

Anwendungen eines effektiven Stokes-Solvers in der Strömungsmechanik bei besonderer Beachtung von Problemen mit freien Grenzen

Jochen Reichenbach, Christoph Scheurer

1. Einleitung

Der numerischen Behandlung von Problemen aus der Strömungsmechanik wurde in den letzten Jahren große Aufmerksamkeit gewidmet. Die Untersuchung des Einflusses bestimmter Parameter (z. B. Geometrie des Gebietes, Viskosität, Dichte, Oberflächenspannung) ist auf diesem Wege einfacher, schneller und billiger als die Durchführung praktischer Experimente. Durch die numerische Behandlung eines Problems kann die experimentelle Arbeit auf wenige zielgerichtete Versuche beschränkt werden.

Als Grundgleichungen in der Strömungsmechanik sind die Navier-Stokes-Gleichungen bekannt:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \eta \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } \Omega \\ \mathbf{u}(t=0) &= \mathbf{u}^0 \quad \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} &= \mathbf{g} \quad \text{auf } \Gamma \end{aligned}$$

Dieses nichtlineare System partieller Differentialgleichungen läßt sich behandeln, indem eine Iteration linearer Probleme erfolgt, wobei der Term $\rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ durch geeignete Verfahren linearisiert wurde.

Für Probleme mit $Re \leq 1$ wird dieser Term i. a. ganz vernachlässigt und es entstehen die Stokes-Gleichungen.

Zur Lösung solcher Probleme werden sehr viele verschiedene Methoden vorgeschlagen. Bei der Behandlung von Strömungen inkompressibler Medien werden so z. B. Penalty-Verfahren, Uzawa- oder Arrow-Hurwitz-Algorithmen, Fractional-Step-Algorithmen oder direkte Lösungsverfahren benutzt. Das breite Spektrum an eingesetzten Methoden zeigt das Interesse an dieser Problematik, es verdeutlicht aber auch, daß sich noch kein Lösungsverfahren als überlegen erwiesen hat. Ähnlich ist die Frage der Diskretisierung zu betrachten. Finite-Differenzen-Methoden (FDM) und Finite-Elemente-Methoden (FEM) mit den oben genannten Algorithmen werden für viele Aufgaben mit Erfolg eingesetzt. Bei Problemen mit einheitlichen Stoffparametern sind auch Boundary-Element-Methoden (BEM) effektive Lösungsverfahren. Auf einigen Gebieten finden auch analytische Verfahren und Finite-Analytische-Verfahren (FAM) Anwendung.

Hier sollen zweidimensionale Strömungsprobleme betrachtet werden, die aus dreidimensionalen Problemen durch Symmetriebetrachtung entstehen. So können bei einem (ideal) unendlich breiten Kanal (in z-Richtung) die Einflüsse der Seitenränder vernachlässigt werden,

eine Geschwindigkeitskomponente, in z-Richtung existiert nicht, und die Geschwindigkeiten sind für alle z-Werte gleich. Damit kann die z-Richtung völlig vernachlässigt werden, und es entsteht ein (x,y)-System. Analog kann bei rotationssymmetrischen Rohrströmungen die Winkelkomponente weggelassen werden und im (r,z)-Zylindersystem gearbeitet werden. Im folgenden soll nur der Fall des kartesischen (x,y)-Systems betrachtet werden, die Behandlung für das (r,z)-System erfolgt analog. Im Punkt 2. soll als Grundlage für Navier-Stokes-Probleme und andere Anwendungen ein direktes Lösungsverfahren für das Stokes-Problem vorgestellt werden, wie es von Glowinski und Pironneau vorgeschlagen wurde ([1] bis [3]).

Der Punkt 3. beinhaltet dann Erweiterungen auf allgemeinere Probleme und eine dieser Verallgemeinerungen, die Behandlung von Strömungen mit freien Grenzen, wird im Punkt 4. beschrieben.

2. Die Lösung des Stokes-Problems

Es wird das Problem

$$\begin{aligned} \alpha \mathbf{u} - \eta \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} &= \mathbf{g} \quad \text{auf } \Gamma, \quad \int_{\Gamma} \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (2.1)$$

betrachtet. Dabei ist Ω ein endliches, offenes, einfach zusammenhängendes Gebiet des R^2 mit dem Rand Γ . Der Term $\alpha \mathbf{u}$ repräsentiert die Zeitableitung, für $\alpha = 0$ erhält man die stationären Stokes-Gleichungen, sonst wird $\alpha = \frac{\rho}{\Delta t}$ verwendet.

Bemerkung 1:

Die folgenden Überlegungen und Aussagen sind auch auf mehrfach zusammenhängende Gebiete und auf den R^3 übertragbar.

Bemerkung 2:

Andere Randbedingungen sind betrachtet worden in [4]: Verschwinden der Spannungen

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &\equiv \eta (u_{i,j} + u_{j,i}) - p \delta_{ij} \\ \sigma_n &\equiv \sigma_{ij} n_j n_i = 0 \\ \sigma_t &\equiv \sigma_{ij} n_j \tau_i = 0 \end{aligned} \quad , i, j = 1, 2 \quad (2.2)$$

und in [5], [6]:

$$\mathbf{u} \times \mathbf{n} \Big|_{\Gamma_2} = \mathbf{a}, \quad p \Big|_{\Gamma_2} = p^0$$

und

$$\underline{u} \cdot \underline{n} \Big|_{\Gamma_3} = h, \quad \underline{u} \times \underline{\nabla} \times \underline{u} \Big|_{\Gamma_3} = \underline{h} \quad (2.3)$$

Man kann zu (2.1) folgende Variationsformulierung angeben [1]:

Finde $(\underline{u}, \psi) \in W_g$, so daß für alle $(\underline{v}, \varphi) \in W_0$ gilt

$$\alpha \int \underline{u} \cdot \underline{v} \, d\Omega + \eta \int \underline{\nabla} \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \underline{v} \, d\Omega = \int \underline{f} \cdot (\underline{v} + \underline{\nabla} \varphi) \, d\Omega \quad (2.4)$$

