatedFileUpdate;
55         libs          ("libutilityFunctionObjects.so");
56         writeControl   timeStep;
57         writeInterval  1;
58         fileToUpdate   "$FOAM_CASE/constant/g";
59         timeVsFile
60         (
61             (-1 "$FOAM_CASE/constant/g.before")
62             (1 "$FOAM_CASE/constant/g.after")
63         );
64     } */
65 }

```

Hier wird unter anderem der verwendete Solver, hier `interFoam`, Startzeit `startTime` und Endzeit `endTime` der Simulation als auch die nötigen Parameter für den Zeitschritt angegeben. Dabei wird ein sich dynamisch ändernder Zeitschritt angewendet, welcher unter `writeControl` als `adjustableRunTime` eingestellt wird. Auch wurde die maximale `COURANT`-Zahl unter `maxCo` mit Eins festgelegt. Der auskommentierte Teil im Feld `functions` welcher als `fileUpdate1` genannt wurde diente in den ersten Simulationsversuchen für einen besseren Anlauf. Hierbei wurde die Erdbeschleunigung `g` erst nach einer Zeit von einer Sekunde hinzugeschaltet.

⇒ **Datei `controlDict` (Glycerol/Wasser-Lösung):** Im Falle der *Glycerol/Wasser-Lösung* ergab sich eine idente Kontrolldatei wie im Fall für *Wasser* auf Seite 118.

⇒ **Datei `controlDict` (Prästol 2540/Wasser-Lösung):** Der grundsätzliche Aufbau dieser Datei entspricht jenen der vorherigen `NEWTON`schen Flüssigkeiten. Einziger Unterschied ist eine deutlich kleinere `COURANT`-Zahl `maxCo` bzw. `maxAlphaCo` von `0.2`.

```

1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class   dictionary;
6     object  controlDict;
7 }
8
9 application      rheoInterFoam;
10
11 startFrom        startTime;
12

```

Anhang A. Preprocessing

```
13 startTime          0;
14
15 stopAt             endTime;
16
17 endTime            1;
18
19 deltaT              0.000001;
20
21 writeControl        adjustableRunTime;
22
23 writeInterval       0.01;
24
25 purgeWrite          0;
26
27 writeFormat         ascii;
28
29 writePrecision      6;
30
31 writeCompression    off;
32
33 timeFormat          general;
34
35 timePrecision        6;
36
37 runTimeModifiable  yes;
38
39 adjustTimeStep      yes;
40
41 maxCo                0.2;
42
43 maxAlphaCo           0.2;
44
45 maxDeltaT            0.001;
46
47 functions
48 { }
```

⇒ **Datei fvSchemes (Wasser):** In dieser Datei werden die Diskretisierungsmethoden der einzelnen Terme der Erhaltungsgleichungen von *Wasser* festgelegt. Für die genaue mathematische Modellierung der verwendeten Methoden wird auf Abschnitt 3.4 auf Seite 40 verwiesen.

```
1 FoamFile
2 {
3     version          2.0;
4     format           ascii;
5     class            dictionary;
6     location         "system";
7     object           fvSchemes;
8 }
9
```

```

10 ddtSchemes
11 {
12     default      Euler;
13 }
14
15 gradSchemes
16 {
17     default      Gauss linear;
18 }
19
20 divSchemes
21 {
22     div(rhoPhi,U)      Gauss linearUpwind grad(U);
23     div(phi,alpha)     Gauss linearUpwind grad(alpha);
24     div(phi*rb,alpha)  Gauss linearUpwind grad(alpha);
25     div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U))))      Gauss linear;
26 }
27
28 laplacianSchemes
29 {
30     default      Gauss linear corrected;
31 }
32
33 interpolationSchemes
34 {
35     default      linear;
36 }
37
38 snGradSchemes
39 {
40     default      corrected;
41 }

```

⇒ **Datei fvSchemes (Glycerol/Wasser-Lösung):** Diese Datei ist für die *Glycerol/Wasser-Lösung* völlig ident mit jener von *Wasser* auf Seite 120.

⇒ **Datei fvSchemes (Prästol 2540/Wasser-Lösung):** Die für die *Prästol 2540/Wasser-Lösung* verwendeten Solver sind alle bereits aus den zuvor besprochenen Fällen bekannt. Der einzige Unterschied besteht in der Verwendung von `GaussDefCmpw cubista` für die Divergenzterme bezüglich des Spannungstensors. Für die genaue mathematische Beschreibung sei auf 3.4.2 verwiesen.

