

Analytische Modellierung, experimentelle
Untersuchungen und dreidimensionale
Gitter-Boltzmann Simulation der quasistatischen
und instabilen Farbspaltung

Vom Studiengang Kommunikationstechnologie Druck an der
Bergischen Universität Gesamthochschule Wuppertal zur Erlangung des
Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Dissertation

vorgelegt am 29.07.2002 von

Dipl.-Math. Christian Voß

aus Köln

Gutachter

Prof. Dr.-Ing. Peter Urban

Prof. Dr. rer. nat. Jorge Rodriguez-Gilles

Prof. Dr.-Ing. Martin Böhle

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand in den Jahren 1998 bis 2002 während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter im Studiengang Kommunikationstechnologie Druck an der Bergischen Universität - Gesamthochschule Wuppertal.

Mein Dank gilt allen Mitarbeitern dieses Fachbereichs, die mir stets hilfsbereit zur Seite standen und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. Dr. Ing. P. Urban danke ich besonders für sein in meine Person gesetztes Vertrauen, den zur Durchführung dieser Arbeit gewährten Freiraum, die Übernahme des Referates sowie die vielen wertvollen Hinweise und Anregungen, die diese Arbeit wesentlich beeinflusst haben.

Herrn Prof. Dr. rer. nat. J. Rodriguez-Giles danke ich vielmals für das dieser Arbeit entgegengebrachte Interesse und für die Übernahme des Korreferates.

Ebenfalls danke ich Herrn Prof. Dr. Ing. M. Böhle für die vielen Anregungen aus dem Bereich der Strömungssimulation.

Herzlichen Dank für die gewissenhaften grammatikalischen und orthographischen Korrekturen an Gerti Dörner, Mara Niederdräing, Georg Diedrich, Henning Schulze und Antje Voß.

Hiermit erkläre ich an Eides statt, daß ich die vorliegende Arbeit - abgesehen von den ausdrücklich genannten Hilfen - selbstständig verfaßt habe.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	11
1.1	Flüssigkeitsströmung in der Drucktechnik	11
1.2	Zielsetzung	13
1.3	Stand des Wissens	14
2	Die quasistatische Farbspaltung	15
2.1	Die quasistatische Punktspaltung	16
2.2	Die quasistatische Lamellenspaltung	20
3	Hydrodynamische Grundgleichungen	24
4	Die Farbspaltung 2. Klasse	31
4.1	Stabile und instabile Punktspaltung	33
4.2	Stabile und instabile Lamellenspaltung	41
4.3	Einfluß rauher Oberflächen	47
4.3.1	Die Flüssigkeitslamelle	47
4.3.2	Der Flüssigkeitstropfen	51
5	Die Farbspaltung 1. Klasse	53
5.1	Die sich öffnende Hele-Shaw Zelle	54
5.2	Experimentelle Untersuchung	60
6	Simulationsverfahren	67
7	2-dimensionale Gittergase	71
7.1	Das FHP-Gittergas	72
7.1.1	Mikrodynamische Gleichungen	74
7.1.2	Makrodynamische Gleichungen	76
7.2	Das HPP-Gittergas	79
7.3	Tensoren	85
7.3.1	Tensoren und Gitter	86
7.4	Die Fermi-Dirac Verteilung	90

7.5	Die Euler-Gleichung des FHP-Gittergases	93
7.6	Viskosität der Gittergase	96
7.6.1	Viskosität des HPP-Gases	97
7.6.2	Viskosität des FHP-1 Gases	101
8	3-dim. Gitter-Boltzmann Verfahren	107
8.1	3-dimensionale Gitter	107
8.1.1	Das FCHC-Gitter (face centered hypercubic)	108
8.1.2	Gewichtete Kombination 3-dimensionaler Gitter	109
8.1.3	Projektion des P_{24} Polytops	111
8.2	Das Gitter-Boltzmann Verfahren	112
8.3	Die Verteilungsfunktion	112
8.4	Die Chapman-Enskog Methode	118
8.4.1	Herleitung der Kontinuitätsgleichung	121
8.4.2	Herleitung der Navier-Stokes Gleichung	122
8.5	Wahl der noch offenen Konstanten	126
9	Zweiphasenströmungen	130
9.1	Zwischenmolekulare Kräfte	130
9.2	Thermische Zustandsgleichung	133
9.3	Gleichgewichtszustand	138
9.4	Oberflächenspannung	144
9.5	Modellparameter und Stoffgrößen	144
9.6	Randbedingungen	152
9.6.1	Ruhende, ebene Festkörper	153
9.6.2	Bewegte, gekrümmte Festkörper	154
9.7	Algorithmus	155
10	Simulationsbeispiele	158
10.1	Quasistatische Punktspaltung	158
10.1.1	Vergleich von Experiment und Simulation	165
10.2	Dynamische Schichtspaltung	169
10.2.1	Spalteinlauf	172
10.2.2	Spaltauslauf	180
11	Zusammenfassung und Ausblick	204

Abbildungsverzeichnis

2.1	Tropfen	16
2.2	Flüssigkeitslamelle	20
4.1	Viscous fingering eines Tropfens	31
4.2	Mikrostreifen	32
4.3	Tropfenmodell	34
5.1	Die Hele-Shaw Zelle	54
5.2	Schichtspaltung	61
5.3	Wellenzahl - Rasterwalzenlineatur	63
5.4	Wellenzahl - Rasterwalzenvolumen	64
5.5	Ausgleichsfunktion	65
5.6	Baumrindenstruktur	66
6.1	Tropfenkollision	69
7.1	FHP-Gittergas	73
7.2	Kollisionsgesetze im FHP-1 Modell	75
7.3	FHP-Gittergas makroskopisch	78
7.4	HPP-Gittergas	80
7.5	Scherung	97
7.6	Spannungstensor des FHP-Gittergases	104
8.1	Gitter	111
9.1	Zustandsdiagramm für verschiedene Werte von \mathcal{G}	136
9.2	Maxwellkonstruktion	137
9.3	Dynamische Viskosität	147
9.4	Oberflächenspannung	147
9.5	Machzahl	148
9.6	Reynoldszahl	148
9.7	Weberzahl	149
9.8	Kapillarzahl	149

9.9	Dichteverhältnis	150
9.10	Randbedingung-Festkörper	155
9.11	Algorithmus	157
10.1	Tropfenkontur 1	162
10.2	Tropfenkontur 2	163
10.3	Tropfenkontur 3	164
10.4	Tropfenkontur 4	164
10.5	Tropfenkontur 5	165
10.6	Experiment-Simulation	168
10.7	Spaltgeometrie	173
10.8	Spalteinlauf 1	176
10.9	Spalteinlauf 2	177
10.10	Spalteinlauf 3	178
10.11	Spalteinlauf 4	179
10.12	Spaltauslauf 1	184
10.13	Spaltauslauf 2	186
10.14	Rückströmung	187
10.15	Diskretisierungsfehler	188
10.16	Spaltauslauf 3	192
10.17	Spaltauslauf 4	193
10.18	Spaltauslauf 5	193
10.19	Spaltauslauf 6	194
10.20	Spaltauslauf 7	195
10.21	Spaltauslauf 8	198
10.22	Spaltauslauf 9	200
10.23	Spaltauslauf 10	201

Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Erläuterung
p_i	$[Pa]$	Innendruck
p_a	$[Pa]$	Außendruck
κ	$[m^{-1}]$	Krümmung
R_1, R_2	$[m]$	Krümmungsradien bzw. Zylinderradien
γ_l	$[N \cdot m^{-1}]$	Oberflächenspannung
γ_s	$[N \cdot m^{-1}]$	Grenzflächenspannung fest-gasförmig
γ_{sl}	$[N \cdot m^{-1}]$	Grenzflächenspannung fest-flüssig
η	$[N \cdot s \cdot m^{-2}]$	dynamische Viskosität
ν	$[m^2 \cdot s^{-1}]$	kinematische Viskosität
ξ	$[N \cdot s \cdot m^{-2}]$	Volumenviskosität
	$[-]$	bzw. dimensionslose Koordinate
ϑ	$[-]$	Randwinkel
(x, y, z)	$([m], [m], [m])$	kartesische Koordinaten
(r, φ, z)	$([m], [-], [m])$	Zylinderkoordinaten
A, F, O	$[m^2]$	Oberflächen
V	$[m^3]$	Volumen
	$[N \cdot m]$	bzw. Potential des Kraftfeldes
$R(z), X(z)$	$[m]$	Konturkurven
S	$[m]$	Weglänge
∇	$[m^{-1}]$	Nablaoperator
$div = \nabla \cdot$	$[m^{-1}]$	Divergenz
$\Delta = \nabla^2$	$[m^{-2}]$	Laplaceoperator
ρ	$[kg \cdot m^{-3}]$	Dichte
$\vec{v}, \vec{u}, \vec{w}$	$[m \cdot s^{-1}]$	Geschwindigkeit
\vec{j}	$[kg \cdot m^{-2} \cdot s]$	Stromdichte
\vec{F}	$[N]$ bzw. $[N \cdot m^{-3}]$	Kraft bzw. Volumenkraft

Symbol	Einheit	Erläuterung
\vec{k}	$[m \cdot s^{-2}]$	Beschleunigung
ζ	$[-]$	dimensionslose Koordinate
\vec{T}	$[N \cdot m^{-2}]$	Spannungstensor bzw. Impulsstromtensor
\vec{E}	$[s^{-1}]$	Verformungstensor
	$[-]$	bzw. Rotations- oder Spiegelmatrix
$\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$	$[N \cdot s \cdot m^{-2}]$	Tensor 4.Stufe
p	$[N \cdot m^{-2}]$	Druck
$\delta = \delta^{(2)}, \delta^{(4)}$	$[-]$	Kronecker Symbol 2. bzw. 4.Ordnung
ε	$[-]$	kleine Störgröße
β	$[s^{-1}]$	
n	$[-]$ bzw. $[m^{-1}]$	Wellenzahl
h	$[m]$	Spalthöhenverlauf
		bzw. orthogonale Knotenabstand
p_0	$[Pa]$	ungestörter Druck bzw. Gleichgewichtsdruck
p_1	$[Pa]$	Stördruck
g	$[Pa]$	Stördruckfunktion
u_0, w_0	$[m \cdot s^{-1}]$	ungestörte Geschwindigkeitskomponente
u_1, w_1	$[m \cdot s^{-1}]$	gestörte Geschwindigkeitskomponente
R, X	$[m]$	ungestörte Flüssigkeitsausdehnung
R_s, X_s	$[m]$	gestörte Flüssigkeitsausdehnung
Ca	$[-]$	Kapillarzahl
Ca^*	$[-]$	modifizierte Kapillarzahl
Re	$[-]$	Reynoldszahl
Kn	$[-]$	Knudsenzahl
We	$[-]$	Weberzahl
Ma	$[-]$	Machzahl
Fr	$[-]$	Froudezahl
Bo	$[-]$	Bondzahl
I_1	$[-]$	mod. Besselfunktion 1.Ordn. 1.Gattung
K_1	$[-]$	mod. Besselfunktion 1.Ordn. 2.Gattung
I_2	$[-]$	mod. Besselfunktion 2.Ordn. 1.Gattung
K_2	$[-]$	mod. Besselfunktion 2.Ordn. 2.Gattung
n_i	$[-]$	Teilchenpopulation in i-Richtung

Symbol	Einheit	Erläuterung
$\langle n_i \rangle, N_i$	$[-]$	gemittelte Teilchenpopulation in i-Richtung
$\vec{c}_i, \vec{c}_{\sigma i}$	$[-]$ bzw. $[m \cdot s^{-1}]$	Geschwindigkeitsvektor in $(\sigma)i$ -Richtung
ω	$[s^{-1}]$	Winkelgeschwindigkeit bzw. Scherrate
$\Delta_i, \Delta_{\sigma i}$	$[-]$ bzw. $[m^{-3}]$	Kollisionsoperator in $(\sigma)i$ -Richtung
$C_{\alpha_1 \dots \alpha_k}^{(k)}$	$[-]$ bzw. $[m^k \cdot s^{-k}]$	Gittertensor k-ter Stufe
t	$[s]$	Zeit
δt	$[s]$	Zeitschritt
m	$[kg]$	Masse
$w^{(\sigma)}$	$[-]$	Gewichtung
$f_{\sigma i}$	$[m^{-3}]$	Verteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^{(0)}$	$[m^{-3}]$	Gleichgewichtsverteilungsfunktion
$f_{\sigma i}^{(1)}$	$[m^{-3}]$	Abweichung 1. Ordn. vom Gleichgewicht
$f_{\sigma i}^{(2)}$	$[m^{-3}]$	Abweichung 2. Ordn. vom Gleichgewicht
τ	$[s]$	Relaxationszeit
$n(\vec{x}, t)$	$[m^{-3}]$	Teilchendichte
$c_{s, id}$	$[m \cdot s^{-1}]$	isotherme Schallgeschwindigkeit
A_σ	$[-]$	Konstanten der Gleichgewichtsverteilung
B_σ	$[s^2 \cdot m^{-2}]$	Konstanten der Gleichgewichtsverteilung
C_σ	$[s^4 \cdot m^{-4}]$	Konstanten der Gleichgewichtsverteilung
D_σ	$[s^2 \cdot m^{-2}]$	Konstanten der Gleichgewichtsverteilung
α	$[-]$	Massenanteil der Ruheteilchen
β	$[-]$	Massenanteil der Teilchen auf dem einfach kubischen Gitter
γ	$[-]$	Massenparameter
$H_{f_{\sigma i}}(\vec{x}, t)$	$[m^{-3}s^{-2}]$ bzw. $[m^{-5}]$ bzw. $[m^{-4}s^{-1}]$	Hessematrix von $f_{\sigma i}$
\mathcal{G}	$[kg^{-1} \cdot m^3]$	Stärke der zwischenmolekularen Kraft
ψ	$[kg \cdot m^{-3}]$	Funktion im Kraftterm
ρ_s	$[kg \cdot m^{-3}]$	Dichte an der Phasengrenze
ρ_l	$[kg \cdot m^{-3}]$	Dichte der flüssigen Phase
ρ_g	$[kg \cdot m^{-3}]$	Dichte der gasförmigen Phase
ϕ	$[kg \cdot m^{-8}]$	$(d\rho/dz)^2$
L	$[m]$	charakteristische Länge
k, k_u, k_o	$[-]$	Faktor in Randbedingung RR

Symbol	Einheit	Erläuterung
H	$[m]$	Plattenabstand bzw. Walzenabstand
S, S_1, S_2	$[m]$	Farbschichtdicke
N_x	$[-]$	Knotenanzahl in x-Richtung
N_y	$[-]$	Knotenanzahl in y-Richtung
N_z	$[-]$	Knotenanzahl in z-Richtung
U_w, w, w_{max}	$[m \cdot s^{-1}]$	Wandgeschwindigkeit
R_0	$[m]$	mittlerer Radius

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Flüssigkeitsströmung in der Drucktechnik

Die Aufgabe der Drucktechnik besteht in der Informationsübertragung mittels Farbe auf die unterschiedlichsten Substrate. Um dies zu erreichen, werden entweder Farbstoffe in einer Flüssigkeit gelöst, oder Farbpigmente in einer Flüssigkeit dispergiert, so daß die Farbe mittels Strömungsvorgängen auf den Bedruckstoff gelangen kann. Das Lösungsmittel stellt also lediglich ein Hilfsmittel für die Informationsübertragung dar, welches nach dem Drucken, durch Verdunstung oder andere Trocknungsverfahren wieder beseitigt wird. Die Schwierigkeit beim Drucken besteht darin, aus einem sehr großen Flüssigkeitsreservoir kleine Mengen auflagenstabil und in vorgegebener Anordnung auf einem Substrat zu separieren. Die Druckpunkte haben dabei einen Durchmesser von $10\ \mu\text{m}$ bis zu ungefähr $0,5\ \text{mm}$. Die Farbschichtdicke von Druckpunkten bzw. Volltonflächen beträgt je nach Druckverfahren ca. $2\ \mu\text{m}$ bis $10\ \mu\text{m}$. Diese Dosierung im Pikoliterbereich, welche im Druckwerk einige tausend mal pro Sekunde stattfindet, soll mit möglichst wenig Informationsverlust behaftet sein. Der flächenselektive Materialauftrag, d.h. der Wechsel von farbführenden und farbfreien Flächen, grenzt die Drucktechnik auch von den artverwandten Lackier- und Laminierverfahren ab.

Die Separation kleinster Farbvolumina aus einem quasi unendlich großen Reservoir kann in einigen Fällen nicht in einem einzigen Schritt erfolgen. Je nach Druckverfahren erfolgt vielmehr eine Hintereinanderschaltung vieler Farbtrennungsprozesse, bis schließlich Volumina bzw. Schichtdicken geeigneter Maße zur Verfügung stehen. In Farbwerken von Offsetdruckmaschinen ist diese Vorgehensweise durch die Hintereinanderschaltung einer großen Anzahl von Verreiberwalzen verwirklicht.

Im Flexodruck erfolgt die Farbseparation mittels einer Rasterwalze. Eine sol-

che Walze besitzt meist eine Metall- oder Chromoxidoberfläche, in die eine periodische Struktur gelasert, graviert oder geätzt wurde. Die Anzahl dieser, als Nöpfchen bezeichneten Vertiefungen, variiert bei handelsüblichen Rasterwalzen von ca. 6 bis 500 Linien pro Zentimeter, also von ca. 36 bis 250000 Nöpfchen pro Quadratzentimeter. Die Tiefe der Nöpfchen variiert von $5\ \mu\text{m}$ bis $500\ \mu\text{m}$.

Das Wirkprinzip der Rasterwalze besteht darin, daß sie aufgrund ihrer erhöhten Oberfläche mehr Farbe an sich binden und transportieren kann als eine ideal glatte Walze. Dies liegt in den Wechselwirkungskräften von Flüssigkeits- und Feststoffmolekülen begründet, welche die sogenannten Kohäsions- oder Kapillarkräfte hervorrufen. Eine vergrößerte Oberfläche erhöht natürlich die Fläche, an der diese Kohäsionskräfte ansetzen können.

In diesem Sinne ähnelt der Vorgang der Farbübertragung beim Flexodruck mittels einer Rasterwalze der Farbübertragung beim Tiefdruck. In beiden Verfahren spielt die Farbentleerung aus Nöpfchen eine entscheidende Rolle. Die Rasternöpfchen eines Tiefdruckzylinders tragen jedoch schon die zu übermittelnde Information. Diese liegt in Anordnung, Tiefe und Grundfläche der Nöpfchen, welche ihre Farbfüllung direkt dem Bedruckstoff anbieten. Die Rasterwalze im Flexodruckverfahren dient, im Gegensatz dazu, der möglichst genau dosierten und gleichmäßigen Einfärbung der Hochdruckform auf dem Gegenzylinder. Ihre Nöpfchen sind demnach geometrisch ähnlich.

Ein besonderer Vorteil dieser Art der Einfärbung liegt in der Rückwirkungsfreiheit dieser Verfahren. Sowohl der Tiefdruckzylinder als auch die Rasterwalze werden bei jeder Umdrehung überschüssig eingefärbt und abgerakelt, so daß sich die angebotene Farbmenge nicht mit der Zeit ändert.

Ein weiterer Vorteil von Rasterwalzen gegenüber ideal glatten Walzen für die Einfärbung besteht darin, daß sie ein sehr kurzes und damit preiswertes Farbwerk ermöglichen und dennoch für eine gleichmäßige Farbzufuhr sorgen.

In der Drucktechnik wird im Wesentlichen zwischen zwei Strömungsformen unterschieden. Es gibt zum einen die reine Schichtspaltung, die sich dadurch auszeichnet, daß ein im Vergleich zum Druckpunkt großes Farbvolumen zur Verfügung steht. Diese Strömungsform tritt beispielsweise bei der Übertragung von Volltonflächen oder zwischen den Verreiberwalzen einer Offsetdruckmaschine auf. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von der Farbspaltung 1. Klasse.

Die Punktspaltung oder Farbspaltung 2. Klasse zeichnet sich dadurch aus, daß die zur Verfügung stehenden Farbvolumina wesentlich kleiner und in sich abgeschlossen sind. Die Spaltung eines einzelnen Druckpunktes oder die Entleerung eines vollkommen abgerakelten Tiefdruckzylinders sind hierfür typische Beispiele.

1.2 Zielsetzung

Zielsetzung dieser Arbeit ist es, Strömungen, wie sie im Druckprozess insbesondere bei der Farbspaltung vorkommen, analytisch, experimentell und mittels Computersimulationen zu untersuchen.

Analytische Untersuchungen

In diesem Teil der vorliegenden Arbeit soll sowohl die quasistatische als auch die hydrodynamische Farbspaltung anhand möglichst einfacher mathematischer Modelle untersucht werden. Dabei sollen die auftretenden Instabilitäten bei der Punktpaltung (viscous fingering) und Schichtspaltung (Mikrostreifen) besondere Berücksichtigung finden. Diese Instabilitäten erzeugen in beiden Farbspaltungsklassen Schichtdickenschwankungen im Farbfilm. Da die optische Dichte exponentiell von der Farbschichtdicke abhängt, verursachen bereits kleine Abweichungen in der Schichtdicke erhebliche Qualitätsverluste im Druckerzeugnis. Des weiteren wird die optische Dichte im Mittel herabgesetzt, wodurch die Farbgebung der Pigmente schlechter ausgenutzt wird. Bei der Punktpaltung verursachen diese Instabilitäten zusätzlich eine Auf-fingerung des Druckpunktrandes, was den Kontrast zwischen farbfreien und farbführenden Flächen herabsetzt.

Das Strömungsverhalten von Flüssigkeiten zwischen strukturierten Festkörpern soll ebenfalls behandelt werden. Motivation hierfür ist das, bisher erst unzureichend untersuchte, Entleerungsverhalten von Rasterwalzen. Bislang basiert die Auswahl geeigneter Rasterwalzen für unterschiedlichste Druck- und Beschichtungsprozesse fast ausschließlich auf Erfahrungswerten. Daher ist es wünschenswert, diesen Strömungsprozess besser zu verstehen, um Optimierungsmöglichkeiten zu finden.

Instabile Strömungen haben bei der Farbentleerung von Rasterwalzen, neben dem verursachten ungleichmäßigen Farbauftrag, noch einen zweiten wesentlichen Nachteil: Bei einer instabilen Lage der freien Farboberfläche im Spalteinlauf oder Spaltauslauf ist es vorstellbar, daß Luft in den Walzenspalt transportiert und somit der sich dort ausbildende Unterdruck ausgeglichen wird. Gerade dieses Unterdruckgebiet hat aber die willkommene Eigenschaft, neben den Kohäsionskräften zwischen Farbe und Klischee, verstärkend auf die Entleerung der einzelnen Nöpfchen zu wirken. Aus diesem Grund wird die instabile Strömung zwischen rauhen Oberflächen ein weiteres Thema im analytischen Teil dieser Arbeit sein. Es sei aber bereits hier darauf hingewiesen, daß selbst stark vereinfachende Modelle der instabilen Strömung zwischen rauhen Festkörpern auf Grund der komplexen Randbedingungen keine analytische Lösung der hydrodynamischen Grundgleichungen zulassen.

Experimentelle Untersuchungen

Das Ziel im experimentellen Teil dieser Arbeit ist es, das instabile Strömungsverhalten der Schichtspaltung (Mikrostreifen) zu untersuchen und mit den analytischen Ergebnissen zu vergleichen. Dabei soll insbesondere gezeigt werden, daß die dominante Wellenzahl im Druckbild wesentlich stärker vom absoluten Schöpfvolumen beteiligter Rasterwalzen beeinflusst wird, als von deren expliziter Oberflächentopologie (Rasterwalzenlineatur).

Simulation

Bei der rein analytischen Behandlung der oben beschriebenen Strömungsprobleme gelangt man auf Grund der komplexen hydrodynamischen Grundgleichungen (bzw. Randbedingungen) sehr schnell an die Grenzen der mathematischen Lösbarkeit. Daher soll im numerischen Teil dieser Arbeit ein neuartiges Simulationsmodell vorgestellt werden, welches es erlaubt, dreidimensionale Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen realitätsnah zu simulieren. Da es sich bei diesem sog. Gitter-Boltzmann Verfahren um ein noch sehr junges Simulationsverfahren handelt, soll zum besseren Verständnis auch dessen Vorgänger, das sogenannte Gittergasmodell, vorgestellt werden. Des weiteren werden die Vor- und Nachteile beider Verfahren gegenüber den klassischen Simulationsverfahren der Hydrodynamik (finite Elemente, finite Volumen, finite Differenzen,...) kurz diskutiert. Abschließend sollen druckspezifische Strömungen (quasistatische Punktspaltung, dynamische Schichtspaltung) mit diesem Gitter-Boltzmann Verfahren untersucht werden. Zur Überprüfung des Algorithmus werden die Simulationsergebnisse der quasistatischen Punktspaltung zusätzlich mit realen Experimenten verglichen.

1.3 Stand des Wissens

Von den vielen Arbeiten, die sich mit druckspezifischen Strömungsprozessen beschäftigt haben, seien an dieser Stelle die Dissertationen von G. Hübner [3] und H. Behler [2], sowie die Arbeit von S.-Z. Zhang [9] hervorgehoben, da auf diese später noch intensiv Bezug genommen wird.

Im Zusammenhang mit Gitter-Boltzmann Simulationen soll bereits hier die Dissertation von M.Schelkle [1] erwähnt werden, da das dort beschriebene Simulationsmodell in großen Teilen auch in der vorliegenden Arbeit Verwendung findet.

Ansonsten soll aber auf Grund der großen Anzahl relevanter Arbeiten zu den unterschiedlichen Themengebieten am Anfang jeden Kapitels bzw. Paragraphen auf die dort verwendete Literatur verwiesen werden.

Kapitel 2

Die quasistatische Farbspaltung

In diesem Kapitel soll ein erstes, stark vereinfachtes Modell zur Farbspaltung der 2. Klasse beschrieben und diskutiert werden. Der Farbspaltungsvorgang sei hier als so langsam angenommen, daß bewegungsinduzierte Kräfte, wie sie später in der Hydrodynamik vorkommen werden, vollkommen vernachlässigt werden können. Dieser hydrostatische Einstieg in die Problematik der Farbspaltung hat den Vorteil, daß man sich auf diese Weise anfangs noch nicht den großen, mathematischen Schwierigkeiten bei der Behandlung partieller Differentialgleichungssysteme gegenüberstellt, und sich daher intensiver mit den prinzipiellen Schwierigkeiten der Farbspaltung auseinandersetzen kann. Daß diese Vereinfachung nur sehr bedingt zulässig ist, wird Anfang des vierten Kapitels, welches sich mit der hydrodynamischen Sichtweise auseinandersetzt, beschrieben. Trotz dieser groben Vereinfachung des realen Farbspaltungsprozesses werden aber bereits in diesem Kapitel die grundlegenden Probleme mathematischer Natur sichtbar.

Im Folgenden werden unterschiedliche Geometrien eines abgeschlossenen Flüssigkeitsvolumens betrachtet, welches sich zwischen zwei parallelen Platten befindet. Es wird jeweils der Versuch unternommen, Aussagen über das Spaltungsverhältnis des Flüssigkeitsvolumens zu gewinnen, wenn sich der Abstand der beiden Platten „unendlich langsam“ vergrößert.

Literatur: Dieses Kapitel ist als Einstieg in die Problematik der Farbspaltung zu verstehen und orientiert sich an der Dissertation von G. Hübner [3]. Sowohl die Abbildungen als auch die Modellierungsansätze dieses Kapitels sind dieser Arbeit entnommen; die mathematische Umsetzung ist allerdings an vielen Stellen abweichend.

In Bezug auf quasistatische Flüssigkeitsbrücken sei exemplarisch auf die Arbeiten von Martinez [22], [23], De Bishop [24] und Mesgeguer [25] verwiesen. Im Zusammenhang mit Problemen der Variationsrechnung sowie gewöhnli-

cher Differentialgleichungen sind z.B. die Bücher von Walter [45], Clegg [43], Grauert [47] und Velte [44] zu nennen.

2.1 Die quasistatische Punktspaltung

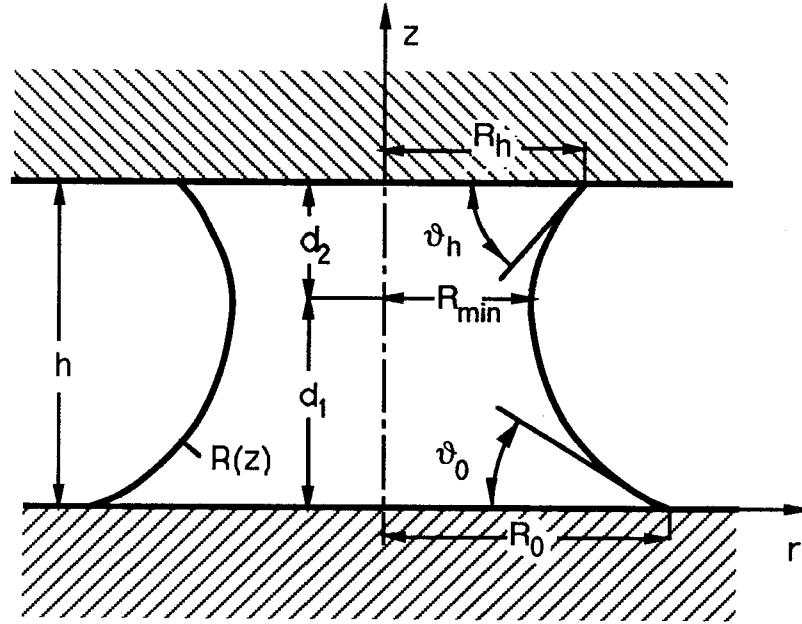


Abbildung 2.1: Modell eines rotationssymmetrischen Tropfens zwischen parallelen Platten.

Im Gegensatz zur dynamischen Punktspaltung soll in diesem Kapitel die Trennung eines Druckpunktes als so langsam angesehen werden, daß bewegungsinduzierte Kräfte und Druckunterschiede keinen Einfluß auf die Farbspaltung haben und somit allein die Konturkurve der freien Oberfläche des Druckpunktes die Farbspaltungszahl festlegt: Der rotationssymmetrische Tropfen wird sich beim langsamen Auseinanderziehen der Platten genau da spalten, wo sein Radius minimal ist (siehe Abbildung 2.1). Eine mathematische Funktion, die diese Tropfenkontur beschreibt, läßt sich theoretisch aus der Young-Laplace Gleichung ermitteln, welche besagt, daß der Drucksprung an der freien Oberfläche gleich dem Produkt aus der Krümmung und der Oberflächenspannung der Flüssigkeit ist (siehe z.B. Spurk [26] S.148ff., Becker [32] S.30ff.):

$$p_i - p_a = \gamma_l \cdot \kappa \quad (2.1)$$

Hierbei ist die Krümmung κ der freien Oberfläche durch die beiden Krümmungsradien R_1, R_2 gegeben:

$$\kappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \quad (2.2)$$

Weiterhin ist in diesem einfachsten Modell der Punktspaltung angenommen, daß der Innendruck p_i des Tropfens konstant ist. Dies liegt darin begründet, daß zum einen der Vorgang der Trennung als unendlich langsam angesehen wird und zum anderen die Bondzahl $Bo = \rho g L^2 / \gamma_l$, welche ein Verhältnis von Gravitationskraft zu Oberflächenkraft angibt, bei der Spaltung eines Druckpunktes so klein ist, daß auch die Gravitation den Innendruck im Tropfen nicht maßgeblich mit variabler Höhe verändert (siehe hierzu Hübner [3]). Die charakteristische Länge L ist dabei die dritte Wurzel aus dem Tropfenvolumen V . Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, daß vor allem der Wegfall bewegungsinduzierter Kräfte eine sehr grobe Vereinfachung des dynamischen Spaltungsprozesses darstellt.

Aus obiger Young-Laplace Gleichung 2.1 folgt nun, unter Ausnutzung der als bekannt vorausgesetzten, differentialgeometrischen Gleichungen für die Krümmungsradien (siehe hierzu z.B. Bronstein [41]), eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung für die noch unbekanntete Konturkurve $R(z)$:

$$R''(z) = -\frac{p_i - p_a}{\gamma_l} (1 + R'(z)^2)^{3/2} + \frac{1}{R(z)} (1 + R'(z)^2) \quad (2.3)$$

Diese Differentialgleichung ist stark nichtlinear und trotz ihres recht unkomplizierten Aussehens nicht geschlossen lösbar. Auf einen numerischen Lösungsversuch soll hier verzichtet werden. Es sei aber bereits darauf hingewiesen, daß im Paragraph 10.1 die hier beschriebene quasistatische Punktspaltung mittels eines sog. Gitter-Botzmann Verfahrens simuliert wird.

Einen Schritt weiter kommt man, wenn man die Aufgabe der Konturkurvensuche als isoperimetrisches Variationsproblem interpretiert (siehe z.B. Clegg [43] und Velte [44]). Dies bedeutet, daß man eine Funktion $R(z)$ sucht, welche die Oberfläche A des Tropfens minimiert. Mit der Parametrisierung

$$\begin{aligned} \phi : [0, h] \times [0, 2\pi] &\longrightarrow A \\ \begin{pmatrix} z \\ \varphi \end{pmatrix} &\longmapsto \begin{pmatrix} R(z) \cdot \cos(\varphi) \\ R(z) \cdot \sin(\varphi) \\ z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.4)$$

der freien Oberfläche A ergibt sich:

$$\|A\| = \int_0^{2\pi} \int_0^h \|\phi_z \times \phi_\varphi\| dz d\varphi$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^{2\pi} \int_0^h \left\| \begin{pmatrix} R'(z) \cos(\varphi) \\ R'(z) \sin(\varphi) \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -R(z) \sin(\varphi) \\ R(z) \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix} \right\| dz d\varphi \\
&= \int_0^{2\pi} \int_0^h \left\| \begin{pmatrix} -R(z) \cos(\varphi) \\ R(z) \sin(\varphi) \\ R(z)R'(z) \end{pmatrix} \right\| dz d\varphi \\
&= 2\pi \int_0^h R(z) \sqrt{1 + R'(z)^2} dz \tag{2.5}
\end{aligned}$$

Dieses Integral gibt den Betrag der Oberfläche A des rotationssymmetrischen Tropfens an und soll daher aus energetischen Gründen minimiert werden. Als Nebenbedingung muß allerdings das Tropfenvolumen konstant bleiben, da Druckfarben in guter Näherung als inkompressible Fluide betrachtet werden können. (Würde man auf diese Nebenbedingung verzichten, so hieße das, nach der Konturkurve einer rotationssymmetrischen Seifenblase zwischen zwei parallelen Platten zu suchen, was in diesem Zusammenhang nicht von Interesse ist.)

In mathematischer Schreibweise lautet diese Nebenbedingung,

$$\pi \int_0^h R(z)^2 dz = V \tag{2.6}$$

wobei das Tropfenvolumen V eine vorgegebene Konstante ist. Durch Übergang auf dimensionslose Koordinaten $\xi = R/h$ und $\zeta = z/h$ ergibt sich aus den Gleichungen 2.5 und 2.6:

$$\frac{A}{2\pi h^2} = \int_0^1 \xi(\zeta) \cdot \sqrt{\xi'(\zeta)^2 + 1} d\zeta \tag{2.7}$$

$$\frac{V}{\pi h^3} = \int_0^1 \xi(\zeta)^2 d\zeta \tag{2.8}$$

Aus der Variationsrechnung sind Lösungsmethoden für solche Probleme bekannt (siehe z.B. Clegg [43] und Velte [44]). Notwendig für eine solche Funktion $\xi(\zeta)$ ist die Minimierung folgenden Integrals:

$$\int_0^1 \xi(\zeta) \cdot \sqrt{\xi'(\zeta)^2 + 1} + \lambda \cdot \xi(\zeta)^2 d\zeta =: \int_0^1 F(\xi, \xi') d\zeta \tag{2.9}$$

Hieraus folgt nun mit Hilfe der sogenannten Eulerschen Gleichung (siehe hierzu Clegg [43]):

$$F(\xi, \xi') - \xi' \cdot \frac{\partial F(\xi, \xi')}{\partial \xi'} = c = \text{const.} \quad (2.10)$$

Nach Einsetzen der Funktion $F(\xi, \xi')$ aus Gleichung 2.9 ergibt sich hieraus nun immerhin eine gewöhnliche DGL 1. Ordnung für $\xi(\zeta)$ (Gleichung 2.3 ist eine DGL 2. Ordnung) und damit auch für $R(z)$:

$$\frac{\xi(\zeta)}{\sqrt{\xi'(\zeta)^2 + 1}} = c - \lambda \xi(\zeta)^2 \quad (2.11)$$

Diese gewöhnliche DGL 1. Ordnung ist nun unter gewissen, allerdings sehr strengen Voraussetzungen, allgemein lösbar und unterteilt die Lösungen in verschiedene Klassen: Undoloiden, Katenoiden, Nodoiden und Kreise (siehe Hübner [3]). Wollte man allerdings auf die sehr strengen Voraussetzungen verzichten, so müßte man auch an dieser Stelle nach numerischen Lösungen obiger DGL 2.11 suchen.

Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, daß die Gleichungen 2.3 und 2.11 im folgenden Sinne äquivalent sind: Differenziert man Gleichung 2.11 implizit nach ζ und setzt man

$$\lambda := \frac{(p_a - p_i) \cdot h}{\gamma_l} \quad (2.12)$$

so erhält man Gleichung 2.3.

Selbst unter der (nicht zutreffenden) Voraussetzung, daß die Gleichungen 2.3 bzw. 2.11 eine allgemeine Lösung $R(z)$ bzw. $\xi(\zeta)$ hätten, blieben einige Probleme bei der Wahl geeigneter Randbedingungen bestehen: Für die Bestimmung der 3 unbekanntenen Konstanten λ, c, d dürfen auch lediglich 3 Randbedingungen herangezogen werden (d ist die, hier nicht explizit auftauchende, Integrationskonstante beim Lösen einer DGL 1. Ordnung). Als unerlässlich muß dabei die Bedingung des konstanten Volumens angesehen werden. Wird auch eine Haftbedingung des Fluids an den Platten vorausgesetzt, so sind auch die Randradien R_0, R_h unbedingt notwendige Randbedingungen. Dies aber bedeutet, daß für die Randwinkel ϑ_0, ϑ_h keine weiteren Konstanten mehr zur Verfügung stehen, sie ergeben sich "automatisch". In diesem Sinne haben die Randwinkel und die mit ihnen über die Young-Dupre Gleichung (siehe z.B. [8])

$$\gamma_s = \gamma_{s,l} + \gamma_l \cdot \cos(\vartheta) \quad (2.13)$$

verbundenen Oberflächenspannungen der Platten, sowie die Grenzflächenspannungen zwischen den Platten und dem Fluid, keinerlei Einfluß auf die

Konturkurve. Diese, sich aus dem Modell ergebende Eigenschaft, ist in vielen Fällen sicherlich zweifelhaft, so daß man sich also sehr genau überlegen muß, welche Randbedingungen einen maßgeblichen Einfluß auf die Konturkurve haben. Lösungsfindung von Differentialgleichungen (bzw. Differentialgleichungssystemen) und Wahl geeigneter Randbedingungen stellen auch die Hauptschwierigkeiten beim analytischen Umgang mit hydrodynamischen Prozessen dar. Eine etwas leichter zu behandelnde Geometrie als die des rotationssymmetrischen Tropfens wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

2.2 Die quasistatische Lamellenspaltung

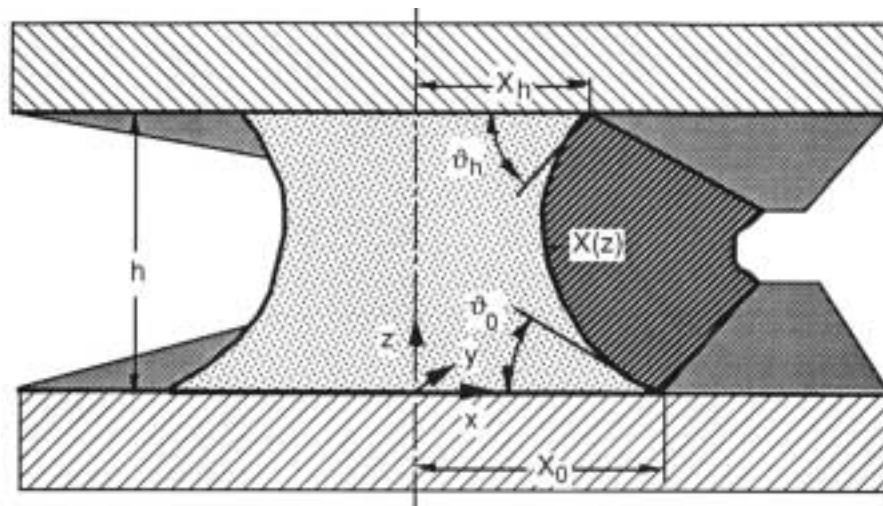


Abbildung 2.2: Modell einer sich spaltenden Flüssigkeitslamelle

Im Gegensatz zum rotationssymmetrischen Tropfen gibt es bei der Flüssigkeitslamelle lediglich einen endlichen Krümmungsradius. Mit $R_2 = \infty$ folgt aus der Young-Laplace Gleichung 2.1:

$$p_a - p_i = \frac{\gamma_l}{R_1} \quad (2.14)$$

Die hieraus resultierende Differentialgleichung für die Konturkurve $X(z)$ besitzt eine allgemeine Lösung. Analog zum vorherigen Kapitel soll hier aber der äquivalente Weg zur Lösungsfindung über die Variationsrechnung beschrieben werden. Die freie Oberfläche der Lamelle wird sich so einstellen, daß ihr Betrag bei vorgegebenem, konstantem Volumen minimal ist. Da die Lage der freien Oberfläche unabhängig von der Koordinate y ist, muß also

die Weglänge

$$S = \int_0^h \sqrt{1 + X'(z)^2} dz \quad (2.15)$$

minimiert werden, unter der Nebenbedingung, daß die Fläche

$$F = \int_0^h X(z) dz \quad (2.16)$$

einen konstanten, vorgegebenen Wert annimmt. Gesucht sind also die Extremalen folgenden Integrals:

$$\int_0^h \sqrt{1 + X'(z)^2} + \lambda \cdot X(z) dz =: \int_0^h F(X, X') dz \quad (2.17)$$

Aus der Eulerschen Gleichung 2.10 folgt:

$$(c - \lambda \cdot X(z)) \cdot \sqrt{1 + X'(z)^2} = 1 \quad (2.18)$$

Diese gewöhnliche DGL 1. Ordnung hat nun die allgemeine Lösung:

$$X(z) = \frac{c\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - \lambda^4(z-d)^2}}{\lambda^2} \quad (2.19)$$

Durch leichte Umformungen ergibt sich:

$$\left(X(z) - \frac{c}{\lambda}\right)^2 + (z-d)^2 = \frac{1}{\lambda^2} \quad (2.20)$$

Die Konturkurve $X(z)$ wird also durch Kreise mit Radius $1/\lambda$ beschrieben. Spezielle Lösungen ergeben sich hieraus durch die Wahl geeigneter Randbedingungen.