Dabei ist

$$V_g = \{ \underline{v} : \underline{v} \in (H^1(\Omega))^2, \underline{v} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma \} \quad (2.5)$$

$$W_g = \{ (\underline{v}, \varphi) : (\underline{v}, \varphi) \in V_g \times H_0^1(\Omega), \int \underline{\nabla} \varphi \cdot \underline{\nabla} \underline{w} \, d\Omega = \int \underline{\nabla} \cdot \underline{v} \, \underline{w} \, d\Omega \text{ für alle } \underline{w} \in H^1(\Omega) \} \quad (2.6)$$

und $H^1(\Omega)$, $H_0^1(\Omega)$ sind die üblichen Sobolew-Räume. Diese Variationsaufgabe kann auf eine Folge von Dirichlet-Problemen zurückgeführt werden. Dazu wird der Operator A betrachtet:

$$A : \lambda \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma) \longrightarrow -\frac{\partial \psi_\lambda}{\partial n} \Big|_{\Gamma} \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma) \quad (2.7)$$

, dabei ist ψ_λ Lösung von

$$\int (\underline{\nabla} \psi + \underline{u}) \underline{\nabla} \varphi \, d\Omega = 0 \text{ für alle } \varphi \in H_0^1, \psi \in H_0^1 \quad (2.8)$$

, \underline{u} Lösung von

$$\int (\alpha \underline{u} \cdot \underline{v} + \eta \underline{\nabla} \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \underline{v}) \, d\Omega = -\int \underline{\nabla} \underline{p} \cdot \underline{v} \, d\Omega \quad (2.9)$$

für alle $\underline{v} \in V_0, \underline{u} \in V_0$

und \underline{p} Lösung von

$$\int \underline{\nabla} \underline{p} \cdot \underline{\nabla} \underline{q} \, d\Omega = 0 \text{ für alle } \underline{q} \in H_0^1, \underline{p} - \lambda \in H_0^1 \quad (2.10)$$

Man kann nun zeigen, daß A einen symmetrischen, positiv definiten Operator darstellt und die Lösung der Gleichung

$$A \lambda = \frac{\partial \psi_0}{\partial n}, \quad \lambda \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma), \quad \frac{\partial \psi_0}{\partial n} \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma) \quad (2.11)$$

die Werte des Drucks von (2.1) auf dem Rand liefert: $\underline{p} \Big|_{\Gamma} = \lambda$. Dabei wird ψ_0 durch die Lösung der folgenden Probleme geliefert:

$$\int (\underline{\nabla} \underline{p}_0 - \underline{f}) \underline{\nabla} \underline{q} \, d\Omega = 0 \text{ für alle } \underline{q} \in H_0^1, \underline{p}_0 \in H_0^1 \quad (2.12)$$

$$\int (\alpha \underline{u}_0 \cdot \underline{v} + \eta \underline{\nabla} \underline{u}_0 \cdot \underline{\nabla} \underline{v}) \, d\Omega = \int (\underline{f} - \underline{\nabla} \underline{p}_0) \underline{v} \, d\Omega \text{ für alle } \underline{v} \in V_0, \underline{u}_0 \in V_g \quad (2.13)$$

$$\int (\underline{\nabla} \psi_0 + \underline{u}_0) \underline{\nabla} \varphi \, d\Omega = 0 \text{ für alle } \varphi \in H_0^1, \psi_0 \in H_0^1 \quad (2.14)$$

Bei bekannten Werten des Druckes auf dem Rand Γ können dann \underline{u} und \underline{p} im gesamten Gebiet durch entkoppelte Dirichlet-Probleme berechnet werden.

Für eine FEM-Diskretisierung benutzt man zweckmäßigerweise eine reguläre Dreieckzerlegung $\{T_h\}$ des Gebietes und setzt

$$H_h^1 = \{ \varphi_h \in C^0(\bar{\Omega}), \varphi_h \Big|_K \in P_1 \text{ für alle } K \in T_h \} \quad (2.15)$$

$$V_h = \{ \underline{v}_h \in (C^0(\bar{\Omega}))^2, \underline{v}_h \Big|_K \in P_2 \times P_2 \text{ für alle } K \in T_h \}$$

P_i – Polynome vom Grad i

Bemerkung 3:

Bei Wahl dieser Räume ist eine Ladyshenskaja-Brezzi-Babuška-Bedingung erfüllt und die Konvergenz der Ordnung $O(h^2)$ für \underline{u} und $O(h)$ für \underline{p} nachgewiesen [1].

Bei einer direkten Lösung von (2.11) entfällt die Hauptarbeit auf die Aufstellung des entsprechenden Gleichungssystems. Wenn man den Stokes-Solver für Iterationsverfahren benutzt, hat dies jedoch den Vorteil, daß die Matrix nur einmal aufgestellt und faktorisiert werden muß. Alle entstehenden Systemmatrizen sind symmetrisch und positiv definit, so daß ein numerisch sehr sicheres Verfahren vorliegt.

3. Behandlung allgemeinerer Probleme

(1) Die üblichen Semidiskretisierungen (bezüglich der Zeit) der instationären Stokes-Gleichungen führen auf eine Form, für die die Überlegungen des Abschnittes 2. mit einigen Modifikationen anwendbar sind.

(2) Bei der Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen

$$\rho \frac{d \underline{u}}{dt} + \rho (\underline{u} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u} - \eta \Delta \underline{u} + \underline{\nabla} \underline{p} = \underline{f} \text{ in } \Omega$$

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{u} = 0 \text{ in } \Omega$$

$$\underline{u}(t=0) = \underline{u}^0 \text{ in } \Omega$$

$$\underline{u} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma$$

(3.1)

kann durch Semidiskretisierung und geeignete Behandlung der konvektiven Glieder der Stokes-Solver ebenfalls als effektives Lösungsmittel eingesetzt werden.

Beispiel 1:

Ein Verfahren der alternierenden Richtungen [3]

$$\begin{aligned} & \rho \frac{\underline{u}^{n+\frac{2}{4}} - \underline{u}^{n+\frac{1}{4}}}{\frac{1}{4} \Delta t} - \frac{2}{3} \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} + \underline{\nabla} \underline{p}^{n+\frac{1}{4}} \\ & = \underline{f}^{n+\frac{1}{4}} + \frac{1}{3} \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} - \rho (\underline{u}^{n+\frac{1}{4}} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} = 0, \quad \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} \Big|_{\Gamma} = \underline{g}^{n+\frac{1}{4}} \text{ für } i=1, i=4$$

$$\rho \frac{\underline{u}^{n+\frac{3}{4}} - \underline{u}^{n+\frac{1}{4}}}{\frac{1}{2} \Delta t} - \frac{1}{3} \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{3}{4}} + \rho (\underline{u}^{n+\frac{3}{4}} \cdot \nabla) \underline{u}^{n+\frac{3}{4}} = \underline{f}^{n+\frac{3}{4}} + \frac{2}{3} \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{1}{4}} - \nabla p^{n+\frac{1}{4}} \quad (3.3)$$

$$\underline{u}^{n+\frac{3}{4}} \Big|_{\Gamma} = \underline{g}^{n+\frac{3}{4}}$$

Dabei erweist sich (3.2) als Stokes-Problem und (3.3) ist eine nichtlineare Aufgabe der Art

$$\alpha \underline{u} - \eta \Delta \underline{u} + \rho (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} = \underline{f} \text{ in } \Omega \quad (3.4)$$

$$\underline{u} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma$$

Diese kann als Variationsaufgabe behandelt werden:

Finde $\underline{u} \in V_g$, so daß $J(\underline{u}) \leq J(\underline{v})$ für alle $\underline{v} \in V_g$ (3.5)

mit $J(\underline{v}) = \frac{1}{2} \int \{ \alpha |\underline{v}|^2 + \eta |\nabla \underline{v}|^2 \} d\Omega$ und $\underline{v} \in V_0$,

so daß für alle $\underline{z} \in V_0$ gilt (3.6)

$$\int \{ \alpha \underline{v} \cdot \underline{z} + \eta \nabla \underline{v} \cdot \nabla \underline{z} \} d\Omega = \int \{ \alpha \underline{v} \cdot \underline{z} + \eta \nabla \underline{v} \cdot \nabla \underline{z} + \rho (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} \cdot \underline{z} - \underline{f} \cdot \underline{z} \} d\Omega \quad (3.7)$$

Ein geeignetes Lösungsverfahren hierfür ist die Methode der konjugierten Gradienten.

Beispiel 2:

Eine Methode der geteilten Schritte (fractional step) [7]:

$$\rho \frac{\underline{u}^{n+\frac{1}{2}} - \underline{u}^n}{\frac{1}{2} \Delta t} - \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{1}{2}} + \nabla p^{n+\frac{1}{2}} + \rho (\underline{u}^n \cdot \nabla) \underline{u}^n = \underline{f}^{n+\frac{1}{2}} \text{ in } \Omega$$

$$\nabla \cdot \underline{u}^{n+\frac{1}{2}} = 0 \text{ in } \Omega$$

$$\underline{u}^{n+\frac{1}{2}} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma \quad (3.8)$$

$$\rho \frac{\underline{u}^{n+1} - \underline{u}^{n+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2} \Delta t} + \rho (\underline{u}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \nabla) \underline{u}^{n+\frac{1}{2}} - \eta \Delta \underline{u}^{n+\frac{1}{2}} + \nabla p^{n+\frac{1}{2}} = \underline{f}^{n+1} \text{ in } \Omega$$

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma_- \quad (3.9)$$

wobei $\Gamma_- = \{ x \in \Gamma : \underline{g}(x) \cdot \underline{n}(x) < 0 \}$

Während (3.8) ein Stokes-Problem darstellt, ist (3.9) ein lineares System 1. Ordnung, das mit einer Charakteristikemethode [8] behandelt werden kann. Das erlaubt die Anwendung einiger up-wind-Formeln zur Behandlung der konvektiven Terme.

(3) Im Falle viskoelastischer Strömungen sind die Reibungsspannungen \underline{T} mit dem Geschwindigkeitsfeld \underline{u} durch rheologische Konstitutivgleichungen verknüpft, so daß weitere Nichtlinearitäten in den Bewegungsgleichungen auftreten. Zur Anwendung des Stokes-Solvers seien zwei Beispiele gegeben.

Beispiel 3:

Die Reibungsspannungen \underline{T} sind explizit angebar (verallgemeinerte newtonsche Fluide, Approximation für langsam veränderliche Prozesse [9])

Als Analogon zu (2.1) wird

$$\alpha \underline{u} - \nabla \cdot \underline{T}(\underline{u}) + \nabla p = \underline{f} \text{ in } \Omega$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ in } \Omega \quad (3.10)$$

$$\underline{u} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma$$

betrachtet. Eine Kleinste-Quadrate-Formulierung ergibt

$$\text{Min } J(\underline{u}) \quad \underline{u} \in V_g \quad (3.11)$$

mit

$$V_g = \{ \underline{v} : \underline{v} \in (H^1(\Omega))^2, \nabla \cdot \underline{v} = 0 \text{ in } \Omega, \underline{v}|_{\Gamma} = \underline{g} \} \quad (3.12)$$

$$J(\underline{u}) = \frac{\alpha}{2} \int |\underline{u} - \underline{z}|^2 d\Omega + \frac{\eta_0}{2} \int |\nabla(\underline{u} - \underline{z})|^2 d\Omega \quad (3.13)$$

, wobei $\underline{z} = \underline{z}(\underline{u}) \in V_g$ Lösung von

$$\alpha \underline{z} - \eta_0 \Delta \underline{z} + \nabla \pi = \underline{f} + \nabla \cdot \underline{T}(\underline{u}) - \eta_0 \Delta \underline{u} \text{ in } \Omega$$

$$\nabla \cdot \underline{z} = 0 \text{ in } \Omega \quad (3.14)$$

$$\underline{z} = \underline{g} \text{ auf } \Gamma$$

ist.

Wieder liegt mit (3.14) ein Stokes-Problem vor, das in jedem Iterationsschritt, etwa eines Konjugierte-Gradienten-Verfahrens, gelöst werden muß.

Beispiel 4:

Die Reibungsspannungen \underline{T} werden durch differentielle Modelle gegeben (Modell von Maxwell, Oldroyd usw.). Zur Integration der hyperbolischen Gleichungen für die T_{ij} sind geeignete Diskretisierungen (up-wind-Verfahren) zu benutzen. Danach entsteht für die Bewegungsgleichungen wieder ein Problem vom Stokes-Typ.

(4) Bei der Einbeziehung freier Grenzen entsteht durch die Randbedingung auf der freien Grenze ein nichtlineares Problem. Außerdem wird die Behandlung durch die Notwendigkeit der Bestimmung der a priori nicht bekannten oder veränderlichen Position der freien Grenze erweitert.

Für die numerisch erfolgreiche, d. h. schnelle und hinreichend exakte Lösung dieser Aufgaben ist die Verfügbarkeit eines entsprechenden Stokes-Solvers von grundlegender Bedeutung. Daneben gewinnt die Diskretisie-

rung der hyperbolischen Glieder der entsprechenden Gleichungen durch spezielle Verfahren, die eine hinreichend genaue Widerspiegelung der Lösung garantieren und zu effektiv auflösbaren Gleichungssystemen führen, eine ebenso große Bedeutung.