```

1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class   dictionary;
6     object  fvSchemes;
7 }
8
9 ddtSchemes
10 {
11     default      Euler;

```

Anhang A. Preprocessing

```
12 }
13
14 gradSchemes
15 {
16     default          Gauss linear;
17     grad(p)          Gauss linear;
18     grad(U)          Gauss linear;
19     linExtrapGrad    Gauss linear;
20 }
21
22 divSchemes
23 {
24     default none;
25     div(Sum(tau))     Gauss linear;
26     div(grad(U))      Gauss linear;
27
28     div(rhoPhi,U)     Gauss limitedLinearV 1;
29
30     div(phi,alpha)    Gauss vanLeer01;
31     div(phiRb,alpha)  Gauss linear;
32
33     div(eta*alpha*dev2(T(gradU))) Gauss linear;
34
35     div(phi,theta.praestol) GaussDefCmpw cubista;
36     div(phi,theta.air)      GaussDefCmpw cubista;
37     div(phi,tau.praestol)   GaussDefCmpw cubista;
38     div(phi,tau.air)        GaussDefCmpw cubista;
39 }
40
41 laplacianSchemes
42 {
43     default          Gauss linear corrected;
44 }
45
46 interpolationSchemes
47 {
48     default          linear;
49 }
50
51 snGradSchemes
52 {
53     default          corrected;
54 }
55
56 fluxRequired
57 {
58     default          no;
59     p_rgh;
60     pcorr;
61     alpha;
```

62 }

⇒ **Datei fvSolution (Wasser):** Im nachfolgenden Listing erfolgt unter anderem die Auswahl und Kontrolle der entsprechenden Konditionierungs- und Berechnungsalgorithmen, sowie die Festlegung der verwendeten Relaxationsfaktoren. Des Weiteren wird auch die Geschwindigkeits-/Druck-Kopplung in diesem Listing definiert. Die genaue mathematische Beschreibung der Konditionierungs- und Berechnungsmethoden ist in Abschnitt 3.5 und jene der Relaxationsfaktoren in Abschnitt 3.5.3 dargestellt.

```

1 FoamFile
2 {
3     version      2.0;
4     format       ascii;
5     class        dictionary;
6     location     "system";
7     object       fvSolution;
8 }
9
10 solvers
11 {
12     "alpha.water.*"
13     {
14         nAlphaCorr      2;
15         nAlphaSubCycles 1;
16         cAlpha          1;
17
18         MULESCorr       yes;
19         nLimiterIter    5;
20
21         solver          smoothSolver;
22         smoother        symGaussSeidel;
23         tolerance       1e-8;
24         relTol          0;
25     }
26
27     "pcorr.*"
28     {
29         solver          GAMG;
30         smoother        GaussSeidel;
31         tolerance       1e-5;
32         relTol          0;
33     }
34
35     p_rgh
36     {
37         solver          GAMG;
38         smoother        GaussSeidel;
39         tolerance       1e-07;
40         relTol          0.05;
41     }

```

