

Leitlinienteknik zur Berechnung von Strömungen nichtlinear-viskoser Medien bei Beschichtungsvorgängen

J. Socolowsky, J. Bergmann

1. Einleitung

Bei zahlreichen technologischen Prozessen erfolgen Beschichtungsvorgänge aus der fluiden Phase. Dabei werden häufig eine oder auch mehrere Schichten viskoser Fluide auf eine bewegte feste Unterlage aufgetragen und abgezogen. Anschließend wird dann der Flüssigkeitsverband erstarrt und getrocknet. Bei einigen Beschichtungsvorrichtungen kommt es zu Meniskusströmungen, d. h. Strömungen mit zwei freien Oberflächen und einer dynamischen Kontaktlinie zwischen einer freien Oberfläche und der bewegten Unterlage. Die Untersuchung der Meniskusströmung in der Nähe der Antragsstelle ist von besonderer Relevanz, da in diesem Bereich Störungen auftreten können, die eine gleichmäßige Schichtbildung behindern. Den Verarbeitungstechniker interessieren deshalb detaillierte Aussagen über das Geschwindigkeitsfeld, das Druckfeld und die Schichtdicken (d. h. genauer über die Form der freien Grenzflächen) des Meniskus für die betreffende Strömung in Abhängigkeit von verschiedenen Beschichtungsparametern. Mit Hilfe der berechneten Geschwindigkeiten lassen sich auch die Spannungen im Strömungsbereich unmittelbar angeben. Aufgrund der Spezifik vieler Beschichtungsvorrichtungen ist es häufig ausreichend, die entstehenden Strömungsprobleme in der Nähe der Antragsstelle als zweidimensional, stationär und isotherm vorzusetzen. Eine prinzipielle Variante des gleichzeitigen Auftragens mehrerer Flüssigkeitsschichten auf eine bewegte Unterlage veranschaulicht Bild 1. Das Strömungsgebiet Ω setzt sich aus $N \geq 1$ Gebieten (Schichten) Ω_k gemäß Bild 1 zusammen. Die Randstücke Σ_1 bzw. Σ_2 sind geradlinig und stellen den vorgegebenen Einström- bzw. Ausströmbereich dar. Auf ihnen ist die Geschwindigkeit \underline{v} bekannt. Für diese Vorgaben lassen sich etwa eindimensionale Näherungslösungen auf der schiefen Ebene, experimentelle Daten oder

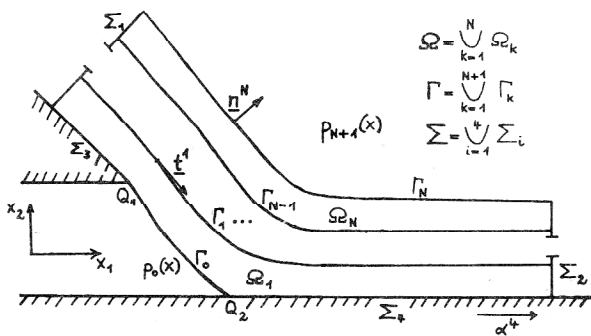


Bild 1
Strömungsgebiet bei einem Beschichtungsvorgang

auch die Asymptotik der Strömung im Unendlichen geeignet nutzen. Auf Σ_3 bzw. Σ_4 gelten die Haftbedingungen für die ruhende bzw. bewegte feste Wand. Die Kurven Γ_k mit $k=0,1,2,\dots,N$ stellen sogenannte freie Grenzflächen, d. h. a priori unbekannte Trennlinien zwischen den einzelnen Flüssigkeitsschichten, dar. Die an die umgebende Luft grenzenden Kurven Γ_0 und Γ_N nennt man häufig freie Oberflächen. Schließlich sei $p_{N+1}(x)$ bzw. $p_0(x)$ der vorgegebene (dimensionslose) Umgebungsdruck der Luft außerhalb von Γ_N bzw. Γ_0 .

2. Mathematische Problemformulierung und ein verallgemeinerter Lösungsbegriff

Es sei $\rho_{\max} = \max_{k=1,\dots,N} \rho_k$ das Maximum der (konstanten) Dichten aller Fluidschichten und σ_k die Γ_k -spezifische (konstante) Grenzflächenspannung. Ferner seien \underline{v}^0 eine charakteristische Geschwindigkeit und L eine charakteristische Länge für das betrachtete Strömungsproblem. Schließlich seien G bzw. \underline{g} der Betrag bzw. der Einheitsvektor in Richtung der Erdbeschleunigung. Dann werden die kartesischen Koordinaten mittels L , die Geschwindigkeiten mittels $|\underline{v}^0|$ und die Spannungen mittels $\rho_{\max} |\underline{v}^0|^2$ dimensionslos gemacht. Aus der Impulsbilanz ergibt sich damit die folgende dimensionslose Bewegungsgleichung

$$\kappa (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nabla T - \frac{\kappa}{Fr} \underline{g} = 0, \quad x \in \bigcup_{k=1}^N \Omega_k \quad (1)$$

Hierin symbolisiert κ das schichtweise konstante Dichtenverhältnis $\kappa = \rho_k / \rho_{\max}$. Mit Fr wurde die Froudezahl $Fr = |\underline{v}^0|^2 / LG$ bezeichnet. Unter T^k verstehen wir den Spannungstensor der k -ten Schicht für eine nichtlinear-viskose Flüssigkeit

$$T^k(\underline{v}) = -pI + f_k(J_2) D(\underline{v}). \quad (A)$$

In der Zustandsgleichung (A) symbolisieren I den Einheitstensor, D den Deformationsgeschwindigkeitstensor mit $D_{ij}(\underline{v}) = 0,5 (\partial v_i / \partial x_j + \partial v_j / \partial x_i)$ für $i, j = 1, 2, 3$ sowie J_2 dessen zweite Invariante, d. h.

$$\frac{1}{2} J_2 = 2 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right)^2 + \sum_{m=2}^3 \sum_{j=1}^{m-1} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_m} + \frac{\partial v_m}{\partial x_j} \right)^2 \quad (B)$$

Außerdem sei $f_k(\cdot)$ eine positive, stetig differenzierbare Funktion einer Variablen. Im Falle Newtonscher Fluide gilt bekanntlich $f_k(J_2) = \kappa / R_k = \text{const.}$, wobei R_k die Reynoldszahl $R_k = |\underline{v}^0| L / \nu_k$ und ν_k die kinematische Viskosität der k -ten Fluidschicht darstellt. Im gesamten

Strömungsgebiet gilt ferner die Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \underline{v} = (\nabla \cdot \underline{v}) = 0. \quad (2)$$