Genau wie im Fall der Punktspaltung können jedoch lediglich drei Randbedingungen zur Ermittlung der drei Konstanten c , d , λ herangezogen werden. Würden beispielsweise die Werte für X_0 , ϑ_0 aus Abbildung 2.2 und das konstante Tropfenvolumen V als Randbedingungen vorgegeben, so ließen sich c , d und λ aus folgendem Gleichungssystem ermitteln,

$$\begin{aligned} X(0) &= X_0 \\ X'(0) &= -\tan(\vartheta_0) \\ \int_0^h X(z) dz &= V \end{aligned}$$

welches numerisch, beispielsweise mit dem Newtonverfahren, zu lösen wäre. Ermittelt man von einer solchen speziellen Lösung die z-Komponente des Minimums z_{min} , so ist der Quotient

$$\frac{\int_0^{z_{min}} X(z) dz}{\int_0^h X(z) dz} \quad (2.21)$$

ein geeignetes Maß für das Spaltungsverhältnis der Lamelle.

Bemerkung 2.1

Es ist durchaus möglich, bereits an dieser Stelle Untersuchungen darüber zu führen, wie sich das Spaltungsverhältnis ändert, wenn man von ideal glatten Platten zu strukturierten Platten übergeht. Eine Strukturierung der Platten beeinflusst in diesem Modell die Randbedingungen (nicht etwa die DGL 2.18, welche die Konturkurve bestimmt) in folgender Weise:

1. *Die sich einstellenden makroskopischen Randwinkel ϑ_0, ϑ_h gehorchen nun nicht mehr der Young-Dupre Gleichung, sondern hängen mit den Youngschen Winkeln gemäß der Wenzelgleichung zusammen:*

$$\cos(\vartheta_w) = r \cdot \cos(\vartheta_y) \quad (2.22)$$

Hierbei ist $r \leq 1$ die Rauigkeit der Platten, d.h. die makroskopischen Randwinkel verkleinern sich im Vergleich zu ideal glatten Platten (siehe Jung [7]).

2. *Das konstante Flüssigkeitsvolumen der Lamelle ist über die Rauigkeit der Festkörper auch mit den Größen X_0 und X_h verknüpft.*

An dieser Stelle soll nicht im Einzelnen untersucht werden, wie das Zusammenspiel dieser beiden Eigenschaften von rauhen Oberflächen die Integrationskonstanten und damit das Spaltungsverhältnis beeinflussen, da es in diesem Zusammenhang unumgänglich erscheint, hydrodynamische Effekte in ein realitätsnahes Modell aufzunehmen. Für langsamere Prozesse als den Farbspaltungsprozess im Druckwerk könnten dies jedoch interessante Untersuchungen sein.

Zusammenfassung:

In diesem Kapitel wurde gezeigt, daß sich das Problem der quasistatischen Farbspaltung mit Hilfe der Variationsrechnung auf eine gewöhnliche DGL 1. Ordnung reduzieren läßt. Diese ist jedoch nur in einigen Spezialfällen,

wie z.B. den der Farblamelle, analytisch lösbar und erlaubt somit prinzipiell eine Berechnung des Konturkurvenverlaufs. Selbst für diese Spezialfälle bleibt aber das Problem, geeignete Randbedingungen zu wählen. Im Paragraph 10.1 dieser Arbeit wird die quasistatische Farbspaltung daher mit Hilfe einer Gitter-Boltzmann Simulation numerisch untersucht.

Bevor dieses Simulationsverfahren in den Kapiteln 6-9 erläutert wird, beschäftigen sich die folgenden Kapitel jedoch mit der analytischen Betrachtung der hydrodynamischen Farbspaltung.

Kapitel 3

Hydrodynamische Grundgleichungen

Literatur: In diesem Kapitel sollen die wesentlichen Gleichungen vorgestellt werden, welche allgemeine Strömungen und damit auch die Farbspaltung beschreiben. Da zahllose Lehrbücher und Arbeiten existieren, die sich mit diesen allgemeinen Zusammenhängen beschäftigen, das vorliegende Kapitel sich aber an keiner dieser Quellen orientiert, seien in diesem Zusammenhang nur exemplarisch einige Literaturhinweise genannt: Spurk [26], [27], Oertel/Boehle [29], Oertel/Delfs [30], Stauffer [33], Wieghardt [34], Feynman [38], Truckenbrodt [35], [36], [37], Drazin/Reid [31].

Das grundlegende Gleichungssystem zur Beschreibung von Strömungsvorgängen besteht aus der **Kontinuitätsgleichung** für den Stofftransport,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \cdot \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

welche die Massenerhaltung beschreibt, und der als **Ersten Cauchyschen Bewegungsgleichung** bekannten Differentialform des Impulssatzes,

$$\frac{d(\rho \vec{v})}{dt} = \rho \vec{k} + \operatorname{div}(\vec{T}) \quad (3.2)$$

welche die Impulserhaltung beschreibt.

Neben diesen beiden Gleichungen existieren zusätzliche Gleichungen für die Energieerhaltung, Drehimpulserhaltung, Entropiebilanz sowie thermodynamische Zustandsgleichungen, die in diesem Zusammenhang aber von untergeordnetem Interesse sind (siehe z.B. Spurk [26]).

Die Kontinuitätsgleichung und die erste Cauchysche Bewegungsgleichung werden im Folgenden kurz erläutert.

Eine kurze Erläuterung der Kontinuitätsgleichung:

Der Divergenzoperator div in Gleichung 3.1 wirkt auf einen Vektor \vec{v} genau so, wie die Vektormultiplikation dieses Vektors mit dem Nablaoperator ∇ . Im dreidimensionalen Vektorraum gilt also in kartesischen Koordinaten folgende Definition:

$$div(\vec{v}) := \nabla \cdot \vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} + \frac{\partial v_3}{\partial z} \quad (3.3)$$

Es sollte weiterhin beachtet werden, daß in der Hydrodynamik ein großer Unterschied zwischen der totalen zeitlichen Ableitung d/dt und der partiellen zeitlichen Ableitung $\partial/\partial t$ besteht (siehe $\partial\rho/\partial t$ in Gleichung 3.1). Durch die Kettenregel der Differentialrechnung ergibt sich der folgende Zusammenhang für eine reellwertige Funktion $F(t, x(t), y(t), z(t))$:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)F \quad (3.4)$$

Mit der Dichte ρ des Fluids und dem Geschwindigkeitsfeld \vec{v} , gibt $\vec{j} = \rho\vec{v}$ die Stromdichte der Flüssigkeitsströmung an. D.h. \vec{j} gibt an, wieviel Masse der Flüssigkeit pro Zeiteinheit durch einen Querschnitt vom Betrag einer Flächeneinheit fließt und zeigt in Richtung der Geschwindigkeit \vec{v} . Das Oberflächenintegral der Stromdichte

$$\frac{\partial M}{\partial t} = - \oint_O \vec{j} dO$$

über einer geschlossenen Oberfläche O ist dann gleich der Differenz zwischen der pro Zeiteinheit in das Integrationsvolumen hineinfließenden und der aus dem Integrationsvolumen herausfließenden Masse.

Die Masse in diesem Volumen ist gegeben durch:

$$M = \int_V \rho dV \quad (3.5)$$

Hierbei ist V das von der Oberfläche O eingeschlossene Volumen. Es ergibt sich also:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \oint_O \vec{j} dO \quad (3.6)$$

Daraus folgt mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes (zum Gaußschen Integralsatz siehe z.B. Jänich [40], Walter [46]):

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V div(\vec{j}) dV \quad (3.7)$$

Da diese Gleichung für beliebige Integrationsvolumina gültig sein muß, folgt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (3.8)$$

Dies ist genau die Kontinuitätsgleichung 3.1.

Eine kurze Erläuterung zur Ersten Cauchyschen Bewegungsgleichung:

In der Ersten Cauchyschen Bewegungsgleichung 3.2 bezeichnet \overleftrightarrow{T} den Spannungstensor des Fluids, welcher, wie fast alle physikalischen Matrizen, symmetrisch ist und von den Eigenschaften des betrachteten Fluids abhängt. (Auf Tensoren und deren Eigenschaften wird in einem späteren Teil dieser Arbeit, im Paragraph 7.3, noch genauer eingegangen). Der Spannungstensor ist als Verallgemeinerung des Druckes zu interpretieren und als solcher eine Art Flächenkraft:

$(\overleftrightarrow{T})_{i,k}$ ist die Kraft pro Flächeneinheit in i -Richtung auf eine zur k -Richtung senkrechte Einheitsfläche.

$(\overleftrightarrow{T})_{i,k}$ setzt sich aus zwei Arten von Kräften zusammen:

1. Druckkräfte
2. Scherkräfte, die aus innerer Reibung resultieren.

In ruhenden Flüssigkeiten ist der Druck p überall gleich, und es existieren keine Scherspannungen: $(\overleftrightarrow{T})_{i,k} = -p\delta_{i,k}$.

Hierbei bezeichnet $\delta_{i,k}$ das Kronecker Symbol, und $-p\delta_{i,k}$ wird auch als Drucktensor bezeichnet.

Unter der Divergenz eines Tensors versteht man den Vektor, dessen Komponenten die Divergenzen der Zeilen (oder Spalten) des Tensors sind. In kartesischen Koordinaten gilt also:

$$\left(\operatorname{div}(\overleftrightarrow{T})\right)_i = \sum_k \frac{\partial T_{k,i}}{\partial x_k} \quad (3.9)$$

Der Term $\rho\vec{k}$ in Gleichung 3.2 bezeichnet die im Fluid herrschenden Volumenkräfte. In einer ruhenden Flüssigkeit wäre also \vec{k} gleich der Erdbeschleunigung \vec{g} .

Falls in einem bestimmten Flüssigkeitsvolumen sowohl eine Volumenkraft $\rho\vec{k}$ als auch eine auf seine Oberfläche angreifende Flächenkraft \overleftrightarrow{T} vorhanden ist, so ergibt sich die Gesamtkraft \vec{F} aus:

$$\vec{F} = \oint_O \overleftrightarrow{T} dO + \int_V \rho\vec{k} dV = \int_V \left(\operatorname{div}(\overleftrightarrow{T}) + \rho\vec{k}\right) dV \quad (3.10)$$

Mit Hilfe des Newtonschen Bewegungsgesetzes,

$$\vec{F} = \int \frac{d(\rho\vec{v})}{dt} dV \quad (3.11)$$

folgt hieraus die Erste Cauchysche Bewegungsgleichung 3.2.

Die Euler-Gleichung nicht-viskoser Fluide; der nicht-viskose Spannungstensor:

Geht man von einer reibungsfreien Strömung aus, so ist der Spannungstensor mit dem Drucktensor identisch: $(\vec{T})_{i,k} = -p\delta_{i,k}$.

Vernachlässigt man zusätzlich die Volumenkräfte, so ist die Erste Cauchysche Bewegungsgleichung 3.2 äquivalent zu:

$$\frac{d(\rho\vec{v})}{dt} = -\nabla p \stackrel{3.4}{\iff} \frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho\vec{v}) = -\nabla p \quad (3.12)$$

Geht man des weiteren von einer inkompressiblen Strömung aus, so ist obige Gleichung äquivalent zur sogenannten Euler-Gleichung:

$$\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p \quad (3.13)$$

Die Euler-Gleichung stellt die Impulserhaltung in einer nicht-viskosen inkompressiblen Strömung unter Vernachlässigung von äußeren Volumenkräften dar.

Bevor nun der Einfluß der Viskosität, also der inneren Reibung, untersucht wird, lohnt es sich allerdings, diese Impulserhaltung etwas genauer zu beleuchten. Dabei sollen auch einige neue Notationen eingeführt werden, die insbesondere im numerischen Teil dieser Arbeit immer wieder Verwendung finden werden.

Nach der Produktregel der Differentialrechnung gilt für die Impulsänderung in einem fest gewählten Volumen:

$$\partial_t(\rho v_\alpha) = \rho \partial_t v_\alpha + v_\alpha \partial_t \rho \quad (3.14)$$

Hierbei ist ∂_t eine abkürzende Schreibweise von $\partial/\partial t$ und v_α die α -Komponente des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} . Setzt man nun die Euler-Gleichung 3.13 in den ersten Summanden der rechten Seite und die Kontinuitätsgleichung 3.1 in den zweiten Summanden der rechten Seite ein, so erhält man:

$$\partial_t(\rho v_\alpha) = -\rho v_\beta \partial_\beta v_\alpha - \partial_\alpha p - v_\alpha \partial_\beta(\rho v_\beta) \quad (3.15)$$

Hierbei wurde die Einsteinsche Summenkonvention benutzt, welche besagt, daß wiederholte Indizes in einem Produkt die Summation über diese Indizes impliziert:

$$X_\alpha Y_\alpha := \sum_{\alpha=0}^D X_\alpha Y_\alpha \quad (3.16)$$

Hierbei gibt D die räumliche Dimension an. Bewahrt man diese Notation bei, so ergibt sich aus Gleichung 3.15 durch Zusammenfassung der räumlichen Ableitungen mittels der Produktregel:

$$\partial_t(\rho v_\alpha) = -\partial_\alpha p - \partial_\beta(\rho v_\alpha v_\beta) \quad (3.17)$$

Letztlich erhält man eine einfache Gleichung für die Impulserhaltung nicht-viskoser Strömungen durch die Definition des nicht-viskosen Spannungstensors:

$$\partial_t(\rho v_\alpha) = -\partial_\beta T_{\alpha\beta}^{(0)} \quad (3.18)$$

Dabei ist der nicht-viskose Spannungstensor $\overset{\leftrightarrow}{T}^{(0)}$ neu definiert worden durch:

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = p\delta_{\alpha\beta} + \rho v_\alpha v_\beta \quad (3.19)$$

Bemerkung 3.1

Es muß an dieser Stelle angemerkt werden, daß die Neudefinition des Spannungstensors nach Gleichung 3.19 auch seine physikalische Interpretation verändert.

Der erste Term $p\delta_{\alpha\beta}$ ist nach wie vor die Kraft pro Flächeneinheit in α -Richtung auf eine zur β -Richtung senkrechten Einheitsfläche.

Der zweite Term $\rho v_\alpha v_\beta$ stellt aber den sogenannten Impulsstromtensor dar und gibt den Fluß der α -Komponente des Impulses durch eine zur β -Richtung senkrechten Einheitsfläche an.

Im Folgenden werden daher beide Bezeichnungen, Spannungstensor und Impulsstromtensor, für solche Tensoren benutzt.

Der viskose Spannungstensor und die Navier-Stokes Gleichung:

Um innere Reibung von Fluiden in die Betrachtung mit einzubeziehen, muß der Spannungstensor (bzw. Impulsstromtensor) $T_{\alpha\beta}^{(0)}$ in 3.18 um einen viskosen Anteil erweitert werden. Für den Spezialfall newtonscher Flüssigkeiten besteht ein linearer Zusammenhang zwischen dem durch innere Reibung verursachten Spannungstensor $T_{\alpha\beta}^{visk}$ und dem sogenannten Verformungstensor $E_{\alpha\beta}$ (siehe z.B. Spurk [26]):

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = -\mu_{\alpha\beta\gamma\delta} \cdot E_{\gamma\delta} \quad (3.20)$$

Diese Gleichung kann man als Verallgemeinerung des Hookeschen Gesetzes: *Rückstellkraft* = $C \cdot$ *Auslenkung* interpretieren. Hier ist $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ allerdings keine Konstante sondern ein Tensor 4. Stufe, der demnach in 3 räumlichen Dimensionen aus $3^4 = 81$ Elementen besteht.

Da Gleichung 3.20 isotrop (invariant unter Rotationen und Translationen des Bezugssystems) sein muß, wenn es sich um isotrope Fluide handelt, kann $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ also lediglich ein isotroper Tensor sein. Die allgemeinste Form eines solchen isotropen Tensors 4. Stufe ist (siehe hierzu Satz 7.1):

$$\mu_{\alpha\beta\gamma\delta} = A\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + B\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + C\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad (3.21)$$

Hierbei sind A, B, C beliebige Konstanten. Um $T_{\alpha\beta}^{visk}$ explizit anzugeben, muß nun noch der Verformungstensor $E_{\gamma\delta}$ definiert werden. Da $E_{\gamma\delta}$ ein Maß für die Verformung eines Fluidelementes ist, muß ein Zusammenhang mit den Geschwindigkeitsgradienten $\partial_\gamma v_\delta$ bestehen. Tatsächlich ist bekannt, daß der Verformungstensor folgende, symmetrische Form hat (siehe z.B. Stauffer [33]):

$$E_{\gamma\delta} = \partial_\gamma v_\delta + \partial_\delta v_\gamma \quad (3.22)$$

Setzt man Gleichung 3.21 in Gleichung 3.20 ein, so erhält man durch Betrachtung der Kronecker Symbole und der Einsteinschen Summenkonvention:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = -A\delta_{\alpha\beta}E_{\delta\delta} - (B + C)E_{\alpha\beta} \quad (3.23)$$

Mit $B + C =: \eta$ und $2A =: \xi$ folgt hieraus, mittels Gleichung 3.22:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = -\eta(\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha) - \xi\partial_\gamma v_\gamma\delta_{\alpha\beta} \quad (3.24)$$

Hieraus ergibt sich nun der Spannungstensor (bzw. Impulsstromtensor) für viskose Fluide:

$$T_{\alpha\beta} := T_{\alpha\beta}^{visk} + T_{\alpha\beta}^{(0)} \quad (3.25)$$

Setzt man dieses Ergebnis in die Impulserhaltungsgleichung

$$\partial_t(\rho v_\alpha) = -\partial_\beta T_{\alpha\beta} \quad (3.26)$$

ein, so erhält man:

$$\partial_t(\rho v_\alpha) + \partial_\beta(\rho v_\alpha v_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta[\eta(\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha)] + \partial_\alpha(\xi\partial_\gamma v_\gamma) \quad (3.27)$$

Ist die Strömung zusätzlich inkompressibel, so folgt aus der Kontinuitätsgleichung 3.1, daß alle Terme, die den Faktor $\partial_\alpha v_\alpha$ beinhalten, verschwinden. In Vektorform ergibt sich dann nach kurzer Rechnung die **Navier-Stokes Gleichung** für newtonsche, inkompressible Strömungen:

$$\rho \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \eta\Delta\vec{v} \quad (3.28)$$

Falls zusätzlich Volumenkräfte anwesend sind, ergibt sich hieraus:

$$\rho \cdot \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = \rho \vec{k} - \nabla p + \eta \Delta \vec{v} \quad (3.29)$$

Hierbei ist der Laplaceoperator Δ gerade das Quadrat des Nablaoperators:

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3.30)$$

Mit der Navier-Stokes Gleichung 3.29 und der Kontinuitätsgleichung 3.1 sind nun die elementaren Gleichungen zur Lösung von inkompressiblen Strömungsproblemen newtonscher Flüssigkeiten vorgestellt worden. Sie stellen zusammen ein Gleichungssystem von vier gekoppelten, stark nichtlinearen, partiellen Differentialgleichungen dar.

Es sollte dabei beachtet werden, daß sich die Kontinuitätsgleichung im Fall einer inkompressiblen Strömung in folgender vereinfachter Form schreiben läßt:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.31)$$

Neben diesen Gleichungen stellen auch die Randbedingungen, welche selbst Differentialgleichungen sein können, Bedingungen an die zu ermittelnde Lösung eines Strömungsproblems.

Bei der quasistatischen Punktspaltung in Kapitel 2 hat man gesehen, daß selbst das Lösen einer gewöhnlichen Differentialgleichung große mathematische Schwierigkeiten bereiten kann, so daß man in diesem Fall um so mehr damit rechnen muß, an Grenzen der analytischen Berechnung zu gelangen. Die oben eingeführten Tensoren wurden an dieser Stelle relativ ausführlich behandelt, da sie im numerischen Teil dieser Arbeit noch eine entscheidende Rolle spielen werden.

Kapitel 4

Die Farbspaltung 2. Klasse

Abweichend von der quasistatischen Farbspaltung im 2. Kapitel, sollen hier bewegungsinduzierte Kräfte berücksichtigt werden. Die Notwendigkeit dieser Vorgehensweise für die realitätsnahe Modellierung der Farbspaltung läßt sich sowohl bei der Farbspaltung 2. Klasse als auch bei der Farbspaltung 1. Klasse beobachten.

H. Behler untersucht in seiner Dissertation [2] das Trennverhalten verschiedener Normöltropfen zwischen zwei sich voneinander wegbewegenden Glasplatten. Wie man an Abbildung 4.1 gut erkennen kann, zeigt der Tropfen

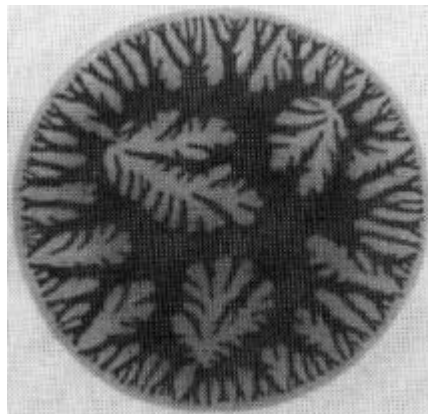


Abbildung 4.1: Viscous fingering eines Tropfens zwischen zwei auseinander strebenden Glasplatten.

nicht etwa eine rotationssymmetrische Form, ähnlich der eines einschaligen Hyperboloiden, wie man es aus hydrostatischer Sicht erwarten würde, sondern er besitzt vielmehr eine starke Auffingerung des freien Randes.

Es ist in einer Modellierung also nicht davon auszugehen, daß die freie Oberfläche, in Zylinderkoordinaten betrachtet, unabhängig vom Raumwinkel ist.

Mit anderen Worten: Die gesuchte Funktion R in der Parametrisierung 2.4 ist nicht nur z - sondern auch φ -abhängig. In diesem Kapitel wird daher die zur Trennrichtung senkrechte Ebene betrachtet, während im Kapitel 2 eine zur Trennrichtung parallele Ebene von Interesse war.

Diese, an mathematische Fraktale erinnernde, Struktur des freien Tropfenrandes ist auf Grund ihrer großen Oberfläche hydrostatisch nicht zu erklären. Die Begründung für eine solche, als *viscous fingering* bezeichnete, Geometrie des freien Randes liegt in der starken Empfindlichkeit der Navier-Stokes Gleichung gegenüber leicht veränderten Randbedingungen. Die Form des Tropfens im Parallelschnitt zu den beiden Glasplatten wird bereits zu Beginn des Trennvorgangs kleine Abweichungen von der Kreisform zeigen. Diese kleinen "Anfangsfehler" können sich im Laufe des dynamischen Prozesses bei geeigneter Wellenzahl so sehr verstärken, daß Formen des *viscous fingering* entstehen. In diesem Sinne ist die hydrodynamische Flüssigkeitsspaltung durchaus als chaotisch anzusehen. (Zum Thema Chaos und Fraktale siehe z.B. Peitgen [68], Mandelbrot [69].)

Strukturen, wie in Abbildung 4.1, sind in der Druckindustrie des öfteren bei Vergrößerungen einzelner Druckpunkte zu beobachten. Da diese Unebenheiten der Farbschichtdicken einen Informationsverlust darstellen und die Brillanz des Druckbildes vermindern, sind sie in der Druckindustrie unerwünscht.

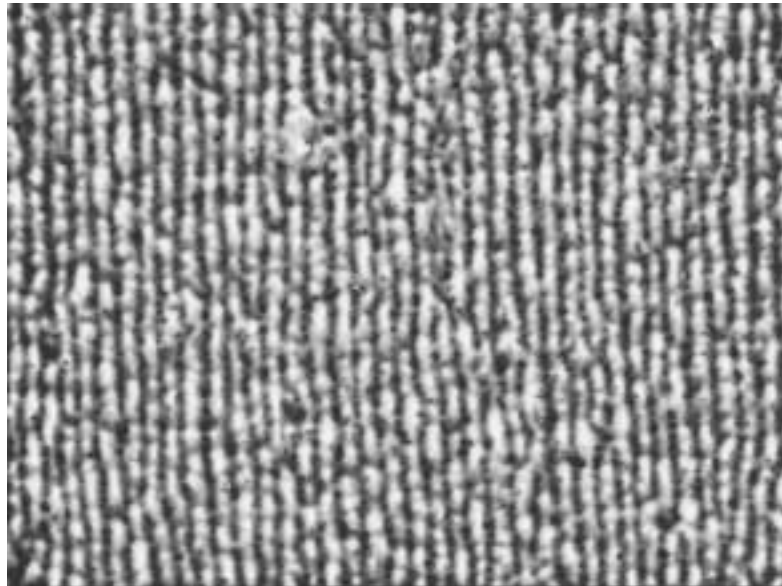


Abbildung 4.2: Mikrostreifen beim Druck einer Volltonfläche.

Auch bei der Farbspaltung 1. Klasse, also der Schichtspaltung, lassen sich solche Phänomene beobachten. Abbildung 4.2 zeigt den Druck einer Volltonfläche auf PE-Folie. Die dort gut sichtbaren Strukturen in Druckrichtung, welche als Mikrostreifen bezeichnet werden, lassen sich nur durch ein instabiles Verhalten der freien Farboberfläche im Spalteingang oder Spaltausgang und somit nicht hydrostatisch erklären.

Die nächsten Abschnitte werden sich mit solchen Instabilitäten bei der Farbspaltung beschäftigen.

Literatur: Der Inhalt des Paragraphen 4.1 orientiert sich an der Dissertation von H. Behler [2]. Der Modellierungsansatz zur Berechnung der dominanten Wellenzahl der Instabilitäten, sowie die Abbildung 4.1 und 4.3 sind dieser Arbeit entnommen. Die mathematische Umsetzung sowie einige Ergebnisse unterscheiden sich jedoch stark von dieser Quelle.

Der Inhalt der Paragraphen 4.2 und 4.3 orientiert sich an keiner Literaturquelle. Ähnliche Phänomene werden jedoch auch in anderen Arbeiten bei der Behandlung von Instabilitäten der Strömung in einer Hele-Shaw Zelle untersucht. Exemplarisch seien die Arbeiten von Paterson [10], Chuoke [21], Saffman [12], Bensimon [13], Gorodtsov [14], Park [11] und Miranda [15] genannt.

4.1 Stabile und instabile Punktspaltung

Formen des viscous fingering sind schon Gegenstand vieler Untersuchungen gewesen. Diese standen anfangs meist im Zusammenhang mit der Ölförderung (siehe z.B. Chuoke [21]), da man dort beobachtete, daß die Verdrängung von Öl, mittels der niedriger viskosen Flüssigkeit Wasser, ähnliche Strukturen, wie die in Abbildung 4.1 gezeigten, hervorriefen.

Das dabei am häufigsten genutzte experimentelle Hilfsmittel ist die sogenannte Hele-Shaw Zelle. Diese besteht aus zwei parallelen Glasplatten, die ein kleiner Abstand h voneinander trennt. In der Mitte einer der Glasplatten befindet sich eine Vorrichtung um Flüssigkeiten in den Zwischenraum zu injizieren. Ist dieser Zwischenraum mit einer Flüssigkeit gefüllt, so erzeugt eine zweite Flüssigkeit, welche injiziert wird, bei der Verdrängung der Ersten eben diese Formen des viscous fingering.

Die Grundgleichungen, welche den Prozess beschreiben, sind selbstverständlich auch hier die Kontinuitätsgleichung und die Navier-Stokes Gleichung. Da im vorliegenden Problem jedoch die typische radiale Strecke R (mittlerer Abstand der Grenzfläche der beiden Flüssigkeiten zur Injektionsvorrichtung) groß ist gegen die typische axiale Strecke h , läßt sich die Navier-Stokes Gleichung

chung in guter Näherung durch das wesentlich leichtere Darcysche Gesetz ersetzen (siehe hierzu Spurk [26], Paterson [10]). Das Darcysche Gesetz wird in der Literatur mitunter auch als Poiseuille-Darcy Gleichung bezeichnet und lautet:

$$\vec{v}_i = -\frac{h^2}{12\eta_i} \nabla p_i \quad (4.1)$$

Hierbei gibt der Index $i \in \{1, 2\}$ an, um welches der beiden Fluide es sich handelt, \vec{v}_i bezeichnet den über die Spalthöhe gemittelten zweidimensionalen Geschwindigkeitsvektor, p_i bezeichnet den Druck und η_i die dynamische Viskosität.

Die Voraussetzung für diese Vereinfachung, d.h. die Ersetzung der Navier-Stokes Gleichung durch das Darcysche Gesetz, ist auch bei der Spaltung eines Druckpunktes erfüllt, da auch hier die typische radiale Ausdehnung R groß ist gegen die typische axiale Ausdehnung h . Von Interesse sind hier nur die Strömungsgrößen der Flüssigkeit (Index 1) und nicht der umgebenden Luft (Index 2), so daß hier nicht mit \vec{v}_i sondern lediglich mit $\vec{v}_1 = \vec{v}$ bzw. dessen r -Komponente u und dessen φ -Komponente w sowie mit dem Flüssigkeitsdruck p gearbeitet wird.

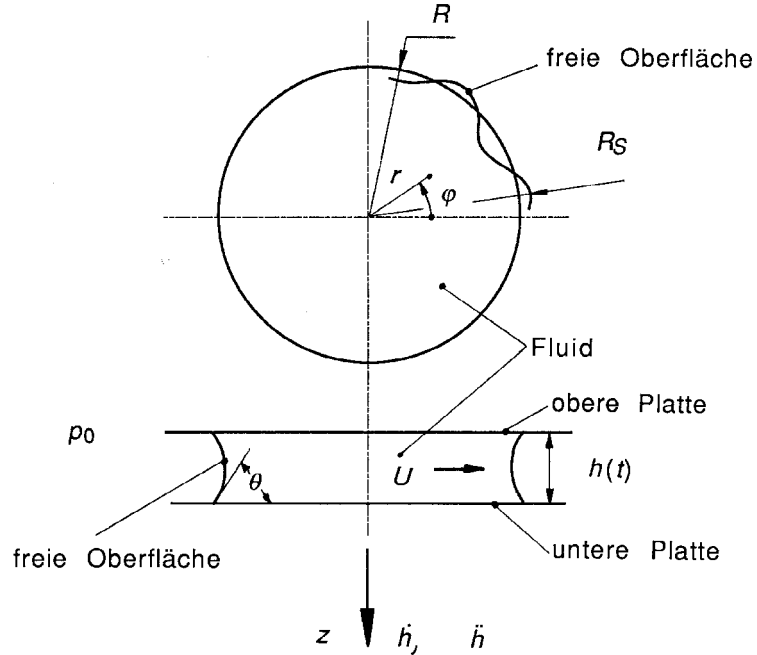


Abbildung 4.3: Modell zur Untersuchung von Instabilitäten bei der Spaltung eines Tropfens.

Zur Modellierung der Spaltung eines Druckpunktes betrachtet man einen Flüssigkeitstropfen zwischen zwei parallelen Platten, welche einen Abstand h voneinander haben und sich mit der Geschwindigkeit \dot{h} voneinander weg bewegen (siehe Abbildung 4.3). Es sei angenommen, daß die Flüssigkeit inkompressibel ist, der Strömungsvorgang isotherm verläuft und der Einfluß von Volumenkräften vernachlässigbar ist. Das Problem wird in Zylinderkoordinaten betrachtet, R_s ist der Radius der Tropfenkontur, R der mittlere Radius.

Die Gleichung für die Massenerhaltung wird in diesem Modell wie folgt hergeleitet: Betrachtet man einen dünnen Zylinder der Höhe h im Tropfen, so ergibt sich die zeitliche Änderung seiner Masse M durch:

$$\frac{dM}{dt} = - \oint_O \rho \vec{v} dO = - \int_V \operatorname{div}(\rho \vec{v}) dV \quad (4.2)$$

Hierbei bezeichnet O die Oberfläche des Zylinders. Teilt man diese Gleichung durch die infinitesimale Grundfläche des Zylinders, so ergibt sich für die zeitliche Änderung der Masse m pro Flächeneinheit:

$$\frac{dm}{dt} = - \int_0^h \operatorname{div}(\rho \vec{v}) dz = -\rho \cdot h \cdot \operatorname{div}(\vec{v}) \quad (4.3)$$

Man beachte, daß die Farbe in guter Näherung als inkompressibel angesehen werden kann, und \vec{v} über die Höhe h gemittelt ist. Damit ist ρ ortsunabhängig und \vec{v} unabhängig von der z -Koordinate, so daß das Integral nicht auf $\operatorname{div}(\rho \vec{v})$ wirkt.

Andererseits gilt für die zeitliche Änderung von m :

$$\frac{dm}{dt} = \rho \frac{dh}{dt} \quad (4.4)$$

Aus den Gleichungen 4.3 und 4.4 folgt:

$$\begin{aligned} \frac{dh}{dt} = -h \cdot \operatorname{div}(\vec{v}) &\stackrel{3.4}{\iff} \frac{\partial h}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)h = -h \cdot \operatorname{div}(\vec{v}) \\ &\iff \frac{\partial h}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla h - h \nabla \cdot \vec{v} \\ &\iff \frac{\partial h}{\partial t} = -\operatorname{div}(h \cdot \vec{v}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Aus den Gleichungen 4.1 und 4.5 kann nun \vec{v} eliminiert werden:

$$4.1 \implies -\operatorname{div}(h \vec{v}) = \nabla \cdot \left(\frac{h^3}{12\eta} \nabla p \right) \quad (4.6)$$

Da h hier ortsunabhängig ist, folgt daraus mit 4.5:

$$\Delta p = \frac{12\eta\dot{h}}{h^3} \quad (4.7)$$

Diese Gleichung, welche die Impuls- und Massenerhaltung beinhaltet, ist die Ausgangsgleichung für die nun folgende lineare Stabilitätsanalyse, welche sowohl die ungestörte als auch die gestörte Strömung berücksichtigt. (Behler [2] betrachtet die ungestörte und gestörte Strömung getrennt voneinander.)

Geht man davon aus, daß der Radius R des Tropfens anfangs von kosinusförmigen Störungen beliebiger Wellenzahlen n überlagert ist, so ergibt sich der Ansatz:

$$R_s = R(1 + \varepsilon \cdot e^{\beta t + i n \varphi}) \quad (4.8)$$

Hierbei kennzeichnet i die imaginäre Einheit der komplexen Zahlen, ε die Amplitude der Störung, und $\beta = \beta(n)$ ist ein Maß für die zeitliche Entwicklung der Störung. Der Spaltungsprozess ist also stabil, falls für den noch zu ermittelnden funktionalen Zusammenhang $\beta = \beta(n)$ folgendes gilt:

$$\beta(n) \leq 0 \quad \forall n \in \mathbf{N} \quad (4.9)$$

Geht man nun davon aus, daß eine Anfangsstörung der freien Oberfläche gemäß 4.8 auch in das Druckfeld hineingetragen wird, so ist es angebracht, den Gesamtdruck p als Summe des ungestörten Druckes p_0 und des Stördruckes p_1 auszudrücken:

$$p(r, \varphi, t) := p_0(r, t) + p_1(r, \varphi, t) = p_0(r, t) + \varepsilon g(r, t) e^{\beta t + i n \varphi} \quad (4.10)$$

Man beachte, daß die skalare Stördruckfunktion $g(r, t)$ die Einheit Pa des Druckes trägt. Setzt man Gleichung 4.10 in Gleichung 4.7 ein, so erhält man bei Kenntnis des Laplaceoperators Δ in Zylinderkoordinaten ($\Delta = \partial^2/\partial r^2 + \partial/r\partial r + \partial^2/r^2\partial\varphi^2 + \partial^2/\partial z^2$ siehe Spurk [26]) folgende partielle Differentialgleichung:

$$\left(\frac{\partial^2 p_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p_0}{\partial r}\right) + \left(\frac{\partial^2 p_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p_1}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 p_1}{\partial \varphi^2}\right) = \frac{12\eta\dot{h}}{h^3} \quad (4.11)$$

Hieraus ergeben sich nach Einsetzen von p_1 und Herauskürzen des Störterms die beiden folgenden gewöhnlichen Differentialgleichungen:

$$\frac{\partial^2 p_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p_0}{\partial r} = \frac{12\eta\dot{h}}{h^3} \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial g}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} g = 0 \quad (4.13)$$

Die allgemeinen Lösungen dieser gewöhnlichen Differentialgleichungen lauten:

$$p_0(r, t) = \frac{3\eta\dot{h}r^2}{h^3} + e + f \cdot \ln(r) \quad (4.14)$$

$$g(r, t) = cr^n + dr^{-n}$$

Des Weiteren sollten folgende physikalisch notwendigen Bedingungen erfüllt sein:

$$\|p_0(0, t)\| \neq \infty \implies f = 0 \quad (4.15)$$

$$\|p_1(0, \varphi, t)\| \neq \infty \implies \|g(0, t)\| \neq \infty \implies d = 0 \quad (4.16)$$

Die Integrationskonstante e erhält man aus der Young-Laplace Gleichung 2.1:

$$p_0(R) = p_a + \gamma_l \cdot \kappa(R) = p_a + \gamma_l \left(\frac{1}{R} - \frac{2}{h} \cos(\theta) \right) \quad (4.17)$$

$$\stackrel{4.14}{\implies} e = p_a + \gamma_l \left(\frac{1}{R} - \frac{2}{h} \cos(\theta) \right) - \frac{3\eta\dot{h}R^2}{h^3} \quad (4.18)$$

Der Summand $-2/h \cdot \cos(\theta)$ entsteht dadurch, daß die Krümmung in axialer Richtung als kreisförmig angesehen wird (θ ist dabei, wie aus Abbildung 4.3 ersichtlich, der Randwinkel), und somit für die Kreiskrümmung gilt:

$$\frac{1}{R_z} = -\frac{2}{h} \cos(\theta) \quad (4.19)$$

Dies ist für die folgende Rechnung allerdings unerheblich; man hätte für diesen Term auch ganz allgemein $\kappa_2(R)$ setzen können. Insgesamt ergibt sich also für den Innendruck $p = p_0 + p_1$:

$$p_0(r, t) = \frac{3\eta\dot{h}r^2}{h^3} + e \quad (4.20)$$

$$g(r, t) = cr^n \implies p_1(r, \varphi, t) = cr^n \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} \quad (4.21)$$

Hieraus folgt mit Hilfe des Darcyschen Gesetzes 4.1 für die r -Komponente u der Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned} u(r, \varphi, t) &= u_0(r, t) + u_1(r, \varphi, t) = -\frac{h^2}{12\eta} \left(\frac{\partial p_0}{\partial r} + \frac{\partial p_1}{\partial r} \right) \\ &= -\frac{h^2}{12\eta} \left(\frac{6\eta\dot{h}r}{h^3} + cnr^{n-1} \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} \right) \\ &= -\frac{\dot{h}r}{2h} - \frac{h^2}{12\eta} cnr^{n-1} \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Die φ -Komponente der Geschwindigkeit \vec{v} ergibt sich lediglich aus dem Stördruck p_1 :

$$\begin{aligned} w(r, \varphi, t) &= w_0(r, t) + w_1(r, \varphi, t) = w_1(r, \varphi, t) = -\frac{h^2}{12\eta r} \frac{\partial p_1}{\partial \varphi} \\ &= -\frac{h^2}{12\eta} cr^{n-1} in \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Um einen funktionalen Zusammenhang der Form $\beta(n)$ zu erlangen, werden noch zwei weitere Randbedingungen zur Bestimmung von c und β herangezogen:

Die kinematische Randbedingung:

Nach dem Lagrangeschen Theorem gilt: “Die Oberfläche der Flüssigkeit besteht immer aus denselben Teilchen.“

In die Sprache der Mathematik übersetzt bedeutet dies, daß für eine implizite Form der Oberfläche, welche $F(r, \varphi, z, t) = 0$ lautet, gelten muß:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)F = 0 \quad (4.24)$$

Im vorliegenden Fall folgt mit $F(r, \varphi, z, t) = r - R_s(\varphi, t)$ und unter Ausnutzung der Gleichungen 4.23 und 4.8 sowie der Darstellung des Nablaoperators in Zylinderkoordinaten ($\nabla = (\partial/\partial r, \partial/r\partial\varphi, \partial/\partial z)$ siehe Spurk [26]):

$$\begin{aligned} 0 &= -\dot{R}_s + u(R_s) - \frac{w}{r} \frac{\partial R_s}{\partial \varphi} \\ &= -\dot{R}_s + u(R_s) + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Hier und im Folgenden werden alle Terme der Ordnung größer gleich zwei in ε vernachlässigt (daher heißt es “lineare“ Stabilitätsanalyse). Es ergibt sich also:

$$u(R_s) = \dot{R}_s \quad (4.25)$$

Entwickelt man $u_0(R_s)$ und $u_1(R_s)$ in eine Taylorreihe um R , so folgt:

$$u_0(R_s) = u_0(R) + \frac{\partial u_0}{\partial r}(R) R \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} + O(\varepsilon^2) \quad (4.26)$$

$$u_1(R_s) = u_1(R) + O(\varepsilon^2) \quad (4.27)$$

Vernachlässigt man die Terme $O(\varepsilon^2)$, so ergibt sich:

$$u_0(R_s) = u_0(R) - \frac{\dot{h}}{2h} R \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} \quad (4.28)$$

$$u_1(R_s) = -\frac{h^2}{12\eta} cnR^{n-1} \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} \quad (4.29)$$

Mit der kinematischen Randbedingung 4.25 und Gleichung 4.8 folgt:

$$\begin{aligned} u(R_s) &= u_0(R) - \left(\frac{\dot{h}}{2h} R + \frac{h^2}{12\eta} cnR^{n-1} \right) \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} \\ &= \dot{R} + (\dot{R} + \beta R) \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} = \dot{R}_s \end{aligned} \quad (4.30)$$

Mit $u_0(R) = \dot{R}$ und Herauskürzung des Störterms folgt:

$$-\left(\frac{\dot{h}}{2h} R + \frac{h^2}{12\eta} cnR^{n-1} \right) = \dot{R} + \beta R \quad (4.31)$$

Löst man diese Gleichung nach β auf, erhält man:

$$\beta = -\frac{h^2 cnR^{n-2}}{12\eta} \quad (4.32)$$

Die Dynamische Randbedingung:

Der Drucksprung an der freien Oberfläche ergibt sich auch hier, wie bei der quasistatischen Punktspaltung, aus der Young-Laplace Gleichung 2.1. Jedoch kann der Innendruck p_i hier nicht mehr als Konstante angesehen werden. Die Unabhängigkeit des Innendruckes von z bleibt auf Grund der kleinen Bondzahl Bo und der über die Spalthöhe gemittelten Geschwindigkeit \vec{v} zwar erhalten, jedoch besitzt p_i nun eine Abhängigkeit von r und φ gemäß Gleichung 4.10. Die Young-Laplace Gleichung lautet hier also:

$$p(R_s) - p_a = \gamma_l \cdot \kappa(R_s) \quad (4.33)$$

Entwickelt man nun $p(R_s)$ in eine Taylorreihe um R , so ergibt sich:

$$p(R_s) = p_0(R_s) + p_1(R_s) = p_0(R) + p_1(R) + \frac{\partial p_0}{\partial r}(R) R \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} + O(\varepsilon^2) \quad (4.34)$$

Die Krümmung der freien Oberfläche $\kappa(R_s)$ ergibt sich aus der Summe der invertierten Krümmungsradien. Betrachtet man zuerst die (r, φ) -Ebene, so erhält man aus bekannten differentialgeometrischen Gleichungen (siehe z.B. Bronstein [41]):

$$\kappa_1(R_s) = \frac{1}{R} \left(1 + (n^2 - 1) \varepsilon e^{\beta t + in\varphi} \right) + O(\varepsilon^2) \quad (4.35)$$

Betrachtet man die (r, z) -Ebene, so sei die Krümmung in dieser Richtung mit $\kappa_2(R_s)$ bezeichnet. Man könnte auch hier eine kreisförmige Krümmung

$\kappa_2(R_s) = -2/h \cdot \cos(\theta)$ annehmen, was allerdings für die nachfolgende Rechnung unerheblich ist.