```

42
43     p_rghFinal
44     {
45         $p_rgh;
46         relTol 0;
47     }
48
49     U
50     {
51         solver      smoothSolver;
52         smoother    symGaussSeidel;
53         tolerance   1e-06;
54         relTol      0;
55     }
56 }
57
58 PIMPLE
59 {
60     momentumPredictor      no;
61     nOuterCorrectors        1;
62     nCorrectors              3;
63     nNonOrthogonalCorrectors 0;
64 }
65
66 relaxationFactors
67 {
68     equations
69     {
70         ".*" 0.4;
71     }
72 }

```

Erwähnenswert ist hier der Parameter `cAlpha`. Dieser dient zur Kompression der Trennfläche zwischen den Fluiden, wobei 0 keine Kompression, 1 geringe Kompression und Werte über 1 erhöhte Kompression bedeuten. Je höher `cAlpha` gewählt wird, desto schärfer wird die Trennfläche zwischen den Fluiden aufgelöst.

Die Lösung der Druckkorrekturgleichung "`pcorr.`" nach dem Druck `p_rgh` erfolgt mittels der Multigrid-Methode `GAMG`, die Vorkonditionierung des Gleichungssystems mit der *Cholesky*-Zerlegung `DIC`. Die genaue mathematische Beschreibung ist, wie oben bereits erwähnt, dem Abschnitt 3.5 zu entnehmen.

Die Kopplung von Geschwindigkeit und Druck erfolgte mit dem `PIMPLE`-Algorithmus.

Für diese Simulation wurden alle Gleichungen und Felder mit einem *Relaxationsfaktor* $\zeta^\phi = 0.4$ versehen.

⇒ **Datei `fvSolution` (Glycerol/Wasser-Lösung):** Das Listing für die *Glycerol/Wasser-Lösung* ist absolut ident der von *Wasser* auf Seite 123 mit Ausnahme eines geringeren *Relaxationsfaktors*, welcher als $\zeta^\phi = 0.25$ definiert wurde.

⇒ **Datei fvSolution (Prästol 2540/Wasser-Lösung):** Der prinzipielle Aufbau bezüglich der Steuerung der numerischen Lösung unterscheidet sich auch im nicht-NEWTONSchen Fall nicht wesentlich von den anderen Fällen. Unterschiede ergeben sich nur im Detail, wie unten beschrieben.

```

1 FoamFile
2 {
3     version 2.0;
4     format  ascii;
5     class  dictionary;
6     object  fvSolution;
7 }
8
9 solvers
10 {
11     "alpha.praestol.*"
12     {
13         nAlphaCorr      2;
14         nAlphaSubCycles 2;
15         cAlpha          0.3;
16
17         MULESCorr       yes;
18         nLimiterIter    3;
19
20         solver          smoothSolver;
21         smoother        symGaussSeidel;
22         tolerance       1e-10;
23         relTol          0;
24     }
25
26     "pcorr.*"
27     {
28         solver          GAMG;
29         smoother        GaussSeidel;
30         tolerance       1e-10;
31         relTol          0;
32     }
33
34     p_rgh
35     {
36         solver          GAMG;
37         smoother        GaussSeidel;
38         tolerance       1e-10;
39         relTol          0;
40     }
41
42     p_rghFinal
43     {
44         $p_rgh;
45         relTol 0;
46     }

```