Als Randbedingungen ergeben sich an den festen Rändern Σ_i mit $i = 1, \dots, 4$ die Beziehungen

$$\underline{v}(\mathbf{x}) = \underline{\alpha}^i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Sigma_i \quad (3)$$

wobei $\underline{\alpha}^i(\mathbf{x})$ vorgegebene Geschwindigkeiten bezeichnet. An den freien Grenzflächen Γ_k verlangt man Stetigkeit der Geschwindigkeit

$$\underline{v}^{k+1}(\mathbf{x}) = \underline{v}^k(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_k \quad (k = 1, \dots, N-1) \quad (4.1)$$

einen tangentialen Geschwindigkeitsverlauf (kinematische Randbedingung)

$$\underline{v} \cdot \underline{n}^k = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_k \quad (k = 0, \dots, N) \quad (4.2)$$

sowie ein Gleichgewicht der Spannungen (dynamische Randbedingung)

$$T^{k+1}(\underline{v}) \underline{n}^k - T^k(\underline{v}) \underline{n}^k + W_{e_k} \frac{d\underline{t}^k}{ds} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_k \quad (k = 0, \dots, N) \quad (4.3)$$

In den Randbedingungen stellen s die Bogenlänge, \underline{t}^k den tangentialen und \underline{n}^k den normalen Einheitsvektor an die freie Grenzfläche Γ_k dar. Zu deren Orientierung vergleiche man Bild 1. Mit W_{e_k} wurde die dimensionslose Weberzahl $W_{e_k} = \sigma_k / (|\underline{v}^0|^2 L \rho_{\max})$ bezeichnet. Ferner gilt $T^0 = -p_0 I$ und $T^{N+1} = -p_{N+1} I$.

Aufgaben der Gestalt [(1) – (4)], zumindest für Strömungsvorgänge einer Newtonschen Flüssigkeit mit einer freien Oberfläche (bzw. mit zwei symmetrischen freien Oberflächen) werden seit etwa 1970 stärker untersucht. Insbesondere hat sich bei der numerischen Lösung derartiger Aufgaben die Methode der finiten Elemente (FEM) sehr bewährt. Bei der numerischen Behandlung von Strömungsproblemen für die Navier-Stokes-Gleichungen mit freier Oberfläche wird in der Literatur meist so vorgegangen, daß die freie Oberfläche durch sukzessive Approximation bestimmt wird. Dabei wird eine gewisse Lage der freien Oberfläche vorausgesetzt und dann das Strömungsfeld berechnet, in dem eine der Randbedingungen am freien Rand unberücksichtigt bleibt. Die vernachlässigte Randbedingung und das approximierten Strömungsfeld werden anschließend benutzt, um eine neue Form der freien Oberfläche zu erzeugen. Frederiksen und Watts [1], Nickell, Tanner und Caswell [2], sowie Silliman und Scriven [3] benutzen die kinematische Randbedingung (4.2) zur sukzessiven Erzeugung der neuen freien Oberfläche. Rivkind [4], Orr und Scriven [5], Reddy und Tanner [6] sowie ebenfalls Silliman und Scriven [3] wählten die Normalspannungskomponente der dynamischen Randbedingung (4.3), um die jeweils neue freie Oberfläche zu lokalisieren.

Beide Varianten erfordern eine aufwendige rechen-technische Realisierung. Die erste Variante liefert im Falle des Auftretens von Kontaktpunkten zwischen freier Oberfläche und festem Rand zusätzlich Schwierigkeiten (vgl. [7]). Ruschak [7] schlägt ein alternatives Verfahren vor, welches es gestattet, das Geschwindigkeitsfeld, das Druckfeld und die Form der freien Oberfläche

simultan, d. h. in einem Iterationszyklus, zu berechnen. Saito und Scriven [8] lösten ein spezielles Strömungsproblem mit ähnlicher Strategie wie Ruschak und für eine modifizierte Variationsformulierung der Aufgabe. Sie verwendeten finite Elemente höherer Ordnung, isoparametrische Abbildungen der krummlinigen Viereckselemente auf Rechtecke sowie eine aufwendige „Matching“-Strategie zwischen Teilgebieten mit kartesischer bzw. Polarkoordinatendarstellung.

In der vorliegenden Arbeit wird der Zugang von Ruschak verallgemeinert und numerisch implementiert. Dabei wird die sogenannte Leitlinienteknik mit der Methode der finiten Elemente auf geeignete Weise gekoppelt ([9], [10]). Eine verwandte Strategie wurde auch in der Arbeit [11] gewählt. Den Ausgangspunkt für die Anwendung der FEM auf die Aufgabe [(1) – (4)] bildet folgende schwache bzw. Variationsformulierung

$$\sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k} [\kappa \Phi(\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} + T(\underline{v}) \nabla \Phi - \frac{\kappa \Phi}{Fr} \underline{g}] dx + \sum_{k=0}^N W_{e_k} \int_{\Gamma_k} \underline{t}^k \frac{d\Phi}{ds} ds + \int_{\Gamma_N} \Phi p_{N+1} \underline{n}^N ds - \int_{\Gamma_0} \Phi p_0 \underline{n}^0 ds =$$

$$\int_{\Omega} \xi \operatorname{div} \underline{v} dx = 0. \quad (6)$$

Die Gleichung (5) erhält man, indem die Gleichung (1) mit einer stetig differenzierbaren (skalaren) Funktion $\Phi(\mathbf{x})$ multipliziert und anschließend über das gesamte Gebiet integriert wird. Durch mehrmaliges Anwenden der Formeln für die partielle Integration (in Ω_k und auf Γ_k), sowie Zusammenfassen der Kurvenintegrale auf Γ_k und Ausnutzung der Randbedingung (4.3) gelangt man zur Beziehung (5). Auf analoge Weise ergibt sich (6).

Mit $\mathcal{M}_\alpha(\Sigma)$ bezeichnen wir die Menge

$$\mathcal{M}_\alpha(\Sigma) = \left\{ \underline{u}(\mathbf{x}) \in C(\bar{\Omega}); \underline{u} \Big|_{\bar{\Omega}_k} \in C^1(\bar{\Omega}_k); \underline{u} \cdot \underline{n} \Big|_{\Gamma} = 0; \underline{u} \Big|_{\Sigma} = \underline{\alpha} \right\}.$$

Die Funktionenklasse (kein linearer Raum) $V_\alpha(\Sigma)$ ist dann die Abschließung der Menge $\mathcal{M}_\alpha(\Sigma)$ in der Norm des Sobolev-Raumes $W_2^1(\Omega)$ (vgl. [10]). Außerdem verstehen wir unter $W_{2,0}^1(\Omega)$ die Abschließung der Menge

$$\mathcal{M} = \left\{ h \in C(\bar{\Omega}); h \Big|_{\bar{\Omega}_k} \in C^1(\bar{\Omega}_k); h \Big|_{\Sigma} = 0 \right\}$$

in der $W_2^1(\Omega)$ -Norm. Die Funktionenklasse $W_{2,0}^1(\Omega)$ bildet einen Hilbertraum. Die freie Grenzfläche Γ_k möge schließlich eine Parameterdarstellung der Form $\mathbf{x} = \underline{F}^k(s)$ mit $0 \leq s \leq s_k$ besitzen. Dann läßt sich der folgende verallgemeinerte Lösungsbegriff definieren.