Mit Hilfe der Gleichung 4.33 folgt also unter Vernachlässigung der Terme $O(\varepsilon^2)$:

$$\frac{\gamma_l}{R} \left(1 + (n^2 - 1) \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} \right) + \gamma_l \cdot \kappa_2(R_s) = p_0(R) + p_1(R) + \frac{\partial p_0}{\partial r}(R) R \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} - p_a$$

Mit $p_0(R) = \gamma_l \cdot [1/R + \kappa_2(R)] + p_a$ sowie der Tatsache, daß es für die Krümmung in axialer Richtung keine Rolle spielt, ob die Strömung in der r, φ -Ebene gestört ist oder nicht ($\kappa_2(R_s) = \kappa_2(R)$), folgt aus obiger Gleichung nach Herauskürzen des Störterms:

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_l}{R} (n^2 - 1) &= g(R) + R \frac{\partial p_0}{\partial r}(R) \\ \iff \frac{\gamma_l}{R} (n^2 - 1) &= c R^n + R \frac{6\eta \dot{h} R}{h^3} \\ \iff c &= \frac{1}{R^n} \left(\frac{\gamma_l}{R} (n^2 - 1) - \frac{6\eta \dot{h} R^2}{h^3} \right) \\ \iff -c &= R^{2-n} \left(\frac{\gamma_l}{R^3} (1 - n^2) + \frac{6\eta \dot{h}}{h^3} \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

Setzt man dies in Gleichung 4.32 ein, so ergibt sich die gesuchte Abhängigkeit $\beta(n)$:

$$\beta = \frac{n(1 - n^2) \gamma_l h^2}{12\eta R^3} + \frac{\dot{h} n}{2h} \quad (4.37)$$

Bemerkung 4.1

Es sollte beachtet werden, daß der, Gleichung 4.37 entsprechende, funktionale Zusammenhang bei Behler [2] (dort Gleichung 4.18) von dem hier Errechneten abweicht. Der Grund hierfür ist in Gleichung 4.9 dieser Arbeit [2] zu suchen. Dort wird bei der partiellen zeitlichen Ableitung der Radialkoordinate R_s der freien Oberfläche ein Summand vernachlässigt.

Mit den dimensionslosen Kennzahlen,

$$\beta^* = \beta \frac{2h}{\dot{h}} \quad (4.38)$$

$$Ca^* = Ca \frac{R^3}{h^3} = \frac{\eta \dot{h} R^3}{\gamma_l h^3} \quad (4.39)$$

ergibt sich aus Gleichung 4.37:

$$\beta^* = n - \frac{n(n^2 - 1)}{6Ca^*} \quad (4.40)$$

Der Spaltungsvorgang verläuft stabil, falls $\beta(n) \leq 0 \iff \beta^*(n) \leq 0$ für alle auftretenden Wellenzahlen n gilt. Dies ist äquivalent zu:

$$6Ca^* + 1 \leq n^2 \quad (4.41)$$

Im Hinblick auf einen stabilen Farbspaltungsprozess wäre es also optimal, die Kapillarzahl $Ca = \eta\dot{h}/\gamma_l$, welche ein Verhältnis von Reibungsspannungen zu Kapillarspannungen angibt (also gleich dem Verhältnis von Weberzahl zu Reynoldszahl ist), bzw. die modifizierte Kapillarzahl Ca^* verschwindend klein einzustellen, da in diesem Fall ($Ca^*=0$) Gleichung 4.41 für alle natürlichen Zahlen n erfüllt ist.

Da in diesem Modell $h \ll R$ vorausgesetzt wurde, kann die modifizierte Kapillarzahl Ca^* jedoch sehr groß werden, so daß Relation 4.41 nur für ebenfalls große Wellenzahlen n erfüllt ist. (Für hinreichend große Wellenzahlen einer Anfangsstörung ist der Spaltungsvorgang automatisch stabil, da $\beta(n) = -\infty$ für $n \rightarrow \infty$.)

Daher sollte zumindest diejenige Wellenzahl n^* , welche die Anfachungsrate β^* maximiert, in einem vom Beobachter nur schwer wahrnehmbaren Bereich liegen. Diese dominante Wellenzahl n^* läßt sich aus Gleichung 4.40 ermitteln:

$$\frac{d\beta^*}{dn} = 0 \wedge \frac{d^2\beta^*}{dn^2} < 0 \implies n^* = \sqrt{2Ca^* + \frac{1}{3}} \quad (4.42)$$

Für die drucktechnische Praxis kann also abschließend festgestellt werden, daß durch eine extreme Verkleinerung der Viskosität, der Druckgeschwindigkeit oder der Druckpunktradien, bzw. durch eine extreme Vergrößerung der Farboberflächenspannung, auftretende Instabilitäten bei der Punktspaltung theoretisch vermieden werden könnten. Diese ermittelten Anforderungen für die stabile Trennung eines Druckpunktes stehen allerdings in Konkurrenz zu anderen Anforderungen der Druckindustrie. So verlangt z.B. die Forderung $\dot{h} \ll 1$ nichts anderes als ein langsames Drucken, was anderen, wirtschaftlichen Aspekten der Druckindustrie abträglich wäre. Im Einzelfall müssen also Kompromisse zwischen diesen konkurrierenden Anforderungen an den Druckprozess geschlossen werden.

4.2 Stabile und instabile Lamellenspaltung

In Analogie zum 2. Kapitel über die quasistatische Farbspaltung soll nun auch hier eine, zum rotationssymmetrischen Farbtropfen veränderte, Geometrie des abgeschlossenen Farbvolumens betrachtet werden. Die Abbildung 2.2

der Farblamelle aus Kapitel 2 kann auch hier als Ausgangsskizze herangezogen werden; es ist jedoch zu beachten, daß sich die beiden parallelen Platten nun mit einer Geschwindigkeit \dot{h} voneinander wegbewegen.

Genau wie im Fall der dynamischen Punktspaltung des letzten Paragraphen sind auch hier die Ausgangsgleichungen, welche Massen- und Impulserhaltung beschreiben, gegeben durch:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\operatorname{div}(h \cdot \vec{v}) \quad (4.43)$$

$$\vec{v} = -\frac{h^2}{12\eta} \nabla p \quad (4.44)$$

Man muß allerdings beachten, daß man sich hier, im Gegensatz zum rotationssymmetrischen Tropfen, nicht mehr in Zylinderkoordinaten, sondern in kartesischen Koordinaten bewegt. Dies bedeutet, daß der Laplace-Operator Δ in der resultierenden Grundgleichung,

$$\Delta p = \frac{12\eta\dot{h}}{h^3} \quad (4.45)$$

nicht mehr die rotationssymmetrische Darstellung,

$$\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial}{r \partial r} + \frac{\partial^2}{r^2 \partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (4.46)$$

sondern die kartesische Darstellung

$$\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (4.47)$$

besitzt. Hieraus ergeben sich in der nun folgenden linearen Stabilitätsanalyse erhebliche Abweichungen vom rotationssymmetrischen Fall.

Nehmen wir also auch hier an, daß die nun nicht mehr kreisförmige, sondern gerade Dreiphasenkontaktlinie in y -Richtung durch eine kosinusförmige Anfangsstörung kleiner Amplitude ε und beliebiger Wellenzahl n pro Längeneinheit überlagert ist. (Es ist zu beachten, daß n hier mit der Einheit $[n] = 1/m$ behaftet ist.) Die freie Oberfläche gehorcht hier also der Gleichung:

$$X_s(y, t) = X(t)(1 + \varepsilon e^{\beta t + i n y}) \quad (4.48)$$

Diese kleine Anfangsstörung wird in das Druckfeld hineingetragen, so daß der ungestörte Druck p_0 nun durch den Stördruck p_1 überlagert wird:

$$p(x, y, t) = p_0(x, t) + p_1(x, y, t) = p_0(x, t) + g(x, t) \varepsilon e^{\beta t + i n y} \quad (4.49)$$

Setzt man dies in Gleichung 4.45 ein, so erhält man:

$$\frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) (g(x, t) \varepsilon e^{\beta t + i n y}) = \frac{12 \eta \dot{h}}{h^3} \quad (4.50)$$

Hieraus folgt nach Herauskürzen des Störterms $\varepsilon e^{\beta t + i n y}$:

$$\frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2}(x, t) = \frac{12 \eta \dot{h}}{h^3} \quad (4.51)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(x, t) - n^2 g(x, t) = 0 \quad (4.52)$$

Die allgemeinen Lösungen dieser beiden gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung sind gegeben durch:

$$p_0(x, t) = \frac{6 \eta \dot{h} x^2}{h^3} + c x + d \quad (4.53)$$

$$g(x, t) = f e^{-n x} + k e^{n x} \quad (4.54)$$

Zur Bestimmung der Integrationskonstanten c, d, f, k werden die folgenden Randbedingungen herangezogen:

$$u_0(0, t) = 0 \implies c = 0 \quad (4.55)$$

$$p_1(0, y, t) = 0 \implies f = -k \quad (4.56)$$

$$p_0(X, y, t) = \gamma_l \kappa(X) + p_a \implies d = -\frac{6 \eta \dot{h} X^2}{h^3} + \gamma_l \kappa(X) + p_a \quad (4.57)$$

Hierbei bezeichnet u die x -Komponente des Geschwindigkeitsvektors. Es ergibt sich also für den Druck $p = p_0 + p_1$:

$$p_0(x, t) = \frac{6 \eta \dot{h} (x^2 - X^2)}{h^3} + \gamma_l \kappa(X) + p_a \quad (4.58)$$

$$p_1(x, y, t) = f (e^{n x} - e^{-n x}) \varepsilon e^{\beta t + i n y} \quad (4.59)$$

Für die x -Komponente u des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} errechnet sich mit dem Darcyschen Gesetz 4.1:

$$u_0(x, t) = -\frac{\dot{h}}{h} x \quad (4.60)$$

$$u_1(x, y, t) = -\frac{h^2}{6 \eta} f n e^{n x} \varepsilon e^{\beta t + i n y} \quad (4.61)$$

Zur Bestimmung des funktionalen Zusammenhangs $\beta(n)$ wird auch hier die kinematische - bzw. dynamische Randbedingung ausgewertet.

Die kinematische Randbedingung:

Die implizite Form der freien Oberfläche ist hier gegeben durch:

$$F(x, y, t) = x - X_s(y, t) \quad (4.62)$$

$dF/dt = \partial F/\partial t + (\vec{v} \cdot \nabla)F = 0$ liefert:

$$0 = -\dot{X}_s(y, t) + u(X_s) + O(\varepsilon^2) \quad (4.63)$$

Die Taylorreihenentwicklung von $u_0(X_s)$ und $u_1(X_s)$ um X ergibt:

$$u_0(X_s, t) = u_0(X, t) + \frac{\partial u_0}{\partial x}(X, t)X\varepsilon e^{\beta t + iny} + O(\varepsilon^2) \quad (4.64)$$

$$u_1(X_s, y, t) = u_1(X, y, t) + O(\varepsilon^2) \quad (4.65)$$

Setzt man diese Terme in Gleichung 4.63 ein, so erhält man bis zur ersten Ordnung in ε :

$$\dot{X} + (\dot{X} + \beta X)e^{\beta t + iny} = u_0(X, t) + u_1(X, y, t) + \frac{\partial u_0}{\partial x}(X, t)X\varepsilon e^{\beta t + iny} \quad (4.66)$$

Mit $u_0(X, t) = \dot{X} = -\dot{h}X/h$ und durch Herauskürzen des Störterms ergibt dies:

$$\dot{X} + \beta X = -\frac{\dot{h}}{h}X - \frac{h^2}{6\eta}fne^{nX} \quad (4.67)$$

$$\iff \beta = -\frac{h^2}{6\eta X}fne^{nX} \quad (4.68)$$

Die dynamische Randbedingung:

Der Drucksprung an der freien Oberfläche ergibt sich wieder aus der Young-Laplace Gleichung:

$$p(X_s) - p_a = \gamma_l \kappa(X_s) \quad (4.69)$$

Die Taylorreihenentwicklung von $p_0(X_s)$ und $p_1(X_s)$ um X ergibt:

$$p_0(X_s, t) = p_0(X, t) + \frac{\partial p_0}{\partial x}(X, t)X\varepsilon e^{\beta t + iny} + O(\varepsilon^2) \quad (4.70)$$

$$p_1(X_s, y, t) = p_1(X, y, t) + O(\varepsilon^2) \quad (4.71)$$

Die Krümmung der freien Oberfläche $\kappa(X_s) = 1/R_y(X_s) + 1/R_z(X_s)$ ist gegeben durch (siehe Bronstein [41]):

$$\frac{1}{R_y(X_s)} = \frac{X_s''}{(1 + X_s')^{\frac{3}{2}}} = -n^2 X \varepsilon e^{\beta t + i n y} + O(\varepsilon^2) \quad (4.72)$$

Die Young-Laplace Gleichung verlangt also:

$$p_0(X, t) + p_1(X, y, t) + \frac{\partial p_0}{\partial x}(X, t) X \varepsilon e^{\beta t + i n y} = \gamma_l \left(n^2 X \varepsilon e^{\beta t + i n y} + \frac{1}{R_z(X_s)} \right) + p_a$$

Die Änderung des Vorzeichens von $1/R_y(X_s)$ in obiger Gleichung erfolgt auf Grund der Tatsache, daß die Krümmung längs der äußeren Normalen auf die freie Oberfläche gerichtet ist.

Setzt man die bereits errechneten Ausdrücke für $p_0(X, t)$ und $p_1(X, y, t)$ ein, so erhält man mit $p_0(X, t) = \gamma_l/R_z(X_s) + p_a$:

$$\begin{aligned} & \frac{12\eta \dot{h} X^2}{h^3} + f(e^{nX} - e^{-nX}) = \gamma_l n^2 X \\ \Leftrightarrow -f &= \left(\frac{12\eta \dot{h} X^2}{h^3} - \gamma_l n^2 X \right) \frac{1}{e^{nX} - e^{-nX}} \end{aligned} \quad (4.73)$$

Dieses Ergebnis wird in die Bestimmungsgleichung für β eingesetzt. Man erhält den gesuchten funktionalen Zusammenhang $\beta(n)$:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{h^2 n}{6\eta X} \left(\frac{12\eta \dot{h} X^2}{h^3} - \gamma_l n^2 X \right) \frac{e^{nX}}{e^{nX} - e^{-nX}} \\ &= \left(\frac{2n \dot{h} X}{h} - \frac{\gamma_l n^3 h^2}{6\eta} \right) \frac{e^{nX}}{e^{nX} - e^{-nX}} \end{aligned} \quad (4.74)$$

Mit den dimensionslosen Kennzahlen,

$$\beta^* := \beta \frac{2h}{\dot{h}} \quad (4.75)$$

$$Ca := \frac{\dot{h}\eta}{\gamma_l} \quad (4.76)$$

ergibt sich:

$$\beta^* = \left(4nX - \frac{n^3 h^3}{3Ca} \right) \frac{e^{nX}}{e^{nX} - e^{-nX}} \quad (4.77)$$

Stabilität herrscht für $\beta \leq 0 \iff \beta^* \leq 0$. Für eine ungestörte Trennung der Flüssigkeitlamelle muß also für alle positiven Zahlen n gelten:

$$4nX \leq \frac{n^3 h^3}{3Ca} \iff 1 \leq \frac{n^2 h^3}{12CaX} = \frac{n^2 h^2}{12Ca^*} \quad (4.78)$$

Hierbei ist Ca^* die modifizierte Kapillarzahl $Ca^* := Ca \cdot X/h$, welche auch in diesem Modell ($h \ll X$ entspricht $h \ll R$ bei der Punktspaltung) sehr groß werden kann.

Die qualitative Interpretation obiger Gleichungen 4.78 erfolgt analog zum Fall der Punktspaltung (Gleichung 4.41), d.h. auch hier verläuft der Spaltungsprozess um so stabiler, je kleiner die Kapillarzahl eingestellt wird.

Um diejenige Wellenzahl pro Längeneinheit in y -Richtung zu bestimmen, welche eine maximale Anfachung der Störung garantiert, muß noch das Maximum der Funktion $\beta^*(n)$ ermittelt werden. Die notwendige Bedingung hierfür ist:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \beta^*}{\partial n} = \left(4X - \frac{n^2 h^3}{Ca}\right) \frac{e^{nX}}{e^{nX} - e^{-nX}} + \left(4nX - \frac{n^3 h^3}{3Ca}\right) X \frac{e^{2nX} - 1 - (e^{2nX} + 1)}{(e^{nX} - e^{-nX})^2} \\ \iff 0 &= \left(4X - \frac{n^2 h^3}{Ca}\right) e^{nX} (e^{nX} - e^{-nX}) + \left(4nX - \frac{n^3 h^3}{3Ca}\right) X (-2) \\ \iff 0 &= \left(4X - \frac{n^2 h^3}{Ca}\right) (e^{2nX} - 1) - 2nX \left(4X - \frac{n^2 h^3}{3Ca}\right) \end{aligned}$$

Diese Gleichung läßt sich nicht nach n auflösen. Um trotzdem eine Aussage über die Existenz und Lage eines Maximums von $\beta^*(n)$ machen zu können, wird das Grenzwertverhalten der Funktion betrachtet:

1. Nach dem Satz von l'Hospital ist $n = 0$ eine stetig hebbare Lücke der Funktion $\beta^*(n)$:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \beta^*(n) = 2 \quad (4.79)$$

2. Durch zweimalige Anwendung des Satzes von l'Hospital folgt für die 1. Ableitung bei $n = 0$:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial \beta^*(n)}{\partial n} = 2X > 0 \quad (4.80)$$

3. Das Grenzwertverhalten für divergierendes n wird beschrieben durch:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \beta^*(n) = -\infty \quad (4.81)$$

4. Obwohl physikalisch nicht sinnvoll, betrachtet man zusätzlich den Grenzwert für negative n :

$$\lim_{n \rightarrow -\infty} \beta^*(n) = 0 \quad (4.82)$$

Aus diesen Betrachtungen läßt sich auf die Existenz eines Maximums n^* schließen, welches kleiner sein muß als die positive Nullstelle n_0 von $\beta^*(n)$:

$$n^* \in [0, n_0], \quad n_0 = \sqrt{\frac{12CaX}{h^3}} \quad (4.83)$$

Abschließend erkennt man also, daß die Größe der Kapillarzahl, also das Verhältnis von Zähigkeitskräften zu Oberflächenkräften, ein entscheidendes Stabilitätsmaß für die Farbspaltung 2. Klasse zu sein scheint. Für zwei vollkommen unterschiedliche Farbvolumengeometrien, die des rotationssymmetrischen Tropfens und die der geraden Farblamelle, ergab die lineare Stabilitätsanalyse, daß bei kleiner Kapillarzahl ($Ca \rightarrow 0$ bzw. $Ca^* \rightarrow 0$), kleine Anfangsstörungen im Laufe des Trennvorgangs abklingen und somit ein gleichmäßiger scharf berandeter Farbauftrag gewährleistet ist.

Da die Voraussetzung einer verschwindenden Kapillarzahl im realen Druckprozess jedoch nicht erfüllt werden kann, sollte es mittels Variation der Kapillarzahl bzw. mittels Variation der geometrischen Größen h und X zumindest möglich sein, die Wellenzahl der dominanten Störung auf einen für den Beobachter schwer wahrnehmbaren Bereich einzustellen.

4.3 Einfluß rauher Oberflächen

In diesem Abschnitt soll, mit rein analytischen Methoden, der Einfluß rauher Festkörper auf die gestörte und ungestörte Strömung bei der Farbspaltung der 2. Klasse untersucht werden. In der Druckindustrie haben viele, an der Farbübertragung beteiligten Elemente des Druckprozesses (z.B. Rasterwalze, Druckplatte, Substrat), diese Oberflächeneigenschaft.

4.3.1 Die Flüssigkeitslamelle

In diesem Paragraphen wird die Farbspaltung einer Flüssigkeitslamelle zwischen rauhen Festkörperoberflächen in kartesischen Koordinaten betrachtet. Zur Modellierung dieses Prozesses muß der Spalthöhenverlauf h (siehe Abbildung 2.2) nicht nur von der Zeit t , sondern auch von den kartesischen Koordinaten x, y abhängig sein:

$$h(x, y, t) = h_0(t) + h_1(x, y) \quad (4.84)$$

Hierbei gibt $h_1(x, y)$ die Strukturierung der rauhen Platten an (vorstellbar wäre z.B. $h_1(x) = 1 + \varepsilon \cdot \cos(2\pi x/l) \cdot \cos(2\pi y/k)$ für periodische Oberflächentopologien wie die einer Rasterwalze), und $\dot{h}(x, y, t) = \dot{h}_0(t)$ ist die Geschwindigkeit, mit der die Platten getrennt werden. In diesem Sinne beinhaltet dieses Kapitel eine Verallgemeinerung der Lamellenspaltung im Paragraph 4.2 ($h = h(t)$).

Die Kontinuitätsgleichung und die Poiseuille-Darcy Gleichung bleiben die, die Strömung beschreibenden, Grundgleichungen:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\operatorname{div}(h \cdot \vec{v}) = -\nabla \cdot (h \cdot \vec{v}) \quad (4.85)$$

$$\vec{v} = -\frac{h^2}{12\eta} \nabla p \quad (4.86)$$

Neu ist allerdings die jetzt vorhandene Ortsabhängigkeit des Spalthöhenverlaufs $h = h(x, y, t)$.

Die Ableitungsoperatoren wirken in obigen Gleichungen also nicht nur auf die Geschwindigkeit \vec{v} und den Druck p , sondern zusätzlich auf $h(x, y, t)$. Damit ergibt sich aus dem Darcyschen Gesetz:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (h \cdot \vec{v}) &= \nabla \cdot \left(\frac{h^3}{12\eta} \nabla p \right) = \nabla \left(\frac{h^3}{12\eta} \right) \cdot \nabla p + \frac{h^3}{12\eta} \cdot \Delta p \\ &= \frac{3h^2}{12\eta} \nabla h \cdot \nabla p + \frac{h^3}{12\eta} \cdot \Delta p \end{aligned} \quad (4.87)$$

Mittels der Kontinuitätsgleichung ergibt sich dann für den Druck p in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} &= \frac{3h^2}{12\eta} \nabla h \cdot \nabla p + \frac{h^3}{12\eta} \cdot \Delta p \\ &= \frac{3h^2}{12\eta} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial y} \right) + \frac{h^3}{12\eta} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (4.88)$$

Die Bestimmungsgleichung für den Druck p ist also durch eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung gegeben, welche in dieser Allgemeinheit nicht geschlossen lösbar ist.

Betrachtet man aber den Spezialfall einer Flüssigkeitslamelle zwischen zwei parallelen Platten, die lediglich ein Profil in x -Richtung besitzen (solch einfach strukturierte Oberflächen werden in Zukunft auch als "ideal rauh" bezeichnet), so läßt sich zumindest die ungestörte Strömung analytisch untersuchen. In diesem Fall ist der Spalthöhenverlauf nicht mehr y -abhängig:

$$h(x, y, t) = h_0(t) + h_1(x) \quad (4.89)$$

Man beachte, daß in diesem Fall die partielle Ableitung von h nach y verschwindet:

$$\frac{\partial h}{\partial y} = 0 \quad (4.90)$$

Die ungestörte Strömung:

Für die ungestörte Strömung gilt auf Grund der Symmetrie in y -Richtung:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (4.91)$$

Mit diesen Vereinfachungen ergibt sich aus Gleichung 4.88 eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung für den ungestörten Druck p :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + 3 \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{12\eta \dot{h}}{h^3} \quad (4.92)$$

Mit der Substitution

$$\tilde{p} := \frac{\partial p}{\partial x}$$

erhält man eine gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung für \tilde{p} ,

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + 3 \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \tilde{p} = \frac{12\eta \dot{h}}{h^3} \quad (4.93)$$

deren homogene Lösung gegeben ist durch:

$$\begin{aligned} \tilde{p}_h(x, t, c) &= c \cdot e^{-\int^x 3 \frac{h'(z,t)}{h(z,t)} dz} = c \cdot e^{-3 \int^x [\ln(h(z,t))]' dz} \\ &= c \cdot e^{-3 \ln(h(x,t))} = \frac{c}{h^3(x, t)} \end{aligned} \quad (4.94)$$

Eine spezielle inhomogene Lösung ergibt sich mittels Variation der Konstanten (siehe hierzu Walter [45]):

$$c(x) = \int^x 12\eta \dot{h}(t) dz = 12\eta \dot{h} x \quad (4.95)$$

Man beachte, daß in obiger Gleichung ausgenutzt wurde, daß \dot{h} unabhängig von x ist, was beispielsweise beim Modell der Hele-Shaw Zelle mit sich öffnenden Platten (wird im Paragraphen 5.1 behandelt) nicht der Fall ist. Mittels der allgemeinen Lösung von $\tilde{p}(x)$

$$\tilde{p}(x, t) = \frac{12\eta \dot{h}(t)x + c}{h^3(x, t)} \quad (4.96)$$

folgt durch Rücksubstitution:

$$p(x, t) = d + \int^x \frac{12\eta \dot{h}(t)z + c}{h^3(z, t)} dz \quad (4.97)$$

Die Poiseuille-Darcy Gleichung liefert hiermit, unter Ausnutzung der Bedingung $u_0(0, t) = 0$, die ungestörte x-Komponente des Geschwindigkeitsfeldes:

$$u_0(x, t) = -\frac{h^2(x, t)}{12\eta} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\dot{h}(t)}{h(x, t)} x \quad (4.98)$$

Dieses Ergebnis ist konsistent mit dem analogen Ergebnis der Lamellenspaltung zwischen zwei parallelen ideal glatten Platten, wo der Spalthöhenverlauf lediglich zeit- und nicht ortsabhängig ist. (Siehe hierzu Gleichung 4.60)

Kennzeichnet man das Geschwindigkeitsfeld im Fall ideal glatter paralleler Platten mit dem Index g und im Fall beteiligter "ideal rauher" Platten mit dem Index r , so gilt also:

$$\frac{u_0^g(x, t)}{u_0^r(x, t)} = \frac{h(t) + h(x)}{h(t)} = 1 + \frac{h(x)}{h(t)} \quad (4.99)$$

Somit verlangsamt sich die ungestörte Strömung mit anwachsender Rauigkeit.

Instabiles Verhalten:

Eine Störung der freien Oberfläche gemäß

$$X_s(y, t) = X(t)(1 + \varepsilon e^{\beta t + i n y}) \quad (4.100)$$

wird in das Druckfeld hineingetragen, so daß der ungestörte Druck p_0 nun überlagert wird durch den Stördruck p_1 :

$$p(x, y, t) = p_0(x, t) + p_1(x, y, t) = p_0(x, t) + g(x, t) \varepsilon e^{\beta t + i n y} \quad (4.101)$$

Setzt man den Stördruck p_1 in Gleichung 4.88 ein, so ergibt sich als Bestimmungsgleichung für $g(x, t)$ unter Berücksichtigung von $\frac{\partial h}{\partial y} = 0$:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(x) + 3 \frac{h'(x, t)}{h(x, t)} \frac{\partial g}{\partial x}(x, t) - q^2 g(x, t) = 0 \quad (4.102)$$

Eine allgemeine analytische Lösung dieser Differentialgleichung 2. Ordnung konnte allerdings nicht gefunden werden (Systemprogramme mit der Möglichkeit Differentialgleichungen zu lösen, wie *Maple* oder *Mathematica*, finden hierfür ebenfalls keine Lösung). Auch Ansätze spezieller periodischer Funktionen für die Rauigkeitsfunktion h_1 (z.B. $h(x) = h_0(t) + 1 + \varepsilon \cos(x)$) machen Gleichung 4.102 nicht lösbar.

Auf numerische Lösungswege wird hier verzichtet.

4.3.2 Der Flüssigkeitstropfen

Der wesentliche Unterschied zum letzten Paragraphen besteht im Übergang von kartesischen Koordinaten auf Zylinderkoordinaten. Die Kombination von Massenerhaltung und Darcyschem Gesetz liefert dann bei beliebigem Spalthöhenverlauf $h(r, \varphi, t)$:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{3h^2}{12\eta} \left(\frac{\partial h}{\partial r} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial h}{\partial \varphi} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \right) + \frac{h^3}{12\eta} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \varphi^2} \right) \quad (4.103)$$

Auch hier handelt es sich um eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung, welche nicht allgemein lösbar ist.

Die "ideal rauhe" Platte weist hier eine rotationssymmetrische Oberfläche auf, so daß der Spalthöhenverlauf gegeben ist durch:

$$h(r, \varphi, t) = h_0(t) + h_1(r) \quad (4.104)$$

Man beachte, daß in diesem Fall gilt:

$$\frac{\partial h}{\partial \varphi} = 0 \quad (4.105)$$

Die ungestörte Strömung:

Für die ungestörte Strömung gilt zusätzlich auf Grund der Rotationssymmetrie:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \varphi^2} = \frac{\partial p}{\partial \varphi} = 0 \quad (4.106)$$

Mit diesen Vereinfachungen ergibt sich aus Gleichung 4.103:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial p}{\partial r} + 3 \frac{\frac{\partial h}{\partial r}}{h} \cdot \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{12\eta \dot{h}}{h^3} \quad (4.107)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung erfolgt, in vollkommener Analogie zum vorherigen Paragraphen, mittels Variation der Konstanten. Man erhält für den ungestörten Druck:

$$p(r, t) = d + \int^r \frac{6\dot{h}(t)\eta z^2 + c}{zh^3(z)} dz \quad (4.108)$$

Die Poiseuille-Darcy Gleichung liefert hiermit, unter Ausnutzung von $u_0(0, t) = 0$, die ungestörte r-Komponente des Geschwindigkeitsfeldes:

$$u_0(r, t) = -\frac{h^2(r, t)}{12\eta} \frac{\partial p}{\partial r} = -\frac{\dot{h}(t)}{2h(r, t)} r \quad (4.109)$$

Diese Ergebnisse sind konsistent mit den Ergebnissen der Punktspaltung zwischen zwei parallelen ideal glatten Platten, wo der Spalthöhenverlauf lediglich zeit- und nicht ortsabhängig ist (siehe hierzu Gleichung 4.22).

Bezeichnet man die ungestörte Radialkomponente der Geschwindigkeit eines sich spaltenden Tropfens zwischen zwei ideal glatten parallelen Platten mit $u_0^g(r, t)$ und die mit beteiligten „ideal rauhen“ Platten mit $u_0^r(r, t)$, so gilt also:

$$\frac{u_0^g(r, t)}{u_0^r(r, t)} = \frac{h(t) + h(r)}{h(t)} = 1 + \frac{h(r)}{h(t)} \quad (4.110)$$

Instabiles Verhalten:

Eine Störung der freien Oberfläche gemäß

$$R_s(\varphi, t) = R(t)(1 + \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi}) \quad (4.111)$$

wird in das Druckfeld hineingetragen, so daß der ungestörte Druck p_0 nun überlagert wird durch den Stördruck p_1 :

$$p(r, \varphi, t) = p_0(r, t) + p_1(r, \varphi, t) = p_0(r, t) + g(r, t) \varepsilon e^{\beta t + i n \varphi} \quad (4.112)$$

Setzt man dies in Gleichung 4.103 ein, so ergibt sich als Bestimmungsgleichung für $g(r, t)$ unter Berücksichtigung von $\frac{\partial h}{\partial \varphi} = 0$:

$$r^2 g''(r, t) + r \left[1 + 3r \frac{h'(r, t)}{h(r, t)} \right] g'(r) - n^2 g(r, t) = 0 \quad (4.113)$$

Eine allgemeine analytische Lösung dieser Differentialgleichung existiert allerdings nicht.

Zusammenfassung:

Wie die Berechnungen in diesem Paragraphen gezeigt haben, beeinflussen die Oberflächentopologien der Platten die Spaltströmung erheblich. Da die ermittelten Gleichungen für die ungestörte Strömung, Gleichung 4.109 bzw. 4.98, im Fall verschwindender Rauigkeit, $h_1(r) = 0$ bzw. $h_1(x) = 0$, exakt mit den in Paragraph 4.1 bzw. Paragraph 4.2 ermittelten Gleichungen 4.22 bzw. 4.60 übereinstimmen, ist dieser Paragraph (für die ungestörte Strömung) als echte Verallgemeinerung der vorherigen Paragraphen zu verstehen.

Des weiteren hat sich gezeigt, daß der Spalthöhenverlauf h die Durchführbarkeit und das Resultat einer Stabilitätsanalyse beeinflusst. Obwohl eine analytische Berechnung der Störampplitude $\beta(n)$ hier nicht möglich war, scheint diese vom Spalthöhenverlauf abhängig zu sein. Es ist also davon auszugehen, daß die Oberflächentopologien beteiligter Festkörper die Stabilität des Spaltungsvorgangs beeinflussen.

Wie stark der Spalthöhenverlauf die Stabilitätsanalyse beeinflusst, zeigt sich auch im folgenden Kapitel, welches die Farbspaltung 1. Klasse behandelt.

Kapitel 5

Die Farbspaltung 1. Klasse

Literatur: Dieses Kapitel orientiert sich an der Arbeit von Zhang [9]. Der Modellierungsansatz nach Abbildung 5.1 ist dieser Arbeit entnommen.

Neben den bereits in Kapitel 4 erwähnten Literaturquellen im Zusammenhang mit dem instabilen Strömungsverhalten innerhalb einer Hele-Shaw Zelle sei hier noch exemplarisch auf die Arbeiten von Huntingford [16], Tabe-ling/Libchader [17], Daccord/Nittmann [18], Pons [19] und Hadavinia [20] hingewiesen.

Zu den in diesem Kapitel auftauchenden Bessel Funktionen gibt es eine große Anzahl von Büchern und Arbeiten. Exemplarisch seien hier nur zwei genannt: Grosswald [39], Farrell [42].

Während bei der Farbspaltung 2. Klasse kleine abgeschlossene Farbvolumina, wie der Druckpunkt oder die Farblamelle, im Walzenspalt betrachtet wurden, sieht man sich bei der Schichtspaltung einer anderen Problematik gegenüber. Hier wird von einer Walze kontinuierlich Farbe zugeführt, während eine zweite Walze (bzw. das Substrat) kontinuierlich Farbe abtransportiert. In dieser Problematik macht es keinen Sinn, auseinanderstrebende parallele Platten mit sich dazwischen befindender Farbe konstanten Volumens zu betrachten. Dies ist im Fall der Farbspaltung 2. Klasse möglich, da die dort auftretenden charakteristischen Längen der abgeschlossenen Farbvolumina klein gegen den Walzenradius sind, und somit die Walzenkrümmung vernachlässigbar scheint. Der Grund für die Farbspaltung liegt dann einfach im konstanten, in sich abgeschlossenen Farbvolumen.

Im Falle der Schichtspaltung ist aber kein konstantes, abgeschlossenes Farbvolumen vorhanden. Um ein möglichst einfaches und damit noch lösbares Modell erstellen zu können, betrachtet man den Vorgang aus dem Bezugssystem eines Farbpartikels im Walzenspalt. In diesem Bezugssystem sieht es so aus, als würden sich zwei anfangs parallele Platten mit einer Winkel-

geschwindigkeit ω gegeneinander öffnen. Im Inertialsystem eines außenstehenden Beobachters nennt sich ein solches System: Hele-Shaw Zelle mit sich öffnenden Platten (siehe Abbildung 5.1).

Da aus dem Bezugssystem der Farbe der Vorgang im Walzenspalt ähnlich zur Strömung in einer Hele-Shaw Zelle mit sich öffnenden Platten ist, scheint dieses Modell geeignet, um diese instabile Strömung der Schichtspaltung zu modellieren.

5.1 Die sich öffnende Hele-Shaw Zelle

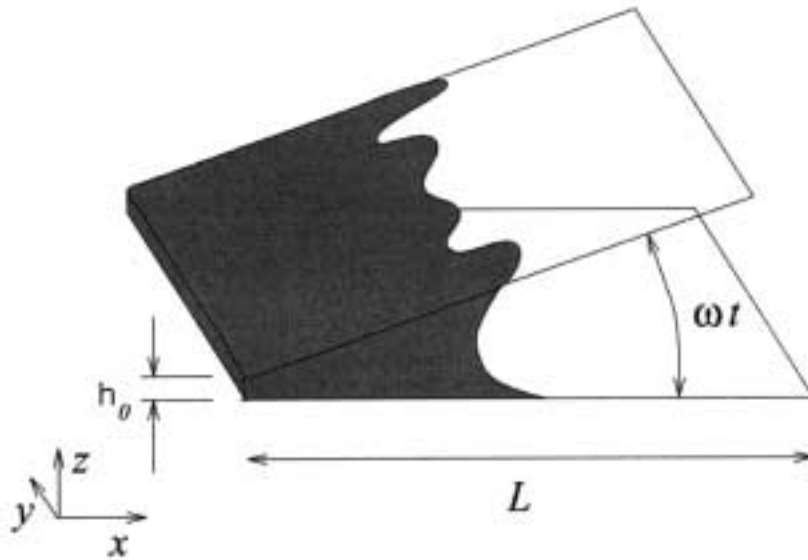


Abbildung 5.1: Die Hele-Shaw Zelle mit sich öffnenden Platten.

In vollkommener Analogie zur dynamischen Farbspaltung der 2. Klasse im letzten Kapitel, lassen sich auch hier die Ausgangsgleichungen, welche Massen- und Impulserhaltung beschreiben, herleiten:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\text{div}(h \cdot \vec{v}) = -\nabla \cdot (h \cdot \vec{v}) \quad (5.1)$$

$$\vec{v} = -\frac{h^2}{12\eta} \nabla p \quad (5.2)$$

Die explizite Ortsabhängigkeit des Spalthöhenverlaufs $h(x, t)$

$$h(x, t) = h_0 + x \tan(\omega t) =: h_0 + x \cdot a(t) \quad (5.3)$$

führt in kartesischen Koordinaten auf Gleichung 4.88, welche sich nun wegen $\partial h / \partial y = 0$, weiter vereinfachen läßt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} = x\dot{a} &= \frac{3ah^2}{12\eta} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{h^3}{12\eta} \cdot \Delta p \\ \iff \Delta p + \frac{3a}{h} \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{12\eta\dot{a}x}{h^3} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Diese Gleichung ist auf Grund ihres zusätzlichen Summanden wesentlich komplizierter als die korrespondierenden Grundgleichungen 4.45 bzw. 4.7 für die Farbspaltung 2. Klasse mit beteiligten ideal glatten Platten. Im Gegensatz zum Fall ideal rauher Platten ($h(x, y, t) = h_0(t) + h_1(x)$ und $h_1(x)$ periodisch) erlaubt sie aber eine lineare Stabilitätsanalyse der gestörten Strömung.

Der nun schon bekannte Ansatz für die freie Flüssigkeitsoberfläche lautet:

$$X_s(y, t) = X(t)(1 + \varepsilon e^{\beta t + iny}) \quad (5.5)$$

Die kleine Anfangsstörung der Amplitude ε wird in das Druckfeld hineingetragen:

$$p(x, y, t) = p_0(x, t) + p_1(x, y, t) = p_0(x, t) + g(x, t)\varepsilon e^{\beta t + iny} \quad (5.6)$$

Einsetzen in Gleichung 5.4 liefert:

$$\frac{\partial^2 p_0(x, t)}{\partial x^2} + \frac{3a(t)}{h(x, t)} \frac{\partial p_0(x, t)}{\partial x} = \frac{12\eta\dot{a}(t)x}{h^3(x, t)} \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial^2 g(x, t)}{\partial x^2} + \frac{3a(t)}{h(x, t)} \frac{\partial g(x, t)}{\partial x} - n^2 g(x, t) = 0 \quad (5.8)$$

Die allgemeinen Lösungen dieser Differentialgleichungen wurden mit dem Systemprogramm *Mathematica 4* berechnet. (Beachte: Die ältere Version *Mathematica 3* liefert ein falsches Ergebnis für die Stördruckfunktion g .) Hierbei wurde zur Bestimmung von g folgende Substitution benutzt:

$$\xi := \frac{nh(x, t)}{a(t)} \quad (5.9)$$

Die Ergebnisse lauten:

$$p_0(x, t) = \frac{12\eta\dot{a}}{a^3} \left[\frac{h_0}{h(x, t)} + \frac{1}{2} \ln(h(x, t)) - \frac{h_0^2}{4h^2(x, t)} \right] - \frac{C_1}{2ah^2(x, t)} + C_2$$

$$g(\xi) = \frac{1}{\xi} \left[D_1 I_1(\xi) + D_2 K_1(\xi) \right]$$

Hierbei sind $I_1(\xi)$ bzw. $K_1(\xi)$ die modifizierten Besselfunktionen erster Ordnung, der ersten bzw. zweiten Gattung (Zu den modifizierten Besselfunktionen siehe z.B. Grosswald [39], Bronstein [41], Farrell [42]). Unter Ausnutzung der Tatsache, daß für die x -Komponente u des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} , $u_0(0, t) = 0$ gelten muß, folgt nach kurzer Rechnung:

$$0 = u_0(0, t) = -\frac{h_0^2}{12\eta} \frac{\partial p_0}{\partial x}(0, t) \iff C_1 = 0 \quad (5.10)$$

C_2 ließe sich aus der Young-Laplace Gleichung

$$p_0(X_s) - p_a = \gamma_l \cdot \kappa(X_s) \quad (5.11)$$

ermitteln, wird aber im Weiteren nicht mehr benötigt.