```
47
48     "(theta.*|tau.*|U)"
49     {
50         solver PBiCG;
51         preconditioner
52         {
53             preconditioner DILU;
54         }
55         tolerance 1e-10;
56         relTol 0;
57         minIter 0;
58         maxIter 1000;
59     }
60 }
61
62 PIMPLE
63 {
64     nInIter 1;
65     SIMPLEC true;
66
67     nCorrectors 1;
68     nNonOrthogonalCorrectors 0;
69 }
70
71 relaxationFactors
72 {
73     equations
74     {
75         p 0.2;
76         U 0.3;
77         tau 0.2;
78         theta 0.2;
79     }
80 }
```

Um die Probleme während der Simulation, welche im Konvergenzverhalten der Farbfunktion α auftraten, in den Griff zu bekommen, wurde der Kompressionsfaktor c_{Alpha} von 1 auf 0.3 reduziert. Des Weiteren wurden die Relaxationsfaktoren ζ^{ϕ} der Feldgrößen p , \mathbf{U} , $\boldsymbol{\tau}$ und Θ auf sehr niedrige Werte gesetzt.

Die Kopplung von Geschwindigkeit und Druck erfolgt auch im viskoelastischen Fall mit PIMPLE, wobei jedoch anstelle von SIMPLE der angepasste SIMPLEC-Algorithmus verwendet wurde.

A.3. Verwendete Solver

An dieser Stelle sind die in OpenFOAM verwendeten Solver zur Lösung der betrachteten Mehrphasenströmung für die unterschiedlichen Flüssigkeiten mit der entsprechenden Definition kurz erwähnt.

A.3.1. interFoam

Zur Lösung der Mehrphasenströmung zwischen dem jeweiligen NEWTONschen-Fluid und der umgebenden Luft wurde der in der verwendeten OpenFOAM -Version enthaltene `interFoam`-Solver herangezogen. Entsprechend der offiziellen Dokumentation von GREENSHIELDS [9] lautet dessen Beschreibung:

Solver for 2 incompressible, isothermal immiscible fluids using a VOF (volume of fluid) phase-fraction based interface capturing approach.

A.3.2. rheoInterFoam

Im Falle der mehrphasigen Strömung zwischen einem viskoelastischen Fluid und der umgebenden Luft konnte keine Implementierung in OpenFOAM herangezogen werden. Abhilfe schaffte das externe, für OpenFOAM konzipierte Paket RheoTool . Dieses enthielt einen passenden Solver mit dem Namen `rheoInterFoam`. Die offizielle Dokumentation von PIMENTA und ALVES [14] enthält folgende Beschreibung:

Transient solver for pressure-driven, two-phase, laminar, isothermal flows, using the volume-of-fluid (VOF) approach. Selection of rheology for each phase is general among all the available GNF and viscoelastic models.

A.4. Verwendete Software

Dieser letzte Abschnitt fasst die Versionshinweise zu den verwendeten Softwarepaketen bzw. Programmiersprachen bezüglich dem Pre-Processing, der Simulation selbst und der Datenauswertung, dem Post-Processing, zusammen.

⇒ **Salome:** *Version: 8.4.0.* Diese kostenlose Open-Source Software wurde zur Erstellung des Netzes verwendet, welches anschließend mit einem passenden Python-Skript in ein OpenFOAM lesbares Format konvertiert wurde.

⇒ **OpenFOAM:** *Version: 5 und 6.* Diese kostenlose Open-Source CFD-Toolbox wurde für die numerischen Berechnungen aller betrachteten Fälle verwendet.

⇒ **RheoTool:** *Version: 4.0.* Mit dieser Open-Source Toolbox wurden die viskoelastischen Simulationen durchgeführt. Mit RheoTool ist es unter anderem möglich, generalisierte NEWTONsche Fluide (GNF), sowie viskoelastische, mehrphasige Strömungsprobleme zu behandeln.