4. Probleme mit freien Grenzen

Strömungsprobleme mit freien Grenzen sind in Natur und Technik häufig anzutreffen und können sehr unterschiedlichen Charakters sein. Vom betrachteten Stoffsystem her ist die Unterscheidung in 1-Phasen-Probleme und 2-Phasen-Probleme (bzw. Mehrphasenprobleme) möglich. Echte 1-Phasen-Probleme treten aber nur bei Grenzen gegen Vakuum oder gegen ein festes Medium auf, z. B. beim Stefan-Problem eines schmelzenden oder gefrierenden Eisblockes im Wasserbad. Bei manchen Strömungen ist es aber sinnvoll, die zweite Phase zu vernachlässigen, es seien hier Probleme genannt, bei denen sich Fluid und Gas langsam bewegen. Eine weitere Klassifikationsmöglichkeit ist die Einteilung in „free boundary problems“ und „moving boundary problems“. Dabei sind die FBP's durch stationäre aber a priori nicht bekannte Grenzen gekennzeichnet, die Position der freien Grenzen bei MBP's ist aber zeitlich veränderlich. In manchen Fällen ist eine eindeutige Zuordnung nicht möglich

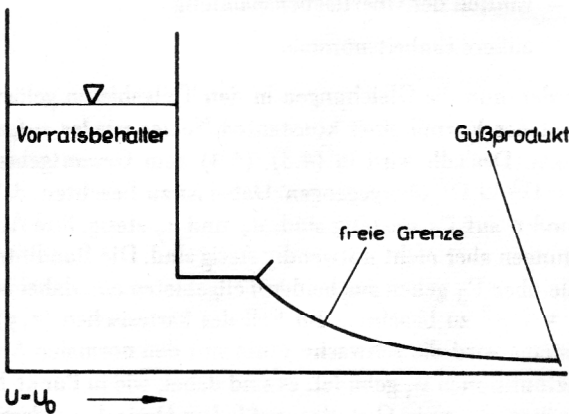


Bild 1
Beispiel eines free-boundary-problems: Gießbeschichtung

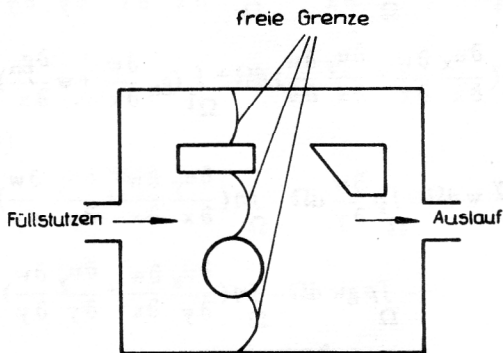


Bild 2
Beispiel eines moving-boundary-problems: Verdrängungs- und Füllvorgang

bzw. der Typ ändert sich, wie z. B. bei Anlaufprozessen mit stationärem Endzustand. Typische Beispiele sind in Bild 1 für FBP's und in Bild 2 für MBP's dargestellt.

Der Charakter der Strömung in der Umgebung der freien Grenze bietet die Grundlage für die dritte wichtige Unterscheidungsmöglichkeit. Man spricht hier einerseits von Stromliniengrenzen, wenn die Beziehung $v_n = 0$ auf der freien Grenze gilt und andererseits bei $v_n \neq 0$ auf der freien Grenze von Fließfrontgrenzen. Das Problem in Bild 2 beinhaltet eine typische Fließfrontgrenze, für eine Stromliniengrenze wird in Bild 3 ein Beispiel angegeben.

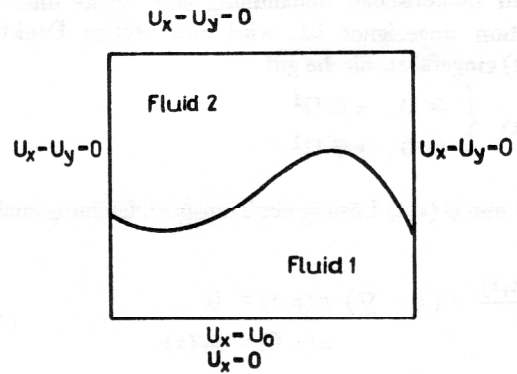


Bild 3
Beispiel eines Problems mit Stromliniengrenze: Ein Cavity-Problem

In der Literatur werden vorwiegend Verfahren für bestimmte Klassen von Problemen angegeben, so sind bevorzugt Stromliniengrenzen und 1-Phasen-Probleme behandelt. ([10] – [13], ...) Hier wird aber ein Verfahren vorgestellt, das für alle gerade erwähnten Probleme einsetzbar ist. Dabei werden alle Probleme prinzipiell als 2-Phasen-Probleme behandelt und eine Neuvernetzung nach jedem Schritt vermieden, da mit einem über die gesamte Rechnung konstanten Netz gearbeitet wird. Ein zentrales Problem der Bearbeitung von Problemen mit freien Grenzen ist die Bestimmung der Position der Grenzlinie. Im überwiegenden Teil der bekannten Methoden wird nach dem Trial-Prinzip gearbeitet, d. h. es werden als Iteration das Feldproblem der (\underline{u}, p) -Berechnung unter Annahme einer fixierten Grenze und das Problem der Berechnung einer neuen freien Grenze aus dem (\underline{u}, p) -Feld und einer weiteren Randbedingung gelöst.

Die Konvergenz eines solchen Prozesses ist aber nicht immer zu gewährleisten. Eine andere Möglichkeit sind Entropie-Verfahren, die oft aber nur ungenaue Bestimmungen der Grenzlinien zulassen. In dieser Arbeit wird deswegen ein nichtiteratives Verfahren zur Grenzlinienbestimmung eingesetzt, wie es von Dervieux und Thomasset in [14] für Rayleigh-Taylor-Instabilitäten vorgeschlagen wurde. Für ein bekanntes (\underline{u}, p) -Feld beruht dieses Verfahren auf den folgenden Überlegungen:

Aus der Inkompressibilität aller beteiligten Medien folgt die Beziehung

$$\underline{u} \cdot \underline{n} = \underline{v} \cdot \underline{n}$$

mit

\underline{u} – Fluid-Geschwindigkeit auf der Grenzlinie

\underline{v} – Geschwindigkeit der Bewegung der Grenzlinie

\underline{n} – Einheitsnormale der Grenzlinie

Ist $\chi(x, t)$ die charakteristische Funktion für das Gebiet Ω^1 , das vom Medium I ausgefüllt ist, d. h.