Da der Stördruck p_1 bis zum geschlossenen Ende der Hele-Shaw Zelle abgeklungen sein sollte, ist eine weitere Randbedingung:

$$0 = p_1(0, y, t) = \varepsilon e^{\beta t + i n y} \frac{1}{\xi_0} [D_1 I_1(\xi_0) + D_2 K_1(\xi_0)] \iff D_1 = -D_2 G_1(\xi_0)$$

Hierbei wurden folgende Definitionen benutzt:

$$G_1(\xi) := \frac{K_1(\xi)}{I_1(\xi)} \quad (5.12)$$

$$\xi_0 := \xi(0, t) = \frac{nh_0}{a(t)} \quad (5.13)$$

Für die x -Komponente der Geschwindigkeit \vec{v} gilt also:

$$\begin{aligned} u &= u_0 + u_1 = -\frac{h^2}{12\eta} \left(\frac{\partial p_0}{\partial x}(x, t) + \frac{\partial p_1}{\partial x}(x, t) \right) \\ &= -\frac{\dot{a}}{2h(x, t)a^2} (h(x, t) - h_0)^2 + \\ &\quad + \frac{h^2(x, t)n}{12\eta} \frac{n}{\xi} D_2 [G_1(\xi_0)I_2(\xi) + K_2(\xi)] \varepsilon e^{\beta t + i n y} \\ &= -\frac{\dot{a}x^2}{2h(x, t)} + \frac{h^2(x, t)n}{12\eta} \frac{n}{\xi} D_2 [G_1(\xi_0)I_2(\xi) + K_2(\xi)] \varepsilon e^{\beta t + i n y} \\ &= -\frac{\dot{h}(x, t)}{2h(x, t)} x + \frac{h^2(x, t)n}{12\eta} \frac{n}{\xi} D_2 [G_1(\xi_0)I_2(\xi) + K_2(\xi)] \varepsilon e^{\beta t + i n y} \end{aligned}$$

Hierbei wurde ausgenutzt, daß für die Ableitung der Funktion g gilt:

$$\frac{\partial g}{\partial x}(\xi) = \frac{n}{\xi} [D_1 I_2(\xi) - D_2 K_2(\xi)] = -\frac{n}{\xi} D_2 [G_1(\xi_0) I_2(\xi) + K_2(\xi)] \quad (5.14)$$

I_2 und K_2 sind dabei die modifizierten Besselfunktionen zweiter Ordnung, der ersten bzw. zweiten Gattung (siehe hierzu [39], [41], [42]).

Die kinematische Randbedingung:

Die implizite Form der freien Oberfläche ist hier gegeben durch:

$$F(x, y, t) = x - X_s(y, t) \quad (5.15)$$

Die kinematische Randbedingung $dF/dt = \partial F/\partial t + (\vec{v} \cdot \nabla)F = 0$ liefert:

$$0 = -\dot{X}_s(y, t) + u(X_s) + O(\varepsilon^2) \quad (5.16)$$

Die Taylorreihenentwicklung von $u_0(X_s)$ und $u_1(X_s)$ um X ergibt:

$$u_0(X_s, t) = u_0(X, t) + \frac{\partial u_0}{\partial x}(X, t) X \varepsilon e^{\beta t + i n y} + O(\varepsilon^2) \quad (5.17)$$

$$u_1(X_s, y, t) = u_1(X, y, t) + O(\varepsilon^2) \quad (5.18)$$

Setzt man diese Terme in Gleichung 5.16 ein, so erhält man bis zur ersten Ordnung in ε :

$$\dot{X} + (\dot{X} + \beta X) \varepsilon e^{\beta t + i n y} = u_0(X, t) + u_1(X, y, t) + \frac{\partial u_0}{\partial x}(X, t) X \varepsilon e^{\beta t + i n y} \quad (5.19)$$

Mit $u_0(X, t) = \dot{X} = -\dot{h}X/2h = -\dot{a}X^2/2h$ und Herauskürzen des Störterms ergibt dies:

$$\begin{aligned} \dot{X} + \beta X &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\dot{h}}{2h} x \right) (X) X + \frac{h^2}{12\eta} \frac{n}{\xi_X} D_2 [G_1(\xi_0) I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)] \\ \iff -\frac{\dot{a}}{2h} X^2 + \beta X &= -\frac{4\dot{a}Xh - 2a\dot{a}X^2}{4h^2} X + \frac{h^2}{12\eta} \frac{n}{\xi_X} D_2 [G_1(\xi_0) I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)] \\ \iff \beta &= -\frac{\dot{h}}{2h} + \frac{\dot{a}aX^2}{2h^2} + \frac{1}{X} \frac{h^2}{12\eta} \frac{n}{\xi_X} D_2 [G_1(\xi_0) I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)] \\ &= -\frac{\dot{h}(X, t)}{2h(X, t)} + \frac{\dot{a}aX^2}{2h^2(X, t)} + \frac{ah(X, t)}{12\eta X} D_2 [G_1(\xi_0) I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)] \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet: $\xi_X := \xi(X, t) = nh(X, t)/a$

Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß in obiger Rechnung, wie auch im Folgenden, öfters h bzw. \dot{h} abkürzend für $h(X, t)$ bzw. $\dot{h}(X, t)$ benutzt wird.

Die dynamische Randbedingung:

In Analogie zu Paragraph 4.2 der Lamellenspaltung erhält man auch hier als dynamische Randbedingung:

$$p_0(X, t) + p_1(X, y, t) + \frac{\partial p_0}{\partial x}(X, t)X\varepsilon e^{\beta t + iny} = \gamma_l \left(n^2 X \varepsilon e^{\beta t + iny} + \frac{1}{R_z(X_s)} \right) + p_a$$

Setzt man die bereits errechneten Ausdrücke für $p_0(X, t)$ und $p_1(X, y, t)$ ein, so erhält man mit $p_0(X, t) = \gamma_l/R_z(X_s) + p_a$ und Herauskürzen des Störterms:

$$\begin{aligned} & \frac{12\eta\dot{a}}{a^3} \frac{a}{2h^3} (h - h_0)^2 X + \frac{1}{\xi_X} D_2 [K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)] = \gamma_l n^2 X \\ \Leftrightarrow & \frac{1}{\xi_X} D_2 [K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)] = \gamma_l n^2 X - \frac{6\eta\dot{a}}{h^3} X^3 \\ \Leftrightarrow & \frac{\xi_X (\gamma_l n^2 X - \frac{6\eta\dot{a}}{h^3} X^3)}{K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)} = D_2 \\ \Leftrightarrow & \frac{\gamma_l n^3 h^3 X - 6\eta\dot{a}nX^3}{ah^2 [K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)]} = D_2 \end{aligned}$$

Setzt man dieses Ergebnis in obige Bestimmungsgleichung für β ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} \beta &= -\frac{\dot{h}}{2h} + \frac{\dot{a}aX^2}{2h^2} \\ &+ \frac{ah}{12\eta X} \frac{\gamma_l n^3 h^3 X - 6\eta\dot{a}nX^3}{ah^2 [K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)]} [G_1(\xi_0)I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)] \\ &= -\frac{\dot{h}}{2h} + \frac{\dot{a}aX^2}{2h^2} + \frac{\gamma_l n^3 h^3 X - 6\eta\dot{a}nX^3}{12\eta h X} \cdot \frac{G_1(\xi_0)I_2(\xi_X) + K_2(\xi_X)}{K_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)I_1(\xi_X)} \\ &= -\frac{\dot{h}}{2h} + \frac{\dot{a}aX^2}{2h^2} \\ &+ \frac{\gamma_l n^3 h^3 - 6\eta\dot{a}nX^2}{12\eta h} \cdot \frac{I_2(\xi_X) [G_1(\xi_0) + G_2(\xi_X)]}{I_1(\xi_X) [G_1(\xi_X) - G_1(\xi_0)]} \end{aligned} \tag{5.20}$$

Approximationen für kleines t :

Für $t \approx 0$, und dies ist für ein realitätsnahes Modell der Schichtspaltung die interessante Phase, ergeben sich folgende Vereinfachungen:

$$\frac{\dot{a}aX^2}{2h^2}(X, t \approx 0) = \frac{X^2\omega \tan^2(\omega t \approx 0)}{2h^2(X, t \approx 0)} \approx 0$$

Der zweite Summand in Gleichung 5.20 verschwindet also.

Für die Approximation des letzten Summanden in 5.20 nutzt man das exponentielle Verhalten der Besselschen Funktionen aus (siehe z.B. Grosswald [39], Farrell [42]):

$$t \approx 0 \implies 1 \ll \xi_0 \ll \xi_X \implies \begin{cases} G_1(\xi_X) \approx G_2(\xi_X) \wedge G_1(\xi_0) \approx G_2(\xi_0) \\ G_2(\xi_X) \ll G_2(\xi_0) \\ I_2(\xi_X) \approx I_1(\xi_X) \end{cases}$$

Mit diesen Vereinfachungen gilt also für β zu Beginn dieses Vorgangs:

$$\begin{aligned} \beta &= -\frac{\dot{h}}{2h} + \frac{\gamma \iota n^3 h^3 - 6\eta \dot{a}nX^2}{12\eta h} \cdot (-1) & (5.21) \\ &= -\frac{\dot{h}}{2h} - \frac{\gamma \iota n^3 h^2}{12\eta} + \frac{\dot{a}nX^2}{2h} \\ &= \frac{\dot{h}(nX - 1)}{2h} - \frac{\gamma \iota n^3 h^2}{12\eta} \end{aligned}$$

Mit den dimensionslosen Kennzahlen:

$$\beta^* := \beta \frac{2h}{\dot{h}} \quad (5.22)$$

$$Ca := \frac{\dot{h}\eta}{\gamma \iota} \quad (5.23)$$

ergibt sich hieraus:

$$\beta^* = (nX - 1) - \frac{n^3 h^3}{6Ca} \quad (5.24)$$

Stabilität herrscht, falls $\beta^* < 0$ für alle positiven Zahlen n gilt:

$$(nX - 1) - \frac{n^3 h^3}{6Ca} < 0 \iff Ca < \frac{n^3 h^3}{6(nX - 1)} \quad (5.25)$$

Um diejenige Wellenzahl n^* pro Längeneinheit in y -Richtung zu bestimmen, welche eine maximale Anfachung der Störung garantiert, muß noch das Maximum der Funktion $\beta^*(n)$ ermittelt werden. Die notwendige Bedingung hierfür ist:

$$0 = \frac{\partial \beta^*}{\partial n} = X - \frac{3n^2 h^3(X)}{6Ca} \stackrel{n>0}{\iff} n^* = \sqrt{\frac{2CaX}{h^3(X)}} \quad (5.26)$$

Man beachte, daß n^* auch die hinreichende Bedingung für Extremstellen erfüllt. Diese Gleichung wird im folgenden Paragraphen mittels Druckversuchen experimentell überprüft.

5.2 Experimentelle Untersuchung

In diesem Paragraphen soll die Gültigkeit von Gleichung 5.26 für die dominante Wellenzahl bei der Schichtspaltung experimentell untersucht werden. Hierfür wird die Farbspaltung zwischen Druckform (gedruckt werden ausschließlich Volltonflächen) und Substrat (PE-Folie) betrachtet.

Da die sich öffnende Hele-Shaw Zelle ein sehr vereinfachtes mathematisches Modell für die Farbspaltung der 1. Klasse darstellt, müssen die einzelnen physikalischen Größen aus Gleichung 5.26 in diesem neuen Kontext richtig interpretiert werden.

Die in der Kapillarzahl Ca enthaltenen Größen γ_l und η entsprechen der Oberflächenspannung und Viskosität der Farbe; $h(X)$ ist ein Maß für die Vertikalkomponente der Druckgeschwindigkeit am Spaltpunkt.

Die geometrischen Größen h und X sind in Abbildung 5.2 dargestellt. Die Höhe h des spaltauslaufseitigen Farbfilms entspricht dabei nicht der Höhe des in den Spalt transportierten Farbfilms, sondern ist auf Grund eines sich ausbildenden Farbreservoirs etwas größer. (In den an späterer Stelle dieser Arbeit durchgeführten Simulationen ist dieser Effekt der Farbreservoirbildung gut zu beobachten.) X entspricht der zu h senkrechten Ausdehnung des Farbfilms von der freien Oberfläche bis zum Spaltmittelpunkt. Diese beiden Größen h und X sind allerdings abhängig von den Walzenradien, der Druckgeschwindigkeit, der übertragenen Farbschichtdicke, den physikalischen Eigenschaften der Druckplatte und von der Oberflächenspannung und der Viskosität der Farbe. Ein funktionaler Zusammenhang, der diese Abhängigkeiten beschreibt, ist nicht bekannt.

Es stellt sich also die Frage, wie in einer experimentellen Untersuchung einzelne Größen in Gleichung 5.26 gezielt variiert werden können, ohne andere Größen entscheidend zu beeinflussen.

Am einfachsten scheint dies über eine definierte Veränderung der in den Walzenspalt transportierten Farbschichtdicke bei sonst gleichen Druckparametern

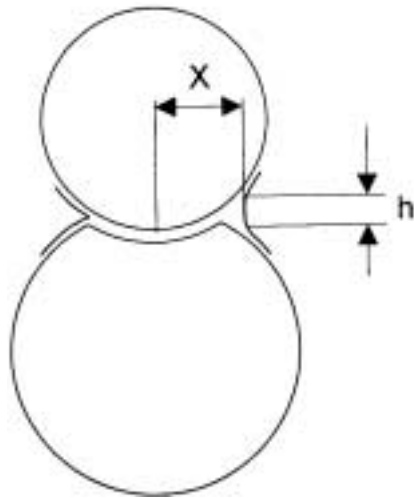


Abbildung 5.2: Geometrische Größen bei der Schichtspaltung

tern realisierbar zu sein. So bewirkt z.B. eine Erhöhung der Farbschichtdicke in erster Linie einen Zuwachs der geometrischen Größe h . Die wahrscheinlich gleichzeitig gegebene Erhöhung der Größe X hat dabei schon aus dem Grund, daß h kubisch und X linear in Gleichung 5.26 eingeht, einen wesentlich geringeren Einfluß auf die theoretisch berechnete dominante Wellenzahl, die sich demnach bei Erhöhung der Farbschichtdicke verringern sollte.

Die Versuchsdurchführung, welche an der Universität - Gesamthochschule Wuppertal im Fachbereich Kommunikationstechnologie Druck stattfand, sei im Folgenden kurz skizziert:

1. Druckverfahren/Druckmaschine:

Der Andruck erfolgte auf einer Zentralzylinder-Flexodruckmaschine, die über ein computergesteuertes Farbwerk mit Schrittmotoren verfügt. Dies ermöglichte eine exakte Einstellung der Druckbeistellung, die in allen Versuchsdurchgängen $120\mu\text{m}$ betrug.

2. Substrat/Motiv:

Als Bedruckstoff wurde eine glatte, weiß durchgefärbte LDPE-Flachfolie mit einer Dicke von $60\mu\text{m}$ ausgewählt. Gedruckt wurden ausschließlich Volltonflächen.

3. Druckplatte:

Gedruckt wurde mit einer Photopolymerplatte mit einer Dicke von $2,84\text{mm}$. Diese wurde auf einen Druckzylinder mit 540mm Umfang und hartem Unterbau geklebt.

4. **Farbe:**

Vor Beginn der Druckversuche wurde die alkoholbasierende Farbe unter Raumtemperatur gelagert und eine Stunde vor Druckbeginn im Farbwerk zum Umlauf gebracht, um eine konstante Farbviskosität zu gewährleisten. Der Festkörperanteil der Farbe betrug beim Druck im Mittel 31,5%.

5. **Druckgeschwindigkeit:**

Es wurde mit einer Geschwindigkeit von $120\text{m}/\text{min}$ gedruckt.

6. **Einfärbung:**

Die Einfärbung der Druckplatte erfolgte mittels einer Rasterwalze, welche über vier Bänder verschiedener Lineaturen und Schöpfvolumina verfügt. Das Einfärben der Rasterwalze erfolgte über ein offenes Kammerakelsystem.

Der Versuch wurde zweimal hintereinander mit unterschiedlichen Rasterwalzen bei sonst identischen Druckparametern durchgeführt. Die Daten dieser Bänderwalzen, im Folgenden als Rasterwalze 1 (RW1) und Rasterwalze 2 (RW2) bezeichnet, finden sich in der folgenden Tabelle:

RW1	Raster [L/cm]	180	140	120	100
	Näpfchentiefe [μm]	11	16,8	20,3	31,7
	Volumen [ml/m^2]	5,1	7,6	9,5	14,2
	Steganteil [%]	26,6	28,9	24	23,8
RW2	Raster [L/cm]	180	140	120	100
	Näpfchentiefe [μm]	8,8	13,2	16	27
	Volumen [ml/m^2]	2,9	4,9	6,4	10,2
	Steganteil [%]	31,5	29,5	30	26,8

Wie man aus dieser Tabelle abliest, verfügen beide Rasterwalzen über dieselben Lineaturen, unterscheiden sich aber in Näpfchentiefe, Steganteil und Schöpfvolumen. Diese Rasterwalzenauswahl erfolgte aus dem Grund, den oft diskutierten Einfluß der Rasterwalzenlineatur auf die Wellenzahl der Mikrostreifen im Druckbild endgültig verwerfen zu können.

Im Anschluß an die Versuche wurden die gedruckten Volltonflächen mikroskopisch erfaßt (siehe z.B. Abbildung 4.2) und ausgewertet.

Die Auszählung der Streifenmuster brachte folgende Ergebnisse:

RW1	Raster RW1 [L/cm]	180	140	120	100
	Volumen RW1 [ml/m^2]	5,1	7,6	9,5	14,2
	Wellenzahl im Druckbild [L/cm]	88	74	64	50
RW2	Raster RW2 [L/cm]	180	140	120	100
	Volumen RW2 [ml/m^2]	2,9	4,9	6,4	10,2
	Wellenzahl im Druckbild [L/cm]	120	94	80	60

Trägt man die im Versuch ermittelte dominante Wellenzahl im Druck, im Fol-

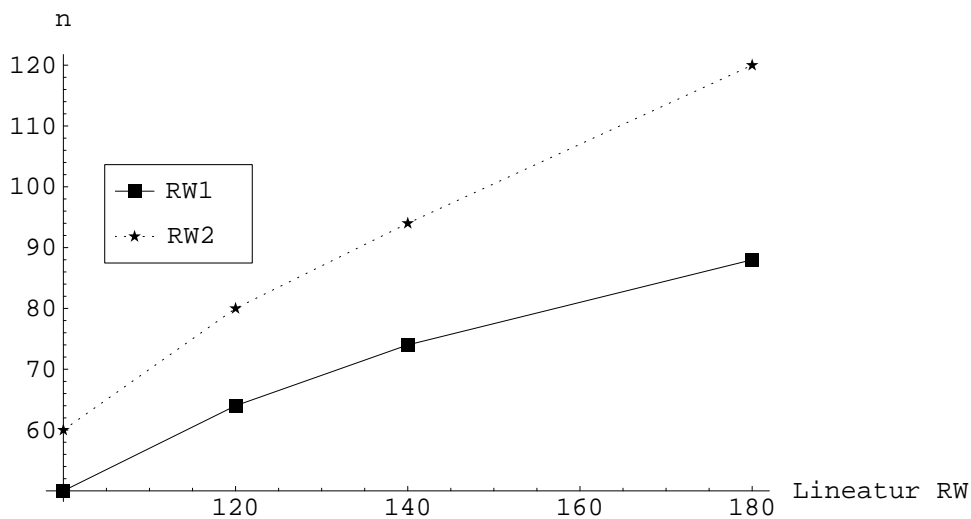


Abbildung 5.3: Dominante Wellenzahl im Druck von Volltonflächen als Funktion der Rasterwalzenlineatur [L/cm].

genden als n bezeichnet, über der Lineatur der Rasterwalze auf (siehe Abbildung 5.3), so erkennt man sofort, daß diese beiden Größen augenscheinlich nicht miteinander korrelieren. Wäre dies der Fall, so müßten sich die einzelnen Meßpunkte **beider** Rasterwalzen in Abbildung 5.3 gut durch **einen** Funktionsgraphen approximieren lassen. Ein Einfluß der Rasterwalzenlineatur auf die dominante Wellenzahl im Druck ist daher auszuschließen.

Ganz anders stellt sich der Zusammenhang zwischen der dominanten Wellenzahl im Druck und dem Schöpfvolumen V der Rasterwalzen dar (siehe Abbildung 5.4). Hier erkennt man sofort einen offenbar gegebenen funktionalen Zusammenhang beider Größen. Geht man nun näherungsweise von der

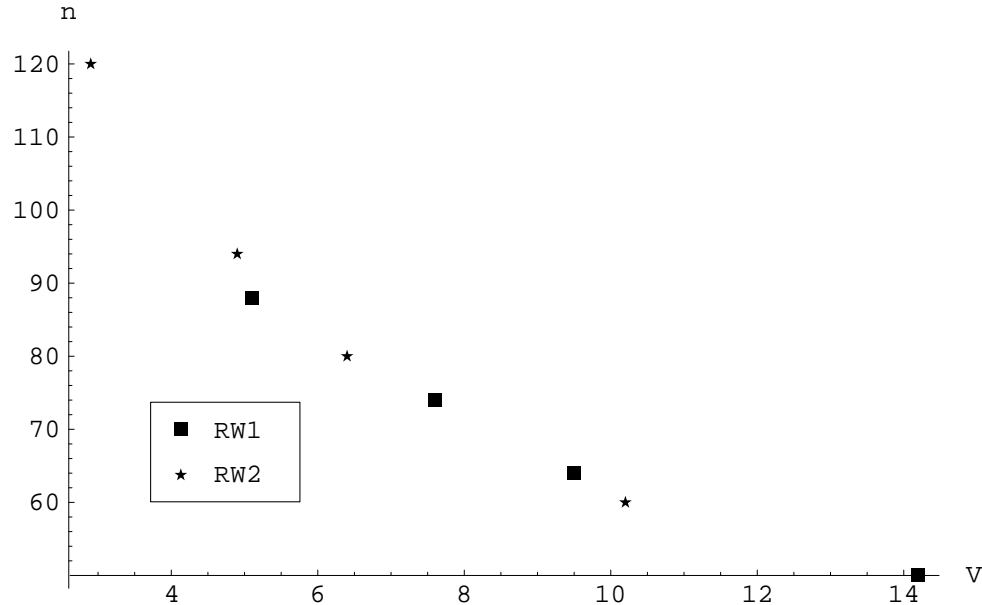


Abbildung 5.4: Dominante Wellenzahl im Druck $n[L/cm]$ von Volltonflächen als Funktion des Schöpfvolumens $V[ml/m^2]$ der Rasterwalzen.

Annahme aus, daß eine Veränderung des Schöpfvolumens V sich lediglich auf die Höhe des Farbfilms h , nicht aber auf die geometrische Größe X bzw. die Geschwindigkeit $\dot{h}(X)$ auswirkt, so bleiben bis auf h alle Größen in Gleichung 5.26 während des Versuchs unverändert. Da h auf Grund eines sich ausbildenden Farbreservoirs größer als das flächenbezogene Schöpfvolumen V ist, wird für diese beiden Größen der einfachst mögliche funktionale Zusammenhang angesetzt:

$$h = V + c \quad (5.27)$$

Es sei angemerkt, daß ein allgemeiner linearer Zusammenhang der Form $h = b \cdot V + c$ die im Folgenden berechnete Ausgleichsfunktion noch besser an die Messpunkte angleichen würde, die Anzahl der Freiheitsgrade hier aber bewußt klein gehalten werden soll. Die theoretische Berechnung der dominanten Wellenzahl im Druckbild ergibt sich unter diesen vereinfachenden Annahmen dann aus Gleichung 5.26:

$$n^* = \sqrt{\frac{2CaX}{h^3}} = \sqrt{\frac{2CaX}{(V+c)^3}} = \sqrt{\frac{a}{(V+c)^3}} \quad (5.28)$$

Da die beiden Konstanten a und c im Experiment unbekannt sind, kann ein absoluter Vergleich der theoretisch berechneten Wellenzahl mit der aus dem

Experiment ermittelten Wellenzahl nicht erfolgen. Daher wird zum qualitativen Vergleich der beiden Wellenzahlen eine Ausgleichsfunktion des Typs 5.28 durch die Messpunkte (V_i, n_i) gelegt (siehe Abbildung 5.5). Gibt man das

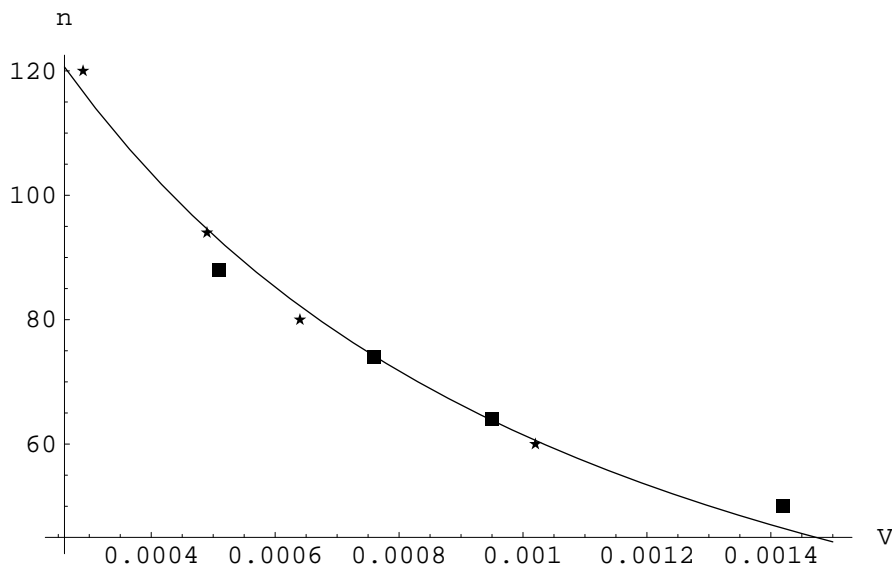


Abbildung 5.5: Ausgleichsfunktion des Typs 5.28 mit $a \approx 3,23 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$,
 $c \approx 1,0445 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$.

flächenbezogene Schöpfvolumen V der Rasterwalze in $\text{cm} = \text{ml}/\text{cm}^2$ an, so errechnet sich durch Minimierung der Summe der vertikalen Abstandsquadrate: $a \approx 3,2310^{-5} \text{ cm}$, $c \approx 1,044510^{-3} \text{ cm}$.

Abbildung 5.5 zeigt die sehr gute Approximation der Messpunkte durch die Ausgleichsfunktion mit einer mittleren relativen Abweichung von ca. 3%.

Zusammenfassung:

In diesem Kapitel wurde die instabile Schichtspaltung analytisch und experimentell untersucht. Abschließend kann gesagt werden, daß obwohl ein quantitativer Vergleich von Theorie und Experiment auf Grund der unbekanntenen Größenverhältnisse im Walzenspalt hier nicht möglich erscheint, der theoretisch errechnete qualitative Verlauf nach Gleichung 5.26 durch die experimentellen Untersuchungen voll bestätigt wurde. Trotz der stark vereinfachten Modellierung der instabilen Schichtspaltung mittels der sich öffnenden Hele-Shaw Zelle, scheinen die theoretischen Ergebnisse sehr gut mit der Realität zu korrelieren.

Des weiteren konnte gezeigt werden, daß die Rasterwalzenlineatur keinen entscheidenden Einfluß auf die Wellenzahl der Mikrostreifen im Druckbild

hat. Der Grund hierfür ist aber nicht etwa in der Vermutung zu suchen, daß die spezielle Oberflächentopologie der Rasterwalze keinerlei Einfluß auf die Stabilität des Spaltungsvorgangs hätte. Ein solcher Einfluß ist nach den theoretischen Betrachtungen in Paragraph 4.3 sogar eher naheliegend. Da der Spaltungsvorgang an dem die Rasterwalze direkt beteiligt ist jedoch vor der Farbspaltung zwischen Druckform und Substrat stattfindet, hat es aber zumindest den Anschein, daß sich dieser Einfluß nicht unmittelbar auf das Substrat überträgt sondern vorher abklingt bzw. durch die Quetschströmung im Spalteinlauf zwischen Druckform und Gegendruckzylinder beseitigt wird.

Es sollte hier erwähnt werden, daß eine einfache Auszählung der dominanten Wellenzahl im Druckbild bei den hier verwendeten Druckparametern zwar ohne Weiteres möglich war, da den Mikrostreifen eine eindeutige Wellenzahl zugeordnet werden konnte (wie z.B in Abbildung 4.2), dies bei anderen Druckparametern aber nicht der Fall sein muß. Dies zeigt sich beispielsweise an Abbildung 5.6. Diese Mikroskopaufnahme einer gedruckten Volltonfläche zeigt eine weitere Verästelung der ursprünglich dominanten Finger (eine sog. *Baumrindenstruktur*), so daß die dominante Wellenzahl nicht ohne Weiteres zu ermitteln ist. (Die zu dieser Mikroskopaufnahme gehörigen Druckparameter unterscheiden sich von denen des oben beschriebenen Versuchs lediglich durch ein erhöhtes Schöpfvolumen der zur Einfärbung benutzten Rasterwalze: $V = 15ml/m^2$.)

Ein solches Verhalten ist mittels der hier durchgeführten *linearen* Stabilitätsanalyse nicht vorhersagbar, da diese nur **ein** lokales Maximum n^* (Gleichung 5.26) der Störampplitude $\beta^*(n)$ (Gleichung 5.24) und keine lokalen Nebenmaxima zuläßt.

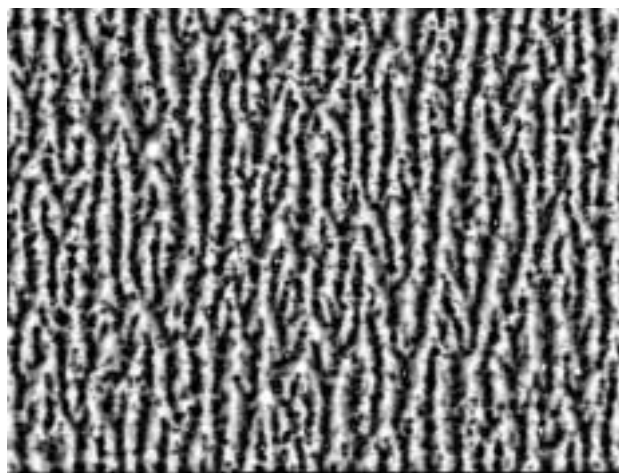


Abbildung 5.6: Baumrindenstruktur bei vergrößerter Farbschichtdicke.

Kapitel 6

Simulationsverfahren

Will man die Farbspaltung am Rechner simulieren, so stellt sich die Frage, welche Anforderungen ein Simulationsmodell erfüllen muß. Da in den vorhergehenden Kapiteln gezeigt wurde, daß die freie Farboberfläche bei der Farbtrennung sehr komplexe Formen annehmen kann (Stichwort: viscous fingering, Mikrostreifen), sollte ein geeignetes Simulationsmodell zum einen dreidimensional sein und zum anderen die Implementierung von Zweiphasenströmungen (Farbe: flüssige Phase, Umgebungsluft: gasförmige Phase) zulassen. Des weiteren sollten die makroskopischen Zustandsgrößen wie Viskosität und Oberflächenspannung der Farbe im Modell variierbar sein.

Die geschichtlich ersten Verfahren, die sich zur Simulation von Zweiphasenströmungen eigneten, basierten auf den klassischen finite Differenzen, finite Elemente bzw. finite Volumen Verfahren, die in dieser Arbeit unter dem Begriff finite xxx-Verfahren zusammengefasst werden. All diesen finiten xxx-Verfahren ist gemeinsam, daß sie Fluide als Kontinua auffassen, den Berechnungsraum mittels eines Gitters diskretisieren und somit die diskretisierten Navier-Stokesschen Gleichungen iterativ lösen.

Zur Implementierung von freien Oberflächen wurden diesen Modellen sogenannte Lagrangesche Markierungsteilchen hinzugefügt, welche frei im Raum beweglich sind und die Lage der freien Oberfläche angeben. Der größte Nachteil bei diesem sogenannten „marker and cell“ Verfahren, welches von Harlow und Welch [51] entwickelt wurde, ist der enorm große Speicherbedarf, hervorgerufen durch die Markierungsteilchen. Trotz einiger Weiterentwicklungen dieses Verfahrens (siehe z.B. Tome [52]) ist die Anwendung auf dreidimensionale Strömungsprobleme daher stark eingeschränkt.

Ein weiteres Verfahren zur Simulation von Zweiphasenströmungen ist das sogenannte „Volume of fluid“ Verfahren, welches ebenfalls auf den finite xxx-

Verfahren basiert. In diesem Modell wird eine Variable definiert, die den Volumenanteil eines der beiden Fluide in den Berechnungszellen angibt. Die zeitliche und räumliche Entwicklung dieser neuen Variablen wird durch eine zusätzliche Transportgleichung beschrieben (siehe z.B. Hirt [53]). Aus dieser sogenannten VOF-Variablen lassen sich dann sowohl die Fluideigenschaften in beiden Phasen als auch die Lage der freien Oberfläche berechnen. Die Diskretisierung der zusätzlichen Transportgleichung erfordert dabei allerdings eine komplizierte Oberflächenkonstruktion.

Eine vollkommen andere Modellierung zur Simulation von Zweiphasenströmungen wird bei den sogenannten molekulardynamischen Verfahren verwendet. Hier werden Fluide nicht makroskopisch als Kontinua, sondern mikroskopisch als Vereinigung vieler Teilchen betrachtet.

Bei einigen dieser Verfahren sind die Teilchen frei im Raum beweglich, und die Dynamik der Teilchen wird im wesentlichen durch Anziehungs- und Abstößungskräfte beschrieben. Zur Simulation von Zweiphasenströmungen werden diese zwischenmolekularen Kräfte durch Teilchenpotentiale definiert, welche sich in den beiden Phasen unterscheiden. Die Lage der freien Oberfläche ergibt sich hier also automatisch und muß nicht, wie bei den finiten xxx-Verfahren, aufwendig modelliert werden. Zur Simulation von dreidimensionalen Strömungsproblemen sind diese Verfahren auf Grund des erheblichen Rechenaufwands jedoch ungeeignet. Dieser Rechenaufwand entsteht bei der Berechnung der Ortskoordinaten der frei beweglichen Teilchen, so daß selbst auf Großrechnern nur wenige tausend Teilchen gleichzeitig beobachtet werden können (siehe z.B. Greenspan [54]).

Mitte der achtziger Jahre entstanden vollkommen neuartige Verfahren zur Simulation von Zweiphasenströmungen. Auch bei diesen Verfahren werden die Fluide durch Teilchen approximiert; nur können sich diese nicht frei im Raum bewegen, sondern Ort und Geschwindigkeit der Teilchen sind durch zu Grunde liegende regelmäßige Gitter diskretisiert. Die Dynamik der Teilchen wird hier im wesentlichen durch freie Fortbewegung und Teilchenstöße beschrieben.

Diese sogenannten Gittergase basieren auf der Grundidee von zellulären Automaten, welche erstmals von J. von Neumann entwickelt wurden ([55]). Das erste Gittergas zur Simulation einer zweidimensionalen Einphasenströmung wurde von Frisch, Hasslacher und Pomeau 1986 entwickelt [49] und war auf einem hexagonalen Gitter beheimatet. Auf dieses sogenannte FHP-Gittergas wird in dieser Arbeit noch genauer eingegangen. Es entstanden dann auch sehr bald Gittergase für dreidimensionale, einphasige Strömungen, wobei sich aber herausstellte, daß ein vierdimensionales Gitter (FCHC-Gitter) verwen-

det werden muß [56]. Die erste Simulation einer **Zweiphasenströmung** in zwei räumlichen Dimensionen mittels Gittergasen gelang dann Rothmann und Keller 1986 [57]. Die großen Probleme bei diesen Arbeiten lagen in der fehlenden Galileiinvarianz und dem geschwindigkeitsabhängigen Druck dieser Modelle. Auch auf diese Probleme wird im Laufe der vorliegenden Arbeit noch genauer eingegangen.

Die Farbspaltung soll hier mittels eines sogenannten Gitter-Boltzmann Verfahrens simuliert werden. Diese Verfahren entstanden aus den Gittergasen, indem anstelle der diskreten Teilchen deren kontinuierliche Verteilungsfunktion betrachtet wurde. Bei den Gittergasen wurden diese Größen indirekt durch Mittelung über viele Gitterpunkte berechnet. Mittels dieser neuen Verfahren konnten die Nachteile der Gittergase schrittweise beseitigt werden. Die Gitter-Boltzmann Verfahren zeichnen sich, im Gegensatz zu den finiten xxx-Verfahren und den molekulardynamischen Verfahren, durch äußerst effiziente Berechnungsalgorithmen aus, welche zusätzlich gut parallelisierbar sind. Dem gegenüber steht allerdings die Schwierigkeit, möglichst einfache Berechnungsvorschriften für die Teilchendynamik zu formulieren, welche makroskopisch auf die Navier-Stokesschen Gleichungen und die gewünschten Stoffgrößen führen.

Schelkle gelang es 1997 [1] mittels eines Gitter-Boltzmann Verfahrens mit Krookschem Stoßterm, Tropfenkollisionen zu simulieren. Er verglich seine Simulationsergebnisse mit Experimenten und stellte hervorragende Übereinstimmung fest (siehe Abbildung 6.1).



Abbildung 6.1: Tropfenkollision: unten Experiment, oben Simulation

Da sich die überkritische Tropfenkollision mit entstehenden Satellitentropfen, genau wie die Farbspaltung, durch komplexe Verformungen der freien Oberfläche auszeichnet, scheint dieses Grundmodell also geeignet, um auch die dreidimensionale Zweiphasenströmung der Farbspaltung realitätsnah zu simulieren.

Kapitel 7

2-dimensionale Gittergase

Literatur: Der Inhalt dieses Kapitels orientiert sich am Lehrbuch von Rothman und Zaleski [60]. Alle Abbildungen und Modellierungsansätze des vorliegenden Kapitels sind diesem Buch, welches selber eine Vielzahl an Literaturhinweisen enthält, entnommen.

Dieses Kapitel ist als reine Einführung in die Theorie der in Kapitel 8 behandelten Gitter-Boltzmann Modelle zu verstehen. Da diese eine Weiterentwicklung der Gittergase darstellen, kann das vorliegende Kapitel vom Leser mit bereits vorhandenen, tiefgehenden Kenntnissen in der Gitter-Boltzmann Simulation übersprungen werden. Zum Verständnis der in Kapitel 8 beschriebenen Probleme ist eine Untersuchung der weniger komplexen Gittergase jedoch sehr hilfreich. Eine Durchsicht des Paragraphen 7.3, welcher von Tensoren und deren Eigenschaften handelt, empfiehlt sich auch für den in der Theorie der Gittergase versierten Leser, da auf diesen Paragraphen in Kapitel 8 Bezug genommen wird.

Bemerkung 7.1

Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß in dieser Arbeit nur 2-dimensionale Gittergase behandelt werden. Möglichkeiten der 3-dimensionalen Simulation werden später im Kapitel 8 dieser Arbeit, an Hand von Gitter-Boltzmann Modellen erläutert. Selbstverständlich könnten auf den dort benutzten 3-dimensionalen Gittern ebenfalls Gittergassimulationen stattfinden.

Des weiteren sollte beachtet werden, daß in diesem Paragraphen die Teilchenmasse, der Abstand zwischen zwei Knoten und der diskrete Zeitschritt auf eins normiert sind. Physikalische Größen haben daher als Einheiten sogenannte „lattice-units“.

Im Kapitel 8 wird dagegen die Teilchenmasse als m , der Abstand zwischen zwei Knoten als h und der diskrete Zeitschritt als δt bezeichnet, wodurch

sich für alle Größen die üblichen physikalischen Einheiten ergeben.

7.1 Das FHP-Gittergas

In diesem Abschnitt wird ein mikroskopisches Flüssigkeitsmodell vorgestellt, welches wesentlich einfacheren Gesetzen gehorcht als ein reales Fluid. Tatsächlich hat dieses Modell so gut wie nichts mit realen Flüssigkeiten gemeinsam, bis auf die entscheidende Ausnahme, daß es auf einer makroskopischen Skala dasselbe Fließverhalten wie reale Flüssigkeiten zeigt. Dieses Modell stellt einen Versuch dar, die hydrodynamischen Bewegungsgleichungen auf ihren logischen Ursprung zu reduzieren.

Geschichtlich geht dieses Modell auf Uriel Frisch, Brosl Hasslacher und Yves Pomeau zurück [49]. (Die Anfangsbuchstaben der Nachnamen geben dem Modell seinen Namen.) Sie zeigten 1986, daß die molekulare Bewegung in Flüssigkeiten, ein sehr komplizierter Prozess mit einer Größenordnung von 10^{24} Freiheitsgraden, nicht annähernd so detailliert und komplex sein muß, um auf einer makroskopischen Skala reales Fließverhalten zu simulieren. Statt dessen reicht es aus, ein Modell zu konstruieren, welches aus fiktiven Teilchen der gleichen Masse und dem gleichen Geschwindigkeitsbetrag besteht. Die Anzahl der möglichen Geschwindigkeitsvektoren, die diese fiktiven Teilchen haben können, ist ebenfalls endlich. Frisch, Hasslacher und Pomeau zeigten, daß 6 Geschwindigkeitsvektoren ausreichen, um ein 2-dimensionales isotropes Fluid zu simulieren.

Die Teilchen dieses “Fluids“ bewegen sich auf einem hexagonalen Gitter (siehe Abbildung 7.1). Die Bewegungsgesetze der Teilchen sind sehr leicht zu beschreiben. Das Gitter ist anfangs so belegt, daß sich nicht mehr als ein Teilchen an einem festen Gitterknoten in eine bestimmte Richtung bewegt (Abbildung 7.1(a)). Jeder Knoten dieses hexagonalen Gitters kann also höchstens mit 6 Teilchen belegt sein (eines in jede der 6 Richtungen). In einem diskreten Zeitschritt gelangen die Teilchen gemäß ihrer Geschwindigkeitsrichtung zu einem der 6 Nachbarknoten. Dort können sie mit anderen Teilchen kollidieren. Einige Kollisionen haben zur Folge, daß sich die Bewegungsrichtung der Teilchen ändert (Abbildung 7.1(c)), während andere die Teilchenrichtung nicht beeinflussen (Abbildung 7.1(b)), so daß sie sich gemäß ihrer vorherigen Richtung zum nächsten Gitterpunkt weiterbewegen. In beiden Fällen dürfen die Kollisionen jedoch weder die Anzahl der Teilchen noch die Summe ihrer Geschwindigkeitsvektoren verändern. Mit anderen Worten, Masse und Impuls bleiben erhalten.

Tatsächlich lassen sich Gleichungen aufstellen, welche die Entwicklung dieser beiden Größen, Masse und Impuls, im Modell beschreiben. Auf einer

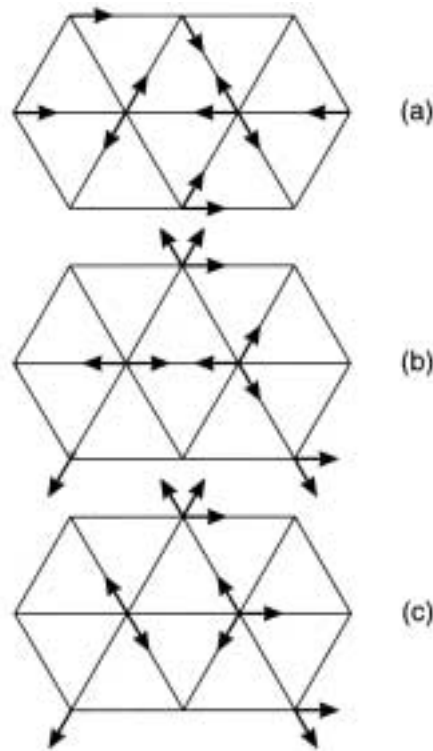


Abbildung 7.1: Beispiel für einen Zeitschritt im FHP-Modell: Jeder Pfeil symbolisiert ein Teilchen und gibt dessen Bewegungsrichtung an. (a) beschreibt die Ausgangskonfiguration. (b) beschreibt den Zustand nach einem Zeitschritt ohne Kollisionen. (c) beschreibt die Zustandsänderung durch Teilchenkollisionen, wobei Masse und Impuls erhalten bleiben.

mikroskopischen Skala sind diese Gleichungen nichts anderes als eine mathematische Formulierung der Kollisionsgesetze.