Das Tripel $\left\{ \underline{v}, p, \underline{F}^k \quad (k = 0, 1, \dots, N) \right\}$ mit $\underline{v} \in V_\alpha(\Sigma)$, $p \in L_2(\Omega)$ und $\underline{F}^k \in W_2^1(0, s_k)$ heißt verallgemeinerte Lösung der Aufgabe [(1) – (4)], wenn es den Identitäten (5) bzw. (6) für alle $\Phi \in W_{2,0}^1(\Omega)$ bzw. für alle $\xi \in L_2(\Omega)$ genügt.

Die bei der Herleitung von (5) und (6) verwendeten glatten Funktionen Φ und ξ liegen bekanntlich dicht im $W_{2,0}^1(\Omega)$ bzw. $L_2(\Omega)$, so daß jede klassische Lösung der Aufgabe [(1) – (4)] auch eine verallgemeinerte Lösung

darstellt. Es konnte gleichfalls eine umgekehrte Aussage bewiesen werden ([10]). Beispielsweise erfüllt im Falle Newtonscher Fluide eine verallgemeinerte Lösung $\{\underline{v}, p, \underline{F}^k\}$ mit den Eigenschaften

$$\underline{v} \Big|_{\Omega_k} \in W_2^2(\Omega_k), p \Big|_{\Omega_k} \in W_2^1(\Omega_k), \quad k = 1, 2, \dots, N$$

$$\underline{F}^k(s) \in W_2^2(0, s_{k'}) \quad k' = 0, 1, \dots, N$$

die Gleichungen und Randbedingungen der Aufgabe [(1) - (4)] fast überall.

3. Die Anwendung der FEM unter Einbeziehung der Leitlinientechnik

Die schwache bzw. Variationsformulierung [(5), (6)] der Aufgabe [(1) - (4)] gestattet es, die Geschwindigkeit und die freien Grenzflächen stückweise linear und den Druck stückweise konstant zu approximieren. Man kann folglich die einfachsten finiten Elemente verwenden.

Es sei \mathcal{T} eine fixierte Triangulation des gesamten Strömungsgebietes. Über die konkrete Gestalt der Triangulation wird weiter unten verfügt. \mathcal{T} enthalte J Dreiecke (Elemente), wobei jedes Element gemäß Bild 2 nochmals in 4 kongruente Teildreiecke (Viertelemente) zerlegt ist.

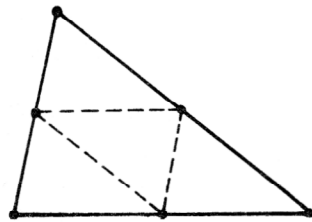


Bild 2
Element mit Knotenpunkten

Ein Element enthält demnach 6 Knotenpunkte. Die drei Elementeckpunkte heißen zur besseren Übersicht Hauptknotenpunkte. Insgesamt möge \mathcal{T} genau M Knotenpunkte besitzen. Es sei $\Phi_m(x_1, x_2)$ eine stückweise lineare Funktion, die im Knotenpunkt mit der Nummer m den Wert 1 annimmt und in allen anderen Knotenpunkten verschwindet. Auf jedem Viertelement sei Φ_m linear. Die Funktion ξ_j sei im Element mit der Nummer j identisch 1 und verschwinde über allen anderen Elementen. Folglich bildet die Menge

$$\left\{ \Phi_m \right\}_{m=1}^M \left(\left\{ \xi_j \right\}_{j=1}^J \right)$$

die Basis eines endlichdimensionalen Unterraumes des $W_2^1(\Omega)$ ($L_2(\Omega)$). Sei \underline{v}^m die näherungsweise Geschwindigkeit im Knotenpunkt m und p_j der angenäherte Druck im Element j . Dann approximieren wir die Geschwindigkeit durch das Vektorfeld

$$\hat{\underline{v}}(x) = \sum_{m=1}^M \underline{v}^m \Phi_m(x) \quad (7)$$

und den Druck durch das Skalarfeld

$$\hat{p}(x) = \sum_{j=1}^J p_j \xi_j(x). \quad (8)$$

Jede Funktion $\Phi_m(\xi_j)$ dient nun als Testfunktion $\Phi(\xi)$ in der Gleichung (5) (6). Auf diese Weise erhält man für die $(2M+J)$ skalaren Unbekannten v_1^m, v_2^m, p_j genau $(2M+J)$ skalare Gleichungen

$$\sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k^*} \left\{ \kappa \Phi_m \left(\sum_{i=1}^M \underline{v}^i \Phi_i \cdot \nabla \right) \sum_{i=1}^M \underline{v}^i \Phi_i - \left(\sum_{j=1}^J p_j \xi_j \right) \nabla \Phi_m + f_k [J_2(\hat{\underline{v}})] \left[\sum_{i=1}^M \nabla(\underline{v}^i \Phi_i) + \left(\sum_{i=1}^M \nabla(\underline{v}^i \Phi_i) \right)^T \right] \nabla \Phi_m - \frac{\kappa \Phi_m}{Fr} \underline{g} \right\} dx + \sum_{k=0}^N W e_k \int_{\Gamma_k^*} \underline{t}^k \frac{d\Phi_m}{ds} ds + \int_{\Gamma_N^*} \Phi_m p_{N+1} \underline{n}^N ds - \int_{\Gamma_o^*} \Phi_m p_o \underline{n}^o ds = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (9)$$

$$\int_{\Omega^*} \xi_j \operatorname{div} \left(\sum_{i=1}^M \underline{v}^i \Phi_i \right) dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (10)$$

Hierbei sind Ω^* bzw. Γ^* die durch die Triangulation erhaltenen Approximationen für das Strömungsgebiet Ω bzw. den freien Rand Γ . In den Gleichungen (9) und (10) sind die Differentiationen für jedes Viertelement (bzw. deren Rand) gesondert auszuführen und entsprechend zu summieren. Es handelt sich um eine kompakte Schreibweise.

Wir betrachten ein Viertelement η , welches ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Knotenpunkte 1, 2 und 3 als Eckpunkte besitzt. Mit $(x_1^i, x_2^i)^T$ bezeichnen wir den Ortsvektor des Punktes i ($i = 1, 2, 3$). Ferner sei $N_i(x)$ die Einschränkung der Funktion $\Phi_i(x)$ auf das Viertelement η . Bekanntlich besitzt N_i die Gestalt (vgl.

$$\text{z. B. [12]} \quad N_i(x_1, x_2) = \frac{1}{2A_\eta} (A_i + B_i x_1 + C_i x_2),$$

wobei A_η den Flächeninhalt des Viertelementes η bezeichnet und

$$A_i = x_1^j x_2^k - x_1^k x_2^j, \quad B_i = x_2^j - x_2^k, \quad C_i = x_1^j - x_1^k; \quad i = 1, 2, 3$$

gilt sowie $\{i, j, k\}$ eine zyklische Vertauschung von $\{1, 2, 3\}$ ist. Die partiellen Ableitungen berechnen sich zu

$$\frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{B_i}{2A_\eta}, \quad \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{C_i}{2A_\eta}$$

und sind auf einem Viertelement konstant. Folglich sind wegen (7) und (8) auch die Größen $J_2(\hat{\underline{v}})$ und $f_k(J_2(\hat{\underline{v}}))$ auf einem Viertelement konstant. Dieser Umstand ist für die rechentechnische Realisierung von Vorteil.