$$\chi(x, t) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega^1 \\ 0, & x \notin \Omega^1 \end{cases}$$

so gilt dann die Transportgleichung

$$\frac{d\chi(x, t)}{dt} + (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \chi(x, t) = 0 \quad (4.1)$$

$$\chi(x, 0) = \chi_0(x)$$

Da zur numerischen Behandlung eine solche unstetige Funktion ungeeignet ist, wird eine stetige Funktion $\varphi(x, t)$ eingeführt, für die gilt

$$\varphi(x, t) \begin{cases} \geq 0, & x \in \Omega^1 \\ < 0, & x \notin \Omega^1 \end{cases}$$

Es sei nun $\varphi(x, t)$ Lösung der Transportgleichung analog (4.1)

$$\frac{d\varphi(x, t)}{dt} + (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \varphi(x, t) = 0 \quad (4.2)$$

$$\varphi(x, 0) = \varphi_0(x)$$

Damit ist die Grenzlinie zur Zeit t_1 die Punktmenge

$$\{x \in \Omega : \varphi(x, t_1) = 0\}$$

Das φ -Feld wird als „Pseudodichte“ bezeichnet und numerisch über die Variationsform von (4.2)

$$\int_{\Omega} \frac{d\varphi}{dt} \lambda + (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \varphi \lambda \, d\Omega = 0 \quad \varphi, \lambda \in H^1$$

$$\varphi(x, 0) = \varphi_0(x)$$

berechnet.

Es sollen jetzt die mit dem Stokes-Solver zu behandelnden Gleichungen aus dem ursprünglich stehenden Problem abgeleitet werden. Dabei seien die Bezeichnungen verwendet, wie sie im Bild 4 eingeführt sind.

Die mathematische Form des Problems in kartesischen (x, y) -Koordinaten lautet:

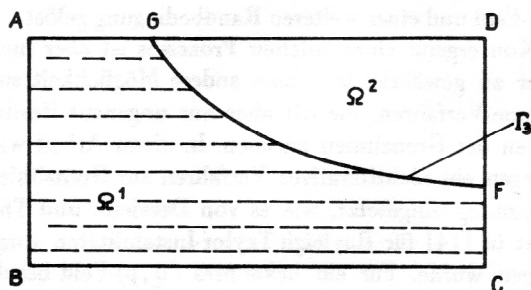


Bild 4

Einführung der Bezeichnungen:

Ω^1 – Gebiet mit Medium I

Ω^2 – Gebiet mit Medium II

$\widehat{GF} = \Gamma_3 = \bar{\Omega}^1 \cap \bar{\Omega}^2$ – freie Grenze

$AB \cup BC \cup CD \cup DA = \Gamma$ – feste Ränder mit evtl. verschiedenen Randbedingungen

$$\rho^i \frac{d u_x^i}{dt} = - \frac{\partial p^i}{\partial x} + \eta^i \Delta u_x^i \quad \text{in } \Omega^i, i = 1, 2$$

$$\rho^i \frac{d u_y^i}{dt} = - \frac{\partial p^i}{\partial y} + \eta^i \Delta u_y^i - \rho^i g \quad \text{in } \Omega^i, i = 1, 2 \quad (4.3)$$

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{u} = 0 \quad \text{in } \Omega^i, i = 1, 2$$

Randbedingungen:

$$\underline{u} = \underline{h} \quad \text{auf } \Gamma_1$$

Auf einem Randteil Γ_2 können Bedingungen wie in Bemerkung 2 angeführt gelten. Es soll hier aber der Einfachheit halber $\Gamma_2 = \emptyset$ gelten.

$$\text{Stets ist aber } \Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma, \Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset \quad (4.4)$$

$$\sum_{j=x,y} (\sigma_{ij}^1 n_j^1 + \sigma_{ij}^2 n_j^2) = g_i \quad \text{auf } \Gamma_3, i = x, y$$

, wobei

$$\sigma_{xx} = 2 \frac{\partial u_x}{\partial x} - p$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

$$\sigma_{yy} = 2 \frac{\partial u_y}{\partial y} - p$$

g_i – Einfluß der Oberflächenspannung

\underline{n} – äußere Einheitsnormale

Werden nun die Gleichungen in den Teilgebieten gelöst, so ist der Vorteil eines konstanten Netzes wieder aufgehoben. Deshalb wird in (4.3), (4.4) zum Gesamtgebiet $\Omega = \Omega^1 \cup \Omega^2$ übergegangen. Dabei ist zu beachten, daß ρ und η auf Γ_3 unstetig sind, u_x und u_y stetig, ihre Ableitungen aber nicht notwendig stetig sind. Die Randintegrale über Γ_3 gehen aus beiden Teilgebieten ein, dabei ist $\underline{n}^1 = -\underline{n}^2$ zu beachten. Im Fall des kartesischen (x, y) -Systems wird die schwache Form mit den normalen Ansatzfunktionen w_i gebildet, es sind dabei, wie in Punkt 1. erwähnt, die w_i in Ω stetige, auf jedem Dreieck quadratische Polynome (konforme FEM).

Nach einigen Umformungen und Vereinfachungen erhält man aus (4.3), (4.4) das Problem

$$\int_{\Omega} \rho \frac{d u_x}{dt} w \, d\Omega = \int_{\Omega} p \frac{\partial w}{\partial x} \, d\Omega - \int_{\Omega} \eta \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \, d\Omega$$

$$- \int_{\Omega} \eta \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \, d\Omega + \int_{\Omega^1} \left(g_n \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial g_n}{\partial x} \right) \, d\Omega \quad (4.5)$$

$$\int_{\Omega} \rho \frac{d u_y}{dt} w \, d\Omega = \int_{\Omega} p \frac{\partial w}{\partial y} \, d\Omega - \int_{\Omega} \eta \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \, d\Omega$$

$$- \int_{\Omega} \rho g w \, d\Omega - \int_{\Omega} \eta \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \, d\Omega$$

$$+ \int_{\Omega^1} \left(g_n \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial g_n}{\partial y} \right) \, d\Omega$$

$$\text{für alle } w \in V \quad (4.6)$$

$$\underline{u} = \underline{h} \quad \text{auf } \Gamma_1 \quad (4.7)$$

Darauf kann nun nach der FEM-Ortsdiskretisierung, einer Zeit-Semidiskretisierung und der Linearisierung des Problems, die durch Verwendung der Werte aus dem letzten Zeitschritt für die sowohl u_x wie auch u_y enthaltenden Terme erfolgt, der beschriebene Stokes-Solver angewendet werden.