⇒ **ParaView:** *Version: 5.4.0.* Mit dieser Post-Processing Plattform erfolgte die graphischen Auswertung der Rechenergebnisse. Sämtliche Bilder der jeweiligen Simulationen wurden mit Hilfe von ParaView erstellt.

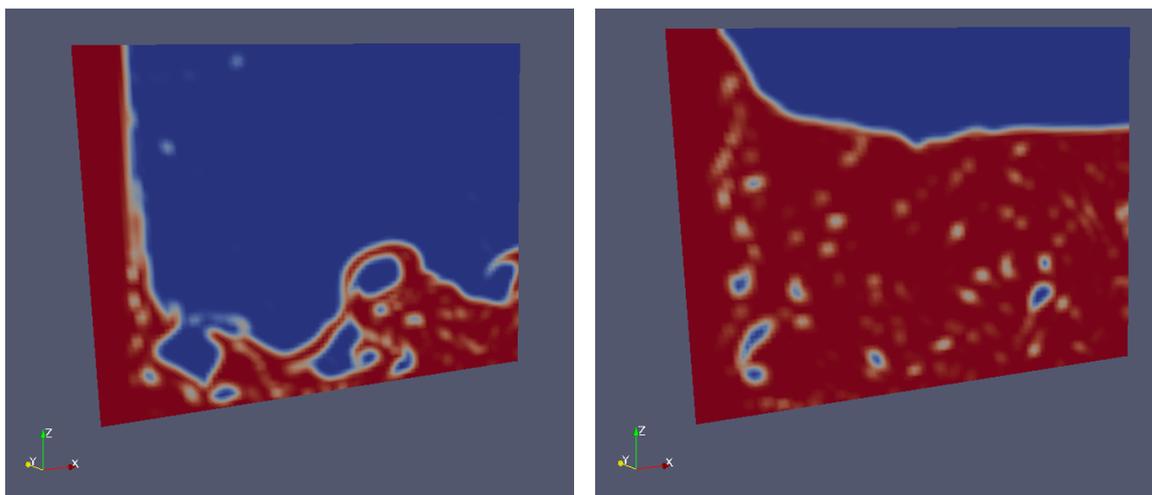
⇒ **Python:** *Version: 3.7.3.* Die physikalische Analyse der Rechenergebnisse, darunter die Erstellung der in dieser Arbeit vorkommenden Plots, wurde mit dieser Programmiersprache bewerkstelligt. Hierbei wurden die Module NumPy (numerisches Python, *Version: 1.17.4*), SciPy (wissenschaftliches Python, *Version: 1.3.2*), Matplotlib (Ploterstellung, *Version: 3.1.1*) sowie auch SymPy (symbolisches Python, *Version: 1.4*) in erster Linie verwendet.

Performance-Test

In diesem Kapitel wird die Performance des `interFoam`-Solvers in OpenFOAM mit steigender Prozessoranzahl verglichen mit der Idealperformance erläutert. Die hierbei verwendete Modellsimulation behandelt eine einfache Füllung eines Tanks mit Wasser.

B.1. Modell

Wie bereits erwähnt, beschreibt das für den Performance-Test verwendete Modell die Füllung eines Tanks, wie in Abbildung B.1 für zwei unterschiedliche Zeitpunkte ersichtlich. Die Simulationszeit wurde dabei auf 10 s gesetzt. Für die Simulation wurden 1, 2, 4, 8, 16 und 32 Prozessoren eines AMD-Servers am Institut parallel verwendet und die benötigte Zeit zur Lösung des Problems aufgezeichnet, um anschließend den Verlauf zwischen der Anzahl der verwendeten Prozessoren und der Geschwindigkeit darstellen zu können. Die Aufteilung des Rechengebietes mit `decomposePar` wurde bei Verwendung von n Prozessoren in n Teile entlang der z -Achse durchgeführt. Die Elementgröße liegt konstant bei 1 mm und die Eintrittsgeschwindigkeit in den Behälter liegt bei 1 m s^{-1} .



(a) Füllung des Tanks nach 2 s

(b) Füllung des Tanks nach 6 s

Abbildung B.1 Füllung des Tanks nach 2 unterschiedlichen Zeitschritten.

B.2. Ergebnisse

Die gemessenen Zeitwerte sind in Tabelle B.1 und der zugehörige grafische Verlauf ist in Abbildung B.2 ersichtlich. Es lässt sich gut zeigen, dass sich mit steigender Prozessoranzahl eine Verminderung der Simulationszeit auftritt. Der Idealfall wäre bei doppelter Prozessoranzahl eine Halbierung der Simulationszeit. Dieser Verlauf wird mittels der roten Linie in Abbildung B.2 beschrieben. OpenFOAM mit der Verwendung des `interFoam`-Solvers jedoch zeigt eine Abweichung vom idealen Verlauf wie aus der blauen Linie hervorgeht. Es lässt sich gut erkennen, dass mit zunehmender Prozessoranzahl die Abweichung von der Ideallinie immer größer wird.

Tabelle B.1 Benötigte Zeiten zur Simulation der Befüllung des Tanks mit unterschiedlicher Prozessoranzahl.

Prozessoren n_{CPU} [–]	Execution Time t_{exec} [s]	Clock Time t_{clock} [s]
1	1544.55	1545
2	857.23	857
4	446.88	447
8	275.55	275
16	186.24	186
32	150.03	150

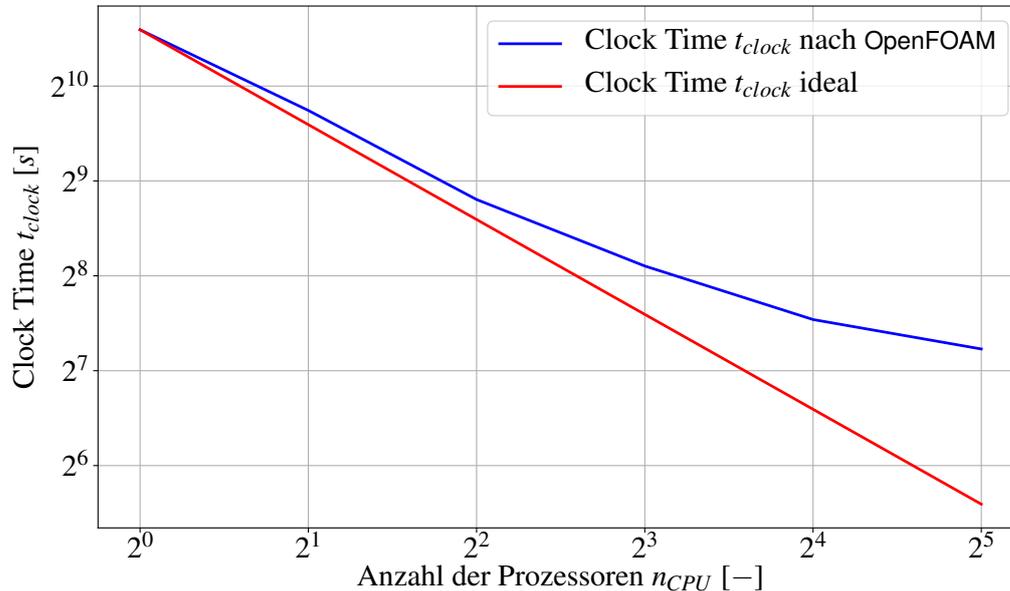


Abbildung B.2 Verlauf der benötigten CPU-Zeit zwischen OpenFOAM und dem Idealfall des linearen Verlaufes.

Als Fazit lässt sich schlussfolgern, dass die Verwendung von sehr hohen Prozessorzahlen nicht ideal ist, da das Verhältnis der gewonnenen Zeit in Relation zu den benötigten Ressourcen, also der Prozessoranzahl, sinkt.