Die Approximation der freien Grenzflächen geschieht in folgender Weise. Das Strömungsgebiet wird durch geeignete wählende Strahlen (im weiteren Leitlinien genannt; bei Ruschak in [7] „boundary supports“) in Streifen zerlegt. Man vergleiche hierzu Bild 3.

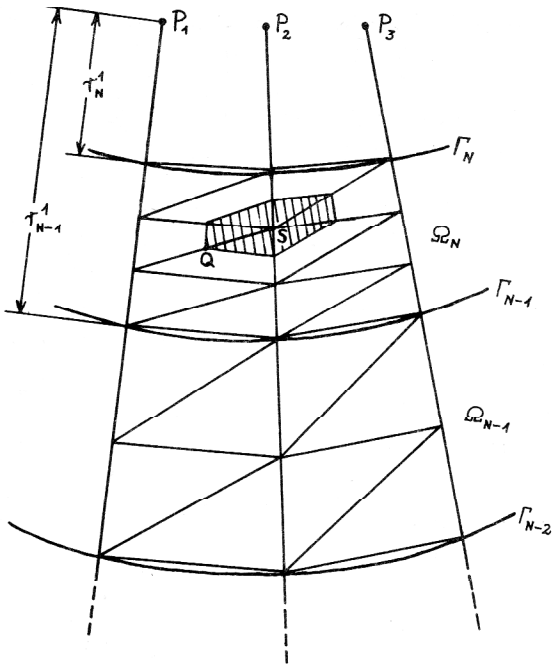


Bild 3
Ausschnitt aus einem Strömungsgebiet mit Leitlinien und Elementen

Die m -te Leitlinie beginnt in einem fixierten Punkt P_m und schließt mit der positiven Richtung der x_1 -Achse einen fixierten Winkel Θ_m ($0 \leq \Theta_m < 2\pi$) ein. Die Orientierung sei dabei mathematisch positiv. Die variablen Längen $r_N^m, r_{N-1}^m, \dots, r_1^m, r_0^m$ einer Leitlinie vom Anfangspunkt P_m bis zum Schnitt mit den freien Grenzflächen $\Gamma_N, \Gamma_{N-1}, \dots, \Gamma_1, \Gamma_0$ (vgl. Bild 3) sind im Prozeß der Rechnung simultan mit Geschwindigkeit und Druck zu ermitteln. Die Schnittpunkte der Leitlinien mit den freien Grenzflächen bestimmen sämtliche Hauptknotenpunkte auf den freien Grenzflächen. Die Grenzflächen werden durch diese Hauptknotenpunkte stückweise geradlinig approximiert. Innerhalb jeder Schicht Ω_k ($k=1, 2, \dots, N$) werden durch vorgegebene Unterteilungsverhältnisse (im einfachsten Fall gleichmäßige Verteilung) die weiteren Hauptknotenpunkte auf jeder Leitlinie festgelegt. Diese werden gemäß Bild 3 geradlinig zu Elementen verbunden und liefern die Triangulation. Außerdem kann sich die Anzahl der Hauptknotenpunkte pro Schicht auf zwei benachbarten Leitlinien um eine unterscheiden. Es liegt dann entsprechend (von links nach rechts gesehen) konvergente, gleichmäßige oder divergente Vernetzung vor. Dadurch und durch die weitgehend willkürliche Festlegung der Leitlinien hat man die Möglichkeit, auch stark gekrümmte bzw. irreguläre Strömungsgebiete zu diskretisieren bzw. lokale Verfeinerungen vorzunehmen. Der Ausschnitt in Bild 3 wurde beispielsweise gleichmäßig vernetzt.

Zur Illustration nehmen wir an, daß in der Schicht Ω_N jede Leitlinie durch Hauptknotenpunkte in 3 gleiche Abschnitte zerlegt wird (vgl. Bild 3). Dann haben beispielsweise die Punkte S und Q folgende kartesische Koordinaten

$$\left. \begin{aligned} x_1(S) &= x_1(P_2) + \left(\frac{2}{3} r_N^2 + \frac{1}{3} r_{N-1}^2 \right) \cos \Theta_2 \\ x_2(S) &= x_2(P_2) + \left(\frac{2}{3} r_N^2 + \frac{1}{3} r_{N-1}^2 \right) \sin \Theta_2 \end{aligned} \right\} (11)$$

$$\begin{aligned} x_1(Q) &= \frac{1}{2} \left[x_1(P_1) + x_1(P_2) \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} r_N^1 + \frac{2}{3} r_{N-1}^1 \right) \cos \Theta_1 \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} r_N^2 + \frac{1}{3} r_{N-1}^2 \right) \cos \Theta_2, \quad x_2(Q) = \frac{1}{2} \left[x_2(P_1) + x_2(P_2) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} r_N^1 + \frac{2}{3} r_{N-1}^1 \right) \sin \Theta_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} r_N^2 + \frac{1}{3} r_{N-1}^2 \right) \sin \Theta_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Die Längen $r_0^m, r_1^m, r_2^m, \dots, r_N^m$ mit $m=1, 2, \dots, N$ gehen als gleichberechtigte Unbekannte in das nicht-lineare Gleichungssystem [(9), (10)] ein. Insbesondere fließen diese Längen über die Knotenpunktkoordinaten (11) und (12) direkt in die Größen A_i, B_i, C_i und A_η und damit in (9) und (10) ein.

Die fehlenden Gleichungen zur Bestimmung der Längen liefert die kinematische Randbedingung (4.2). Wir fordern, daß die Gleichung

$$\int_{\Gamma_k} \underline{v} \cdot \underline{n}^k ds = 0 \quad (13)$$

auf jedem geradlinigen Teilstück Γ_k der approximierten freien Grenzfläche erfüllt ist.

Nach Hinweisen aus der Literatur (vgl. [7]) ist es vorteilhaft, den Elementen, die an einer freien Grenzfläche liegen, einen zusätzlichen Freiheitsgrad λ zu verleihen.