Es ist zu bemerken, daß sich durch die Wahl $\Gamma_2 = \phi$ in (4.7) die Gleichungen vereinfacht haben und bei $\Gamma_2 \neq \phi$ evtl. – je nach angenommener Randbedingung – die Eindeutigkeit der Lösung nicht mehr gewährleistet werden kann. Daher sollte nach Möglichkeit nur mit Randbedingung 1. Art gearbeitet werden.

Bemerkung 4:

Für das (r, z) -Zylindersystem entstehen etwas umfangreichere Formeln, bei der Diskretisierung werden als Ansatzfunktionen die Funktionen $r \cdot w_i$ verwendet, um die Singularität bei $r = 0$ zu vermeiden. Die genaue Behandlung ist in [15] enthalten.

Es wird in dieser Arbeit angestrebt, auch die Oberflächenspannung einzubeziehen. Das war bei den bisher bekannten Verfahren oft nicht möglich. Dieser Einfluß soll jetzt näher betrachtet werden.

Es soll hier nur der Anteil in Normalenrichtung zur freien Grenze betrachtet werden, der tangentielle Anteil wird vernachlässigt. Für den Normalanteil gilt im (x, y) -System:

$$g_n = \sigma \frac{1}{R},$$

wobei

σ – Oberflächenspannung

$\frac{1}{R}$ – Hauptkrümmung der Grenzlinie ist.

Ist Γ_3 als Funktion $\Gamma_3 = s(x)$ darstellbar, so gilt

$$g_n = \sigma \frac{s''}{\sqrt{(1-s'^2)^3}}, \quad (4.8)$$

analog für den Fall $\Gamma_3 = s(y)$. Das ist aber nicht immer möglich, wie Bild 5 zeigt. Nun wird genutzt, daß die in g_n eingehenden Ableitungen nicht global, sondern nur lokal benötigt werden und Γ_3 aus Stücken $\Gamma_3^1 = s_1(x)$,

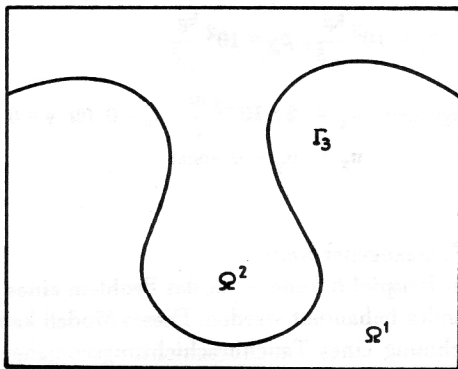


Bild 5
Beispiel einer Grenzlinie, die nicht als Funktion einer Koordinate darstellbar ist

$\Gamma_3^2 = s_2(y)$ zusammengesetzt sein kann. Deshalb wird eine Parameterdarstellung der Grenzlinie Γ_3 konstruiert, wobei als Parameter die Länge der Grenzlinie von einem Anfangspunkt aus verwendet wird.

Mit $x = f(t)$, $y = g(t)$ gilt dann

$$\frac{ds(x)}{dx} = \frac{dg(t)}{dt} \cdot \frac{1}{\frac{df(t)}{dt}}$$

bzw.

$$\frac{ds(y)}{dy} = \frac{df(t)}{dt} \cdot \frac{1}{\frac{dg(t)}{dt}}$$

Die Ableitungen $\frac{df(t)}{dt}$ und $\frac{dg(t)}{dt}$ sind stets erklärt, so daß überall auf Γ_3 eine der Ableitungen $\frac{ds(x)}{dx}$ oder $\frac{ds(y)}{dy}$ berechenbar ist.

Bei der Berechnung der zweiten Ableitungen sollen durch eine für solche Probleme neue Betrachtungsweise Fehler vermieden werden. Als Stützstellen für die Grenzlinie sind aus dem Pseudodichtefeld die Schnittstellen mit den Dreiecksseiten bekannt. Um stetige zweite Ableitungen zu erhalten, soll die Grenzlinie durch eine kubische Spline-Approximation dargestellt werden. Die Darstellung

$$f_s(x) = \sum_{i=1}^N f_i h_i(x) + f_1^1 h_1^1(x) + f_N^1 h_N^1(x) + \sum_{i=2}^{N-1} c_i^1 h_i^1(x)$$

mit

f_i – bekannte Werte $f(x_i)$

c_i^1 – Näherungen für die Ableitung f' in der Stützstelle x_i

f_1^1 – Näherung/Wert der Ableitung f' in der Stützstelle x_1

f_N^1 – Näherung/Wert der Ableitung f' in der Stützstelle x_N

N – Zahl der Stützstellen

$h_i(x), h_i^1(x)$ – Standard-Spline-Ansatzfunktionen (s. z. B. [16])

wird zweimal abgeleitet und dann in (4.8) eingesetzt. Im (r, z) -Zylindersystem ist die Behandlung schwieriger, da dort die Krümmung in Richtung der vernachlässigten Winkelkomponente nicht vernachlässigt werden kann. Für Abschnitte mit $r|_{\Gamma_3} = \text{const.}$ existiert sogar nur diese Komponente $\neq 0$, der Krümmungsradius ist dann r . Sonst ist – zumindest stückweise – eine Darstellung $\Gamma_3 = f(r)$ möglich und für die Hauptkrümmungsradien einer Fläche $z = f(r)$ lassen sich Formeln ableiten (siehe [15]), die einfach zu lösen sind.

Die auftretenden Gleichungssysteme werden mit dem Cholesky-Verfahren gelöst, die Matrizen werden als Profilmatrizen abgespeichert. Zur Verringerung des Aufwandes erfolgt eine Umordnung der Variablen nach dem „Reverse Cuthill-McKee“-Verfahren mit dem Ziel, möglichst wenige Elemente im Profil zu haben.

Für die Fälle beider Koordinatensysteme sind Fortran-Programme implementiert worden, die eine Realisierung der hier dargestellten Methoden verkörpern. Mit diesen

Programmen sind Beispielrechnungen gemacht worden, einige Ergebnisse sollen hier vorgestellt werden:

Beispiel 5: Instabile Schichtung

Als Anfangszustand wird die Schichtung einer schweren über eine leichtere Flüssigkeit mit einer kleinen Störung der ansonsten waagerechten Grenze angenommen. Der Strömungsprozess ist gravitationsbestimmt, in der hier dargestellten Rechnung wurde nur der Anfangsteil des Prozesses, die Fingerausbildung, berechnet. Es genügte hierzu ein Gitter mit 121 Punkten für die Geschwindigkeiten. Einige Grenzlinienverläufe sind in Bild 6 gezeigt.