Überraschenderweise läßt sich allerdings zeigen, daß sich auf makroskopischer Skala Gleichungen ergeben, welche asymptotisch äquivalent sind zu:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \vec{u} \quad (7.1)$$

und

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (7.2)$$

Dieses sind genau die Navier-Stokes Gleichung und die Kontinuitätsgleichung der inkompressiblen Hydrodynamik (siehe Kapitel 3). Die Geschwindigkeit \vec{u} und der Druck p werden hier über eine gemittelte Teilchenbewegung definiert.

ρ stellt eine gemittelte Teilchendichte dar, und die kinematische Viskosität ν hängt von den expliziten Kollisionsgesetzen ab.

Man könnte nun naiv argumentieren, daß die Navier-Stokes Gleichung und die Kontinuitätsgleichung, welche Impuls- und Massenerhaltung in der Hydrodynamik beschreiben, keine bemerkenswerten makroskopischen Folgerungen aus dem Gittergasmodell darstellen, da sich Massen- und Impulserhaltung auf mikroskopischer Skala auf die makroskopische Skala fortsetzen müssen. Dabei vergißt man allerdings den wichtigen Aspekt, daß man auf makroskopischer Skala nicht lediglich hydrodynamische Gleichungen erhält, sondern diese zusätzlich isotrop sind. Dies bedeutet, daß obwohl sich ein einzelnes Teilchen nur in 6 diskreten Richtungen ausbreiten kann, das makroskopische „Fluid“ keine bevorzugte Richtung hat, genau wie eine reale Flüssigkeit.

Diese Isotropieeigenschaft ist eine herausragende Eigenschaft des FHP-Gittergases, die bei früheren Gittergasen, welche auf Quadratgittern beheimatet waren, nicht gewährleistet war.

7.1.1 Mikrodynamische Gleichungen

Die Teilchendynamik des FHP-Gittergases (und jeden anderen Gittergases) kann durch folgende Gleichung dargestellt werden:

$$n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = n_i(\vec{x}, t) + \Delta_i[\vec{n}(\vec{x}, t)] \quad (7.3)$$

Hierbei bezeichnet t einen bestimmten Zeitpunkt, $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_b)$ sind Boolesche Variablen, die die Anwesenheit ($n_i = 1$) bzw. die Abwesenheit ($n_i = 0$) von Teilchen beschreiben, welche sich von einem Gitterpunkt \vec{x} auf einen benachbarten Gitterknoten $\vec{x} + \vec{c}_i$ zubewegen. Für allgemeine Gittergase gilt $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_b)$, wobei b die Anzahl der Nachbarknoten eines Gitterpunktes angibt. In einem einfachen Quadratgitter wäre also $b = 4$. Die Teilchen bewegen sich mit gleichem Geschwindigkeitsbetrag in Richtung der

$$\vec{c}_i = \left(\cos\left(\frac{\pi i}{3}\right), \sin\left(\frac{\pi i}{3}\right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (7.4)$$

(Andere Gittergeometrien würden selbstverständlich andere \vec{c}_i implizieren.) Die Funktion Δ_i wird als Kollisionsoperator bezeichnet. Dieser beschreibt die Änderung der $n_i(\vec{x}, t)$, hervorgerufen durch Teilchenkollisionen, und hat demnach den Wertebereich $\{-1, 0, 1\}$. Der Kollisionsoperator hängt sowohl von der gewählten Gittergeometrie als auch von den expliziten Kollisionsgesetzen ab.

Zur Verdeutlichung betrachten wir beispielsweise einen Gitterknoten \vec{x} des

FHP-Gittergases, auf den 3 Teilchen zur Zeit t aus den Richtungen $\vec{c}_i, \vec{c}_{i+2}, \vec{c}_{i+4}$ zukommen. Nachdem diese Teilchen am Knoten \vec{x} kollidiert sind, bewegen sie sich zur Zeit $t + 1$ auf $\vec{x} + \vec{c}_{i+1}, \vec{x} + \vec{c}_{i+3}, \vec{x} + \vec{c}_{i+5}$ zu (Abbildung 7.2). Man

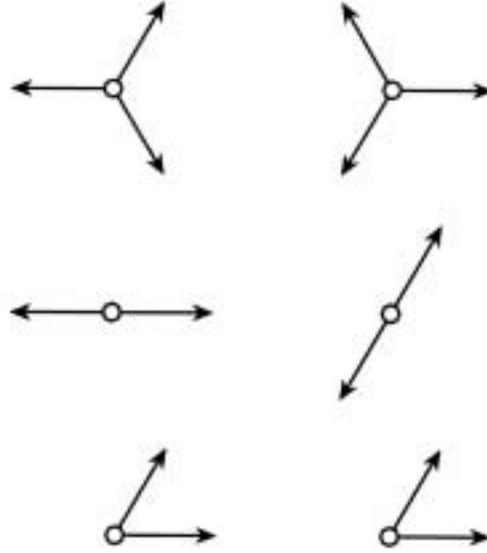


Abbildung 7.2: Darstellung der Kollisionsgesetze im FHP-1 Modell. Die linke Spalte beschreibt die Zustände an einem Knoten vor der Kollision, während die rechte Spalte die Zustandsänderung nach der Kollision darstellt. Die Zweiteilchenkollision mit verschwindendem Gesamtimpuls kann die Ausgangskonfiguration sowohl im - als auch gegen den Uhrzeigersinn ändern. Die Zweiteilchenkollision ohne verschwindenden Gesamtimpuls kann die Ausgangskonfiguration nicht ändern, da keine andere Konfiguration Massen- und Impulserhaltung gewährleistet.

beachte, daß eine solche Kollision Masse und Impuls erhält. Für diesen Fall der Dreiteilchenkollision ist der Kollisionsoperator gegeben durch:

$$\Delta_i^{(3)} = n_{i+1}n_{i+3}n_{i+5}\bar{n}_i\bar{n}_{i+2}\bar{n}_{i+4} - n_in_{i+2}n_{i+4}\bar{n}_{i+1}\bar{n}_{i+3}\bar{n}_{i+5} \quad (7.5)$$

Hierbei ist

$$\bar{n}_i = 1 - n_i, \quad (7.6)$$

und die Indizierung i ist gleichbedeutend mit $i \bmod 6$.

Kommen auf einen Gitterknoten \vec{x} zwei Teilchen zur Zeit t aus den Richtungen \vec{c}_i, \vec{c}_{i+3} zu, so könnten sie sich nach einer Kollision zur Zeit $t + 1$ auf

$\vec{x} + \vec{c}_{i+1}, \vec{x} + \vec{c}_{i+4}$ (Abbildung 7.2) oder auf $\vec{x} + \vec{c}_{i+2}, \vec{x} + \vec{c}_{i+5}$ zubewegen, ohne daß Massen- und Impulserhaltung verletzt würden. Für diesen Fall der Zweiteilchenkollision ist der Kollisionsoperator also gegeben durch:

$$\begin{aligned} \Delta_i^{(2)} = & \ a n_{i+1} n_{i+4} \bar{n}_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+3} + \bar{a} n_{i+2} n_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+4} \\ & - n_i n_{i+3} \bar{n}_{i+4} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+5} \end{aligned} \quad (7.7)$$

Hierbei ist $a(\vec{x}, t)$ eine Boolesche Variable, die angibt, ob die Kollision die Ausgangskonfiguration im - oder gegen den Uhrzeigersinn ändert. Für das einfachste hexagonale Gittergas, das sogenannte FHP-1 Modell, lautet der gesamte Kollisionsoperator also:

$$\Delta_i = \Delta_i^{(2)} + \Delta_i^{(3)} \quad (7.8)$$

Selbstverständlich sind auch kompliziertere Kollisionsoperatoren denkbar, beispielsweise solche, die Vierteilchenkollisionen berücksichtigen. Man beachte allerdings, daß 1,5,6-Teilchenkollisionen die Ausgangskonfiguration auf Grund der geforderten Massen- und Impulserhaltung nicht ändern können und somit ein $\Delta^{(1)}, \Delta^{(5)}, \Delta^{(6)}$ nicht zu definieren ist.

Welchen Kollisionsoperator man auch wählt, erfüllt bleiben müssen die Massenerhaltung:

$$\sum_i \Delta_i(\vec{n}) = 0 \quad (7.9)$$

und die Impulserhaltung:

$$\sum_i \vec{c}_i \Delta_i(\vec{n}) = 0 \quad (7.10)$$

Diese Gleichungen sind äquivalent zu:

$$\sum_i n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i n_i(\vec{x}, t) \quad (7.11)$$

und:

$$\sum_i \vec{c}_i n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i \vec{c}_i n_i(\vec{x}, t) \quad (7.12)$$

Diese Gleichungen beschreiben die Entwicklung von Masse und Impuls des Booleschen Feldes und können als mikroskopische Massen- und Impulserhaltung des (allgemeinen) Gittergases interpretiert werden.

7.1.2 Makrodynamische Gleichungen

Der folgende Abschnitt behandelt die makrodynamischen Gleichungen beliebiger Gittergasmodelle, d.h. es gibt keine Einschränkungen bzgl. Dimension, Gittergeometrie oder Kollisionsgesetzen.

Bei der Herleitung makrodynamischer Gleichungen des Gittergases geht man in einer zur klassischen Hydrodynamik analogen Weise vor. Auch bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung bzw. der Navier-Stokes Gleichung betrachtet man nicht die Wechselwirkung einzelner Moleküle, sondern man geht davon aus, daß sich ein Fluid in einer bestimmten makroskopischen Größenskala als ein Kontinuum beschreiben läßt. Diese Annahme ermöglicht es, Erhaltungsgleichungen in Form von Differentialgleichungen aufzustellen, wie es in Kapitel 3 dieser Arbeit geschehen ist.

Betrachtet man also einen makroskopischen Bereich A von mehreren Gitterpunkten des zu Grunde liegenden Gitters, welcher von der Berandung $\partial A = S$ eingeschlossen wird (Abbildung 7.3 zeigt dies am Beispiel des hexagonalen Gitters), so ergibt sich ein mikroskopisches Analogon zur Gleichung 3.6 durch:

$$\sum_{x \in A} \sum_i [n_i(\vec{x}, t+1) - n_i(\vec{x}, t)] = -(\text{Massenfluss durch } S) \quad (7.13)$$

Gesucht wird nun eine Gleichung für den Massenfluss, die anstatt der mikroskopischen Variablen n_i , makroskopische Variablen besitzt.

Diese makroskopischen Variablen werden mit N_i bzw. $\langle n_i \rangle$ bezeichnet und entstehen aus den Booleschen Größen n_i durch geeignete Durchschnittsbildung über mehrere Gitterknoten.

Auf die Umskalierung von der mikroskopischen - zur makroskopischen Skala soll an dieser Stelle nicht genauer eingegangen werden. Es sei lediglich bemerkt, daß die makroskopische Längeneinheit groß gegen die Gitterweite und die makroskopische Zeiteinheit groß gegen einen diskreten Zeitschritt sein müssen.

Übersetzt man nun Gleichung 7.13 in die makroskopischen Einheiten, so sieht man, daß die linke Seite der zeitlichen Änderung der Masse im Bereich A und die rechte Seite der Divergenz des Massenflusses entspricht:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i N_i = -\nabla \cdot \sum_i \vec{c}_i N_i \quad (7.14)$$

Mit den an früherer Stelle eingeführten Notationen ($\partial_x := \partial/\partial x$ und der Einsteinschen Summenkonvention) ist dies äquivalent zu:

$$\partial_t \sum_i N_i = -\partial_\alpha \sum_i c_{i\alpha} N_i \quad (7.15)$$

Eine analoge Argumentation liefert nun auch eine entsprechende Gleichung für die Impulserhaltung. Aus

$$\begin{aligned} & \sum_{x \in A} \sum_i [n_i(\vec{x}, t+1) - n_i(\vec{x}, t)] c_{i\alpha} \\ &= -(\text{Fluss der } \alpha \text{ - Komponente des Impulses durch } S) \end{aligned} \quad (7.16)$$

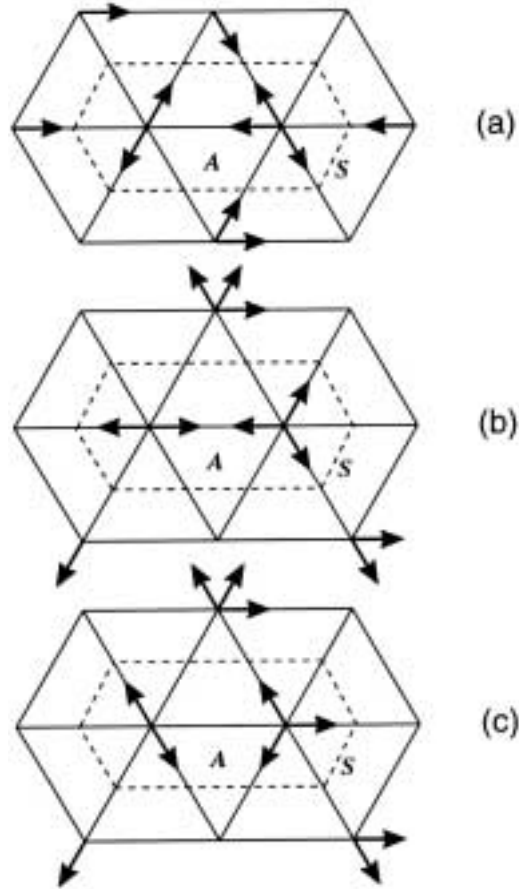


Abbildung 7.3: Abbildung 7.1 mit einem makroskopischen Bereich A, welcher von S berandet ist.

folgt für die makroskopischen Einheiten:

$$\partial_t \sum_i N_i c_{i\alpha} = -\partial_\beta \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i \quad (7.17)$$

Um die Gleichungen 7.15 und 7.17 physikalisch zu interpretieren, werden nun noch Dichte und Geschwindigkeit des Gittergases definiert:

$$\rho = \sum_i N_i \quad (7.18)$$

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i \vec{c}_i N_i \quad (7.19)$$

Setzt man dies in Gleichung 7.15 und 7.17 ein, so erhält man genau die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho = -\partial_\beta (\rho u_\beta) \quad (7.20)$$

und eine Gleichung für die makroskopische Impulserhaltung,

$$\partial_t(\rho u_\alpha) = -\partial_\beta T_{\alpha\beta}^{(0)} \quad (7.21)$$

in welcher das Analogon des Gittergases zum nicht viskosen Spannungstensor (bzw. Impulsstromtensor) definiert ist durch:

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i \quad (7.22)$$

Man erkennt nun, daß Gleichung 7.21 formal identisch mit der klassischen Impulserhaltungsgleichung 3.18 ist, sich die Spannungstensoren aus Gleichung 7.22 und Gleichung 3.19 allerdings unterscheiden. Um den Spannungstensor des Gittergases mit dem Spannungstensor der klassischen Hydrodynamik vergleichen zu können, muß man die makroskopischen Variablen N_i noch als Funktionen der Dichte ρ und der Geschwindigkeit \vec{u} ausdrücken. Dieser funktionale Zusammenhang $N_i(\rho, \vec{u})$ wird selbstverständlich von der Dimension und der Gittersymmetrie abhängen.

Im nächsten Abschnitt soll nun dieser funktionale Zusammenhang für das geometrisch einfachste Gittergas, das sogenannte HPP-Gas (**H**ardy, de **P**azzis, **P**omeau [58], [59]), einmal explizit hergeleitet werden.

7.2 Das HPP-Gittergas

Ziel dieses Abschnittes ist die explizite Herleitung der Euler-Gleichung für das geometrisch einfachste 2-dimensionale Gittergas, das sogenannte HPP-Gas. Hier ist das zu Grunde liegende Gitter ein Quadratgitter, und es gibt nur eine mögliche Kollision, welche eine Ausgangskonfiguration unter Erhaltung von Masse und Impuls verändern kann:

Kommen auf einen Gitterknoten \vec{x} zur Zeit t zwei Teilchen aus den Richtungen \vec{c}_i, \vec{c}_{i+2} zu, so können sie sich nach einer Kollision zur Zeit $t + 1$ auf $\vec{x} + \vec{c}_{i+1}, \vec{x} + \vec{c}_{i+3}$ zubewegen, ohne daß Massen- und Impulserhaltung verletzt würden (Abbildung 7.4). Hier gilt:

$$\vec{c}_i = \left(\cos\left(\frac{2\pi i}{4}\right), \sin\left(\frac{2\pi i}{4}\right) \right) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (7.23)$$

Die mikrodynamische Gleichung, die dieses Modell beschreibt, ist also gegeben durch:

$$n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = n_i(\vec{x}, t) + \Delta_i[\vec{n}(\vec{x}, t)] \quad (7.24)$$

Hierbei ist der Kollisionsoperator folgendermaßen definiert:

$$\Delta_i(\vec{n}) = \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} n_{i+1} n_{i+3} - n_i n_{i+2} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \quad (7.25)$$

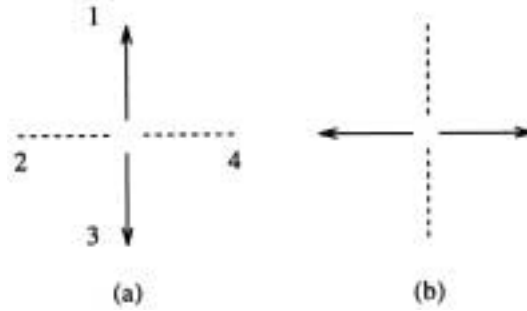


Abbildung 7.4: Der Kollisionsoperator des HPP-Modells. Im Gleichgewicht wechseln gleich viele Zustände von (a) nach (b) wie umgekehrt.

Eine Durchschnittsbildung dieser Gleichung ergibt:

$$\langle \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} n_{i+1} n_{i+3} \rangle = \langle n_i n_{i+2} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \rangle \quad (7.26)$$

Eine wiederholte Anwendung des Kollisionsgesetzes 7.24 bewirkt, daß sich die makroskopischen Variablen $\langle n_i \rangle$ sehr schnell einer Gleichgewichtsverteilung annähern werden und zwar unabhängig von gewählten Anfangsbedingungen. Dies bedeutet, daß bereits nach wenigen Zeitschritten ähnlich viele Wechsel vom Zustand $(1,0,1,0)$ zum Zustand $(0,1,0,1)$ stattfinden werden wie umgekehrt.

Im Gleichgewicht gilt Gleichung 7.26 dann exakt.

Wenn man nun weiterhin annimmt, daß die n_i unkorreliert sind, so folgt, daß der Durchschnitt obiger Produkte gleich dem Produkt der Durchschnitte ist:

$$\bar{N}_i \bar{N}_{i+2} N_{i+1} N_{i+3} = N_i N_{i+2} \bar{N}_{i+1} \bar{N}_{i+3} \quad (7.27)$$

Hier ist wieder $N_i = \langle n_i \rangle$ die makroskopische Teilchendichte. Zusammen mit den Gleichungen:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i N_i \\ \vec{u} &= \frac{1}{\rho} \sum_i \vec{c}_i N_i \end{aligned} \quad (7.28)$$

hat man also 4 Gleichungen für die 4 unbekannt makroskopischen Teilchendichten $N_i(\rho, \vec{u})$. Eine analytische Lösung dieses nicht linearen Gleichungssystems existiert allerdings nicht.

Man sollte bei diesem Ansatz noch beachten, daß man folgende Annahme getroffen hat: Die makroskopischen Teilchendichten N_i sind im Gleichgewichtszustand lediglich von den Systeminvarianten Masse und Impuls, nicht aber

vom Ort \vec{x} abhängig. Mit anderen Worten: Der Gleichgewichtszustand soll homogen sein.

Die Berechnung der Gleichgewichtsverteilung $N_i(\rho, \vec{u})$ erfolgt nun unter der Annahme kleiner Geschwindigkeiten $u = |\vec{u}|$ mit Hilfe eines Potenzreihenansatzes:

$$N_i = A_i + \vec{B}_i \vec{u} + \vec{u}^T \overleftrightarrow{D}_i \vec{u} + O(u^3) \quad (7.29)$$

bzw. in Komponentenschreibweise:

$$N_i = A_i + B_{i\alpha} u_\alpha + D_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta + O(u^3) \quad (7.30)$$

Insgesamt beinhalten diese 4 Gleichungen noch 28 Unbekannte. Aus Symmetriegründen läßt sich diese Zahl aber auf 3 Unbekannte reduzieren:

Betrachtet man den Fall $\vec{u} = 0$ und beachtet, daß für diesen Fall keine Gitterrichtung bevorzugt ist, so ergibt sich aus der Definition für ρ sofort:

$$A_i = \frac{\rho}{4} \quad i \in \{1, 2, 3, 4\} \quad (7.31)$$

Es verbleiben also noch 24 Unbekannte. Diese reduzieren sich durch folgende Symmetriebetrachtungen: Die Vektoren \vec{B}_i und die Tensoren \overleftrightarrow{D}_i müssen invariant gegenüber allen Isometrien (Isometrien sind orthogonale Abbildungen des Raumes, also Transformationen, welche invariant gegenüber Längeneinheiten sind.) sein, welche das Gitter und die i -Richtung beibehalten: Für $i = 1$ muß also gelten:

$$\vec{B}_1 = \overleftrightarrow{E}_1 \vec{B}_1 \quad (7.32)$$

$$\overleftrightarrow{D}_1 = \overleftrightarrow{E}_1^T \overleftrightarrow{D}_1 \overleftrightarrow{E}_1 \quad (7.33)$$

Hierbei beschreibt \overleftrightarrow{E}_1 die Spiegelung an der \vec{c}_1 -Achse, also der y -Achse:

$$\overleftrightarrow{E}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.34)$$

Setzt man dies in obige Gleichungen ein, so folgt:

$$\vec{B}_1 = b_1 \vec{c}_1 \quad (7.35)$$

$$\overleftrightarrow{D}_1 = \begin{pmatrix} D_{1xx} & 0 \\ 0 & D_{1yy} \end{pmatrix} \quad (7.36)$$

Analoge Ergebnisse gelten für $i = 2, 3, 4$:

$$\vec{B}_i = b_i \vec{c}_i \quad (7.37)$$

$$\overleftrightarrow{D}_i = \begin{pmatrix} D_{ixx} & 0 \\ 0 & D_{iyy} \end{pmatrix} \quad (7.38)$$

Da das Gitter ebenfalls invariant unter einer $\frac{\pi}{2}$ -Rotation ist, gilt weiterhin:

$$\vec{B}_2 = \overleftrightarrow{E}_2 \vec{B}_1 \quad (7.39)$$

$$\overleftrightarrow{D}_2 = \overleftrightarrow{E}_2 \overleftrightarrow{D}_1 \overleftrightarrow{E}_2 \quad (7.40)$$

Hierbei beschreibt \overleftrightarrow{E}_2 die $\frac{\pi}{2}$ -Rotation:

$$\overleftrightarrow{E}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.41)$$

Setzt man dies in obige Gleichungen ein, so folgt:

$$b_1 = b_2 \quad (7.42)$$

$$D_{1xx} = D_{2yy}, \quad D_{1yy} = D_{2xx} \quad (7.43)$$

Die Invarianz des Gitters unter einer π -Rotation liefert schließlich noch:

$$D_{1xx} = D_{3xx}, \quad D_{1yy} = D_{3yy}, \quad D_{2xx} = D_{4xx}, \quad D_{2yy} = D_{4yy} \quad (7.44)$$

Allgemein hat man also:

$$\vec{B}_i = B \vec{c}_i \quad (7.45)$$

$$\overleftrightarrow{D}_i = \overleftrightarrow{D}_{i+2} \quad (7.46)$$

$$\overleftrightarrow{D}_i = \begin{pmatrix} D_{ixx} & 0 \\ 0 & D_{iyy} \end{pmatrix} \quad D_{1xx} = D_{2yy}, \quad D_{1yy} = D_{2xx} \quad (7.47)$$

und es verbleiben noch insgesamt 3 Unbekannte.

Die obigen Bedingungen an die \overleftrightarrow{D}_i sind sowohl für $D_{i\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ als auch für $D_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha}c_{i\beta}$ erfüllt. Da diese beiden Lösungen linear unabhängig sind, ergibt sich als allgemeine Lösung für die \overleftrightarrow{D}_i :

$$D_{i\alpha\beta} = \lambda_1 c_{i\alpha}c_{i\beta} + \lambda_2 \delta_{\alpha\beta} \quad (7.48)$$

Hierbei sind λ_1, λ_2 noch unbekannte Konstanten. Setzt man diese Ergebnisse in die Potenzreihenentwicklung 7.29 ein, so erhält man:

$$N_i = \frac{\rho}{4} + B c_{i\alpha} u_\alpha + (\lambda_1 c_{i\alpha}c_{i\beta} + \lambda_2 \delta_{\alpha\beta}) u_\alpha u_\beta + O(u^3) \quad (7.49)$$

Nach Multiplikation dieser Gleichung mit $c_{i\alpha}$ und Aufsummierung über alle i liefert die Impulsgleichung 7.28 unter Vernachlässigung aller Terme der Ordnung $O(u^3)$:

$$\rho u_\alpha = \frac{\rho}{4} \sum_i c_{i\alpha} + B \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\beta + \lambda_1 \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} u_\beta u_\gamma + \lambda_2 \sum_i c_{i\alpha} \delta_{\beta\gamma} u_\beta u_\gamma \quad (7.50)$$

Diese Gleichung vereinfacht sich dadurch, daß der erste, dritte und vierte Term der rechten Seite dieser Gleichung auf Grund folgender Gittersymmetrie verschwinden:

$$\forall i \in \{1, 2, 3, 4\} \exists j \in \{1, 2, 3, 4\} : \vec{c}_i = -\vec{c}_j \quad (7.51)$$

Somit verbleibt:

$$\rho u_\alpha = B \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\beta \quad (7.52)$$

Da für das Quadratgitter $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = 2\delta_{\alpha\beta}$ gilt, folgt sofort, daß $B = \frac{\rho}{2}$ gelten muß.

Aus der Massengleichung 7.28 folgt nach Aufsummierung von 7.49 über alle i , daß:

$$\rho = \rho + \sum_i (\lambda_1 c_{i\alpha} c_{i\beta} + \lambda_2 \delta_{\alpha\beta}) u_\alpha u_\beta \quad (7.53)$$

Hieraus ergibt sich mit $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = 2\delta_{\alpha\beta}$, daß $\lambda_2 = -\lambda_1/2$. Die einzige verbleibende Unbekannte ist somit λ_1 , welche sich nach Einsetzen aller anderen Unbekannten in Gleichung 7.49 und Ausnutzung von 7.27 nach aufwendiger Rechnung und Vernachlässigung aller Terme der Ordnung $O(u^3)$ berechnen läßt:

$$\lambda_1 = \frac{\rho(1 - \frac{\rho}{2})}{2 - \frac{\rho}{2}} \quad (7.54)$$

Letztlich erhält man folgenden funktionalen Zusammenhang:

$$N_i = \frac{\rho}{4} + \frac{\rho}{2} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{\rho(1 - \frac{\rho}{2})}{2 - \frac{\rho}{2}} (c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}) u_\alpha u_\beta + O(u^3) \quad (7.55)$$

Mit der Definition von $f :=$ „Dichte pro Nachbarknoten“ (hier: $f = \rho/4$) ergibt sich:

$$N_i = f \left[1 + 2c_{i\alpha} u_\alpha + 2 \frac{1 - 2f}{1 - f} (c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}) u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3) \quad (7.56)$$

Nun ist man in der Lage, für das HPP-Gas den Spannungstensor 7.22 und die Euler-Gleichung 7.21 explizit anzugeben.

Hierzu sollte man allerdings beachten, daß obige Rechnung für den Gleichgewichtszustand des Gittergases $N_i^{eq}(\rho, \vec{u})$ erfolgte. Geht man nun von einer nicht elementaren Strömung des Gittergases aus (erlaubt sind nun auch Fluidbewegungen außer einfachen Translationen), ist die Annahme, daß sich eine Gleichgewichtsverteilung einstellen wird, nicht mehr gesichert gültig. Trotzdem kann man davon ausgehen, daß die Abweichung vom Gleichgewicht klein bleibt, wenn man voraussetzt, daß sich Dichte und Geschwindigkeit nur langsam in Ort und Zeit verändern, d.h. daß z.B. $\vec{u}(x, t) \approx \vec{u}(x + \vec{c}_i, t)$ gültig ist. (Diese Annahme ist sicherlich berechtigt, falls die makroskopische Skala geeignet gewählt ist.) Mit anderen Worten bleibt die oben errechnete Gleichgewichtsverteilung auch im Fall eines strömenden Gittergases eine gute Approximation für die makroskopische Teilchendichte.

Setzt man nun 7.56 in 7.22 ein, so ergibt sich unter Berücksichtigung von $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = 2\delta_{\alpha\beta}$ der Spannungstensor bis zur zweiten Ordnung in u :

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(0)} &= \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i \\ &= 2f\delta_{\alpha\beta} + 2f \frac{1-2f}{1-f} \left(\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right) u_\gamma u_\delta \\ &= 2f\delta_{\alpha\beta} + \mu_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\gamma u_\delta \end{aligned} \quad (7.57)$$

Durch obige Gleichung wird der gitterabhängige Tensor 4. Stufe $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ definiert. Der darin enthaltene Tensor $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta}$ kann für das Quadratgitter leicht berechnet werden:

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = 2 \quad (7.58)$$

für $\alpha = \beta = \gamma = \delta$, und

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = 0 \quad (7.59)$$

in allen anderen Fällen. Man erhält also:

$$\mu_{\alpha\beta\gamma\delta} = 2f \frac{1-2f}{1-f} (2\delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}) \quad (7.60)$$

Dies ist, wie weiter unten erläutert wird, ein nicht isotroper Tensor 4. Stufe. Einsetzen in Gleichung 7.57 liefert:

$$T_{xx} = 2f \left[1 + \frac{1-2f}{1-f} (2u_x^2 - u^2) \right] \quad (7.61)$$

$$T_{xy} = T_{yx} = 0 \quad (7.62)$$

$$T_{yy} = 2f \left[1 + \frac{1-2f}{1-f} (2u_y^2 - u^2) \right] \quad (7.63)$$

Hiebei ist $u = |\vec{u}|$. Durch Einsetzen in 7.21 ergibt sich:

$$\partial_t(\rho u_x) + \partial_x(T_{xx}) = 0 \quad (7.64)$$

$$\partial_t(\rho u_y) + \partial_x(T_{yy}) = 0 \quad (7.65)$$

Es ist wichtig zu erkennen, daß diese Gleichungen im Gegensatz zur klassischen Euler-Gleichung nicht isotrop sind, d.h sie sind nicht invariant unter allen Isometrien der Ebene.

Im folgenden Abschnitt sollen nun die theoretischen Grundlagen für diese, bei Gittergasmodellen und Gitter-Boltzmann Simulationen sehr wichtigen Isotropieeigenschaften, zur Verfügung gestellt werden. Gleichzeitig erfolgt eine kurze Einführung in die Tensoralgebra, sowie der Beweis, daß die Wahl des hexagonalen Gitters isotrope Tensoren 4. Stufe garantiert.

7.3 Tensoren

Vorausgehend sei bemerkt, daß auch in diesem Paragraphen von der Einsteinschen Summenkovention Gebrauch gemacht wird.

Definition 7.1

Sei \vec{R} eine Isometrie des D -dimensionalen Raumes. Ein Objekt mit k Indizes $T_{\alpha_1 \dots \alpha_k}$ heißt Tensor k -ter Stufe (bzw. Tensor vom Rang k), wenn es sich unter \vec{R} wie folgt transformiert:

$$T'_{\alpha_1 \dots \alpha_k} = T_{\beta_1 \dots \beta_k} R_{\alpha_1 \beta_1} \dots R_{\alpha_k \beta_k} \quad \alpha_i, \beta_i \in \{1, \dots, D\} \quad (7.66)$$

Definition 7.2

Ein Tensor \vec{T} heißt invariant unter einer Isometrie \vec{R} , falls in 7.66: $\vec{T}' = \vec{T}$ gilt.

Definition 7.3

Ein Tensor \vec{T} heißt isotrop, wenn er invariant unter allen Isometrien ist.

Die physikalische Bedeutung isotroper Tensoren ist folgende: Es sei vorausgesetzt, daß ein Tensor die physikalischen Eigenschaften eines Mediums angibt (z.B. Elastizität oder Viskosität). Erfolgt nun eine Koordinatentransformation (z.B. eine Drehung des Koordinatensystems), so muß der Tensor diese Eigenschaften nach wie vor angeben. Für ein isotropes Medium müssen diese Eigenschaften aber unverändert bleiben, d.h. daß auch der Tensor isotrop sein muß.

Definition 7.4

Ein Tensor \vec{T} heißt invariant unter Permutation der Indizes, wenn für jede Permutation P der Indizes gilt:

$$T_{\alpha_1 \dots \alpha_k} = T_{P(\alpha_1 \dots \alpha_k)} \quad (7.67)$$

Bemerkung 7.2

Diese Eigenschaft der Invarianz unter Permutationen ist für alle in dieser Arbeit auftauchenden Tensoren erfüllt.

Satz 7.1

1. Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 0 (ein Skalar) ist immer isotrop.
2. Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 1 (ein Vektor) ist dann, und nur dann isotrop, wenn es der Nullvektor ist.
3. Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 2 (eine Matrix) ist dann, und nur dann isotrop, wenn er proportional zur Einheitsmatrix ist:

$$T_{\alpha\beta} = \lambda\delta_{\alpha\beta} \quad (7.68)$$

4. Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 3 ist dann, und nur dann isotrop, wenn es der Nulltensor ist.
5. Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 4 ist dann, und nur dann isotrop, wenn gilt:

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = A\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + B\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + C\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad (7.69)$$

Beweis: Daß obige Tensoren isotrop sind, beweist man durch Einsetzen in Gleichung 7.66.

Die Tatsache, daß alle isotropen Tensoren obige Gestalt haben, beweist man, indem man allgemeine Tensoren (aus Invarianzgründen gegenüber verschiedenen Isometrien) so weit einschränkt, bis man obige Tensoren erhält. Eine genaue Ausführung dieses leichten, aber relativ mühevollen Beweises findet sich bei Rothman und Zaleski [60].

Folgerung 7.1

Ein Tensor $\overset{\leftrightarrow}{T}$ vom Rang 4 ist dann und nur dann isotrop und invariant gegenüber Permutation der Indizes, wenn gilt:

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = A(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad (7.70)$$

7.3.1 Tensoren und Gitter

An mehreren Stellen in dieser Arbeit (z.B in den Gleichungen 7.57, 3.20) kommen allgemeine Zusammenhänge der Form:

$$T_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta\gamma\delta}u_{\gamma}u_{\delta} \quad (7.71)$$

bzw.

$$T_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta\gamma\delta} E_{\gamma\delta} \quad (7.72)$$

vor. In der klassischen Hydrodynamik isotroper Medien müssen diese Tensoren 4. Stufe $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ selbstverständlich isotrop sein, da die obigen allgemeinen funktionalen Zusammenhänge in jedem Inertialsystem gelten müssen. Im Zusammenhang mit Gittergasen sind diese Tensoren 4. Stufe allerdings lediglich invariant gegenüber denjenigen Isometrien, die das Gitter in sich selbst überführen, d.h. gegenüber den Gittersymmetrien. Im Folgenden werden Tensoren 2.- und 4. Stufe betrachtet, die invariant gegenüber den Gittersymmetrien des hexagonalen- bzw. quadratischen Gitters sind. Es wird gezeigt, daß die Invarianz gegenüber den Symmetrien des hexagonalen Gitters ausreicht, um Isotropie zu garantieren. (Diese Eigenschaft ist für Tensoren 4. Stufe, die invariant gegenüber den Symmetrien des Quadratgitters sind, nicht erfüllt.)

Satz 7.2

Alle Tensoren 2. Stufe, die invariant gegenüber den Gittersymmetrien des hexagonalen- bzw. des quadratischen Gitters sind, sind bereits isotrop.

Beweis: Beide obigen Gitter sind invariant gegenüber den beiden folgenden Transformationen:

1. Spiegelung an der x-Achse, gegeben durch die Matrix

$$\vec{E}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.73)$$

2. Spiegelung an der y-Achse, gegeben durch die Matrix

$$\vec{E}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.74)$$

Für einen Tensor \vec{T} , der invariant gegenüber diesen beiden Transformationen ist, gilt also:

$$\vec{T} = \vec{E}_i \vec{T} \vec{E}_i \quad (7.75)$$

Hieraus folgt sofort:

$$T_{12} = T_{21} = 0 \quad (7.76)$$

Aus der Invarianz des Quadratgitters unter einer $\frac{\pi}{2}$ -Rotation:

$$\vec{P}_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.77)$$

bzw. der Invarianz des hexagonalen Gitters unter einer $\frac{2\pi}{3}$ -Rotation:

$$\overleftrightarrow{P}_{\frac{2\pi}{3}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (7.78)$$

folgt nun ganz analog:

$$T_{11} = T_{22} \quad (7.79)$$

Damit ist $T_{\alpha\beta} = \lambda\delta_{\alpha\beta}$ nach Gleichung 7.68 isotrop.

Satz 7.3

1. *Alle Tensoren 4. Stufe, die invariant gegenüber den Gittersymmetrien des hexagonalen Gitters und zusätzlich invariant gegenüber Permutation der Indizes sind, sind bereits isotrop.*
2. *Alle Tensoren 4. Stufe, die invariant gegenüber den Gittersymmetrien des quadratischen Gitters und zusätzlich invariant gegenüber Permutation der Indizes sind, sind nicht automatisch isotrop.*

Beweis: Beide Gitter sind, wie bereits oben erwähnt invariant gegenüber:

$$\overleftrightarrow{E}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.80)$$

und

$$\overleftrightarrow{E}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.81)$$

Nach Auswertung von Gleichung 7.66 verbleiben für einen Tensor \overleftrightarrow{T} 4. Stufe, der invariant gegenüber diesen Transformationen ist, noch die Unbekannten:

$$T_{1111}, \quad T_{2211}, \quad T_{2121}, \quad T_{2112}, \quad T_{1221}, \quad T_{1212}, \quad T_{1122}, \quad T_{2222} \quad (7.82)$$

Alle anderen Elemente von \overleftrightarrow{T} müssen gleich Null sein. Da \overleftrightarrow{T} zusätzlich invariant gegenüber Permutation der Indizes ist, gilt:

$$T_{2211} = T_{2121} = T_{2112} = T_{1221} = T_{1212} = T_{1122} \quad (7.83)$$

und es verbleiben lediglich die Unbekannten $T_{1111}, T_{2222}, T_{1122}$.

Quadratgitter: Das Quadratgitter ist zusätzlich invariant gegenüber:

$$\overleftrightarrow{P}_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.84)$$

Nach Auswertung von Gleichung 7.66 folgt sofort:

$$T_{2222} = T_{1111} \quad (7.85)$$

Es verbleiben 2 Unbekannte T_{1111}, T_{1122} . Um zu zeigen, daß keine weitere Variablenreduktion mehr möglich ist, betrachtet man den Tensor:

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \lambda(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) + \mu\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\delta_{\alpha\gamma} \quad (7.86)$$

Der erste Summand der rechten Seite ist, wie bereits in Gleichung 7.69 erwähnt, isotrop. Der zweite Term ist, wie man leicht sieht, invariant gegenüber den Achsenspiegelungen sowie dem Koordinatenwechsel: $x_i \mapsto x_j$. Aus Dimensionsgründen folgt also, daß Gleichung 7.86 alle Tensoren 4. Stufe charakterisiert, die invariant gegenüber Koordinatenwechsel und Achsenspiegelung sind. Man spricht in diesem Fall von kubischer Invarianz.

Hexagonales Gitter: Hier gilt neben der Achsenspiegelung, zusätzlich eine Invarianz gegenüber einer $\frac{2\pi}{3}$ -Rotation:

$$\overset{\leftrightarrow}{P}_{\frac{2\pi}{3}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (7.87)$$

Wendet man darauf Gleichung 7.66 an, so ergibt sich für die Komponenten T_{1111}, T_{2222} :

$$\begin{aligned} T_{1111} &= P_{11}P_{11}P_{11}P_{11}T_{1111} \\ &\quad + P_{12}P_{12}P_{12}P_{12}T_{2222} \\ &\quad + 6P_{11}P_{11}P_{12}P_{12}T_{1122} \\ &= \frac{1}{16}T_{1111} + \frac{9}{16}T_{2222} + \frac{18}{16}T_{1122} \end{aligned} \quad (7.88)$$

$$\begin{aligned} T_{2222} &= P_{22}P_{22}P_{22}P_{22}T_{2222} \\ &\quad + P_{21}P_{21}P_{21}P_{21}T_{1111} \\ &\quad + 6P_{21}P_{21}P_{22}P_{22}T_{1122} \\ &= \frac{1}{16}T_{2222} + \frac{9}{16}T_{1111} + \frac{18}{16}T_{1122} \end{aligned} \quad (7.89)$$

Zieht man diese Gleichungen voneinander ab, so erhält man $T_{1111} = T_{2222}$ und ebenfalls eine kubische Invarianz. Einsetzen in Gleichung 7.88 liefert $T_{1111} = T_{2222} = 3T_{1122}$. Wertet man nun Gleichung 7.86 bei $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 1$ und $\alpha = \beta = 1, \gamma = \delta = 2$ aus, so erhält man:

$$\begin{aligned} T_{1111} &= 3\lambda + \mu \\ T_{1122} &= \lambda \end{aligned}$$

bzw.:

$$\begin{aligned} T_{1111} - 3T_{1122} &= \mu \\ T_{1122} &= \lambda \end{aligned}$$

Da auf Grund der Invarianz gegenüber einer $2\pi/3$ -Rotation hier aber $T_{1111} = T_{2222} = 3T_{1122}$ gilt, folgt $\mu = 0$. Mit Gleichung 7.86 ergibt sich:

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \lambda(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad (7.90)$$

Dies ist nach Satz 7.1 ein isotroper Tensor.

Zusammenfassung: Die beiden obigen Sätze stellen die wichtigsten geometrischen Grundlagen 2-dimensionaler Gittergasmodelle zur Verfügung. Der wesentliche Vorteil des hexagonalen Gitters gegenüber dem quadratischen Gitter besteht in der Tatsache, daß das hexagonale Gitter genug Symmetrien besitzt, um isotrope Tensoren 4. Stufe zu garantieren.

Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, daß sich obige Sätze samt Beweisen in analoger Form in beliebige Dimensionen verallgemeinern lassen. Für $D = 4$ ist das Analogon des hexagonalen Gitters das sogenannte FCHC-Gitter (face-centered-hypercubic), auf das an späterer Stelle (Paragraph 8.1.1) noch eingegangen wird.