Der Mittelpunkt R_4 der Elementseite $\overline{R_2 R_3}$ (vgl. Bild 4) kann gemäß der Formel

$$x(R_4^*) = x(R_4) - \lambda [x(R_4) - x(R_1)] \quad (14)$$

mit $-0.5 < \lambda < 0.5$ in den Punkt R_4^* auf der Seitenhalbierenden $\overline{R_1 R_4}$ verschoben werden. Anschließend fordern wir die Beziehung (13) auf beiden Teilstrecken $\overline{R_3 R_4^*}$ und $\overline{R_4^* R_2}$. Auf diese Weise ordnen wir der m -ten Leitlinie die variablen Längen $r_0^m, r_1^m, \dots, r_N^m$ und die variablen „Einknickkoeffizienten“ $\lambda_0^m, \lambda_1^m, \dots, \lambda_N^m$ zu. Im Endeffekt entsteht ein nichtlineares Gleichungssystem

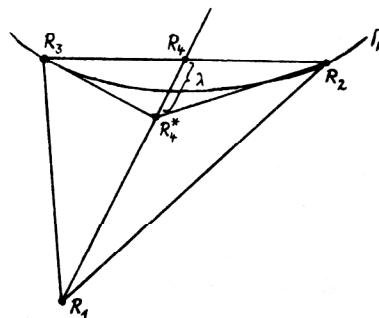


Bild 4
Zur Definition des „Einknickkoeffizienten“

$$AZ = 0 \quad (15)$$

mit $NP = 2M + J + 2(N + 1)$ NL skalaren Unbekannten und ebenso vielen Gleichungen. Dabei ist N die Anzahl der Flüssigkeitsschichten und NL die Anzahl sämtlicher Leitlinien.

Die vorgestellte Leitlinienstrategie läßt sich ebenfalls auf Teilgebiete mit festen Rändern anwenden. Für die entsprechenden Größen r_{Σ}^i und λ_{Σ}^i (man vgl. etwa Σ_4 aus Bild 1) liegen dann Randwerte erster Art vor, welche an die Stelle von Beziehung (13) treten.

Das Gleichungssystem (15) wird iterativ nach dem Newtonverfahren gelöst. Es sei Z^0 eine Startlösung des Systems (15). Dann lautet die Iterationsvorschrift

$$(\text{grad } A) \Big|_{Z^K} Y^K = -AZ^K \quad (16)$$

$$Z^{K+1} = Z^K + Y^K \quad K = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

Das lineare Gleichungssystem (16) wird mit dem Frontal-Solver von Hood gelöst ([13]).

Für die rechentechnische Realisierung des angeführten Verfahrens ist eine effektive und genaue Berechnung der Jacobi-Matrix ($\text{grad } A$) sehr wesentlich. Bei der hier gewählten Form der Diskretisierung und Approximation war es möglich, für Newtonsche Flüssigkeiten sämtliche Elemente der Jacobi-Matrix analytisch und damit exakt zu berechnen. Das betrifft auch die Ableitungen nach den geometrischen Variablen r_k^m und λ_k^m , die bei Saito und Scriven [8] relativ kompliziert zu ermitteln sind. Da die Koordinatenformeln (11), (12) und (14) linear in r_k^m und λ_k^m und die Abhängigkeiten der Formfunktionen $\Phi_i(x)$ von den Koordinaten der Knotenpunkte bekannt sind, ist die Berechnung der entsprechenden Gradienten einfach. Zum Beispiel ist die Größe $x_2(Q)$ eine Funktion der Variablen r_N^1, r_{N-1}^1, r_N^2 sowie r_{N-1}^2 und es gilt $\partial x_2(Q) / \partial r_{N-1}^1 = \frac{1}{3} \sin \Theta_1$. Die Ableitungen von (9) und (10) nach r_k^m werden dann durch sukzessives Anwenden der Kettenregel mit Hilfe der Gradienten $\partial x_1^i / \partial r_k^m$ und $\partial x_2^i / \partial r_k^m$ bestimmt.

Im Falle nichtlinearer Stoffgesetze (A) ist die exakte Berechnung aller Gradienten ebenfalls möglich, aber in Abhängigkeit vom konkreten Stoffgesetz (bzw. $f_k(\cdot)$) zu implementieren.

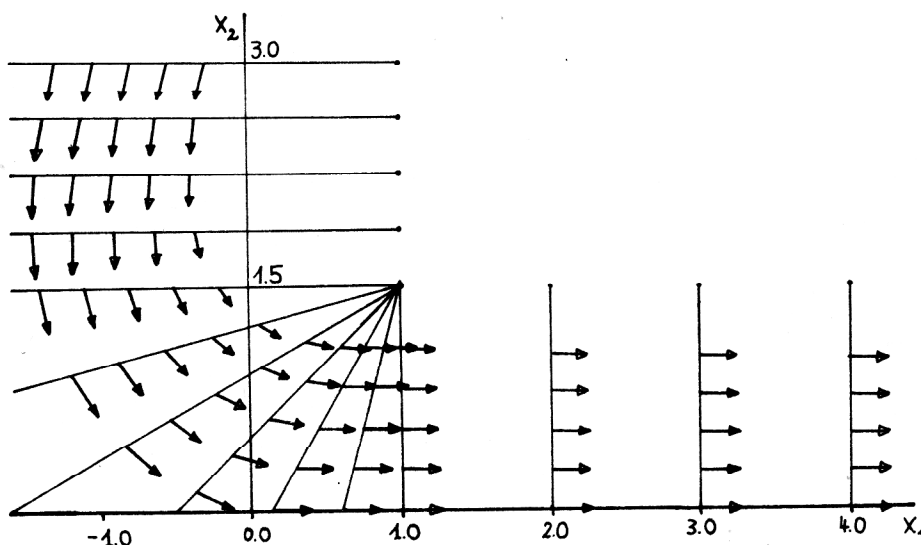
Die mit Hilfe von Leitlinien realisierte Triangulation hat den Vorteil, daß sie nach jedem Iterationsschritt ohne großen Aufwand und entsprechend den aktuellen Geometrievariablen neu erfolgen kann. In das beschriebene Leitlinienkonzept fügen sich auch die Bestimmung des unbekanntem dynamischen Kontaktpunktes (vgl. Punkt Q_2 in Bild 1) und die Berücksichtigung von Gleitrandbedingungen organisch ein ([10]). Zur Einführung und Bedeutung der Gleitrandbedingung vergleiche man etwa die Arbeit [3].

4. Einige Resultate von ausgewählten Strömungsproblemen

Zu dem beschriebenen numerischen Verfahren ist ein Computerprogramm in FORTRAN erarbeitet worden, das in der zur Zeit vorliegenden Fassung die Berechnung von Strömungen einer Fluidschicht (Newtonsche bzw. Potenzgesetz-Flüssigkeit) mit maximal zwei freien Oberflächen gestattet. Das angegebene Verfahren wurde erstmalig 1981 in Berlin [9], jedoch ohne numerische Ergebnisse vorgestellt. Numerische Resultate von verschiedenen Strömungsproblemen mit einer bzw. zwei freien Oberflächen findet man in [10] und [14]. Die folgenden Beispiele sind bisher unveröffentlicht.