Abbildungsverzeichnis

Kapitel 2. Physikalisches Modell	3
2.1 Schematische Darstellung der zu untersuchenden Strömung.	4
2.2 Störung der Strahloberfläche des betrachteten Fluidstrahles.	5
2.3 Allgemeine Darstellungen der Gammafunktion $\Gamma(t)$ und der modifizierten BESSELfunktion erster Art $I_n(kr)$	9
2.4 Allgemeine Darstellung der modifizierten BESSELfunktion zweiter Art $K_n(kr)$	10
2.5 Allgemeine Darstellungen der Lösung der Dispersionsrelation (2.35) bei einem ungestörten Radius $\tilde{r} = 0.0012 m$ für Wasser.	12
Kapitel 3. Mathematisches Modell	27
3.1 Darstellung des Rechengebiets Λ als Teil des gesamten Reservoirs.	28
3.2 Die Randbedingungen Γ_j im verwendeten Rechengebiet Λ bzw. am Rand $\partial\Lambda$	29
3.3 Geometrische Bedingungen zur Herleitung des Gradienten.	42
3.4 Prinzipielle Darstellung des <i>Upwind-Schemas</i> im eindimensionalen Fall.	43
3.5 Zweidimensionales Problem zur Herleitung des diskreten Diffusionsterms.	47
Kapitel 4. Numerische Ergebnisse	55
4.1 Darstellung des Rechenmodells bzw. des Koordinatensystems (r, z)	56
4.2 Prinzipielle Darstellung der Ermittlung des mittleren Strahlradius' $\bar{r}(\bar{z})$ in einem Wellenelement zwischen einem Wellental und einem unmittelbar folgenden Wellenberg.	58
4.3 Schematische Darstellung eines Wellenpaketes zur Ermittlung der Wellenlänge und ihre axiale Position.	60
4.4 Darstellung der räumlichen dimensionslosen Dämpfung δ über der WEBERzahl We aller untersuchten Fluide.	61
4.5 Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 m$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W	64
4.6 Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	65

4.7	Verlauf des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	66
4.8	Verlauf der gemittelten WEBERZahl $\overline{We}(z)$ für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERZahl nach BERNOULLI.	67
4.9	Histogramm der aus den Simulationsergebnissen ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r} _{z=h}$ der auftretenden Kapillarwellen für Wasser bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s	68
4.10	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskose Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W für Wasser.	69
4.11	Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für Wasser für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W	70
4.12	Fotoaufnahmen aus experimentellen Versuchen mit Wasser von RATZBERGER [16] bei den WEBERzahlen $We _{z \approx h} = 4, 7, 11$ nahe dem Aufprallpunkt.	71
4.13	Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 m$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W	73
4.14	Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	74
4.15	Verlauf des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	75
4.16	Verlauf der gemittelten WEBERZahl $\overline{We}(z)$ für die Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERZahl nach BERNOULLI.	76
4.17	Histogramm der ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r} _{z=0.03}$ der auftretenden Kapillarwellen der Glycerol/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s	77