Im Folgenden soll die Euler-Gleichung für das FHP-Gittergas hergeleitet werden. Die Vorgehensweise ist eine Verallgemeinerung derjenigen beim HPP-Gittergas und benötigt einige bekannte Tatsachen aus der statistischen Physik.

7.4 Die Fermi-Dirac Verteilung

Die Herleitung der makroskopischen Teilchendichte N_i war für das HPP-Gittergas auf Grund der gegebenen Geometrie und der leichten Kollisionsgesetze relativ einfach. Bei allgemeineren Gittergasen bedient man sich jedoch bekannter Verteilungsfunktionen der statistischen Physik, die errechnet werden können, falls die Erhaltungsgrößen eines Systems bekannt sind.

Für Boolesche Systeme, welche lediglich Masse und Impuls erhalten, ist diese Gleichgewichtsverteilung gegeben durch die sogenannte Fermi-Dirac Verteilung:

$$N_i^{eq} = \frac{1}{1 + \exp(h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i)} = F(h + \vec{q} \cdot \vec{c}_i) \quad (7.91)$$

Die Funktion F ist dabei folgendermaßen definiert:

$$F(x) := \frac{1}{1 + e^x} \quad (7.92)$$

Die Gleichungen 7.28 und 7.91 definieren die Unbekannten h und \vec{q} implizit als Funktionen der Dichte ρ und der Geschwindigkeit \vec{u} , so daß sich 7.91 prinzipiell darstellen läßt als Funktion der Parameter ρ und \vec{u} . Normalerweise ist es aber nicht möglich, eine geschlossene Form für diese Funktion $N_i^{eq}(\rho, \vec{u})$ zu finden. Man hilft sich hier, genau wie beim HPP-Gittergas, mittels eines Potenzreihenansatzes:

$$h(\rho, \vec{u}) = h_0 + h_2 u^2 + O(u^4) \quad (7.93)$$

$$\vec{q}(\rho, \vec{u}) = q_1 \vec{u} + O(u^3) \quad (7.94)$$

Die Funktion h muß gerade und die Funktion \vec{q} ungerade sein, da die Verteilung N_i^{eq} invariant unter $(\vec{c}_i \mapsto -\vec{c}_i, \vec{u} \mapsto -\vec{u})$ sein muß.

Entwickelt man nun F in eine Taylorreihe um $x = h_0$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} N_i^{eq} &= F(h_0) + F'(h_0)(h_2 u^2 + q_1 \vec{u} \vec{c}_i) + \frac{1}{2} F''(h_0)(h_2 u^2 + q_1 \vec{u} \vec{c}_i)^2 + O(u^3) \\ &= F(h_0) + F'(h_0)(h_2 u^2 + q_1 \vec{u} \vec{c}_i) + \frac{1}{2} F''(h_0) q_1^2 (\vec{u} \vec{c}_i)^2 + O(u^3) \end{aligned} \quad (7.95)$$

Summiert man diese Gleichung über alle i und setzt zusätzlich $\vec{u} = \vec{0}$, so sieht man sofort, daß $F(h_0) = \rho/b =: f$ gelten muß. Nutzt man weiterhin aus, daß $F' = -F(1 - F)$ gilt, so ergibt sich bis zur Ordnung $O(u^3)$:

$$N_i^{eq} = f \left[1 - (1 - f)(h_2 u^2 + q_1 \vec{u} \vec{c}_i) + \frac{1}{2} (1 - f)(1 - 2f) q_1^2 (\vec{u} \vec{c}_i)^2 \right] \quad (7.96)$$

Setzt man diese Gleichung nun in die Massen- und Impulsgleichung 7.28 ein, so ergeben sich die Gleichungen:

$$0 = -f \bar{f} q_1 u_\alpha C_\alpha^{(1)} + \left(\frac{1}{2} f \bar{f} (1 - 2f) q_1^2 C_{\alpha\beta}^{(2)} - b f \bar{f} h_2 \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \quad (7.97)$$

und

$$\rho u_\alpha = f C_\alpha^{(1)} - f \bar{f} q_1 u_\beta C_{\alpha\beta}^{(2)} + \left(\frac{1}{2} f \bar{f} (1 - 2f) q_1^2 C_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} - b f \bar{f} h_2 C_\alpha^{(1)} \delta_{\beta\gamma} \right) u_\beta u_\gamma \quad (7.98)$$

Hierbei wurden implizit folgende Tensoren definiert:

$$C_{\alpha_1 \dots \alpha_r}^{(r)} = \sum_i c_{i\alpha_1} \dots c_{i\alpha_r} \quad (7.99)$$

Da alle hier betrachteten Gitter zu jedem Vektor \vec{c}_i einen Vektor \vec{c}_j besitzen mit $\vec{c}_i = -\vec{c}_j$, folgt, daß für jede ungerade Zahl r gelten muß:

$$C_{\alpha_1 \dots \alpha_r}^{(r)} = 0 \quad (7.100)$$

Der in 7.98 und 7.97 verbleibende Tensor 2. Stufe $C_{\alpha\beta}^{(2)}$ ergibt sich aus folgendem Satz:

Satz 7.4

Für jedes Gitter mit mindestens kubischer Invarianz (diese Eigenschaft haben alle in dieser Arbeit betrachteten Gitter) gilt:

$$C_{\alpha\beta}^{(2)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \quad (7.101)$$

Hierbei ist $c = |\vec{c}_i|$, $i \in \{1, \dots, b\}$, und D die Dimension des zu Grunde liegenden Vektorraumes.

Beweis: Es ist aus Satz 7.1 bekannt, daß bereits kubisch invariante Tensoren 2. Stufe proportional zur Einheitsmatrix sind. Der Proportionalitätsfaktor berechnet sich durch:

$$C_{xx}^{(2)} = \sum_{i=1}^b c_{ix} c_{ix} = \frac{bc^2}{D} \quad (7.102)$$

Die letzte Gleichung ergibt sich für alle in dieser Arbeit verwendeten Gitter (quadratisches Gitter, hexagonales Gitter, FCHC-Gitter) sofort durch Einsetzen der \vec{c}_i . Ein allgemeiner Beweis dieser Gleichung soll hier nicht erfolgen, kann aber bei Rothman und Zaleski [60] nachgelesen werden.

Mit diesem Ergebnis vereinfacht sich Gleichung 7.97 zu:

$$0 = \left(\frac{1}{2} f \bar{f} (1 - 2f) q_1^2 \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} - b f \bar{f} h_2 \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \quad (7.103)$$

Gleichung 7.98 vereinfacht sich zu:

$$\rho u_\alpha = -f \bar{f} q_1 u_\beta \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \quad (7.104)$$

Aus Gleichung 7.104 bestimmt man q_1 und damit aus Gleichung 7.103 h_2 . Setzt man diese Ergebnisse in Gleichung 7.96 ein, so errechnet sich die **Fermi-Dirac Gleichgewichtsverteilung**:

$$N_i^{eq} = f \left[1 + \frac{D}{c^2} c_{i\alpha} u_\alpha + G(f) Q_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta \right] + O(u^3) \quad (7.105)$$

Hierbei wurde definiert:

$$G(f) = \frac{D^2}{2c^4} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right), \quad Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha}c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \quad (7.106)$$

Man beachte, daß Gleichung 7.105 eine Verallgemeinerung der Gleichung 7.56 ist: Setzt man in 7.105 $D = 2, c = 1, f = \rho/4$ ein, so entsteht Gleichung 7.56.

7.5 Die Euler-Gleichung des FHP-Gittergases

Nachfolgend wird die Fermi-Dirac Gleichgewichtsverteilung benutzt, um die Euler-Gleichung des hexagonalen Gitters herzuleiten. Die Vorgehensweise ist vollkommen analog zum quadratischen Gitter im Paragraphen 7.2.

Setzt man in Gleichung 7.22 die Fermi-Dirac Verteilung 7.105 ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(0)} &= \sum_i N_i^{eq} c_{i\alpha}c_{i\beta} = \sum_i f \left[1 + \frac{D}{c^2} c_{i\gamma}u_\gamma + G(f)Q_{i\gamma\delta}u_\gamma u_\delta \right] c_{i\alpha}c_{i\beta} \\ &= \sum_i f \left[1 + \frac{D}{c^2} c_{i\gamma}u_\gamma + \frac{D^2}{2c^4} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) (c_{i\gamma}c_{i\delta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\gamma\delta}) u_\gamma u_\delta \right] c_{i\alpha}c_{i\beta} \\ &= fC_{\alpha\beta}^{(2)} + fG(f) \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} - \frac{1}{2} \delta_{\gamma\delta} C_{\alpha\beta}^{(2)} \right) u_\gamma u_\delta \end{aligned} \quad (7.107)$$

Hierbei wurde ausgenutzt, daß $C_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} = 0$ ist.

$C_{\alpha\beta}^{(2)}$ ist aus Satz 7.4 bekannt, und $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ berechnet sich für das hexagonale Gitter wie folgt:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \frac{3}{4} (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad (7.108)$$

Dies ist eine spezielle Form des folgenden allgemeinen Satzes:

Satz 7.5

Für solche Gitter, die isotrope Tensoren 4. Stufe garantieren (z.B. das hexagonale Gitter oder das FCHC-Gitter), gilt:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \frac{bc^4}{D(D+2)} (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad (7.109)$$

Beweis: Da $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ isotrop sein muß, ergibt sich (da $C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ zusätzlich invariant gegenüber Permutation der Indizes ist):

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \lambda (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad (7.110)$$

Der Proportionalitätsfaktor λ ergibt sich aus der Aufsummierung von 7.99 über paarweise gleiche Indizes:

$$\begin{aligned}
C_{kkjj}^{(4)} &= \sum_{i=1}^b \sum_{k=1}^D \sum_{j=1}^D c_{ik} c_{ik} c_{ij} c_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^b \left(\sum_{k=1}^D c_{ik} c_{ik} \right) \left(\sum_{j=1}^D c_{ij} c_{ij} \right) \\
&= \sum_{i=1}^b \bar{c}_i^2 \bar{c}_i^2 \\
&= bc^4
\end{aligned} \tag{7.111}$$

Außerdem gilt nach 7.110:

$$\begin{aligned}
C_{\alpha\alpha\beta\beta}^{(4)} &= \lambda(\delta_{\alpha\alpha}\delta_{\beta\beta} + 2\delta_{\alpha\beta}^2) \\
&= \lambda\left(\sum_{k=1}^D \sum_{j=1}^D \delta_{kk}\delta_{jj} + 2\delta_{kj}^2\right) \\
&= \lambda(D^2 + 2D)
\end{aligned} \tag{7.112}$$

Aus 7.111 und 7.112 folgt:

$$\lambda = \frac{bc^4}{D(D+2)} \tag{7.113}$$

Setzt man nun die Gleichungen 7.108 und 7.101 in Gleichung 7.107 ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
T_{\alpha\beta}^{(0)} &= f \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} + fG(f) \left[\frac{3}{4}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) - \frac{1}{2}\delta_{\gamma\delta} \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \right] u_\gamma u_\delta \\
&= 3f\delta_{\alpha\beta} + fG(f) \left[\frac{3}{4}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) - \frac{3}{2}\delta_{\gamma\delta}\delta_{\alpha\beta} \right] u_\gamma u_\delta \\
&= 3f\delta_{\alpha\beta} + fG(f) \left[-\frac{3}{4}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{3}{4}(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \right] u_\gamma u_\delta
\end{aligned} \tag{7.114}$$

Setzt man dies in die Impulserhaltungsgleichung 7.21 ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho u_\alpha) &= -\partial_\beta T_{\alpha\beta}^{(0)} \\
&= -\partial_\beta \left[fG(f) \left[-\frac{3}{4}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{3}{4}(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \right] u_\gamma u_\delta \right] \\
&= -fG(f)\partial_\beta \left(\left[-\frac{3}{4}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{3}{4}(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \right] u_\gamma u_\delta \right) \\
&= -fG(f)\partial_\beta \left(-\frac{3}{4}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\gamma}u_\gamma^2) + \frac{3}{4}2u_\alpha u_\beta \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -fG(f) \left[\partial_\alpha \left(-\frac{3}{4} \delta_{\gamma\gamma} u_\gamma^2 \right) + \partial_\beta \left(\frac{3}{2} u_\alpha u_\beta \right) \right] \\
&= -fG(f) \left[\partial_\alpha \left(-\frac{3}{4} u^2 \right) + \partial_\beta \left(\frac{3}{2} u_\alpha u_\beta \right) \right] \\
&= -\frac{2\rho}{3} \frac{3-\rho}{6-\rho} \left[\partial_\alpha \left(-\frac{3}{4} u^2 \right) + \partial_\beta \left(\frac{3}{2} u_\alpha u_\beta \right) \right] \\
&= -\rho \frac{3-\rho}{6-\rho} \left[\partial_\alpha \left(-\frac{1}{2} u^2 \right) + \partial_\beta (u_\alpha u_\beta) \right]
\end{aligned}$$

Mit

$$g(\rho) = \frac{3-\rho}{6-\rho} \quad (7.115)$$

ergibt sich:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho g(\rho) u_\alpha u_\beta) = \partial_\alpha \left(\frac{\rho}{2} g(\rho) u^2 \right) \quad (7.116)$$

Mit:

$$p(\rho, u^2) = \frac{\rho}{2} (1 - g(\rho) u^2) \quad (7.117)$$

ergibt sich:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho g(\rho) u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha(p(\rho, u^2)) \quad (7.118)$$

Man erkennt nun, daß obige Gleichung 7.118 zwar isotrop ist, sich aber trotzdem noch von der Euler-Gleichung 3.17 "realer Fluide" unterscheidet. Es läßt sich jedoch zeigen, daß die beiden Gleichungen für den inkompressiblen Fall einer kleinen Machzahl asymptotisch identisch sind (siehe Rothman und Zaleski [60]).

Formal identisch wären beide Gleichungen nur für $g(\rho) = 1$, was hier allerdings nicht der Fall ist. Die Ursache dafür liegt im Fehlen der Galileiinvarianz der Gittergase:

Gleichung 7.118 ist nicht invariant unter der Galileitransformation $\vec{x} \mapsto \vec{x} - \vec{w}t$, mit einer konstanten Geschwindigkeit \vec{w} . Vereinfacht gesagt, verursacht der eindeutige Geschwindigkeitsbetrag der Gittergasteilchen die Verletzung der Galileiinvarianz. Dieser hat zur Folge, daß ein ruhendes Inertialsystem gegenüber allen anderen Bezugssystemen besonders ausgezeichnet ist.

Des weiteren erkennt man eine unphysikalische Geschwindigkeitsabhängigkeit des Druckes p in Gleichung 7.118, welche die Rolle der thermischen Zustandsgleichung einnimmt.

Diese beiden Probleme:

1. Fehlende Galileiinvarianz
2. Geschwindigkeitsabhängiger Druck

werden im später besprochenen Gitter-Boltzmann Verfahren eliminiert.

Es sei an dieser Stelle erwähnt, daß es sinnvoll sein kann, dem FHP-Gittergas ein weiteres ruhendes Teilchen (bzw. mehrere ruhende Teilchen) pro Knoten hinzuzufügen. Diese ruhenden Teilchen verharren nach einem Zeitschritt entweder an ihrem Gitterknoten, oder sie sind in Kollisionen verwickelt und bewegen sich nach einer Kollision gemäß Massen- und Impulserhaltung zu einem Nachbarknoten. Der Vorteil dieses zusätzlichen Teilchens besteht in der von ihm verursachten höheren Kollisionsrate des Gittergases. Diese führt zu einer schnelleren Annäherung an das statistische Gleichgewicht sowie zu einer niedrigeren Viskosität. Die Viskosität von Gittergasen soll nun im folgenden Abschnitt behandelt werden.

7.6 Viskosität der Gittergase

Während in den vorherigen Paragraphen das nicht viskose Verhalten verschiedener Gittergasmodelle untersucht wurde, soll nun die Viskosität solcher Fluidmodelle näher beleuchtet werden. Wie bereits in Kapitel 3 erläutert wurde, existiert für newtonsche Fluide ein linearer Zusammenhang zwischen dem viskosen Spannungstensor und dem Verformungstensor. Für Gittergase wird nun in gleicher Weise vorgegangen:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = -\mu_{\alpha\beta\gamma\delta} E_{\gamma\delta} \quad (7.119)$$

Hierbei ist $E_{\alpha\beta} = \partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha$ und $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ein Tensor 4. Stufe der die Symmetrieeigenschaften des Gitters trägt. Mit anderen Worten: $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ist isotrop für das hexagonale Gitter und das FCHC-Gitter und anisotrop für das Quadratgitter (Dies ist eine direkte Folgerung aus Satz 7.3). In analoger Vorgehensweise, wie in Kapitel 3, läßt sich also auch für Gitter mit hinreichender Symmetrie zeigen, daß:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = -\eta_1(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) - \eta_2 \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \quad (7.120)$$

Wenn nun η_1 und η_2 und damit der viskose Spannungstensor $T_{\alpha\beta}^{visk}$ des Gittergases bekannt wäre, so ließe sich auch die Navier-Stokes Gleichung (die viskose Form der Euler-Gleichung 7.118) des Gittergases aufstellen:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) = -\partial_\beta(T_{\alpha\beta}^{visk} + T_{\alpha\beta}^{(0)}) \quad (7.121)$$

Hierbei ist $T_{\alpha\beta}^{(0)}$ aus Gleichung 7.114 (für das hexagonale Gitter) bzw. aus Gleichung 7.61 (für das Quadratgitter) bereits bekannt. Für das hexagonale

Gitter ergibt sich unter Berücksichtigung von 7.120 im inkompressiblen Fall:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho g(\rho) u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\alpha(p(\rho, u^2)) + \partial_\beta[\eta_1(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] \\ \iff \rho \cdot \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + g(\rho)\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}\right) &= -\nabla p(\rho, u^2) + \eta_1 \Delta \vec{u} \end{aligned} \quad (7.122)$$

Zur expliziten Bestimmung der Viskositäten η_i und des viskosen Spannungstensors $T_{\alpha\beta}^{visk}$ läßt sich die sogenannte Chapman-Enskog Methode benutzen, auf die später (Paragraph 8.4) noch eingegangen wird.

Im Folgenden soll (aus didaktischen Gründen) aber erst einmal die Viskosität η_1 des geometrisch einfachsten Gittergases, des HPP-Gases, berechnet werden.

7.6.1 Viskosität des HPP-Gases

Zur Berechnung der Viskosität η_1 des HPP-Gases wird eine einfache parallele Scherung (Abbildung 7.5) im Winkel von 45 Grad zu den Achsen betrachtet. Der Geschwindigkeitsvektor \vec{u} sei dabei folgendermaßen definiert:

$$u_x = u_y = \omega(x - y) \quad (7.123)$$

Es wird davon ausgegangen, daß sich der viskose Spannungstensor $T_{\alpha\beta}^{visk}$ in

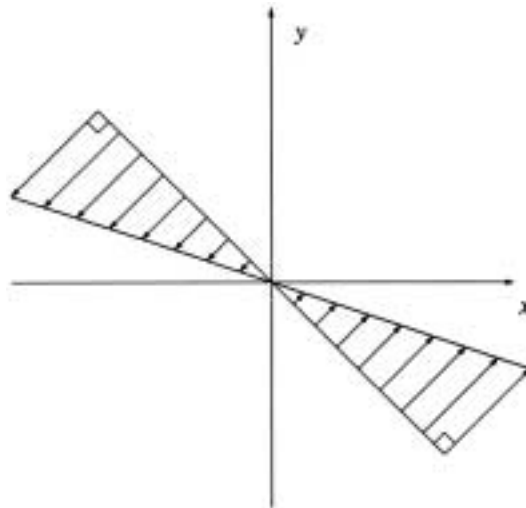


Abbildung 7.5: Scherung im 45 Grad Winkel zu den Achsen

einer zur Gleichung 7.22 analogen Weise darstellen läßt:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} N_i^{neq} \quad (7.124)$$

Hierbei ist $N_i^{neq} = N_i - N_i^{eq}$ eine Korrektur der Gleichgewichtsverteilung, die durch das viskose Verhalten des Gittergases hervorgerufen wird (verursacht wird dieses Verhalten durch die Scherströmung).

Um N_i^{neq} bzw. N_i zu bestimmen, betrachtet man die, durch Mittelung von Gleichung 7.3 entstehende, sogenannte Gitter-Boltzmann Gleichung:

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = N_i(\vec{x}, t) + \Delta_i[\vec{N}(\vec{x}, t)] \quad (7.125)$$

Der nicht lineare Kollisionsoperator:

$$\Delta_i(\vec{N}) = \bar{N}_i \bar{N}_{i+2} N_{i+1} N_{i+3} - N_i N_{i+2} \bar{N}_{i+1} \bar{N}_{i+3} \quad (7.126)$$

wirkt nun auf die gemittelten Größen $N_i(x, t)$ und nicht mehr auf die mikroskopischen Größen n_i . Beim Aufstellen von Gleichung 7.126 trifft man, wie bei Gleichung 7.27, die Annahme, daß die n_i unkorreliert sind; dies ist die sogenannte „molekulares Chaos Approximation“.

Gleichung 7.125 soll nun näherungsweise gelöst werden, indem man den nicht linearen Kollisionsoperator Δ_i linearisiert, und als erste Näherung für N_i die Fermi-Dirac Verteilung N_i^{eq} annimmt. Für kleine Scherraten ω erscheint folgender Ansatz sinnvoll:

$$N_i(\vec{x}) = N_i^{eq}(\vec{x}, \vec{u}) + \epsilon_i(\omega) + O(\omega^2) \quad (7.127)$$

Hierbei ist $\epsilon_i(\omega)$ ein zu suchender Korrekturterm der Ordnung ω für die Gleichgewichtsverteilung $N_i^{eq}(\vec{x}, \vec{u})$, welche sich durch Einsetzen von 7.123 in Gleichung 7.105 ergibt:

$$\begin{aligned} N_1^{eq}(\vec{x}) &= f[1 + 2\omega(x - y)] + O(\omega^2) \\ N_2^{eq}(\vec{x}) &= f[1 + 2\omega(x - y)] + O(\omega^2) \\ N_3^{eq}(\vec{x}) &= f[1 - 2\omega(x - y)] + O(\omega^2) \\ N_4^{eq}(\vec{x}) &= f[1 - 2\omega(x - y)] + O(\omega^2) \end{aligned} \quad (7.128)$$

Man setzt nun Gleichung 7.127 als Argument des Kollisionsoperators in die Gitter-Boltzmann Gleichung 7.125 ein und erhält die stationäre, zeitunabhängige Form der Gitter-Boltzmann Gleichung:

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i) - N_i(\vec{x}) = \Delta_i[\vec{N}^{eq}(\vec{x}, \vec{u})] + \sum_j \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j}(\vec{N}^{eq}) \epsilon_j + O(\omega^2) \quad (7.129)$$

Wie bereits im Anschluß an Gleichung 7.26 erläutert, verschwindet dabei der erste Term auf der rechten Seite obiger Gleichung.

Der zweite Term auf der rechten Seite ist das Produkt der Jakobimatrix des Kollisionsoperators (ausgewertet im Gleichgewichtszustand) mit dem zu ermittelnden Störvektor $\vec{\epsilon}$. Eine erste Näherung ergibt sich, wenn man im Ausdruck \vec{N}^{eq} die Geschwindigkeit $\vec{u} = \vec{0}$ setzt:

$$\Lambda_{i,j} := \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j}(\vec{N}^{eq}(\vec{x}, \vec{0})) = \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j}(f, f, f, f) \quad (7.130)$$

Mit 7.126 errechnet sich:

$$\Lambda_{1,1} = -\bar{N}_3 N_2 N_4 - N_3 \bar{N}_2 \bar{N}_4 = -\bar{f} f^2 - f \bar{f}^2 = -f \bar{f} \quad (7.131)$$

$$\Lambda_{1,2} = \bar{N}_1 \bar{N}_3 N_4 + N_1 N_3 \bar{N}_4 = \bar{f} f^2 + f \bar{f}^2 = f \bar{f} \quad (7.132)$$

$$\Lambda_{1,3} = -\bar{N}_1 N_2 N_4 - N_1 \bar{N}_2 \bar{N}_4 = -\bar{f} f^2 - f \bar{f}^2 = -f \bar{f} \quad (7.133)$$

$$\Lambda_{1,4} = \bar{N}_1 \bar{N}_3 N_2 + N_1 N_3 \bar{N}_2 = \bar{f} f^2 + f \bar{f}^2 = f \bar{f} \quad (7.134)$$

·
·
·

Insgesamt erhält man folgende nicht reguläre Matrix:

$$\Lambda = f \bar{f} \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.135)$$

Man setzt nun Gleichung 7.127 auch in die linke Seite von 7.129 ein und erhält:

$$N_i^{eq}(\vec{x} + \vec{c}_i) - N_i^{eq}(\vec{x}) = \Lambda \vec{\epsilon} + O(\omega^2) \quad (7.136)$$

Setzt man hier noch die Ergebnisse aus 7.128 ein, so ergibt sich das folgende lineare Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} 2f\omega \\ -2f\omega \\ 2f\omega \\ -2f\omega \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix} \quad (7.137)$$

Um dieses singuläre LGS zu lösen, betrachte man die Eigenvektoren von Λ :

$$\vec{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (7.138)$$

Die ersten drei Eigenvektoren haben den Eigenwert Null, während \vec{e}_4 den Eigenwert $\lambda = -4f\bar{f}$ besitzt:

$$\Lambda\vec{e}_4 = -4f\bar{f}\vec{e}_4 \quad (7.139)$$

Gleichung 7.137 ist äquivalent zu:

$$2f\omega\vec{e}_4 = \Lambda\vec{\epsilon} \quad (7.140)$$

Nach 7.139 ist dies gleichbedeutend mit:

$$-\frac{\omega}{2\bar{f}}\Lambda\vec{e}_4 = \Lambda\vec{\epsilon} \quad (7.141)$$

Hieraus folgt:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix} = -\frac{\omega}{2\bar{f}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (7.142)$$

Da ϵ_i nichts anderes als die erste Näherung von $N_i^{neq} = N_i - N_i^{eq}$ ist, läßt sich also nun der viskose Spannungstensor des HPP-Gases berechnen:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = \sum_i c_{i\alpha}c_{i\beta}N_i^{neq} = \sum_i c_{i\alpha}c_{i\beta}\epsilon_i \quad (7.143)$$

Man erhält:

$$T_{xx}^{visk} = -\frac{\omega}{1-f}, \quad T_{yy}^{visk} = \frac{\omega}{1-f} \quad (7.144)$$

Um hieraus die Viskosität η_1 zu errechnen, beachte man, daß in einer Scherströmung der Form 7.123 nach 7.120 folgender viskose Spannungstensor zu erwarten ist:

$$T_{xx}^{visk} = -2\eta_1\omega, \quad T_{yy}^{visk} = 2\eta_1\omega \quad (7.145)$$

Insgesamt ergibt sich also für das HPP-Gas folgende dynamische Viskosität:

$$\eta_1 = -\frac{1}{2\bar{f}} \iff \nu = \frac{\eta_1}{\rho} = -\frac{1}{2\bar{f} \cdot 4f} = -\frac{1}{2\lambda} \quad (7.146)$$

Die Behandlung des HPP-Gases soll mit obiger Behandlung der viskosen makrodynamischen Gleichungen abgeschlossen werden. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß dieses Modell zur Simulation isotroper Fluide ungeeignet ist, da Tensoren 4. Stufe, die invariant gegenüber den Gittersymmetrien sind, anisotrop sein können. Dies erklärt den bevorzugten Gebrauch des hexagonalen Gitters.

7.6.2 Viskosität des FHP-1 Gases

Die Berechnung der Viskosität η_1 erfolgt, genau wie beim HPP-Gas, durch eine genäherte Lösung der Gitter-Boltzmann Gleichung 7.125. Im Falle des FHP-1 Gases hat man es allerdings mit einem anderen gemittelten Kollisionsoperator Δ_i zu tun. Durch Mittelung von Gleichung 7.8 ergibt sich:

$$\begin{aligned}\Delta_i &= \Delta_i^{(3)} + \Delta_i^{(2)} \\ &= N_{i+1}N_{i+3}N_{i+5}\bar{N}_i\bar{N}_{i+2}\bar{N}_{i+4} - N_iN_{i+2}N_{i+4}\bar{N}_{i+1}\bar{N}_{i+3}\bar{N}_{i+5} \\ &\quad + AN_{i+1}N_{i+4}\bar{N}_{i+5}\bar{N}_i\bar{N}_{i+2}\bar{N}_{i+3} + \bar{A}N_{i+2}N_{i+5}\bar{N}_i\bar{N}_{i+1}\bar{N}_{i+3}\bar{N}_{i+4} \\ &\quad - N_iN_{i+3}\bar{N}_{i+4}\bar{N}_{i+1}\bar{N}_{i+2}\bar{N}_{i+5}\end{aligned}\quad (7.147)$$

Hierbei ist A die Mittelung der Booleschen Variable a , welche besagt, ob eine Dreiteilchenkollision (Gesamtimpuls gleich null) die Ausgangskonfiguration im- oder gegen den Uhrzeigersinn verändert (siehe Gleichung 7.7). Es sei vorausgesetzt, daß beide Kollisionsausgänge gleich häufig sind: $A = \bar{A} = 0.5$. Es gilt also:

$$\begin{aligned}\Delta_i &= \prod_{j=i}^{i+6}(\bar{N}_j) \left[-\tilde{N}_i\tilde{N}_{i+3} + \frac{1}{2}(\tilde{N}_{i+1}\tilde{N}_{i+4} + \tilde{N}_{i+2}\tilde{N}_{i+5}) \right. \\ &\quad \left. - \tilde{N}_i\tilde{N}_{i+2}\tilde{N}_{i+4} + \tilde{N}_{i+1}\tilde{N}_{i+3}\tilde{N}_{i+5} \right]\end{aligned}\quad (7.148)$$

Hierbei ist:

$$\tilde{N}_i = \frac{N_i}{1 - N_i}\quad (7.149)$$

Der linearisierte Kollisionsoperator Λ wird nun genau so errechnet wie in Gleichung 7.130:

$$\Lambda_{i,j} := \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j}(\vec{N}^{eq}(\vec{x}, \vec{0})) = \frac{\partial \Delta_i}{\partial N_j}(f, f, f, f, f, f) \quad i, j \in \{1, \dots, 6\}\quad (7.150)$$

Es ergibt sich:

$$\Lambda = f\bar{f}^2 \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & a_3 \\ a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 \end{pmatrix}\quad (7.151)$$

mit den Koeffizienten:

$$a_0 = -1\quad (7.152)$$

$$a_1 = \frac{1}{2}(1+f) \quad (7.153)$$

$$a_2 = \frac{1}{2}(1-3f) \quad (7.154)$$

$$a_3 = 2f - 1 \quad (7.155)$$

Betrachtet man nun eine einfache Scherströmung der Form:

$$\begin{aligned} u_x &= \omega y \\ u_y &= 0 \end{aligned} \quad (7.156)$$

so ergibt sich aus 7.105 und dem Ansatz 7.127 durch Einsetzen obiger Scherströmung:

$$\begin{aligned} N_i &= \underbrace{f(1+2\omega y c_{ix})}_{= N_i^{eq}} + \epsilon_i(\omega) + O(\omega^2) \end{aligned} \quad (7.157)$$

Aus Gleichung 7.129 ergibt sich dann mit

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i) - N_i(\vec{x}) = 2f\omega c_{ix} c_{iy} \quad (7.158)$$

folgendes LGS:

$$2f\omega c_{ix} c_{iy} = \sum_j \Lambda_{ij} \epsilon_i \quad (7.159)$$

Da beim hexagonalen Gitter die Richtungsvektoren gegeben sind durch:

$$\vec{c}_i = \left(\cos\left(\frac{\pi i}{3}\right), \sin\left(\frac{\pi i}{3}\right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (7.160)$$

lautet dieses LGS ausgeschrieben:

$$\underbrace{2f\omega \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=: \vec{e}} = \Lambda \vec{\epsilon} = f\bar{f}^2 \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & a_3 \\ a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \end{pmatrix}$$

Mit den a_i aus 7.152ff. erkennt man, daß der Vektor \vec{e} auf der linken Seite obiger Gleichung ein Eigenvektor von Λ zum Eigenwert $\lambda = -3f\bar{f}^3$ ist:

$$\Lambda \vec{e} = \lambda \vec{e} \quad (7.161)$$

Es ergibt sich also für den zu ermittelnden Korrekturterm:

$$\vec{\epsilon} = \frac{2f\omega}{\lambda} \vec{e} \quad (7.162)$$

bzw. mit der Notation 7.106:

$$\epsilon_i = \frac{2f\omega}{\lambda} Q_{ixy} \quad (7.163)$$

Damit ergibt sich aus 7.157 bis zur ersten Ordnung in ω :

$$\begin{aligned} N_i &= \underbrace{f(1 + 2\omega y c_{ix})}_{= N_i^{eq}} + \underbrace{\frac{2f\omega}{\lambda} Q_{ixy}}_{= \epsilon_i(\omega)} \\ &= N_i^{eq} + \epsilon_i(\omega) \end{aligned} \quad (7.164)$$

Der viskose Spannungstensor ist daher gegeben durch:

$$T_{\alpha\beta}^{visk} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \epsilon_i = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \frac{2f\omega}{\lambda} Q_{ixy} \quad (7.165)$$

Daraus ergibt sich:

$$T_{xy}^{visk} = \frac{2f\omega}{\lambda} \sum_i c_{ix} c_{iy} Q_{ixy} = \frac{2f\omega}{\lambda} \sum_i (c_{ix} c_{iy})^2 = \frac{3f\omega}{2\lambda} \quad (7.166)$$

Um hieraus die Viskosität η_1 zu errechnen, beachte man, daß in einer Scherströmung der Form 7.156 nach 7.120 folgender viskose Spannungstensor zu erwarten ist:

$$T_{xy}^{visk} = -\eta_1 \omega \quad (7.167)$$

Insgesamt ergibt sich also für das FHP-1 Gas folgende dynamische Viskosität:

$$\eta_1 = -\frac{3f}{2\lambda} \iff \nu = \frac{\eta_1}{\rho} = \frac{\eta_1}{6f} = -\frac{1}{4\lambda} \quad (7.168)$$

Dieses Ergebnis bedarf jedoch noch einer Korrektur, deren Ursprung in der diskreten Natur des Gitters liegt. Wie in Kapitel 3 bereits erwähnt, beschreibt $T_{\alpha\beta}$ den Fluß der α -Komponente des Impulses auf eine zur β -Richtung senkrechten Einheitsfläche.

Die hier vorliegenden Definitionen für Dichte ρ und Impuls $\rho\vec{u}$ aus Gleichung 7.18f bezieht sich aber jeweils auf einen Gitterknoten und nicht auf eine Einheitsfläche. Ein Gitterknoten im hexagonalen Gitter „bedeckt“ nun wiederum eine Fläche von $F = \sqrt{3}/2$. (Jedes Dreieck hat eine Fläche von

$\sqrt{3}/4$, jeder Gitterknoten besitzt 6 benachbarte Dreiecke, und jeder Gitterknoten teilt sich jedes Dreieck mit 2 anderen Gitterknoten. $\rightarrow F = \sqrt{3}/4 \cdot 6/3$
Man definiert nun Dichte und Impuls pro Einheitsfläche:

$$\bar{\rho} := \frac{\rho}{\sqrt{3}}, \quad \overline{\rho \vec{u}} := \frac{\rho \vec{u}}{2}$$

In diesem Kontext ist der Fluß nichts anderes, als der Fluß pro Einheitslänge und es ergibt sich:

$$\overline{T}_{\alpha\beta} = \frac{T_{\alpha\beta}}{\sqrt{3}}$$

\overline{T}_{xy} ermittelt man nun einfach durch Addition des x-Impulses der Teilchen,

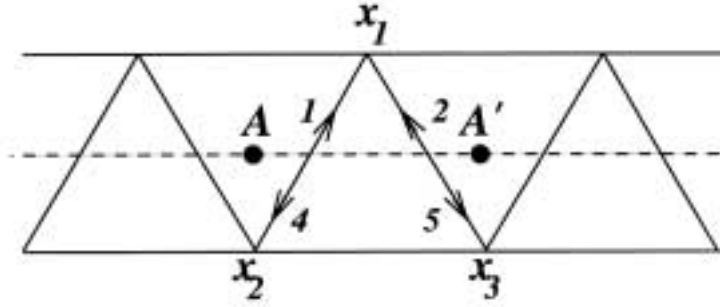


Abbildung 7.6: Die Berechnung des Spannungstensors erfolgt durch Aufsummierung des x-Impulses der Teilchen, die in einem Zeitschritt die Einheitslänge AA' passieren.

welche in einem Zeitschritt eine zur y-Richtung senkrechte Einheitslänge AA' passieren (Abbildung 7.6):

$$\overline{T}_{xy} = N_1(\vec{x} + \vec{c}_1)c_{1x} + N_2(\vec{x} + \vec{c}_2)c_{2x} - N_4(\vec{x})c_{4x} - N_5(\vec{x})c_{5x} \quad (7.169)$$

$$= \frac{1}{2} \left[N_1(\vec{x} + \vec{c}_1) - N_2(\vec{x} + \vec{c}_2) + N_4(\vec{x}) - N_5(\vec{x}) \right] \quad (7.170)$$

Multiplikation mit $\frac{\sqrt{3}}{2}$ und Einsetzen von 7.164 liefert:

$$\begin{aligned} T_{xy} = & \frac{\sqrt{3}}{4} f \left[1 + 2\omega \left(y + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \frac{1}{2} + \frac{2\omega}{\lambda} \frac{\sqrt{3}}{4} \right. \\ & - \left(1 + 2\omega \left(y + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \frac{-1}{2} + \frac{2\omega}{\lambda} \left(\frac{-\sqrt{3}}{4} \right) \right) \\ & \left. + 1 + 2\omega y \frac{-1}{2} + \frac{2\omega}{\lambda} \frac{\sqrt{3}}{4} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\left(1 + 2\omega y \frac{1}{2} + \frac{2\omega}{\lambda} \left(\frac{-\sqrt{3}}{4}\right)\right)] \\
& = \frac{\sqrt{3}}{4} f \left(2\omega \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{2\omega}{\lambda} \sqrt{3}\right) \\
& = \frac{3}{2} f \omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda}\right) \\
& = \rho \omega \left(\frac{1}{4\lambda} + \frac{1}{8}\right) \tag{7.171}
\end{aligned}$$

Vergleicht man dies mit Gleichung 7.167, so errechnet sich:

$$\eta_1 = -\rho \left(\frac{1}{4\lambda} + \frac{1}{8}\right) \iff \nu = -\frac{1}{4\lambda} - \frac{1}{8} \tag{7.172}$$

Nun ist man in der Lage, die Navier-Stokes Gleichung für das FHP-1 Gittergas explizit anzugeben. Sie ergibt sich durch Einsetzen von η_1 aus Gleichung 7.172 in Gleichung 7.122.

Will man aber die Strömung eines Fluids mit gegebener Viskosität simulieren, so läßt sich aus Gleichung 7.172 unschwer erkennen, daß innerhalb des FHP-1 Modells nur wenige Möglichkeiten bestehen, die Viskosität (und damit die Reynoldszahl) gezielt zu variieren. Diese ist lediglich vom Eigenwert λ der Jakobimatrix des linearisierten Kollisionsoperators Λ abhängig. $\lambda = -3f\bar{f}^3$ selbst ist ein Maß für die, durch Kollisionen verursachte, Entwicklung zum Gleichgewicht und daher immer negativ. Dieser Wert wird selbstverständlich immer kleiner, wenn $f = \rho/b$ verkleinert wird. Man könnte also annehmen, daß eine „dünne“ Anfangsbesetzung des Gitters nicht nur weniger Rechenaufwand, sondern auch eine gezielte Erhöhung der kinematischen Viskosität $\nu = -\frac{1}{4\lambda} - \frac{1}{8}$ (entspricht Verkleinerung der Reynoldszahl) zur Folge hat. Tatsächlich aber liefert $f \mapsto 0$ ein nicht hydrodynamisches Verhalten, dessen Ursache in der Erhöhung der mittleren freien Weglänge l_{mfp} der Teilchen zu finden ist. Geht $f \mapsto 0$, so divergiert l_{mfp} und überschreitet die makroskopische Längeneinheit L_{hydro} (In der Literatur wird L_{hydro} auch oft als hydrodynamische Längeneinheit bezeichnet). Dies widerspricht einer Grundvoraussetzung der Kontinuumsmechanik $l_{mfp} \ll L_{hydro}$. Es ist daher unabdingbar, die mittlere freie Weglänge der Teilchen klein gegenüber der makroskopischen Längeneinheit zu halten.

Erweitert man das FHP-1 Modell um ein ruhendes Teilchen, so ergibt sich eine höhere Kollisionswahrscheinlichkeit p für die einzelnen Partikel. Dies hat zur Folge, daß sich die mittlere freie Weglänge verkleinert:

$$l_{mfp} \approx \frac{1}{p} \tag{7.173}$$

Dies erklärt den bevorzugten Gebrauch von FHP-Gittergasen mit zusätzlich ruhenden Teilchen gegenüber dem FHP-1 Gas.

Tatsächlich werden in letzter Zeit aber immer häufiger sogenannte Gitter-Boltzmann Verfahren zur Strömungssimulation benutzt. Ein Vorteil dieser Verfahren ist die bessere Variierbarkeit gegebener Parameter, wie z.B. der Reynoldszahl. Auf diese Verfahren wird im folgenden Kapitel dieser Arbeit näher eingegangen.

Kapitel 8

3-dim. Gitter-Boltzmann Verfahren

Literatur: Sowohl das vorliegende, als auch das folgende Kapitel orientieren sich an der Arbeit von M. Schelkle [1], dessen Modellierungsansatz zur Simulation von dreidimensionalen Zweiphasenströmungen hier zum Teil übernommen wurde.

Des weiteren sind im Zusammenhang mit Gitter-Boltzmann Simulationen die Arbeiten von Takada/Tsutahara [48], Chopard [61], [62], Chen [63], [64], [65], [66] und Skordos [67] zu nennen.

Im folgenden Paragraphen soll lediglich auf die grundlegenden geometrischen Probleme von 3-dimensionalen Gitter-Boltzmann Simulationen eingegangen werden.

8.1 3-dimensionale Gitter

Voraussetzung für Gittergassimulationen und Gitter-Boltzmann Simulationen sind regelmäßig aufgebaute homogene Gitter, denn nur für solche Gitter lassen sich Vorschriften für die Änderung der Teilchengeschwindigkeiten aufstellen, die dann für alle Gitterknoten gelten und gleichzeitig ausgeführt werden können. Es handelt sich folglich um spezielle Bravais Gitter.