Im ersten Beispiel wird die Strömung einer Newtonschen Flüssigkeit im Antragsbereich einer Freifallbeschichtung berechnet. Im Bild 5 ist die Wahl der Leitlinien sowie das berechnete Geschwindigkeitsprofil nach 5 Iterationen veranschaulicht. Auf der bewegten, festen Unterlage ($x_2 = 0$) ist die Geschwindigkeit \underline{v} gleich der Unterlagenabzugsgeschwindigkeit $\underline{v}^0 = (1.0, 0.0)^T$. Bei

Bild 5
Leitlinienwahl und Geschwindigkeitsverteilung bei einer Freifallbeschichtung



$x_1 = 5$ gilt ebenfalls $\underline{v} = \underline{v}^0$. Es wird davon ausgegangen, daß bei $x_1 = 5$ die Endschichtdicke von 1 (für $x_1 = +\infty$) mit dem dazugehörigen gleichmäßigen Geschwindigkeitsprofil näherungsweise erreicht wird. Schließlich wurden auf der ersten Leitlinie ($x_2 = 3$) Geschwindigkeiten vorgegeben, die mit Hilfe experimenteller Daten bzw. eindimensionaler Näherungslösungen gewonnen wurden.

Der Erdbeschleunigungseinheitsvektor hat die Gestalt $\underline{g} = (0.0, -1.0)^T$. Die Reynoldszahl R beträgt $4.5 \cdot 10^{-4}$ und die Weberzahl We ist gleich $2 \cdot 10^{-3}$. Die dimensionslose Druckdifferenz $p_1 - p_0$ aus oberem und unterem Umgebungsdruck der Luft beträgt 6.728. Bei diesem Beispiel wurde mit $NL = 15$ Leitlinien, $M = 261$ Knotenpunkten und $J = 112$ Elementen gerechnet. Die Anzahl sämtlicher Freiheitsgrade lautet $NP = 694$.

Die Konvergenz nach 5 Iterationen ist recht gut. Die Abweichungen von den Werten nach der vierten Iteration sind bei allen Variablen kleiner als 10^{-2} .

In Bild 6 sind die beträchtlichen Änderungen bei den Beträgen der Geschwindigkeit an den freien Oberflächen sowie auf der Mittellinie des Strömungsgebietes sichtbar. Aus Bild 5 geht weiterhin hervor, daß die Strömung wesentlich zweidimensionalen Charakter besitzt und daß die Geschwindigkeitsvektoren tangential zu den freien Oberflächen verlaufen. Im Bild 7 sind die Profile der Flüssigkeitsschicht sowie die Lage des dynamischen Kontaktpunktes für zwei verschiedene Reynoldszahlen bei ansonsten gleichen Kenngrößen dargestellt. Der Einfluß der Viskosität auf die Lage des Auftreffpunktes sowie auf den dynamischen Randwinkel ist deutlich erkennbar. Es konnte außerdem bei diesem Beispiel eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erreicht werden.

Das zweite Beispiel zeigt das Anströmen einer Newtonschen Flüssigkeit auf einer geneigten Ebene (Neigungswinkel 21°) mit anschließendem freien Fall sowie das Abziehen auf einer horizontalen Unterlage (vgl. Bild 8).

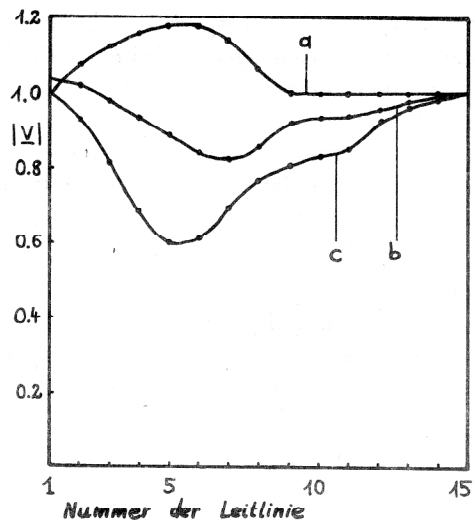


Bild 6
Geschwindigkeit in den Hauptknotenpunkten a – am unteren Gebietsrand, b – auf einer Mittellinie, c – am oberen Gebietsrand

Die Schichtdicke auf der ersten Leitlinie beträgt 2 und die Endschichtdicke ist 1. Die Geschwindigkeiten auf der ersten und der letzten Leitlinie sowie auf der Unterlage sind erneut vorgegeben und im Bild 8 angedeutet. Die Punkte P_1 , P_2 und Q_1 besitzen die folgenden kartesischen Koordinaten: $P_1 (-0.04, 3.84)$, $P_2 (-0.76, 1.98)$, $Q_1 (0.0, 1.69)$. Ferner gilt für die dimensionslosen Kenngrößen $\underline{v}^0 = (1.0, 0.0)^T$, $\underline{g} = (0.0, -1.0)^T$, $R = 2 \cdot 10^{-4}$, $We = 10^{-6}$ sowie $p_1 - p_0 = 0.0$. Die Ausgangsdaten für die Triangulation lauten $NL = 20$, $M = 429$ und $J = 190$, sodaß mit insgesamt $NP = 1128$ Freiheitsgraden gerechnet wurde. Die Konvergenz bei diesem Beispiel war etwas besser als im ersten Beispiel. Die maximale Abweichung zwischen den Ergebnissen der dritten und vierten Iteration war kleiner als 10^{-2} . Bild 8 zeigt das nach 4 Iterationen ermittelte Flüssigkeitsprofil

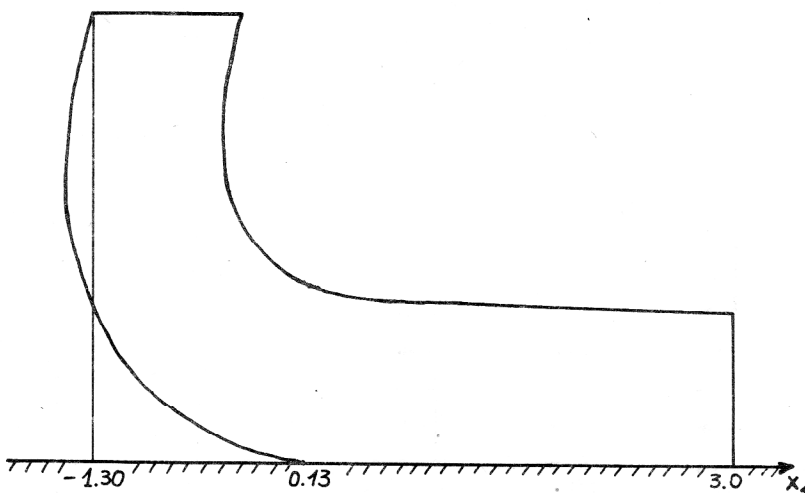


Bild 7 a
Flüssigkeitsprofil bei der Freifallbeschichtung für eine Reynoldszahl $R = 4.5 \cdot 10^{-4}$