4.18	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskose Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W für die Glycerol/Wasser-Lösung.	78
4.19	Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für die Glycerol/Wasser-Lösung für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W	79
4.20	Fotoaufnahme aus Versuchen mit der Glycerol/Wasser-Lösung von RATZBERGER [16] bei einer WEBERzahl $We _{z \approx h} = 10$ nahe dem Aufprallpunkt.	80

4.21	Simulationsergebnisse der Farbfunktion $\alpha(r, z)$ des Fluidstrahls nahe am Auftreffpunkt auf die Flüssigkeitsoberfläche bei $z = 0.03 m$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m	83
4.22	Verlauf des gestörten Radius' $\hat{r}(z)$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	84
4.23	Verlauf des mittleren Radius' $\bar{r}(z)$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Radiusverlauf nach BERNOULLI.	85
4.24	Verlauf der gemittelten WEBERZahl $\overline{We}(z)$ für die Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m . Die schwarze, gestrichelte Linie repräsentiert hier den theoretischen Verlauf der WEBERZahl nach BERNOULLI.	86
4.25	Histogramm der ermittelten relativen Wellenlängen $\lambda/\bar{r} _{z=h}$ der auftretenden Kapillarwellen der Prästol 2540/Wasser-Lösung bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m mit gekennzeichneten Mittelwert \bar{x} und Standardabweichung s	87
4.26	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der theoretischen Vorhersage der Dispersionsrelation für viskoelastische Fluide und den experimentellen Daten bei unterschiedlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteilen m der Prästol 2540/Wasser-Lösung.	88
4.27	Vergleich der simulierten, relativen Störungen $f_{sim}(z)/f_{sim,0}$ mit den theoretisch vorhergesagten räumlich gedämpften Amplituden $f(z)/f_{sim,0}$ über die Höhe z stromauf vom Aufprallpunkt für die Prästol 2540/Wasser-Lösung für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten W und Massenanteile m	89
4.28	Fotoaufnahmen aus experimentellen Versuchen mit der Prästol 2540/Wasser-Lösung von RATZBERGER [16] bei unterschiedlichen Massenkonzentrationen m und WEBERZahlen $We _{z \approx h}$ nahe dem Aufprallpunkt.	90
4.29	Darstellung der Simulationsergebnisse im VON OHNESORGE-Diagramm.	91
Anhang A. Preprocessing		95
A.1	Verwendete zweidimensionale Geometrie zur Erstellung des Netzes.	96
A.2	Erstellung des Netzes einer ausgewählten Fläche.	97
A.3	Diskretisierung mittels geometrischer Reihe.	97
A.4	Anlegen der Gruppe <code>atmosphere</code>	98
A.5	Generiertes dreidimensionales Netz.	99
Anhang B. Performance-Test		129

Abbildungsverzeichnis

B.1	Füllung des Tanks nach 2 unterschiedlichen Zeitschritten.	129
B.2	Verlauf der benötigten CPU-Zeit zwischen OpenFOAM und dem Idealfall des linearen Verlaufes.	130

Tabellenverzeichnis

Kapitel 2. Physikalisches Modell	3
2.1 Stoffwerte von Wasser bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$	24
2.2 Stoffwerte der 11% Glycerol/Wasser-Lösung bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$ nach RATZBERGER [16].	25
2.3 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 10 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$	25