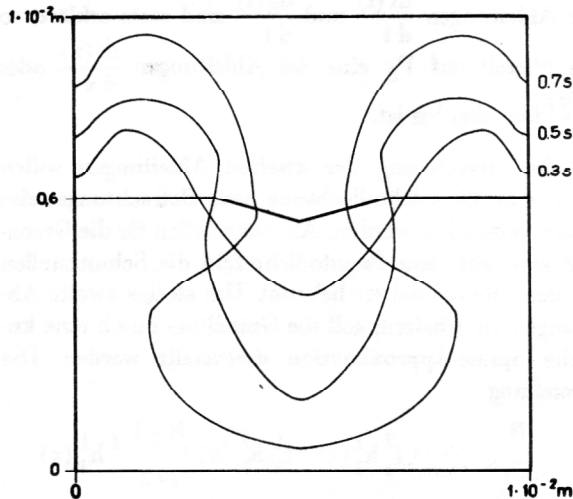


Bild 6

Beispiel 5: Instabile Schichtung mit den Parametern

$$\eta_1 = \eta_2 = 0.1 \text{ Pa s}, \quad \rho_1 = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, \quad \rho_2 = 1.5 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$$

$$g = 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}, \quad \sigma = 0, \quad \text{Re} = 0(1)$$

Randbedingungen: $u_x = u_y = 0$ an allen festen Rändern

Beispiel 6: Gezogener Boden

Es soll jetzt ein Behälter mit quadratischem Querschnitt betrachtet werden, dessen Boden gezogen wird. Dadurch entsteht ein Anlaufprozess mit stationärem Endzustand, wie er auch in anderen Arbeiten als Testproblem benutzt wird ([11], [12]). In den Bildern 7 und 8 wird der zeitliche Verlauf dieser Anlaufprozesse ohne bzw. mit Einbeziehung der Oberflächenspannung dargestellt. Es wird dabei wieder nur der Grenzlinienverlauf gezeigt, um Übersichtlichkeit zu wahren. Gleichzeitig ist aber stets das (u, p) -Feld verfügbar. Mit diesem Beispiel ist ein Problem mit einer freien Grenze vom Stromlinientyp behandelt worden (Endzustand).

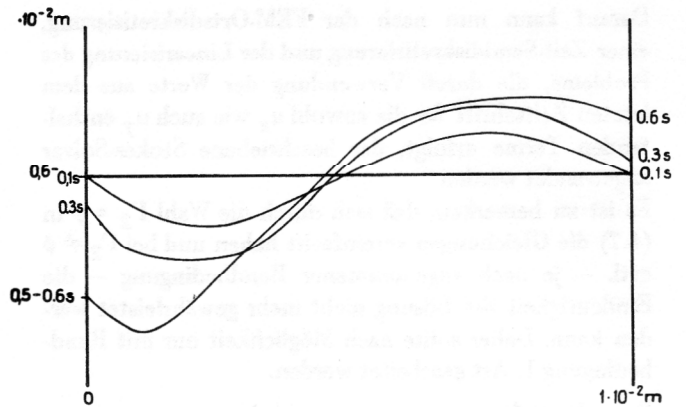


Bild 7

Beispiel 6: Gezogener Boden ohne Oberflächenspannung im Gebiet $[0, 10^{-2} \text{ m}] \times [0, 10^{-2} \text{ m}]$

$$\text{Parameter: } \eta_1 = 1 \text{ Pa s}, \quad \eta_2 = 0.1 \text{ Pa s}, \quad g = 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$$

$$\rho_1 = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, \quad \rho_2 = 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$\text{Randbedingungen: } u_x = 2 \cdot 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad u_y = 0 \text{ für } y = 0$$

$$u_x = u_y = 0 \text{ sonst}$$

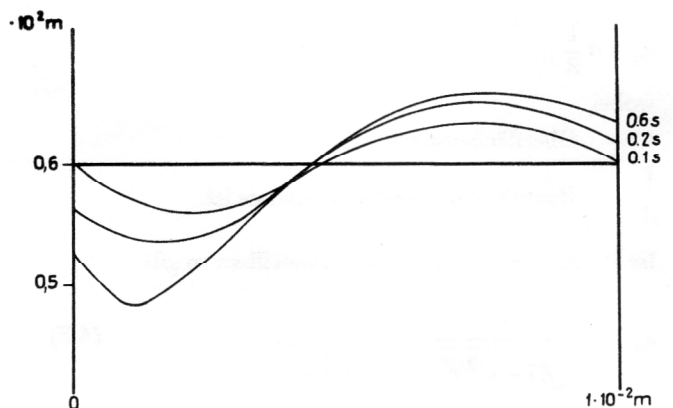


Bild 8

Beispiel 6: Gezogener Boden mit Oberflächenspannung im Gebiet $[0, 10^{-2} \text{ m}] \times [0, 10^{-2} \text{ m}]$

$$\text{Parameter: } \eta_1 = 1 \text{ Pa s}, \quad \eta_2 = 0.1 \text{ Pa s}, \quad g = 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$$

$$\rho_1 = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, \quad \rho_2 = 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$\text{Randbedingungen: } u_x = 2 \cdot 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad u_y = 0 \text{ für } y = 0$$

$$u_x = u_y = 0 \text{ sonst}$$

Beispiel 7: Gezogener Kern

Analog zu Beispiel 6 kann auch das Problem eines gezogenen Randes behandelt werden. Dieses Modell kann für die Berechnung eines Tauchbeschichtungsvorganges benutzt werden. Hier soll jetzt der Beginn eines Zugvorganges mit waagerechter Anfangsgrenze in einem Zylindersystem betrachtet sein. Dabei ist der Rechenaufwand wesentlich höher als im (x, y) -System, da wegen der

r-Abhängigkeit der Ansatzfunktionen und Integrale die Anwendung der Gauß-Integration notwendig wird. Als Randbedingung (Symmetrie) bei $r=0$ wird $\frac{\partial u_r}{\partial r} = \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0$ benutzt, die Bedingung $u_r = 0$ ist von der Lösung automatisch erfüllt.