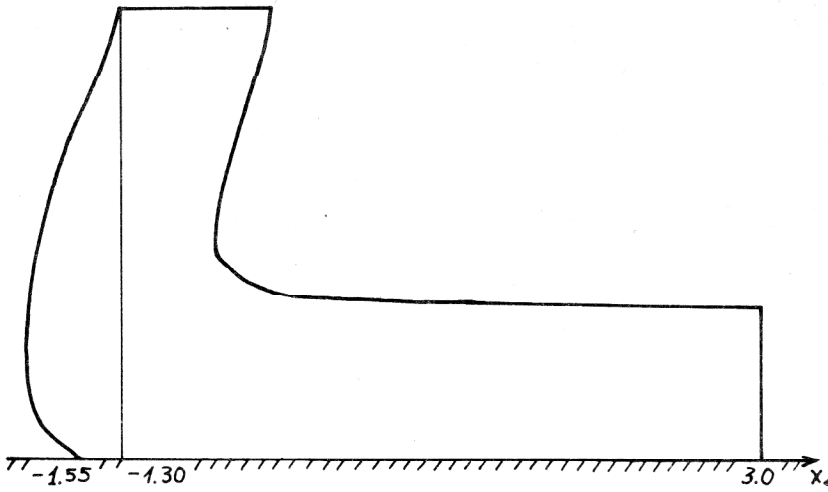


Bild 8
Flüssigkeitsprofil und Geschwindigkeiten auf ausgewählten Leitlinien

Bild 7 b
Flüssigkeitsprofil bei der Freifallbeschichtung für eine Reynoldszahl $R = 4.5 \cdot 10^{-2}$

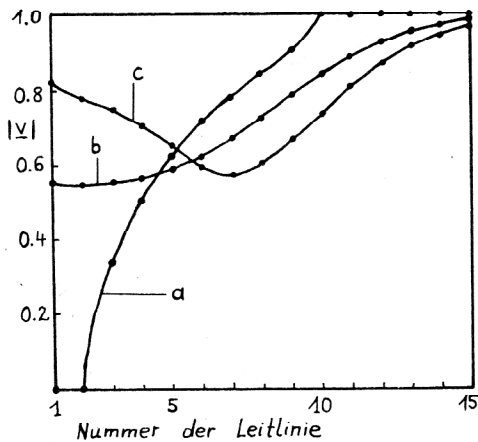
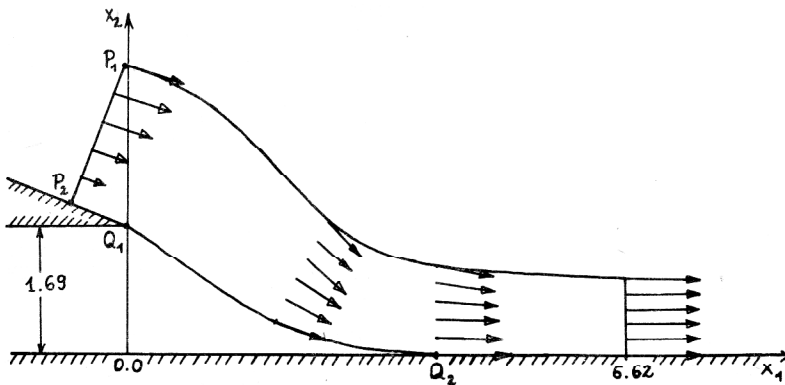


Bild 9
Geschwindigkeit in den Hauptknotenpunkten a – am unteren Gebietsrand, b – auf einer Mittellinie, c – am oberen Gebietsrand

sowie die Geschwindigkeiten auf 4 ausgewählten Leitlinien. Die Lage des dynamischen Kontaktpunktes Q_2 wurde mit $x_1 = 4.12$ bestimmt.

Bild 9 gibt die Beträge der Geschwindigkeit am oberen und unteren Gebietsrand sowie auf der Mittellinie wieder. Auch hier sind große Geschwindigkeitsgradienten erkennbar. Der Druck weist in der Nähe der Kontaktpunkte Q_1 und Q_2 zwischen fester Wand und freier Oberfläche starke Singularitäten auf. An der oberen freien Oberfläche ist der Druck zunächst größer und dann kleiner als der Umgebungsdruck p_1 , wobei er sich letzterem für $x_1 \rightarrow +\infty$ stark annähert. Am unteren Rand ist der Druck bis auf das Element hinter Q_2 kleiner als der Umgebungsdruck p_0 , wobei ebenfalls das Angleichen an $p_1 = p_0$ für $x_1 \rightarrow +\infty$ charakteristisch ist.

Als drittes Beispiel betrachten wir das Ausströmen einer Potenzgesetz-Flüssigkeit aus einem ebenen Spalt mit anschließendem Hinabfließen an einer vertikalen, ruhenden Wand (vgl. Bild 10).

Für Potenzgesetz-Flüssigkeiten hat die Funktion $f(J_2)$ in der Zustandsgleichung (A) die Gestalt

$$f(J_2) = \frac{1}{R^*} \left(\frac{1}{2} J_2 \right)^{\frac{\mu-1}{2}}, \quad (18)$$

wobei μ den Fließexponenten und R^* eine verallgemeinerte Reynoldszahl (vgl. [10]) symbolisieren. Dieses Beispiel wurde für 3 verschiedene Fließexponenten gerechnet.

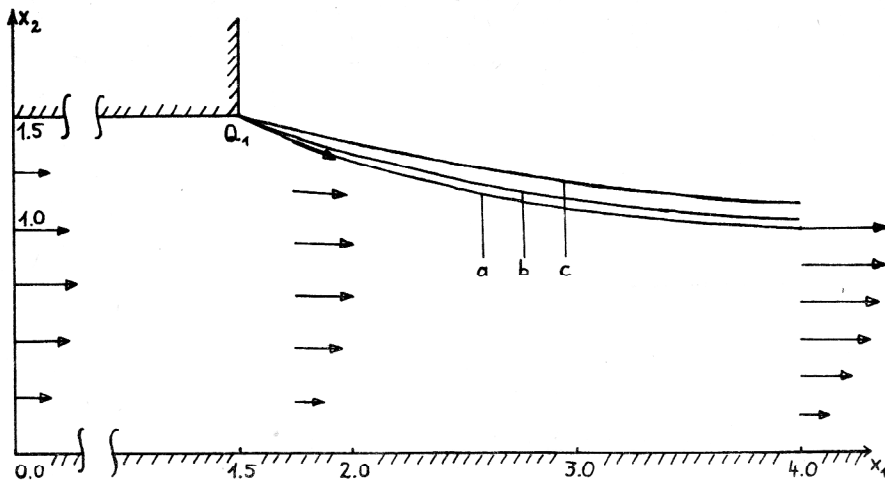


Bild 10

Strömungsprofile für Potenzgesetz-Flüssigkeiten mit Fließexponenten von $a = 0.9$, $b = 1.0$ und $c = 1.2$