2.4 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 25 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$	25
2.5 Stoffwerte der Prästol 2540/Wasser-Lösung mit 60 ppm bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$	26
2.6 Stoffwerte von Luft bei einer Umgebungstemperatur $\vartheta_a = 20^\circ C$ und einem Umgebungsdruck $p_a = 1 bar$	26
Kapitel 3. Mathematisches Modell	27
3.1 Werte für die Parameter α und β von GaussDefCmpw cubista.	44
Kapitel 4. Numerische Ergebnisse	55
4.1 Übersicht aller durchgeführten Simulationen.	55
Anhang B. Performance-Test	129
B.1 Benötigte Zeiten zur Simulation der Befüllung des Tanks mit unterschiedlicher Prozessoranzahl.	130

Tabellenverzeichnis

Literatur

- [1] T. Arens u. a. *Mathematik*. 2. Aufl. Spektrum, 2011.
- [2] K.M. Awati und T. Howes. „Stationary waves on cylindrical fluid jets“. In: *American Association of Industrial Nurses Journal/Association of Physics Teachers* 64 (1996), S. 808–811.
- [3] A. Al-Baldawi. *Modellierung und Simulation viskoelastischer Polymerschmelzen*. 1. Aufl. Kassel University Press GmbH, 2012.
- [4] H.-J. Bartsch. *Taschenbuch mathematischer Formeln*. 21. Aufl. Hanser, 2007.
- [5] G. Brenn, Zhengbai Liu und F. Durst. „Linear analysis of the temporal instability of axisymmetrical non-Newtonian liquid jets“. In: *International Journal of Multiphase Flow* 26 (2000), S. 1621–1644.
- [6] R. Comminal u. a. „Numerical simulation of the planar extrudate swell of pseudoplastic and viscoelastic fluids with the streamfunction and the VOF methods“. In: *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 252 (2018), S. 1–18.
- [7] W.W. Dahmen und A. Reusken. *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. 2. Aufl. Springer, 2008.
- [8] S.M. Damian. „An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces“. Diss. Universidad Nacional del Litoral, 2013.
- [9] C.J. Greenshields. „OpenFoam User Guide, V5.0“. In: *OpenFOAM Foundation Ltd* 230 (2017).
- [10] M.J. Hancock und J.W.M. Bush. „Fluid pipes“. In: *Journal of fluid mechanics* 466 (2002), S. 285–304.
- [11] J.H. Lienhard. „Capillary action in small jets impinging on liquid surfaces“. In: *Journal of Basic Engineering* 90 (1968), S. 137–138.
- [12] F. Moukalled, L. Mangani und M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. 6. Aufl. Springer, 2015.
- [13] M. Niethammer u. a. „An extended volume of fluid method and its application to single bubbles rising in a viscoelastic liquid“. In: *Journal of Computational Physics* 387 (2019), S. 326–355.
- [14] F. Pimenta und M.A. Alves. *rheoTool*. "<https://github.com/fppimenta/rheoTool>". 2016.
- [15] F. Pimenta und M.A. Alves. „Stabilization of an open-source finite-volume solver for viscoelastic fluid flows“. In: *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 239 (2017), S. 85–104.
- [16] R. Ratzberger. „Untersuchung des Auftreffverhaltens vertikaler Flüssigkeitsstrahlen auf ein Reservoir mit freier Spiegeloberfläche“. Bachelorarbeit. Technische Universität Graz, 2012.
- [17] J.W.S.B. Rayleigh. *The theory of sound*. 2. Aufl. Macmillan, 1896.
- [18] Lord Rayleigh. „On the instability of jets“. In: *Proceedings of the London mathematical society* 1 (1878), S. 4–13.