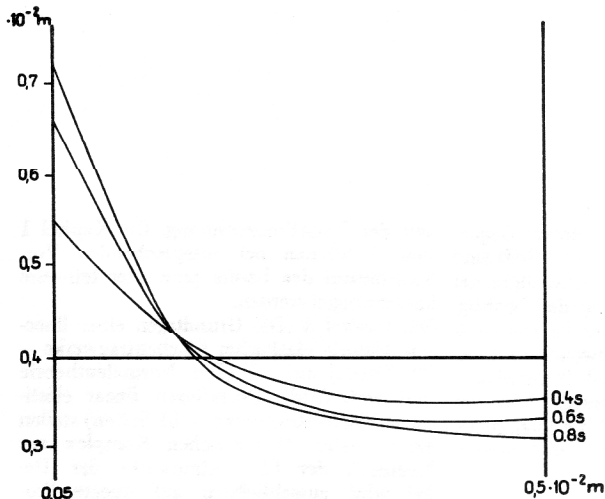


Bild 9
Beispiel 7: Gezogener Kern im Gebiet $[0,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}] \times [0,10 \cdot 10^{-2} \text{ m}]$ mit einem Kerndurchmesser von $0,1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$

Parameter: $\eta_1 = \eta_2 = 1 \text{ Pa s}$, $\rho_1 = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, $\rho_2 = 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

$$g = 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}, \sigma = 0$$

Randbedingungen: $u_r = 0$, $u_z = 2,5 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ für $r = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$
 $u_r = u_z = 0$ sonst

Beispiel 8: Umströmung

Nun soll noch ein Beispiel betrachtet werden, das für Fließfronten typisch ist. Es geht um einen Füllvorgang, wie er z. B. beim Spritzgießen auftritt. Dabei ist zu sehen, daß die Einbeziehung von Strömungen mit Einbauten auch möglich ist. Rechnungen mit Umströmungsproblemen zeigten auch die Bedeutung der Behandlung als 2-Phasen-Problem, dazu sei aber auf [15] verwiesen. Bild 10 zeigt die Entwicklung eines Füllvorganges anhand der Positionen der Grenzlinie.

Die hier genannten Beispiele zeigen die breite Einsetzbarkeit des beschriebenen Verfahrens, es muß jedoch für jedes konkrete Problem eine sorgfältige Überprüfung erfolgen, ob Daten und Randbedingungen eine effektive und eindeutige Lösbarkeit zulassen. Der Rechenaufwand bei Problemen in Zylinderkoordinaten ist noch so hoch, daß die Lösung praktischer Probleme sehr aufwendig ist. Hierzu sind andere Methoden zur Lösung der entstehenden Gleichungssysteme denkbar.

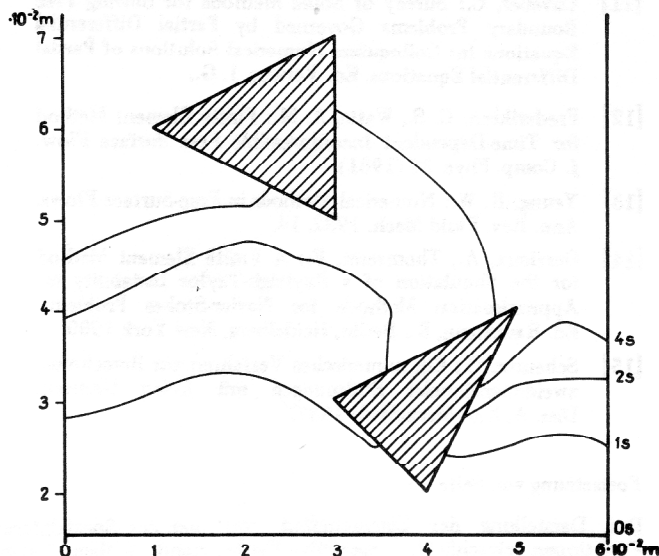


Bild 10
Beispiel 8: Füllvorgang

Parameter: $\eta_1 = 1 \text{ Pa s}$, $\eta_2 = 0,5 \text{ Pa s}$, $g = 0$

$$\rho_1 = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, \rho_2 = 5 \cdot 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Randbedingungen: $u_x = 0$, $u_y = \frac{2}{9}(-x^2 + 6x)$ für $y = 0, y = 9$
 $u_x = u_y = 0$ sonst

LITERATUR

- [1] Glowinski, R., Pironneau, O.: On a Mixed Finite Element Approximation of the Stokes-Problem I. Numerische Mathematik 33 (1979).
- [2] Glowinski, R., Rodin, E. Y., Zienkiewicz, O. C.: Energy Methods in Finite Element Analysis. Chichester, New York, Brisbane, Toronto 1979.
- [3] Glowinski, R.: Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems. New York, Berlin, Heidelberg, Tokyo 1984.
- [4] Conca, C.: Numerical Results on the Homogenization of Stokes- and Navier-Stokes-Equations... Comp. Meth. Appl. Mech. Engr. 53 (1985).
- [5] Pironneau, O.: Condition aux limites sur la pression pour les equations de Stokes et de Navier-Stokes. C. R. Acad. Sc. Paris, t. 303, Serie I, No. 9 (1986).
- [6] Begue, C., Conca, C., Murat, F., Pironneau, O.: A nouveau sur les equations de Stokes et de Navier-Stokes avec der conditions aux limites sur la pression. C. R. Acad. Sc. Paris, t. 386, Serie I, (1986).
- [7] Bengue, J. P., Ibler, B., Keramsie, A., Labadie, G.: in Proc. Third Int. Conf. on Finite Elements in Flow Problems. Ed. Norrie, D. H., Alberta 1980.
- [8] Bercovier, M., Pironneau, O.: Characteristics and the Finite Element Method in: Finite Element Flow Analysis. Ed. Kawai, T., Tokyo 1982.
- [9] Böhme, G.: Strömungsmechanik Nicht-Newtonscher Fluide. Stuttgart 1981.
- [10] Albrecht, J., Collatz, L., Hoffmann, K.-H. (Ed.): Numerical Treatment of Free Boundary Value Problems. Basel, Boston, Stuttgart 1982.

- [11] Cuvelier, C.: Survey of Some Methods for Solving Free Boundary Problems Governed by Partial Differential Equations in: Colloquium Numerical Solutions of Partial Differential Equations. Ed. Verweg, J. G..
- [12] Frederiksen, C. S., Watts, A. M.: Finite Element Method for Time-Dependent Incompressible Free Surface Flow. J. Comp. Phys. 39 (1981).
- [13] Yeung, R. W.: Numerical Methods in Free-Surface Flows. Ann. Rev. Fluid Mech. 1982. 14.
- [14] Dervieux, A., Thomasset, F.: A Finite Element Method for the Simulation of a Rayleigh-Taylor Instability in: Approximation Methods for Navier-Stokes Problems. Ed. Rautmann, R., Berlin, Heidelberg, New York 1980.
- [15] Scheurer, C.: Ein numerisches Verfahren zur Berechnung zweidimensionaler Strömungen mit freien Grenzen. Diss. A, Karl-Marx-Stadt 1987.