net (vgl. Bild 10). Die dimensionslosen Kennzahlen betragen $R^* = 0.02$, $We = 10^{-4}$ und $Fr = 0.004$. Die Erdbeschleunigung hat den Richtungsvektor $\underline{g} = (1.0, 0.0)^T$ und für den dimensionslosen Volumendurchsatz von 1.635 ergab sich eine Endschichtdicke von 1. Bei den Berechnungen wurde davon ausgegangen, daß bei $x_1 = 22$ die Endschichtdicke (für $x_1 = +\infty$) mit dem dazugehörigen halbparabelförmigen Geschwindigkeitsprofil näherungsweise erreicht wird. Bei $x_1 = 0$ wurde ein dem Volumendurchsatz von 1.635 entsprechendes Geschwindigkeitsprofil nach den Formeln für die ebene Kanalströmung (Druckströmung) vorgegeben. An den ruhenden Wänden gilt die Haftbedingung $\underline{v} = (0.0, 0.0)^T$. Die Triangulationsparameter lauten $NL = 14$, $M = 189$, $J = 78$ und folglich $NP = 512$.

Es wurden für die Fließexponenten $\mu_1 = 0.9$, $\mu_2 = 1.0$ (Newtonsche Flüssigkeit) und $\mu_3 = 1.2$ jeweils 5 Iterationen realisiert. Dabei konnte Konvergenz erzielt werden und die maximale Abweichung zwischen den Resultaten der vierten und fünften Iteration war kleiner als 10^{-3} (für μ_2 kleiner als 10^{-6}). Im Bild 10 sind die Formen der freien Oberflächen wiedergegeben. Außerdem sind für den Fall $\mu_1 = 0.9$ die Geschwindigkeitsprofile an den Stellen $x_1 = 1.75$ und $x_1 = 4$ dargestellt. Der Druck an der freien Oberfläche weist in der Umgebung von Q_1 eine Singularität auf und nähert sich für $x_1 \rightarrow +\infty$ dem Umgebungsdruck von unten an.

Sämtliche Rechnungen wurden auf einem älteren Computer vom Typ CDC 3300 durchgeführt. Die Rechenzeiten pro Iteration hingen stark von der Anzahl NP aller Unbekannten ab und lagen für das dritte Beispiel bei etwa 140 Sekunden. Weiterführende Rechnungen sind für verschiedene Parameterkombinationen sowie für komplizierte Geometrien mit starken Krümmungen vorgesehen. Abschließend sei bemerkt, daß Fragen der Existenz, Unität und Regularität der verallgemeinerten Lösung einer gemischten Randwertaufgabe, die in enger Beziehung zur Aufgabe [(1) – (4)] steht, ebenfalls untersucht wurden ([10], [15]). Dabei konnten zum Teil analoge Aussagen erhalten werden, wie sie für das Dirichletproblem bei Navier-Stokes-Gleichungen bekannt sind (vgl. [16]).

Die Autoren möchten die Gelegenheit nutzen, um Herrn Doz. Dr. sc. techn. Roland Lipp recht herzlich für die Anregung zur Beschäftigung mit Fragen der Beschichtung sowie für zahlreiche wertvolle Diskussionen von Testbeispielen und Modellen zu danken.

LITERATUR

- [1] Frederiksen, C. S., Watts, A. M.: Finite element method for time-dependent incompressible free surface flow. *J. Comp. Physics* 39 (1981), Nr. 2, S. 282 – 304.
- [2] Nickell, R. E., Tanner, R. I., Caswell, B.: The solution of viscous incompressible jet and free-surface flows using finite-element methods. *J. Fluid Mech.* 65 (1974), S. 189 – 206.
- [3] Silliman, W. J., Scriven, L. E.: Separating flow near a static contact line: Slip at a wall and shape of a free surface. *J. Comp. Physics* 34 (1980), S. 287 – 313.
- [4] Ривкинд, В. Я.: Некоторые методы расчета течений вязких несжимаемых жидкостей с неизвестной границей раздела. *Числ. мет. мех. сплошной среды* 12 (1981), № 4, стр. 106 – 115.
- [5] Ort, F. M., Scriven, L. E.: Rimming flow numerical simulation of steady, viscous, free-surface flow with surface tension. *J. Fluid Mech.* 84 (1978), S. 145 – 165.
- [6] Reddy, K. R., Tanner, R. T.: Finite element solution of viscous jet flows with surface tension. *Computers and Fluids* 6 (1978), Nr. 2, S. 83 – 91.
- [7] Ruschak, K. J.: A method for incorporating free boundaries with surface-tension in finite-element fluid-flow simulators. *Int. J. num. meth. engng.* 15 (1980), Nr. 5, S. 639 – 648.
- [8] Saito, H., Scriven, L. E.: Study of coating flow by the finite element method. *J. Comp. Physics* 42 (1981), Nr. 1, S. 53 – 76.
- [9] Socolowsky, J.: Zur numerischen Behandlung von Schichtenströmungen. Vortrag beim Seminar zur Anwendung mathematischer Methoden in der chemischen Industrie, 28. – 30. 10. 1981, Berlin (unveröffentlicht).
- [10] Socolowsky, J.: Theoretische und numerische Untersuchungen von Strömungsproblemen bei Beschichtungsvorgängen. Diss. A. TH Leuna-Merseburg (1983).
- [11] Kistler, S. F., Scriven, L. E.: Coating flow theory by finite element and asymptotic analysis of the Navier-Stokes-system. *Int. J. num. meth. fluids* 4 (1984), S. 207 – 229.
- [12] Сегерлинд, Л.: Применение метода конечных элементов. Изд. „Мир“, Москва, 1979.
- [13] Hood, P.: Frontal solution program for unsymmetric matrices. *Int. J. num. meth. engng.* 10 (1976), S. 379 – 399.

- [14] Socolowsky, J.: Eine Anwendung der Methode der finiten Elemente zur Berechnung von Strömungen bei Beschichtungsvorgängen. Vortragsauszüge der Jahrestagung „Mathematische Optimierung“, 25. – 31. 3. 1984, Sellin, S. 79 – 81.
- [15] Socolowsky, J.: Über eine Randwertaufgabe für stationäre Mehrschichtenströmungen. Wiss. Berichte TH Leipzig (1983), Nr. 6, S. 43 – 46.
- [16] Ладыженская, О. А.: Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. Изд. „Наука“, Москва, 1970.

Anschrift der Verfasser:

Dr. rer. nat. Jürgen Socolowsky
Technische Hochschule „Carl Schorlemmer“
Leuna-Merseburg
Sektion Mathematik
4200 Merseburg
Otto-Nuschke-Str.