Definition 8.1

Ein Bravais Gitter B in D Dimensionen ist definiert durch D linear unabhängige Vektoren \vec{b}_i . Ein Punkt \vec{x} des D -dimensionalen Raumes ist Git-

terpunkt, falls ganze Zahlen x_1, \dots, x_D existieren, so daß:

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^D x_i \vec{b}_i \quad (8.1)$$

Bemerkung 8.1

Die in dieser Arbeit betrachteten Bravais Gitter haben zusätzlich die Eigenschaft, daß alle Vektoren \vec{b}_i gleich lang sein müssen $\|\vec{b}_i\| = h$.

Eine Folgerung aus obiger Definition ist die Tatsache, daß alle Punkte eines Bravais Gitters identische Umgebungen haben. Betrachtet man also die Nachbarpunkte P_i eines beliebigen Gitterpunktes O , so liefern auch die $\vec{c}_i := \vec{OP}_i$ eine Beschreibung des Bravais Gitters. Dies sind genau die Geschwindigkeitsvektoren, mit denen sich die Teilchen eines Gittergases (bzw. die Verteilungsfunktionen eines Gitter-Boltzmann Verfahrens) in einem Zeitschritt δt zum nächsten Nachbarn bewegen $\|\vec{c}_i\| = c = h/\delta t$.

Kombinationen dieser Vektoren bilden nun Tensoren k -ter Stufe $C_{\alpha_1 \dots \alpha_k}^{(k)} = \sum_i c_{i\alpha_1} \dots c_{i\alpha_k}$, deren Invarianzeigenschaften gegenüber Isometrien des Raumes entscheidend für die Brauchbarkeit eines Bravais Gitters zum Zwecke von Gittergassimulationen sind. Dies wurde für den 2-dimensionalen Fall im Kapitel 7 ausführlich beschrieben, mit dem Resultat, daß das hexagonale Gitter dem Quadratgitter vorzuziehen ist, da nur für dieses der Tensor 4. Stufe $C^{(4)}$ isotrop ist.

Die Wahl eines geeigneten Gitters in 3 Dimensionen gestaltet sich wesentlich komplizierter, da dort kein Bravais Gitter mit hinreichend vielen Symmetrien existiert, um isotrope Tensoren 4. Stufe zu gewährleisten. Aus der Literatur sind zwei unterschiedliche Ansätze bekannt, dieses Problem zu lösen:

1. Berechnung mittels des 4-dimensionalen FCHC-Gitters.
2. Gewichtete Kombination aus zwei 3-dimensionalen kubischen Bravais Gittern.

Nachdem im Folgenden beide Modelle vorgestellt werden, erfolgt eine geometrische Betrachtung, die eine Verbindung zwischen ihnen herstellt.

8.1.1 Das FCHC-Gitter (face centered hypercubic)

Im Gegensatz zum 3-dimensionalen Raum existiert in vier räumlichen Dimensionen ein Bravais Gitter, welches isotrope Tensoren 2. und 4. Stufe erzeugt. Dieses Bravais Gitter ist durch folgende Vektoren $\vec{OP}_i = \vec{c}_i$ definiert:

$$\vec{c}_i = \frac{h}{\delta t} \cdot perm(\pm 1, \pm 1, 0, 0) \quad (8.2)$$

Dies ergibt für jeden Gitterpunkt insgesamt 24 Nachbarknoten (6 mögliche Permutationen und 4 Varianten die Vorzeichen zu wählen). Diese 24 Vektoren \vec{c}_i bilden nun ein Objekt des 4-dimensionalen Raumes, welches als 24-Polytop P_{24} bezeichnet wird, und dessen Symmetriegruppe genügend Isometrien enthält, um isotrope Tensoren $C^{(i)}$ 2. und 4. Stufe zu garantieren. Die grundlegende Idee zur 3-dimensionalen Simulation mittels des FCHC-Gitters besteht darin, die makroskopischen Größen auf drei Dimensionen zu projizieren. Dies wird erreicht, indem man das FCHC-Gitter so auslegt, daß in der vierten räumlichen Dimension lediglich die Werte $0, \pm 1$ vorkommen, und an allen Gitterpunkten der Form $(a, b, c, \pm 1)$ symmetrische Randbedingungen gesetzt werden. Die Teilchenentwicklung an den Punkten $(a, b, c, 0)$ (diese formen eine 3-dimensionale Hyperebene des 4-dimensionalen Raumes) liefert dann die 3-dimensionale Simulation. Die Partikelbewegungen und Partikelstöße werden allerdings im 4-dimensionalen Raum berechnet. Der Vorteil dieses Modells gegenüber dem Folgenden liegt im eindeutigen Geschwindigkeitsbetrag aller Teilchen. Dem gegenüber besteht hier der Nachteil, alle Berechnungen in vier Dimensionen ausführen zu müssen, was einen erheblich größeren Rechen- und Speicheraufwand erfordert. Daher besitzt das folgende Verfahren eine erheblich bessere Auflösung.

8.1.2 Gewichtete Kombination 3-dimensionaler Gitter

Eine weitere Gittervariante, die isotrope Tensoren 2. und 4. Stufe garantiert, entsteht durch die Kombination von 3-dimensionalen kubischen Bravais Gittern G^σ . Insgesamt existieren drei solche Gitter:

1. Das einfache kubische Gitter $G^{\sigma=1}$:

$$\vec{c}_{i(\sigma=1)} = \frac{h}{\delta t} \cdot perm(\pm 1, 0, 0), \quad b = 6, \quad |\vec{c}_i| := c = \frac{h}{\delta t} \quad (8.3)$$

2. Das flächenzentrierte kubische Gitter $G^{\sigma=2}$:

$$\vec{c}_{i(\sigma=2)} = \frac{h}{\delta t} \cdot perm(\pm 1, \pm 1, 0), \quad b = 12, \quad |\vec{c}_i| = \sqrt{2}c \quad (8.4)$$

3. Das raumzentrierte kubische Gitter $G^{\sigma=3}$:

$$\vec{c}_{i(\sigma=3)} = \frac{h}{\delta t} \cdot perm(\pm 1, \pm 1, \pm 1), \quad b = 8, \quad |\vec{c}_i| = \sqrt{3}c \quad (8.5)$$

Hierbei bezeichnet h den orthogonalen Abstand zweier benachbarter Gitterknoten, und b die Anzahl der Nachbarn eines Knotens.

Diese erzeugen zwar isotrope Tensoren 2. Stufe,

$$\begin{aligned} C_{(\sigma=1)}^{(2)} &= 2c^2\delta^{(2)} \\ C_{(\sigma=2)}^{(2)} &= 8c^2\delta^{(2)} \\ C_{(\sigma=3)}^{(2)} &= 8c^2\delta^{(2)} \end{aligned} \quad (8.6)$$

allerdings anisotrope Tensoren 4. Stufe:

$$\begin{aligned} C_{(\sigma=1)}^{(4)} &= 2c^4\delta^{(4)} \\ C_{(\sigma=2)}^{(4)} &= 4c^4(\Delta^{(4)} - \delta^{(4)}) \\ C_{(\sigma=3)}^{(4)} &= 8c^4(\Delta^{(4)} - 2\delta^{(4)}) \end{aligned} \quad (8.7)$$

Hierbei sind $\delta^{(2)}$ das Kroneckersymbol 2. Stufe, sowie $\Delta^{(4)}$ isotrope Tensoren. Dagegen ist $\delta^{(4)}$, das Kroneckersymbol 4. Stufe, ein anisotroper Tensor (siehe Satz 7.1):

$$\delta^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (8.8)$$

$$\delta^{(4)} = \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta = \gamma = \delta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (8.9)$$

$$\Delta^{(4)} = \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad (8.10)$$

Die gewichtete Kombination aller drei kubischen Bravais Gitter ergibt allerdings für die Tensoren k-ter Stufe:

$$C_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k}^{(k)} = \sum_{\sigma=1}^3 \sum_{i=1}^b w^{(\sigma)} c_{i\alpha_1(\sigma)} \dots c_{i\alpha_k(\sigma)} \quad (8.11)$$

Unter Berücksichtigung von 8.6 ergibt sich für den resultierenden Tensor 2. Stufe:

$$C^{(2)} = 2c^2 \left[w^{(1)} + 4w^{(2)} + 4w^{(3)} \right] \delta^{(2)} \quad (8.12)$$

Dieser ist, unabhängig von den Gewichtungsfaktoren $w^{(\sigma)}$, nach Satz 7.1 immer isotrop.

Unter Berücksichtigung von 8.7 ergibt sich für den resultierenden Tensor 4. Stufe:

$$C^{(4)} = 4c^4 \left[w^{(2)} + 2w^{(3)} \right] \Delta^{(4)} + 2c^4 \left[w^{(1)} - 2w^{(2)} - 8w^{(3)} \right] \delta^{(4)} \quad (8.13)$$

Dieser ist nach Satz 7.1 genau dann isotrop, wenn gilt:

$$w^{(1)} = 2w^{(2)} + 8w^{(3)} \quad (8.14)$$

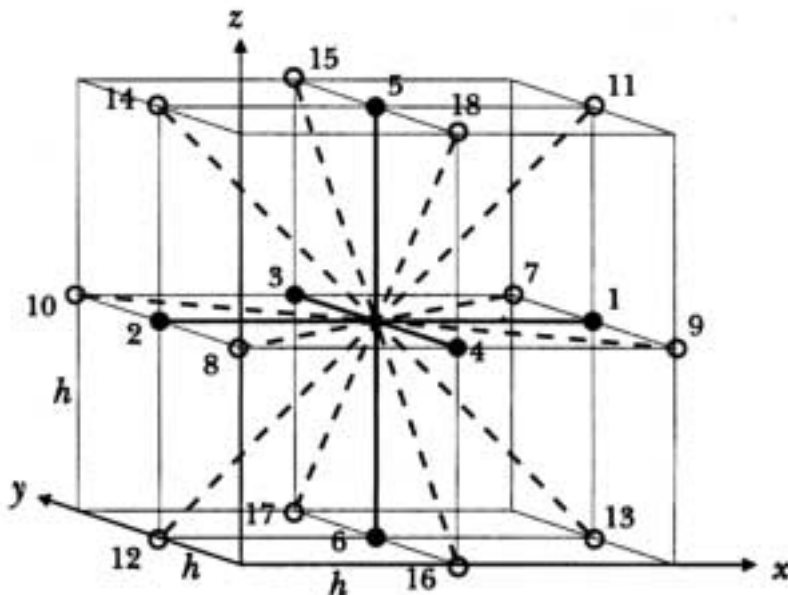


Abbildung 8.1: Kombination aus dem einfach kubischen und dem flächenzentrierten kubischen Gitter.

Wählt man beispielsweise $w^{(1)} = 2w^{(2)}$, $w^{(3)} = 0$; dies entspricht einer gewichteten Kombination des einfachen kubischen Gitters mit dem flächenzentrierten kubischen Gitter, so erhält man für jeden Gitterknoten 18 Nachbarknoten (6 vom einfach kubischen Gitter und 12 vom flächenzentrierten kubischen Gitter). Das bedeutet, man erhält auch Geschwindigkeitsvektoren $c \cdot perm(\pm 1, 0, 0)$, $c \cdot perm(\pm 1, \pm 1, 0)$, die allerdings nicht alle den gleichen Betrag haben (siehe Abbildung 8.1).

Im später beschriebenen Gitter-Boltzmann Verfahren wird auf diesem Gitter gerechnet. Die dabei benutzten Gewichtungsfaktoren zum Erhalt isotroper Tensoren 4. Stufe ergeben sich zusätzlich aus der dort beschriebenen Chapman-Enskog Methode.

8.1.3 Projektion des P_{24} Polytops

Im Folgenden wird ein enger geometrischer Zusammenhang zwischen dem FCHC-Gitter und der gewichteten Kombination des einfachen kubischen Gitters mit dem flächenzentrierten kubischen Gitter hergeleitet.

Dazu betrachtet man die senkrechte Projektion des P_{24} Polytops (Elementarzelle des FCHC-Gitters) auf den 3-dimensionalen Raum. Bei der Projektion der Vektoren $\vec{c}_i = c \cdot perm(\pm 1, \pm 1, 0, 0)$ entstehen zwei unterschiedliche Arten von Vektoren. Es existieren zwölf 3-dimensionale Richtungsvektoren, die im

4-dimensionalen Raum lediglich ein Urbild haben:

$$\vec{c}_i^{(1)} = c \cdot \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0,) \quad (8.15)$$

und zusätzliche sechs Vektoren mit jeweils 2 Urbildern:

$$\vec{c}_i^{(2)} = c \cdot \text{perm}(\pm 1, 0, 0,) \quad (8.16)$$

So hat z.B. der Vektor $c \cdot (1, 1, 0)$ lediglich das Urbild $c \cdot (1, 1, 0, 0)$, während die Vektoren $c \cdot (1, 0, 0, 1)$ und $c \cdot (1, 0, 0, -1)$ beide auf den Vektor $c \cdot (1, 0, 0)$ projiziert werden.

Betrachtet man nun die 3-dimensionalen Vektoren mit einem Urbild, so sieht man, daß diese die Elementarzelle des flächenzentrierten kubischen Gitters definieren, während die Vektoren mit zwei Urbildern die Elementarzelle des einfachen kubischen Gitters definieren. Daraus resultiert die oben errechnete zweifache Gewichtung des einfachen kubischen Gitters gegenüber dem flächenzentrierten kubischen Gitter.

8.2 Das Gitter-Boltzmann Verfahren

Das Gitter-Boltzmann Verfahren stellt eine Weiterentwicklung der Gittergasmodelle dar. Der wesentliche Unterschied zu den Gittergasen liegt in der Ersetzung der diskreten Teilchen durch deren kontinuierliche Geschwindigkeitsverteilungsfunktion. Diese beschreibt die Verteilung der Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten aller Teilchen und wird nachfolgend auch kurz als Verteilungsfunktion bezeichnet. Bei den Gittergasmodellen ergibt sich diese Verteilung indirekt, durch örtliche Mittelung der diskreten Teilchenpopulation an den Gitterknoten; beim Gitter-Boltzmann Verfahren wird sie zu einem Zeitpunkt $t + \delta t$ direkt aus ihrem Wert zur Zeit t berechnet.

8.3 Die Verteilungsfunktion

Die Verteilungsfunktion $f(\vec{c}, \vec{x}, t)$ hat ihren Ursprung in der kinetischen Gastheorie (siehe z.B. Bird [28]). Dort beschreibt sie die Verteilung der kontinuierlichen Geschwindigkeitskoordinaten \vec{c} und der kontinuierlichen Ortskoordinaten \vec{x} zu einem Zeitpunkt t . Da hier mittels einer gewichteten Kombination zweier kubischer Bravais Gitter simuliert wird, sind diese Größen (Geschwindigkeit und Ort) diskretisiert. Während die Ortsdiskretisierung durch Verkleinerung der Knotenabstände ($h \mapsto 0$) beliebig verfeinert werden kann, bleibt die Geschwindigkeitsdiskretisierung in jedem Fall erhalten.

Daher wird die, in der Geschwindigkeit diskrete Verteilungsfunktion, in verschiedene Klassen unterteilt:

$$f(\vec{c}, \vec{x}, t) = f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \quad \sigma \in \{1, 2\} \quad (8.17)$$

Hierbei bezeichnet σ das jeweilige Untergitter, und i die Geschwindigkeitsrichtung auf dem jeweiligen Untergitter. Mit anderen Worten gibt $f_{\sigma i}(\vec{x}, t)$ an, wieviele Teilchen (gemeint ist eigentlich die Teilchendichte, d.h. $f_{\sigma i}$ wird mit der Gesamtzahl aller Teilchen normiert) mit der Geschwindigkeit $\vec{c}_{\sigma i}$ sich zur Zeit t am Ort \vec{x} befinden. (Damit ist $f_{\sigma i}(\vec{x}, t)$ das Analogon zu N_i bzw. $\langle n_i \rangle$ im vorigen Kapitel 7.)

Die Werte von $f_{\sigma i}$ verändern sich nun durch Partikelbewegungen und Partikelkollisionen. Diese Veränderung während eines diskreten Zeitschrittes δt kann durch die Gitter-Boltzmann Gleichung beschrieben werden:

$$f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t + \delta t) - f_{\sigma i}(\vec{x}, t) = \Delta_{\sigma i}(\vec{f}(\vec{x}, t)) \quad (8.18)$$

Wie gehabt, beschreibt die linke Seite obiger Gleichung die Änderung von $f_{\sigma i}$, hervorgerufen durch die Bewegung der Teilchen zum jeweiligen Nachbar-knoten innerhalb eines diskreten Zeitschrittes δt , während die rechte Seite die Änderung von $f_{\sigma i}$ auf Grund von Teilchenkollisionen beschreibt.

Der Kollisionsoperator $\Delta_{\sigma i}$ soll nun aber nicht mehr, wie beispielsweise in Gleichung 7.147, die Teilchenkollisionen im Detail beschreiben (explizite Kollisionsgesetze sind in diesem Modell nicht definiert), sondern die Verteilungsfunktion $f_{\sigma i}$ mittels der sogenannten Relaxationszeit τ an die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht $f_{\sigma i}^{(0)}$ annähern:

$$\Delta_{\sigma i}(\vec{f}(\vec{x}, t)) = -\frac{\delta t}{\tau} \left[f_{\sigma i}(\vec{x}, t) - f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) \right] \quad (8.19)$$

Ein solcher Kollisionsoperator wird in der Literatur als Krookscher Stoßterm bezeichnet. Er besagt qualitativ, daß sich die Verteilungsfunktion so lange ändern wird, bis ein lokaler Gleichgewichtszustand erreicht ist. Dabei erfolgt die Veränderung um so schneller, je größer die Abweichung vom Gleichgewicht ist. Aus den Gleichungen 8.18 und 8.19 erkennt man nun, daß die rein kollisionsbedingte Änderung der Verteilungsfunktion gegeben ist durch:

$$f_{\sigma i}(\vec{x}, t + \delta t) = \left(1 - \frac{\delta t}{\tau}\right) f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{\tau} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) \quad (8.20)$$

Diese explizite Berechnung des Kollisionsvorganges ist der Grund für die hervorragende Effizienz des Gitter-Boltzmann Verfahrens.

Die Gesamtveränderung der Verteilungsfunktion, hervorgerufen durch Kollision und Fortschreiten der Teilchen während des Zeitschrittes δt , wird beschrieben durch:

$$f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t + \delta t) = \left(1 - \frac{\delta t}{\tau}\right) f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{\tau} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) \quad (8.21)$$

Mit dieser einfachen Berechnungsmethode kann man die Verteilungsfunktion und damit die **makroskopischen Zustandsgrößen** zu allen Zeiten berechnen:

1. Die Teilchendichte

$$n(\vec{x}, t) = \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \quad (8.22)$$

ergibt sich aus dem sogenannten nullten Moment der Verteilungsfunktion.

2. Die Massendichte

$$\rho(\vec{x}, t) = m \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}(\vec{x}, t) = m \cdot n(\vec{x}, t) \quad (8.23)$$

ergibt sich aus der Multiplikation der Teilchendichte mit m . Hierbei ist m die Masse eines Teilchens.

3. Die Impulsdichte

$$\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \quad (8.24)$$

ergibt sich aus dem sogenannten ersten Moment der Verteilungsfunktion.

4. Die Geschwindigkeit

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{n(\vec{x}, t)} \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \quad (8.25)$$

ergibt sich aus der Impulsdichte.

5. Der Impulsstromtensor

$$T_{\alpha\beta} = m \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i\alpha} c_{\sigma i\beta} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \quad (8.26)$$

ergibt sich aus dem sogenannten zweiten Moment der Verteilungsfunktion.

Ziel muß es nun noch sein, die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht $f_{\sigma i}^{(0)}$ zu ermitteln. Für diese wird folgender Ansatz gewählt:

$$\begin{aligned} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) &= n(\vec{x}, t) \left[A_{\sigma} + B_{\sigma}(\vec{c}_{\sigma i} \vec{u}) + C_{\sigma}(\vec{c}_{\sigma i} \vec{u})^2 + D_{\sigma} u^2 \right] \iff (8.27) \\ f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) &= n(\vec{x}, t) \left[A_{\sigma} + B_{\sigma} c_{\sigma i \alpha} u_{\alpha} + C_{\sigma} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} u_{\alpha} u_{\beta} + D_{\sigma} u_{\alpha} u_{\beta} \delta_{\alpha \beta} \right] \end{aligned}$$

Hierbei sind $A_{\sigma}, B_{\sigma}, C_{\sigma}, D_{\sigma}$ noch zu bestimmende Konstanten.

Bemerkung 8.2

Es stellt sich an dieser Stelle die Frage, wieso obiger Ansatz für die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht gerechtfertigt ist. Hierzu ist es sinnvoll, noch einmal die Herleitung der Gleichgewichtsverteilung 7.49 im Paragraphen 7.2 zu betrachten. Es wird dann leicht ersichtlich, daß sich der Ansatz 8.27 aus folgendem Potenzreihenansatz ergibt:

$$f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) \left[A_{\sigma i} + \vec{B}_{\sigma i} \vec{u} + \vec{u}^T \vec{D}_{\sigma i} \vec{u} + O(u^3) \right] \quad (8.28)$$

In Komponentenschreibweise ergibt sich:

$$f_{\sigma i}^{(0)} = n \left[A_{\sigma i} + B_{\sigma i \alpha} u_{\alpha} + D_{\sigma i \alpha \beta} u_{\alpha} u_{\beta} + O(u^3) \right] \quad (8.29)$$

Die Tatsache, daß

$$\begin{aligned} A_{\sigma i} &= A_{\sigma j} = A_{\sigma} \\ B_{\sigma i \alpha} &= B_{\sigma} c_{\sigma i \alpha} \\ D_{\sigma i \alpha \beta} &= C_{\sigma} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} + D_{\sigma} \delta_{\alpha \beta} \end{aligned} \quad (8.30)$$

gilt, ergibt sich aus, zu Paragraph 7.2 analogen Symmetriebetrachtungen. Des weiteren erkennt man leicht die formale Ähnlichkeit der Fermi-Dirac Verteilung 7.105 mit Gleichung 8.27.

Gleichung 8.27 ergibt sich aber auch aus einer Taylorreihenentwicklung der Maxwellverteilung bis zur zweiten Ordnung in \vec{u}

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= A n e^{-B(\vec{c} - \vec{u})^2} \\ &\approx n \left[A e^{-Bc^2} + 2AB e^{-Bc^2} (\vec{c} \vec{u}) + 2AB^2 e^{-Bc^2} (\vec{c} \vec{u})^2 - AB e^{-Bc^2} u^2 \right] \end{aligned}$$

für $\vec{c} \gg \vec{u}$, was für inkompressible Strömungen in guter Näherung erfüllt ist. (Tatsächlich ist die Bedingung $\vec{c} \gg \vec{u}$ äquivalent zu einer kleinen Machzahl: $Ma = \vec{u}/\vec{c}_s$, wie sich später in Gleichung 8.73 bzw. Gleichung 8.95 herausstellen wird.)

Wie bereits dargelegt wurde, ist es sinnvoll, neben dem einfachen kubischen Gitter ($\sigma = 1$) und dem flächenzentrierten kubischen Gitter ($\sigma = 2$) noch weitere Ruheteilchen mit der Geschwindigkeit null einzufügen ($\sigma = 0$). Damit ergeben sich für die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht zehn zu ermittelnde Konstanten $A_\sigma, B_\sigma, C_\sigma, D_\sigma$:

$$f_{1i}^{(0)}(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) \left[A_1 + B_1(\vec{c}_{1i}\vec{u}) + C_1(\vec{c}_{1i}\vec{u})^2 + D_1u^2 \right] \quad (8.31)$$

$$f_{2i}^{(0)}(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) \left[A_2 + B_2(\vec{c}_{2i}\vec{u}) + C_2(\vec{c}_{2i}\vec{u})^2 + D_2u^2 \right] \quad (8.32)$$

$$f_0^{(0)}(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t) \left[A_0 + D_0u^2 \right] \quad (8.33)$$

Den obigen Ansatz für die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht setzt man nun in die Definitionsgleichungen der makroskopischen Zustandsgrößen Teilchendichte 8.22, Geschwindigkeit 8.25 und Impulsstromtensor 8.26 ein. Dabei setzt man voraus, daß sich Dichte und Impuls sowohl mittels der Verteilungsfunktionen $f_{\sigma i}$, als auch durch die Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_{\sigma i}^{(0)}$ berechnen läßt.

Man erhält:

$$\begin{aligned} n(\vec{x}, t) &= n(\vec{x}, t) \sum_{\sigma=0}^2 \sum_i \left[A_\sigma + B_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u}) + C_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u})^2 + D_\sigma u^2 \right] \\ \vec{u}(\vec{x}, t) &= \sum_{\sigma=0}^2 \sum_i \vec{c}_{\sigma i} \left[A_\sigma + B_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u}) + C_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u})^2 + D_\sigma u^2 \right] \\ T_{\alpha\beta}^{(0)} &= m \cdot n(\vec{x}, t) \sum_{\sigma=0}^2 \sum_i c_{\sigma i\alpha} c_{\sigma i\beta} \left[A_\sigma + B_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u}) + C_\sigma(\vec{c}_{\sigma i}\vec{u})^2 + D_\sigma u^2 \right] \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Tensoreigenschaften aus den Gleichungen 8.6 und 8.7 resultiert hieraus:

$$\begin{aligned} 1 &= A_0 + 6A_1 + 12A_2 + (2c^2C_1 + 8c^2C_2)\delta_{\alpha\beta}u_\alpha u_\beta + (D_0 + 6D_1 + 12D_2)u^2 \\ n u_\alpha &= n(2c^2B_1 + 8c^2B_2)\delta_{\alpha\beta}u_\beta \\ T_{\alpha\beta}^{(0)} &= \rho \left\{ (2c^2A_1 + 8c^2A_2)\delta_{\alpha\beta} + \left[2c^4C_1\delta_{\alpha\beta\gamma\delta} + 4c^4C_2(\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta\gamma\delta}) \right] u_\gamma u_\delta \right. \\ &\quad \left. + (2c^2D_1 + 8c^2D_2)\delta_{\alpha\beta}u^2 \right\} \end{aligned}$$

Damit die erste dieser drei Gleichungen erfüllt sein kann, muß gelten:

$$\begin{aligned} 1 &= A_0 + 6A_1 + 12A_2 \quad \wedge \\ 0 &= 2c^2(C_1 + 4C_2) + D_0 + 6D_1 + 12D_2 \end{aligned} \quad (8.34)$$

Diese Gleichungen garantieren die Massenerhaltung in den Teilchenkollisionen, sowie die Unabhängigkeit der Teilchendichte von der Strömungsgeschwindigkeit.

Aus der zweiten Gleichung folgt:

$$1 = 2c^2(B_1 + 4B_2) \quad (8.35)$$

Die dritte der obigen Gleichungen bedarf einer genaueren Betrachtung. Unter Berücksichtigung der Definitionsgleichung 8.10 ergibt sich:

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}u_\gamma u_\delta = \delta_{\alpha\beta}u^2 + 2u_\alpha u_\beta \quad (8.36)$$

Setzt man dieses Ergebnis in die dritte Gleichung ein, so vereinfacht sich diese zu:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(0)} = & \rho \left\{ \left[2c^2 A_1 + 8c^2 A_2 + (4c^4 C_2 + 2c^2 D_1 + 8c^2 D_2) u^2 \right] \delta_{\alpha\beta} \right. \\ & \left. + (2c^4 C_1 - 4c^4 C_2) \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\gamma u_\delta + 8c^4 C_2 u_\alpha u_\beta \right\} \end{aligned} \quad (8.37)$$

Vergleicht man dies mit der aus Gleichung 3.19 bekannten Form des nichtviskosen Spannungstensors,

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = p\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \quad (8.38)$$

so muß gelten:

$$\begin{aligned} 0 &= 4c^4 C_2 + 2c^2 D_1 + 8c^2 D_2 \quad \wedge \\ p &= \rho(2c^2 A_1 + 8c^2 A_2) \quad \wedge \\ 0 &= 2c^4 C_1 - 4c^4 C_2 \quad \wedge \\ \rho &= 8c^4 C_2 \rho \end{aligned} \quad (8.39)$$

Bemerkung 8.3

Mit diesen Gleichungen werden die, am Ende von Pragraph 7.5 angesprochenen, Hauptprobleme der Gittergase beseitigt:

1. Fehlende Galileiinvarianz
2. Geschwindigkeitsabhängiger Druck

Die ersten beiden Gleichungen in 8.39 sichern einen von der Geschwindigkeit unabhängigen Druck, wobei speziell die zweite Gleichung als thermische Zustandsgleichung aufgefaßt werden kann.

Die dritte Gleichung in 8.39 sichert die Isotropie des Impulsstromtensors. Die letzte Gleichung in 8.39 sichert die Galileiinvarianz der Bewegungsgleichungen, da nun im Gegensatz zu den Gittergasen $g(\rho) = 1$ gilt (siehe hierzu: Ende des Paragraphen 7.5).

Mit den Gleichungen 8.34, 8.35 und 8.39 stehen nun sieben Gleichungen für die zehn unbekanntenen Konstanten $A_\sigma, B_\sigma, C_\sigma, D_\sigma$ zur Verfügung.

Eine der drei noch fehlenden Bedingungen ergibt sich aus der Betrachtung des Nichtgleichgewichtszustandes mit Hilfe der Chapman-Enskog Methode.

Bemerkung 8.4

Der Chapman-Enskog Methode vorgreifend sei schon hier gesagt, daß die im nächsten Paragraphen ermittelte zusätzliche Bedingung an die Konstanten

$$B_1 = 2B_2 \quad (8.40)$$

lauten wird.

Diese ergibt sich natürlich auch aus den Vorbetrachtungen im Paragraphen 8.1, wo die zweifache Gewichtung des einfach kubischen Gitters gegenüber dem flächenzentrierten kubischen Gitter hergeleitet wurde.

Obwohl also die Beziehungen $A_1 = 2A_2, B_1 = 2B_2, C_1 = 2C_2, D_1 = 2D_2$ bekannt sind, und somit die Berechnung der Konstanten schon an dieser Stelle möglich ist, ist die Chapman-Enskog Methode zum einen notwendig zur Berechnung der Viskositäten, und zum anderen erleichtert sie die Berechnung der thermischen Zustandsgleichung unter Berücksichtigung zwischenmolekularer Kräfte im Paragraphen 9.2 erheblich.

8.4 Die Chapman-Enskog Methode

Die Chapman-Enskog Methode hat ihren Ursprung in der kinetischen Gastheorie. Dort stellt sie ein Lösungsverfahren für die, in Ort und Zeit kontinuierliche Boltzmann-Gleichung dar. Diese Gleichung ergibt sich durch die Taylorreihenentwicklung von $f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i}\delta t, t + \delta t)$ aus Gleichung 8.18 bis zur ersten Ordnung:

$$\begin{aligned} f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i}\delta t, t + \delta t) &= f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial t} \delta t + \frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}} \vec{c}_{\sigma i} \delta t \\ &= f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \delta t \partial_t f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \delta t c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (8.41)$$

Voraussetzung für den Abbruch der Taylorreihe sind kleine Zeitschritte δt und kleine Knotenabstände $h = |\vec{c}_{\sigma i}\delta t|$.

Setzt man dies in Gleichung 8.18 ein, so lautet die in Ort und Zeit kontinuierliche Gitter-Boltzmann Gleichung:

$$\frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}} \vec{c}_{\sigma i} = -\frac{1}{\tau} \left[f_{\sigma i}(\vec{x}, t) - f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) \right] \quad (8.42)$$

Diese ist noch diskret in den Teilchengeschwindigkeiten, entspricht ansonsten aber der bekannten Boltzmann-Gleichung mit Krook'schem Stoßterm, welche aus der kinetischen Gastheorie bekannt ist:

$$\frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}} \vec{c} = -\frac{1}{\tau} \left[f(\vec{x}, t) - f^{(0)}(\vec{x}, t) \right] \quad (8.43)$$

Der von Chapman und Enskog vorgeschlagene Ansatz geht davon aus, daß sich die Verteilungsfunktion mittels eines Störparameters ε als Potenzreihe darstellen läßt:

$$f_{\sigma i} = f_{\sigma i}^{(0)} + \varepsilon f_{\sigma i}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{\sigma i}^{(2)} + \dots \quad (8.44)$$

Hierbei ist der Störparameter ε proportional zur Knudsenzahl $Kn = l/L_{hydro}$, also zum Verhältnis der mittleren freien Weglänge l zur charakteristischen makroskopischen Länge L_{hydro} . Man setzt voraus, daß sich das Fluid wie ein Kontinuum verhält, d.h. $Kn \ll 1$ gilt.

$f_{\sigma i}^{(1)}$, $f_{\sigma i}^{(2)}$ stellen Abweichungen entsprechender Ordnung von der Gleichgewichtsverteilung $f_{\sigma i}^{(0)}$ dar, die mittels des Störparameters gewichtet werden. Die örtlichen und zeitlichen Gradienten werden ebenfalls durch Potenzen des Störparameters ε ausgedrückt:

$$\partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}, \quad \text{und} \quad \partial_\alpha = \varepsilon \partial_{\alpha_1} \quad (8.45)$$

Wie man aus den obigen Ansätzen erkennt, werden örtliche Gradienten bis zur ersten Ordnung, zeitliche Gradienten jedoch bis zur zweiten Ordnung, in ε berücksichtigt. Diese sogenannte „long-wavelength, low-frequency“ Approximation wurde von Frisch eingeführt [50]. Zur Ableitung der Navier-Stokes-Gleichungen sind dabei insbesondere zwei unterschiedliche Zeitskalen notwendig, die einerseits den konvektiven Charakter und andererseits und insbesondere den diffusiven Charakter der Gleichung beschreiben. (Betrachtet man lediglich Gradienten erster Ordnung, so ergibt sich die Euler-Gleichung.) Man betrachtet nun die Taylorreihenentwicklung von $f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t + \delta t)$ aus Gleichung 8.18 bis zur zweiten Ordnung:

$$\begin{aligned} f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t + \delta t) &= f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial t} \delta t + \frac{\partial f_{\sigma i}(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}} \vec{c}_{\sigma i} \delta t + \\ &\quad + \frac{1}{2} (\vec{c}_{\sigma i} \delta t, \delta t) \cdot H_{f_{\sigma i}}(\vec{x}, t) \cdot (\vec{c}_{\sigma i} \delta t, \delta t)^T \\ &= f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \delta t \partial_t f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \delta t c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \\ &\quad + \frac{\delta t^2}{2} \partial_t \partial_t f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \delta t^2 c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha \partial_t f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \\ &\quad + \frac{\delta t^2}{2} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (8.46)$$

Hierbei bezeichnet $H_{f_{\sigma i}}$ die Hessematrix von $f_{\sigma i}$. Setzt man dies in Gleichung 8.18 ein, so erhält man in Indexschreibweise:

$$\begin{aligned} \delta t \partial_t f_{\sigma i} + \delta t c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i} + \frac{\delta t^2}{2} \partial_t \partial_t f_{\sigma i} + \delta t^2 c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha \partial_t f_{\sigma i} + \frac{\delta t^2}{2} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_{\sigma i} \\ = -\frac{\delta t}{\tau} \left[f_{\sigma i} - f_{\sigma i}^{(0)} \right] \end{aligned} \quad (8.47)$$

Die sechs Terme dieser Gleichung werden nun gemäß 8.44 und 8.45 als Potenzreihen in ε ausgedrückt:

$$\begin{aligned} \partial_t f_{\sigma i} &= \varepsilon \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + \varepsilon^2 \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(1)} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} f_{\sigma i}^{(0)} + O(\varepsilon^3) \\ c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i} &= \varepsilon c_{\sigma i \alpha_1} \partial_{\alpha_1} f_{\sigma i}^{(0)} + \varepsilon^2 c_{\sigma i \alpha_1} \partial_{\alpha_1} f_{\sigma i}^{(1)} + O(\varepsilon^3) \\ \partial_t \partial_t f_{\sigma i} &= \varepsilon^2 \partial_{t_1} \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + O(\varepsilon^3) \\ c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha \partial_t f_{\sigma i} &= \varepsilon^2 c_{\sigma i \alpha_1} \partial_{\alpha_1} \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + O(\varepsilon^3) \\ c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_{\sigma i} &= \varepsilon^2 c_{\sigma i \alpha_1} c_{\sigma i \beta_1} \partial_{\alpha_1} \partial_{\beta_1} f_{\sigma i}^{(0)} + O(\varepsilon^3) \\ f_{\sigma i} - f_{\sigma i}^{(0)} &= \varepsilon f_{\sigma i}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{\sigma i}^{(2)} + O(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (8.48)$$

Da in den obigen Gleichungen alle örtlichen Gradienten nur in erster Ordnung auftreten, wird im Folgenden der Index 1 bei den örtlichen Gradienten weggelassen.

Setzt man obige Gleichungen in 8.47 ein, so ergibt sich bis zur ersten Ordnung in ε :

$$\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{(1)} \quad (8.49)$$

Bis zur zweiten Ordnung in ε ergibt sich (unter Berücksichtigung von 8.49):

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(1)} + \partial_{t_2} f_{\sigma i}^{(0)} + c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha f_{\sigma i}^{(1)} + \frac{\delta t}{2} \partial_{t_1} \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + \delta t c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha \partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} \\ + \frac{\delta t}{2} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{(2)} \end{aligned} \quad (8.50)$$

Mit Hilfe von 8.49 läßt sich diese Gleichung noch vereinfachen. Nach kurzer Rechnung erhält man:

$$\partial_{t_2} f_{\sigma i}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) (\partial_{t_1} + c_{\sigma i \alpha} \partial_\alpha) f_{\sigma i}^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{(2)} \quad (8.51)$$

Mit Gleichung 8.49 bzw. Gleichung 8.51 stehen also die kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichungen 1. und 2. Ordnung in ε zur Verfügung. Aus Gleichung 8.49 läßt sich $f_{\sigma i}^{(1)}$ näherungsweise aus $f_{\sigma i}^{(0)}$ berechnen. Gleichung 8.51 ermöglicht die Berechnung von $f_{\sigma i}^{(2)}$ aus $f_{\sigma i}^{(0)}$ und $f_{\sigma i}^{(1)}$.

Zur Herleitung der Kontinuitätsgleichung betrachtet man nun das nullte Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 1. bzw. 2. Ordnung. Zur Herleitung der Navier-Stokes Gleichung betrachtet man das erste Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 1. bzw. 2. Ordnung. Da die Gleichungen 8.22 und 8.25 sowohl für $f_{\sigma i}$ als auch für $f_{\sigma i}^{(0)}$ gelten (letzteres wurde in Paragraph 8.3 zur Bestimmung der unbekanntenen Konstanten im Ansatz der Gleichgewichtsverteilung ausgenutzt), ergibt sich, daß die nullten und ersten Momente der Verteilungsfunktionen höherer Ordnung verschwinden:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(k)} &= 0 \quad \text{für } k > 0 \\ \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}^{(k)} &= 0 \quad \text{für } k > 0 \end{aligned} \quad (8.52)$$

8.4.1 Herleitung der Kontinuitätsgleichung

Das nullte Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 1. Ordnung in ε ergibt:

$$\partial_{t_1} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(0)} + \partial_{\alpha} \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(1)} \quad (8.53)$$

Der Term auf der rechten Seite verschwindet nach Gleichung 8.52, und durch die Definitionsgleichungen für Dichte und Geschwindigkeit ergibt sich nach Multiplikation mit der Teilchenmasse m :

$$\partial_{t_1} \rho + \partial_{\alpha} \rho u_{\alpha} = 0 \quad (8.54)$$

Das nullte Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 2. Ordnung in ε ergibt:

$$\partial_{t_2} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) (\partial_{t_1} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(1)} + \partial_{\alpha} \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(1)}) = -\frac{1}{\tau} \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(2)}$$

Auf Grund von Gleichung 8.52 ist nur der erste Term der linken Seite ungleich Null, und es verbleibt nach Multiplikation mit der Teilchenmasse m :

$$\partial_{t_2} \rho = 0 \quad (8.55)$$

Die Dichte ändert sich auf der zweiten Zeitskala nicht mehr und ist damit keiner Diffusion unterworfen.

Die Addition der Kontinuitätsgleichung auf beiden Zeitskalen 8.54 und 8.55 ergibt:

$$\varepsilon \partial_{t_1} \rho + \varepsilon \partial_\alpha \rho u_\alpha + \varepsilon^2 \partial_{t_2} \rho = 0 \quad (8.56)$$

Die Rückskalierung mittels 8.45 liefert genau die bekannte Kontinuitätsgleichung:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0 \quad (8.57)$$

Das Gitter-Boltzmann Verfahren approximiert die Kontinuitätsgleichung der Hydrodynamik also bis zur zweiten Ordnung in ε .

8.4.2 Herleitung der Navier-Stokes Gleichung

Das erste Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 1. Ordnung in ε ergibt:

$$\partial_{t_1} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(0)} + \partial_\alpha \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(1)} \quad (8.58)$$

Der Term auf der rechten Seite verschwindet nach Gleichung 8.52 und durch die Definitionsgleichungen für Impulsdichte und Impulsstromtensor (siehe 8.24 und 8.26) ergibt sich nach Multiplikation mit der Teilchenmasse m :

$$\partial_{t_1} \rho u_\alpha + \partial_\alpha T_{\alpha\beta}^{(0)} = 0 \quad (8.59)$$

Die Konstanten im Ansatz der Gleichgewichtsverteilung wurden im Paragraph 8.3 so bestimmt, daß gilt:

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = p \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \quad (8.60)$$

Einsetzen in Gleichung 8.59 liefert, nach Rücktransformation der Zeit, die Impulsgleichung erster Ordnung in ε . Dies ist aber genau die Euler-Gleichung der Hydrodynamik:

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\alpha p \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\beta = 0 \quad (8.61)$$

$$\iff \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (8.62)$$

Das erste Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 2. Ordnung in ε ergibt:

$$\begin{aligned} & \partial_{t_2} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) \left(\partial_{t_1} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(1)} + \partial_\alpha \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(1)} \right) \\ & = -\frac{1}{\tau} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(2)} \end{aligned} \quad (8.63)$$

Wegen Gleichung 8.52 sind nur der erste und der letzte Term der linken Seite ungleich Null, und es verbleibt nach Multiplikation mit der Teilchenmasse m gerade die Impulsgleichung zweiter Ordnung in ε :

$$\partial_{t_2} \rho u_\alpha + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) \partial_\alpha T_{\alpha\beta}^{(1)} = 0 \quad (8.64)$$

Zur Ableitung der Navier-Stokes Gleichung (und damit der Viskositäten) muß $T_{\alpha\beta}^{(1)}$ noch durch makroskopische Größen ausgedrückt werden. Dazu setzt man nun in $T_{\alpha\beta}^{(1)}$ Gleichung 8.49 aufgelöst nach $f_{\sigma i}^{(1)}$ ein und erhält:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(1)} &= m \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(1)} \\ &= m \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \left[-\tau (\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + c_{\sigma i \gamma} \partial_\gamma f_{\sigma i}^{(0)}) \right] \\ &= -\tau m \left[\partial_{t_1} \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(0)} + \partial_\gamma \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} c_{\sigma i \gamma} f_{\sigma i}^{(0)} \right] \\ &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + m \partial_\gamma \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} c_{\sigma i \gamma} f_{\sigma i}^{(0)} \right] \end{aligned} \quad (8.65)$$

Für die Gleichgewichtsverteilung $f_{\sigma i}^{(0)}$ wird nun der Ansatz aus 8.27 eingesetzt und man erhält:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma \rho \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} c_{\sigma i \gamma} (A_\sigma + B_\sigma c_{\sigma i \delta} u_\delta \right. \\ &\quad \left. + C_\sigma c_{\sigma i \delta} c_{\sigma i \epsilon} u_\delta u_\epsilon + D_\sigma u^2) \right] \end{aligned} \quad (8.66)$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichung verschwinden alle Tensoren ungerader Stufe. Der verbleibende Tensor 4. Stufe ist für das einfach kubische Gitter und das raumzentrierte kubische Gitter bereits im Paragraph 8.1 berechnet worden (siehe hierzu Gleichung 8.7). Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma (2c^4 B_1 - 4c^4 B_2) \rho \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\delta \right. \\ &\quad \left. + \partial_\gamma 4c^4 B_2 \rho \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\delta \right] \end{aligned} \quad (8.67)$$

Der anisotrope Tensor $\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ verschwindet genau dann, wenn (siehe Bemerkung 8.40):

$$B_1 = 2B_2 \quad (8.68)$$

Hiermit steht eine weitere Gleichung zur Bestimmung der zehn Unbekannten $A_\sigma, B_\sigma, C_\sigma, D_\sigma$ zur Verfügung. Unter Berücksichtigung von Gleichung 8.35

ergibt sich:

$$B_1 = \frac{1}{6c^2}, \quad B_2 = \frac{1}{12c^2} \quad (8.69)$$

Gleichung 8.67 ist dann äquivalent zu:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma \frac{1}{12c^2} 4c^4 \rho \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\delta \right] \\ &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma \frac{c^2}{3} \rho (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) u_\delta \right] \\ &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \frac{c^2}{3} (\partial_\gamma \rho \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} u_\delta \right. \\ &\quad \left. + \partial_\gamma \rho \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} u_\delta + \partial_\gamma \rho \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} u_\delta) \right] \\ &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \frac{c^2}{3} (\partial_\gamma \rho u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha \rho u_\beta + \partial_\beta \rho u_\alpha) \right] \end{aligned} \quad (8.70)$$

Die letzte der obigen Gleichungen ergibt sich durch die Auswertung der Einsteinschen Summenkonvention.

Im Folgenden wird der Term $\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)}$ näher beleuchtet. Nach Gleichung 8.38 gilt:

$$\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} = \partial_{t_1} (p \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) \quad (8.71)$$

In dieser Gleichung, soll nun der Druck p mittels der thermischen Zustandsgleichung durch die Dichte ρ ausgedrückt werden. Eine besonders einfache Form der thermischen Zustandsgleichung ergibt sich durch Einführung der isothermen Schallgeschwindigkeit:

$$c_{s,id} = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}} \quad (8.72)$$

Bemerkung 8.5

Der Index „*id*“ bei der isothermen Schallgeschwindigkeit weist auf die Analogie zum idealen Gas hin. In dieser Betrachtung werden Kräfte zwischen den Molekülen also vernachlässigt.

Es sei allerdings bereits an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß die Form der thermischen Zustandsgleichung für ein inkompressibles Fluid keinen Einfluß auf die Bewegungsgleichungen hat. Hieraus folgt, daß die Navier-Stokes Gleichung bei der späteren Betrachtung von zwischenmolekularen Kräften unverändert bleibt.

Aus Gleichung 8.39 und 8.72 folgt:

$$c_{s,id} = \sqrt{2c^2 A_1 + 8c^2 A_2} \quad (8.73)$$

Es ergibt sich:

$$\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} = c_{s,id}^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_{t_1} \rho + \partial_{t_1} (\rho u_\alpha u_\beta) \quad (8.74)$$

In dieser Gleichung müssen die zeitlichen Gradienten noch durch örtliche Gradienten ersetzt werden. Dazu formt man obige Gleichung mittels der Produktregel der Differentialrechnung weiter um:

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} &= c_{s,id}^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_{t_1} \rho + u_\beta \partial_{t_1} (\rho u_\alpha) + \rho u_\alpha \partial_{t_1} u_\beta \\ &= c_{s,id}^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_{t_1} \rho + u_\beta \partial_{t_1} (\rho u_\alpha) + u_\alpha \partial_{t_1} (\rho u_\beta) - u_\alpha u_\beta \partial_{t_1} \rho \end{aligned} \quad (8.75)$$

Durch Einsetzen der Kontinuitätsgleichung 8.57 in den ersten und letzten Term, sowie Einsetzen der Euler-Gleichung 8.61 in den zweiten und dritten Term, ergibt sich bei Vernachlässigung aller Terme dritter Ordnung in u :

$$\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} = -c_{s,id}^2 \left[\delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) - u_\beta \partial_\alpha \rho - u_\alpha \partial_\beta \rho \right] \quad (8.76)$$

Dies setzt man nun in Gleichung 8.70 ein und erhält den Impulsstromtensor erster Ordnung als Funktion makroskopischer Größen:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau \left[\partial_{t_1} T_{\alpha\beta}^{(0)} + \frac{c^2}{3} (\partial_\gamma \rho u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha \rho u_\beta + \partial_\beta \rho u_\alpha) \right] \\ &= -\tau \left[-c_{s,id}^2 (\delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) - u_\beta \partial_\alpha \rho - u_\alpha \partial_\beta \rho) \right. \\ &\quad \left. + \frac{c^2}{3} (\partial_\gamma \rho u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha \rho u_\beta + \partial_\beta \rho u_\alpha) \right] \\ &= -\tau \left[\left(\frac{c^2}{3} - c_{s,id}^2 \right) \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) - c_{s,id}^2 u_\beta \partial_\alpha \rho - c_{s,id}^2 u_\alpha \partial_\beta \rho \right. \\ &\quad \left. + \frac{c^2}{3} \partial_\alpha (\rho u_\beta) + \frac{c^2}{3} \partial_\beta (\rho u_\alpha) \right] \end{aligned} \quad (8.77)$$

Nach Addition der Impulsgleichung erster Ordnung 8.59 mit der Impulsgleichung zweiter Ordnung 8.64 ergibt sich (beachte: $T_{\alpha\beta}^{(1)} \in O(\varepsilon)$ nach 8.70):

$$\varepsilon \partial_{t_1} \rho u_\alpha + \varepsilon^2 \partial_{t_2} \rho u_\alpha + \varepsilon \partial_\alpha \left[T_{\alpha\beta}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) T_{\alpha\beta}^{(1)} \right] = 0 \quad (8.78)$$

Die Rückskalierung liefert:

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\alpha \left[T_{\alpha\beta}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) T_{\alpha\beta}^{(1)} \right] = 0 \quad (8.79)$$

Vergleicht man dies mit dem viskosen Spannungstensor der Hydrodynamik nach Gleichung 3.24, so liefert Gleichung 8.77:

$$\begin{aligned} \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) \left[\left(\frac{c^2}{3} - c_{s,id}^2 \right) \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) - c_{s,id}^2 u_\beta \partial_\alpha \rho - c_{s,id}^2 u_\alpha \partial_\beta \rho \right. \\ \left. + \frac{c^2}{3} \partial_\alpha (\rho u_\beta) + \frac{c^2}{3} \partial_\beta (\rho u_\alpha) \right] = \eta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \xi \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (8.80)$$

Man erkennt nun, daß diese Gleichung nur für inkompressible Fluide erfüllt werden kann, da nur für solche Strömungen die örtlichen Gradienten der Dichte verschwinden. Für inkompressible Fluide folgt mit $\partial_\alpha \rho = 0$:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{\eta}{\rho} = \frac{c^2}{3} \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) \\ \frac{\xi}{\rho} &= \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) \left(\frac{c^2}{3} - c_{s,id}^2 \right) = \nu \left[1 - 3 \left(\frac{c_{s,id}}{c} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (8.81)$$

Die kinematische Viskosität ν läßt sich also beim Gitter-Boltzmann Verfahren über die Relaxationszeit τ des Krookschen Stoßterms steuern. Theoretisch könnte man sie mit $\tau < \delta t/2$ sogar negativ gestalten, was bei Simulationen jedoch zu instabilem Verhalten führt.

Die sogenannte Volumenviskosität ξ ist beim Gitter-Boltzmann Verfahren linear mit der kinematischen Viskosität verknüpft. Der Proportionalitätsfaktor ließe sich mit Gleichung 8.73 durch die noch frei wählbaren Konstanten A_1 und A_2 steuern.

Die Volumenviskosität spielt allerdings nur eine untergeordnete Rolle, da durch die vorausgesetzte Inkompressibilität der Term mit ξ aus Gleichung 8.80 auf Grund der Kontinuitätsgleichung verschwindet (Im nächsten Paragraphen werden die Konstanten entsprechend gewählt).

Bemerkung 8.6

An dieser Stelle erkennt man die Berechtigung von Bemerkung 8.5. Die Einführung der isothermen Schallgeschwindigkeit in der thermischen Zustandsgleichung hat für inkompressible Fluide keinerlei Einfluß auf den Impulsstromtensor erster Ordnung, da in diesem Fall Gleichung 8.71 verschwindet (siehe hierzu Gleichung 8.76).

Zusammengefaßt kann gesagt werden, daß die Chapman-Enskog Methode die makroskopischen Bewegungsgleichungen samt Viskositäten des Gitter-Boltzmann Verfahrens liefert. Für inkompressible Strömungen stimmen die Bewegungsgleichungen, unter der Bedingung $B_1 = 2B_2$, bis zur 2. Ordnung in ε mit der Navier-Stokes Gleichung überein.

Die Chapman-Enskog Methode liefert jedoch nur eine weitere Bedingung für die Konstanten im Ansatz der Verteilungsfunktion. Die noch offenen Konstanten müssen also noch festgelegt werden.

8.5 Wahl der noch offenen Konstanten

Bisher wurden acht Gleichungen für die zehn Konstanten im Ansatz der Gleichgewichtsverteilung hergeleitet. Daraus ergibt sich, daß zwei Konstanten

noch frei wählbar sind. Man setzt daher:

$$A_0 = \alpha, \quad A_1 = \beta \quad (8.82)$$

Aus Gleichung 8.34 folgt dann:

$$A_2 = \frac{1 - \alpha - 6\beta}{12} \quad (8.83)$$

Damit ist die thermische Zustandsgleichung 8.73 gegeben durch:

$$p = \frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta)c^2\rho \quad (8.84)$$

Die beiden Konstanten B_1, B_2 wurden bereits im letzten Paragraphen bestimmt (8.69).

$$B_1 = \frac{1}{6c^2}, \quad B_2 = \frac{1}{12c^2} \quad (8.85)$$

Die beiden Konstanten C_1, C_2 ergeben sich aus den Gleichungen 8.39:

$$C_1 = \frac{1}{4c^4}, \quad C_2 = \frac{1}{8c^4} \quad (8.86)$$

Für die drei Konstanten D_0, D_1, D_2 stehen mit 8.34: $0 = 2c^2(C_1 + 4C_2) + D_0 + 6D_1 + 12D_2$ und 8.39: $0 = 4c^4C_2 + 2c^2D_1 + 8c^2D_2$ aber nur zwei Gleichungen zur Verfügung. Es ist jedoch naheliegend, für die Konstanten D_1 und D_2 dasselbe Verhältnis zu wählen wie für die Konstanten B_1, B_2 bzw. C_1, C_2 (Die in Paragraph 8.1 errechnete zweifache Gewichtung des einfachen kubischen Gitters gegenüber dem flächenzentrierten kubischen Gitter legt ebenfalls dieses Verhältnis nahe):

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{B_1}{B_2} = \frac{C_1}{C_2} = 2 \quad (8.87)$$

Hieraus folgt mit Gleichung 8.39:

$$D_1 = -\frac{1}{12c^2}, \quad D_2 = -\frac{1}{24c^2} \quad (8.88)$$

Eingesetzt in Gleichung 8.34 ergibt dies:

$$D_0 = -\frac{1}{2c^2} \quad (8.89)$$

Durch Einsetzen aller ermittelten Konstanten in den Ansatz der Verteilungsfunktion ergibt sich nun folgende Form:

$$\begin{aligned} f_{1i}^{(0)}(\vec{x}, t) &= n \left[\beta + \frac{1}{6c^2}(\vec{c}_{1i}\vec{u}) + \frac{1}{4c^4}(\vec{c}_{1i}\vec{u})^2 - \frac{1}{12c^2}u^2 \right] \\ f_{2i}^{(0)}(\vec{x}, t) &= n \left[\frac{1-\alpha-6\beta}{12} + \frac{1}{12c^2}(\vec{c}_{2i}\vec{u}) + \frac{1}{8c^4}(\vec{c}_{2i}\vec{u})^2 - \frac{1}{24c^2}u^2 \right] \\ f_0^{(0)}(\vec{x}, t) &= n \left[\alpha - \frac{1}{2c^2}u^2 \right] \end{aligned} \quad (8.90)$$

Man beachte, daß die Wahl der Konstanten α, β nicht vollkommen beliebig ist. Ein Grund dafür ist die Tatsache, daß die thermische Zustandsgleichung 8.84 noch nicht ausgenutzt wurde. Setzt man in die obigen Gleichungen $\vec{u} = 0$ ein, so erkennt man, daß sowohl α, β als auch A_2 positiv sein müssen:

$$\frac{1-\alpha-6\beta}{12} > 0 \iff \beta \leq -\frac{1}{6}\alpha + \frac{1}{6} \quad (8.91)$$

Mit dieser Einschränkung ergibt sich auch automatisch eine reellwertige isotherme Schallgeschwindigkeit nach Gleichung 8.73:

$$c_{s,id} = c\sqrt{2A_1 + 8A_2} = c\sqrt{2\beta + 8\frac{1-\alpha-6\beta}{12}} = c\sqrt{\frac{2}{3}(1-\alpha-3\beta)} \quad (8.92)$$

Betrachtet man nun noch die Volumenviskosität ξ nach Gleichung 8.81, so ergibt sich für diese ein positiver Wert unter der Bedingung:

$$\beta \geq -\frac{1}{3}\alpha + \frac{1}{6} \quad (8.93)$$

Optimal erscheint die Wahl von:

$$\beta = -\frac{1}{3}\alpha + \frac{1}{6} \iff \gamma := 1 - \alpha - 3\beta = \frac{1}{2} \quad (8.94)$$

Diese Bedingung steht im Einklang mit 8.91 und liefert $\xi = 0$, also eine verschwindende Volumenviskosität.

Des weiteren sieht man, daß unter dieser Bedingung gilt:

$$c_{s,id} = \frac{c}{\sqrt{3}} \quad (8.95)$$

Setzt man dies in 8.80 ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left(\tau - \frac{\delta t}{2}\right) \frac{c^2}{3} \left[-u_\beta \partial_\alpha \rho - u_\alpha \partial_\beta \rho + \partial_\alpha(\rho u_\beta) + \partial_\beta(\rho u_\alpha) \right] &= \eta(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \\ \iff \left(\tau - \frac{\delta t}{2}\right) \frac{c^2}{3} \left[\rho \partial_\alpha u_\beta + \rho \partial_\beta u_\alpha \right] &= \eta(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \\ \iff \nu = \frac{\eta}{\rho} = \frac{c^2}{3} \left(\tau - \frac{\delta t}{2}\right) & \end{aligned} \quad (8.96)$$

Bedingung 8.94 scheint also optimal zur Erfüllung der Navier-Stokes Gleichung eines inkompressiblen Fluids geeignet zu sein.

Wählt man nun α , β aus dem ersten Quadranten gemäß 8.94, so stehen mit 8.90 und 8.21 alle Gleichungen zur Verfügung, um eine Einphasenströmung zu modellieren. Dabei bleibt einem die Möglichkeit, über die Relaxationszeit τ die kinematische Viskosität und damit die Reynoldszahl eines gegebenen Strömungsproblems zu steuern.

Bemerkung 8.7

In den, an einer späteren Stelle dieser Arbeit (Kapitel 10), durchgeführten Simulationen werden die Parameter α und β folgendermaßen gesetzt:

$$\alpha = \frac{1}{3}, \quad \beta = \frac{1}{18} \quad (8.97)$$

Diese spezielle Belegung der beiden Parameter α und β hat den Vorteil, daß zum einen Gleichung 8.94 erfüllt wird, und zum anderen die in Paragraph 8.1 errechnete zweifache Gewichtung des einfachen kubischen Gitters gegenüber dem flächenzentrierten kubischen Gitter gegeben ist:

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{12\beta}{1 - \alpha - 6\beta} = 2 \quad (8.98)$$

Kapitel 9

Zweiphasenströmungen

Bei den für die Drucktechnik relevanten Farbströmungen handelt es sich größtenteils um Zweiphasenströmungen mit freien Flüssigkeitsoberflächen. Darunter fallen beispielsweise die Farbspaltung erster und zweiter Art, die in dieser Arbeit bereits theoretisch untersucht worden sind.

Um solche Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen mittels Gitter-Boltzmann Verfahren simulieren zu können, ist es unerlässlich, Wechselwirkungskräfte zwischen den Partikeln zu berücksichtigen, da diese Kräfte (in der kinetischen Gastheorie als van der Waals Kräfte bezeichnet) für die Ausbildung freier Oberflächen verantwortlich sind.

Des weiteren bestimmen diese zwischenmolekularen Kräfte die Oberflächenspannung des Fluids.

9.1 Zwischenmolekulare Kräfte

Im Folgenden wird davon ausgegangen, daß zwischen den Partikeln eines Fluids Anziehungs- bzw. Abstoßungskräfte herrschen. Diese zwischenmolekularen Kräfte heben sich im Inneren einer Phase gegenseitig auf, so daß die resultierende Kraft \vec{F} verschwindet. Im Grenzgebiet zwischen zwei Phasen existiert jedoch eine resultierende Volumenkraft \vec{F} , für die nun folgender Ansatz der Autoren Shan und Chen übernommen wird:

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\frac{\mathcal{G}}{\delta t} \psi[\rho(\vec{x}, t)] \sum_{\sigma} \sum_i \psi[\rho(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t)] \vec{c}_{\sigma i} \quad (9.1)$$

Man erkennt an dieser Gleichung, daß die resultierende Volumenkraft \vec{F} am Knoten \vec{x} , neben der dort vorhandenen Dichte, nur von der Dichte der direkt benachbarten Gitterknoten $\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t$ abhängen soll. Die Reichweite der zwischenmolekularen Kräfte ist also als gering angenommen und liegt im Bereich

der mittleren freien Weglänge eines Moleküls.

\mathcal{G} ist ein Parameter, der Stärke und Richtung der zwischenmolekularen Kräfte festlegt, während die Funktion ψ die Abhängigkeit des Teilchenpotentials von der Dichte beschreibt und erst an späterer Stelle (Gleichung 9.18) genauer definiert werden soll.

Liegen am Knoten \vec{x} keine Dichtegradienten vor (z.B. innerhalb einer inkompressiblen Phase): $\psi[\rho(\vec{x}, t)] = \psi[\rho(\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t)]$, so folgt aus 9.1 sofort: $\vec{F} = 0$

Die Einführung dieser zwischenmolekularen Kräfte hat eine Veränderung der mikroskopischen Impulsbilanz zur Folge. Es ist nun nicht mehr davon auszugehen, daß die Impulsdichte am Knoten \vec{x} während des Stoßvorganges unverändert bleibt. Vielmehr verursacht die aus den zwischenmolekularen Kräften resultierende Volumenkraft \vec{F} eine Änderung der Impulsdichte an diesem Knoten. Mit Hilfe der Definitionsgleichung der Impulsdichte 8.24 sowie Gleichung 8.20 ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \vec{F}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\delta t} \left[\rho(\vec{x}, t + \delta t) \vec{u}(\vec{x}, t + \delta t) - \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) \right] \\
 &= \frac{1}{\delta t} \left[\left(1 - \frac{\delta t}{\tau}\right) m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{\tau} m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) \right. \\
 &\quad \left. - m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \right] \\
 &= \frac{m}{\tau} \left[\sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t) - \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \right] \quad (9.2)
 \end{aligned}$$

Aus dieser Gleichung ergibt sich, daß sich die ersten Momente, und damit die makroskopischen Geschwindigkeiten, der Verteilungsfunktion $f_{\sigma i}$ und der Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_{\sigma i}^{(0)}$ voneinander unterscheiden müssen. Drückt man die rechte Seite dieser Gleichung durch die makroskopische Geschwindigkeit im Gleichgewicht $u^{(0)}$ nach Definitionsgleichung 8.25 aus, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \vec{F}(\vec{x}, t) &= \frac{m}{\tau} \left[n(\vec{x}, t) \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) - \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \right] \\
 \iff \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{n(\vec{x}, t)} \left[\sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\tau}{m} \vec{F}(\vec{x}, t) \right] \quad (9.3)
 \end{aligned}$$

Für die Berechnung der Gleichgewichtsverteilung nach 8.90 wird nun also $\vec{u}^{(0)}$ an Stelle von \vec{u} nach Definitionsgleichung 8.25 benutzt.

Für die Definition der makroskopischen Geschwindigkeit \vec{u} unter Berücksichtigung der zwischenmolekularen Kräfte bildet man nun das arithmetische

Mittel der Impulsdichten vor und nach dem Stoß $\vec{j}(\vec{x}, t)$, $\vec{j}(\vec{x}, t + \delta t)$:

$$\begin{aligned}\vec{u}(\vec{x}, t) &:= \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \cdot \frac{\vec{j}(\vec{x}, t) + \vec{j}(\vec{x}, t + \delta t)}{2} \\ &= \frac{1}{n(\vec{x}, t)} \left[\sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{2m} \vec{F}(\vec{x}, t) \right]\end{aligned}\quad (9.4)$$

Sowohl $\vec{u}^{(0)}$ als auch \vec{u} unterscheiden sich lediglich durch den Kraftterm von der bisherigen Geschwindigkeit nach Definitionsgleichung 8.25. Der Unterschied zwischen diesen Geschwindigkeiten ist also lediglich an der Phasengrenze von Bedeutung, da innerhalb einer als nahezu inkompressibel angenommenen Phase keine Dichtegradienten vorliegen, und damit $\vec{F} = \vec{0}$ gelten muß.

Im Folgenden wird noch die kontinuierliche Form der resultierenden Volumenkraft \vec{F} sowie deren Potential benötigt. Dafür wird die Funktion ψ in eine Taylorreihe nach dem Ort bis zur zweiten Ordnung entwickelt:

$$\begin{aligned}\psi[\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t] &= \psi[\vec{x}] + \vec{c}_{\sigma i} \delta t \nabla \psi[\vec{x}] + \frac{\delta t^2}{2} \vec{c}_{\sigma i} H_{\psi}(\vec{x}) \vec{c}_{\sigma i}^T \\ &= \psi[\vec{x}] + \delta t c_{\sigma i \alpha} \partial_{\alpha} \psi[\vec{x}] + \frac{\delta t^2}{2} c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \psi[\vec{x}]\end{aligned}\quad (9.5)$$

Einsetzen in Gleichung 9.1 liefert zusammen mit den Tensoreigenschaften 8.6:

$$\begin{aligned}\vec{F}(\vec{x}, t) &= -\frac{\mathcal{G}}{\delta t} \psi[\vec{x}, t] \sum_{\sigma} \sum_i \left(\psi[\vec{x}, t] + \vec{c}_{\sigma i} \delta t \nabla \psi[\vec{x}, t] + \frac{\delta t^2}{2} \vec{c}_{\sigma i} H_{\psi}(\vec{x}) \vec{c}_{\sigma i}^T \right) \vec{c}_{\sigma i} \\ &= -\mathcal{G} \psi[\vec{x}, t] \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} \cdot (\nabla \psi[\vec{x}, t]) \vec{c}_{\sigma i} \\ &= -10c^2 \mathcal{G} \psi[\vec{x}, t] \nabla \psi[\vec{x}, t]\end{aligned}\quad (9.6)$$

Hieraus ergibt sich für das Potential $V(\vec{x}, t)$ von $\vec{F}(\vec{x}, t)$:

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\nabla V(\vec{x}, t) \iff V(\vec{x}, t) = 5c^2 \mathcal{G} \psi[\vec{x}, t]^2 \quad (9.7)$$

Bemerkung 9.1

Es sollte beachtet werden, daß der gewählte Ansatz 9.1 für die resultierende Kraft \vec{F} zwar keine Impulserhaltung am einzelnen Gitterknoten, jedoch eine Erhaltung des Gesamtimpulses garantiert:

$$\sum_x \vec{F}(\vec{x}, t) = -\frac{\mathcal{G}}{\delta t} \sum_x \sum_{\sigma} \sum_i \psi[\vec{x}, t] \psi[\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t] \vec{c}_{\sigma i}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\mathcal{G}}{\delta t} \sum_x \sum_\sigma \sum_i \psi[\vec{x}, t] \psi[\vec{x} - \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t] \vec{c}_{\sigma i} \\
&= \frac{\mathcal{G}}{\delta t} \sum_{x'} \sum_\sigma \sum_i \psi[\vec{x}' + \vec{c}_{\sigma i} \delta t, t] \psi[\vec{x}', t] \vec{c}_{\sigma i} = - \sum_{x'} \vec{F}(\vec{x}', t)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde $\vec{x}' = \vec{x} - \vec{c}_{\sigma i} \delta t$ benutzt.

Vergleicht man die erste und letzte Zeile obiger Gleichung, so folgt:

$$\sum_x \vec{F}(\vec{x}, t) = 0 \quad (9.8)$$

9.2 Thermische Zustandsgleichung

Die Vorgehensweise in diesem Paragraphen erfolgt in vollkommener Analogie zu Paragraph 8.4.2, nur daß hier die zwischenmolekularen Kräfte berücksichtigt werden. Diese zwischenmolekularen Kräfte verändern lediglich die mikroskopische Impulsbilanz, welche nun durch folgende Gleichung gegeben ist:

$$\begin{aligned}
\vec{F}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\delta t} \left[\rho(\vec{x}, t + \delta t) \vec{u}(\vec{x}, t + \delta t) - \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) \right] \\
&= \frac{m}{\delta t} \left[\sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}(\vec{x} + \delta t \vec{c}_{\sigma i}, t + \delta t) \vec{c}_{\sigma i} - \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}(\vec{x}, t) \vec{c}_{\sigma i} \right] \quad (9.9)
\end{aligned}$$

Die Herleitung der Kontinuitätsgleichung in Paragraph 8.4.2 bleibt also vollkommen unverändert, da dort lediglich die nullten Momente der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung gebildet werden.

Die Herleitung der Navier-Stokes Gleichung in Paragraph 8.4.2 erfährt auf Grund der zwischenmolekularen Kräfte jedoch eine kleine Veränderung. Setzt man in die mikroskopische Impulsbilanz, Gleichung 9.9, nun die Gleichung 8.41 ein, so erhält man unter Berücksichtigung von 8.48 bis zur ersten Ordnung in ε :

$$\partial_{t_1} \rho u_\alpha + \partial_\alpha T_{\alpha\beta}^{(0)} = F_\alpha = -\partial_\alpha V \quad (9.10)$$

Bemerkung 9.2

Genau das gleiche Ergebnis erhält man, wenn noch einmal das erste Moment der kontinuierlichen Gitter-Boltzmann Gleichung 1. Ordnung in ε , Gleichung 8.58, betrachtet wird:

$$\partial_{t_1} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(0)} + \partial_\alpha \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_\sigma \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(1)} \quad (9.11)$$

Bei Berücksichtigung der zwischenmolekularen Kräfte kann auf Grund von Gleichung 9.2 nicht mehr davon ausgegangen werden, daß die rechte Seite obiger Gleichung verschwindet. Setzt man in die rechte Seite von Gleichung 9.2 den Ansatz 8.44 für $f_{\sigma i}$ ein, so erhält man nach Multiplikation von 9.11 mit der Teilchenmasse m bis zur ersten Ordnung in ε wiederum Gleichung 9.10.

Analog erhält man durch Einsetzen von Gleichung 8.46 in Gleichung 9.9, unter Berücksichtigung von 8.48, bis zur zweiten Ordnung in ε :

$$\partial_{t_2} \rho u_\alpha + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) \partial_\alpha T_{\alpha\beta}^{(1)} = F_\alpha = -\partial_\alpha V \quad (9.12)$$

Die Gleichungen 9.10 und 9.12 stimmen bis auf den Potentialterm auf der rechten Seite exakt mit den Gleichungen 8.59 und 8.64 überein. Durch Zusammenfassung und Rückskalierung der Gleichungen 9.10 und 9.12 ergibt sich, ganz analog zur Gleichung 8.79, folgendes Ergebnis:

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\alpha \left[T_{\alpha\beta}^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) T_{\alpha\beta}^{(1)} \right] = F_\alpha = -\partial_\alpha V \quad (9.13)$$

Die beiden Tensoren $T_{\alpha\beta}^{(1)}$ und $T_{\alpha\beta}^{(0)}$ sind dabei nach wie vor durch die Gleichung 8.77, bzw. Gleichung 8.38 mit der bisherigen Form der thermischen Zustandsgleichung 8.84 bestimmt:

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) c^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \quad (9.14)$$

Erweitert man den Impulsstromtensor im Gleichgewicht $T_{\alpha\beta}^{(0)}$ um das Potential V , so nimmt dieser unter Berücksichtigung von 9.7 folgende Form an:

$$T_{\alpha\beta}^{(0)} = c^2 \left[\frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5\mathcal{G} \psi(\vec{x}, t)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \quad (9.15)$$

Setzt man diese neue Form des Impulsstromtensors in die Gleichung 9.13 ein, so ist diese formal identisch mit der Gleichung 8.79. Hieraus ergibt sich, daß die Chapman-Enskog Methode auch unter Berücksichtigung der zwischenmolekularen Kräfte auf exakt dieselbe Navier-Stokes Gleichung führt wie in Paragraph 8.4.2.

Lediglich die Form der thermischen Zustandsgleichung verändert sich und ist nun, unter Berücksichtigung der zwischenmolekularen Kräfte, gegeben durch:

$$p = c^2 \left[\frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5\mathcal{G} \psi(\vec{x}, t)^2 \right] \quad (9.16)$$

Bemerkung 9.3

Während die thermische Zustandsgleichung 8.84 ohne Berücksichtigung zwischenmolekularer Kräfte der idealen, isothermen Gasgleichung $p \sim \rho$ entspricht, ist Gleichung 9.16 im Sinne der van der Waals Gleichung zu interpretieren, welche allerdings noch die Temperatur T als Parameter enthält:

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (9.17)$$

Gleichung 9.16 gibt nun Aufschluß darüber, wie die Funktion ψ , die wiederum von der Dichte ρ abhängt, zu wählen ist:

Die Ausbildung einer flüssigen und einer gasförmigen Phase tritt nur dann auf, wenn der Druck p als Funktion der Dichte ρ nicht monoton steigend ist, sondern ein lokales Maximum und ein lokales Minimum aufweist.

Dies kann erreicht werden, indem \mathcal{G} hinreichend negativ, und die Funktion $\psi(\rho)$ als monoton steigend aber beschränkt gewählt wird (Die obere Schranke sei mit ρ_0 bezeichnet, damit ist das Potential V durch $5\mathcal{G} \cdot (c\rho_0)^2$ beschränkt). Für eine solche Funktion sind im Folgenden drei Beispiele gegeben:

$$\begin{aligned} \psi_1(\rho) &= \rho_0(1 - e^{-\frac{\rho}{\rho_0}}) \\ \psi_2(\rho) &= \frac{\rho_0\rho}{\rho_0 + \rho} \\ \psi_3(\rho) &= \rho_0 e^{-\frac{\rho_0}{\rho}} \end{aligned} \quad (9.18)$$

Wählt man nun eine dieser Funktionen, so ergibt sich der kritische Zustand des Systems, ganz analog zur Behandlung der van der Waals Gleichung, aus der thermischen Zustandsgleichung 9.16 zusammen mit den Bedingungen:

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = c^2 \left[\frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta) + 10\mathcal{G}\psi(\rho) \frac{d\psi}{d\rho} \right] = 0 \quad (9.19)$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} = 10c^2\mathcal{G} \left[\left(\frac{d\psi}{d\rho}\right)^2 + \psi(\rho) \frac{d^2\psi}{d\rho^2} \right] = 0 \quad (9.20)$$

Aus der letzten Gleichung folgt die kritische Dichte ρ_{krit} . Setzt man dies in die erste Gleichung ein, so ergibt sich:

$$\left[\frac{(-1 + \alpha + 3\beta)}{\mathcal{G}} \right]_{krit} = 15\psi(\rho_{krit}) \frac{d\psi}{d\rho}(\rho_{krit}) \quad (9.21)$$

Der Term $T := (-1 + \alpha + 3\beta)/\mathcal{G}$ ist also das Äquivalent zur Temperatur in der van der Waals Theorie.

Setzt man dies nun wiederum in die thermische Zustandsgleichung 9.16 ein, so ergibt sich der kritische Druck p_{krit} .

Beispiel 9.1

Wählt man $\psi = \psi_1$, $\rho_0 = 1$, sowie α und β gemäß Gleichung 8.94, z.B. als $\alpha = 1/3$ und $\beta = 1/18$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho_{krit} &= \ln(2), \quad \left[\frac{(-1 + \alpha + 3\beta)}{\mathcal{G}} \right]_{krit} = \frac{15}{4} \iff \mathcal{G}_{krit} = -\frac{2}{15} \\ p_{krit} &= \frac{1}{3}c^2 \left(\ln(2) - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (9.22)$$

Betrachtet man nun das Zustandsdiagramm $p(\rho)$ gemäß Gleichung 9.16 für

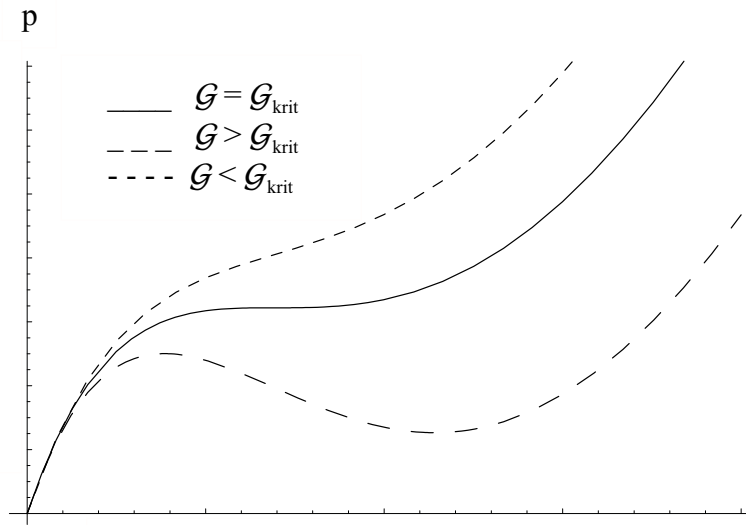


Abbildung 9.1: Zustandsdiagramm für verschiedene Werte von \mathcal{G} .

verschiedene Werte von \mathcal{G} , so erkennt man eine horizontale Wendetangente für $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{krit}$. Eine Verkleinerung dieses Wertes (Die oberste Funktion in Abbildung 9.1 entspricht $\mathcal{G} = 0,9 \cdot \mathcal{G}_{krit}$) führt zu einer Erhöhung der „Temperatur“ $T := (-1 + \alpha + 3\beta)/\mathcal{G}$ über ihren kritischen Wert. Damit steigt der Druck p monoton mit der Dichte ρ , und es kann sich kein Zweiphasensystem einstellen.

Vergrößert man jedoch den Wert von \mathcal{G} über seinen kritischen Wert (die unterste Funktion in Abbildung 9.1 entspricht $\mathcal{G} = 1,15 \cdot \mathcal{G}_{krit}$), so kommt es zu einem Phasenübergang.

Selbstverständlich ist der theoretisch errechnete Verlauf des Zustandsdiagramms für $T < T_{krit} \iff \mathcal{G} > \mathcal{G}_{krit}$ zwischen dem Maximum und dem

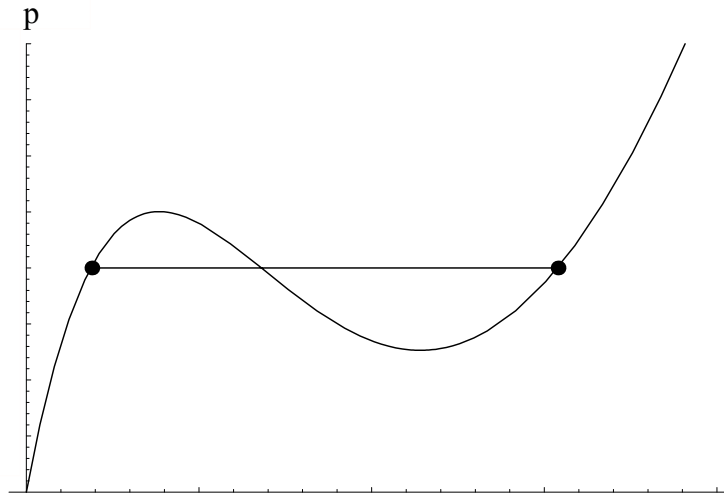


Abbildung 9.2: Reales Fluidverhalten nach der Maxwellkonstruktion

Minimum des Funktionsgraphen unphysikalisch, da dies einer Druckverringering bei isothermer Dichteerhöhung entsprechen würde.

Das reale Verhalten des Fluids ergibt sich, nach Abbildung 9.2, indem man dem theoretisch errechneten Funktionsgraphen nur bis zu einem noch unbestimmten Punkt $(\rho_g; p_0)$ vor Erreichen des lokalen Druckmaximums folgt. Ab diesem Punkt ersetzt man den theoretisch errechneten Graphen durch den konstanten Funktionsgraphen $p = p_0$ und folgt diesem bis es, nach dem theoretisch errechneten Minimum, zu einem weiteren Schnittpunkt $(\rho_l; p_0)$ mit dem Funktionsgraphen kommt. Ab hier beschreibt Gleichung 9.16 wieder das reale Fluidverhalten. Der konstante Abschnitt der so erzeugten Kurve ist gerade der Bereich in dem es zu einem Phasenübergang kommt. Die Berechnung des konstanten Wertes p_0 erfolgt in der van der Waals Theorie mittels der sogenannten Maxwell-Konstruktion, welche allerdings die Hauptsätze der Thermodynamik, d.h. eine Gleichung für die Energieerhaltung benötigt. Hat man p_0 berechnet, so ergeben sich die Dichten der flüssigen und gasförmigen Phase im Gleichgewicht, ρ_l und ρ_g , durch die beiden, in Abbildung 9.2 gekennzeichneten Schnittpunkte der beiden Kurven.

Im hier vorgestellten Gitter-Boltzmann Verfahren ist aber weder eine Energiegleichung noch eine Temperatur definiert, so daß die Berechnung des Gleichgewichtszustandes im Zweiphasengebiet mit Hilfe der mikrodynamischen Gleichungen erfolgen muß.

9.3 Gleichgewichtszustand

Für die Belegung eines Anfangszustandes ist es von elementarer Bedeutung, die Abhängigkeit der makroskopischen Zustandsgrößen p_0 , ρ_g und ρ_l von den Modellparametern α , β , ψ , \mathcal{G} , τ zu ermitteln. Da das vorgestellte Modell keine Energiedefinition beinhaltet, muß sich diese Abhängigkeit aus den mikroskopischen Gleichungen ergeben.

Mit der thermischen Zustandsgleichung 9.16, ausgewertet bei ρ_g und ρ_l , stehen bereits zwei Gleichungen für die drei Unbekannten p_0 , ρ_g und ρ_l zur Verfügung.

Eine weitere Gleichung gewinnt man durch folgende Vorgehensweise:

Der Impulsstromtensor im Gleichgewicht $T_{\alpha\beta}^{(0)}$ läßt sich für ein Zweiphasensystem, unter Berücksichtigung der zwischenmolekularen Kräfte, aus der mittleren Impulsdichte (Gleichung 9.4) ermitteln:

$$\frac{\vec{j}(\vec{x}, t) + \vec{j}(\vec{x}, t + \delta t)}{2} = m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{2} \vec{F}(\vec{x}, t) \quad (9.23)$$

Setzt man hier \vec{F} aus Gleichung 9.1 ein, so folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{j}(\vec{x}, t) + \vec{j}(\vec{x}, t + \delta t)}{2} &= m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) - \frac{\mathcal{G}}{2} \psi[\vec{x}] \sum_{\sigma} \sum_i \psi[\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t] \vec{c}_{\sigma i} \\ &= m \sum_{\sigma} \sum_i \vec{c}_{\sigma i} f_{\sigma i}(\vec{x}, t) + \frac{\mathcal{G}}{2} \psi[\vec{x}] \sum_{\sigma} \sum_i \psi[\vec{x} - \vec{c}_{\sigma i} \delta t] \vec{c}_{\sigma i} \end{aligned}$$

Multipliziert man die α -Komponente dieser Gleichung mit der β -Komponente der Teilchengeschwindigkeit $\vec{c}_{\sigma i}$, so erhält man gerade die mikroskopische Form des Impulsstromtensors $T_{\alpha\beta}$. Befindet sich das System im Gleichgewicht (d.h. die Zeitabhängigkeit entfällt), so folgt:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{(0)} &= T_{\alpha\beta}^{(k)} + T_{\alpha\beta}^{(p)} \\ &= m \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(0)} + \frac{\mathcal{G}}{2} \psi[\vec{x}] \sum_{\sigma} \sum_i \psi[\vec{x} - \vec{c}_{\sigma i} \delta t] c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} \quad (9.24) \end{aligned}$$

Der erste Term wird als kinetischer Term bezeichnet und entspricht dem Impulsstromtensor eines Einphasensystems ohne zwischenmolekulare Kräfte:

$$T_{\alpha\beta}^{(k)} = m \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} c_{\sigma i \beta} f_{\sigma i}^{(0)} = c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_{\alpha}^{(0)} u_{\beta}^{(0)} \quad (9.25)$$

Die makroskopische Geschwindigkeit im Gleichgewicht $\vec{u}^{(0)}$ ist durch die Gleichungen 9.3, 9.6 gegeben:

$$u_{\alpha}^{(0)} = \frac{1}{n} \left[\sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x}) - 10 \frac{\tau}{m} c^2 \mathcal{G} \psi \partial_{\alpha} \psi \right] \quad (9.26)$$

Der erste Term dieser Gleichung hängt allerdings noch von mikroskopischen Größen ab, so daß es notwendig ist, die makroskopische Geschwindigkeit im Gleichgewicht zusätzlich direkt aus der Gitter-Boltzmann Gleichung mit Krookschem Stoßterm 8.21 zu berechnen. Aus 8.21 folgt nach Multiplikation mit $c_{\sigma i \alpha}$ und Summation über alle Richtungen i, σ :

$$\begin{aligned} u_{\alpha}^{(0)} &= \frac{1}{n} \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}) \\ &= \frac{1}{n} \left[\left(1 - \frac{\tau}{\delta t}\right) \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x}) + \frac{\tau}{\delta t} \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c} \delta t) \right] \end{aligned} \quad (9.27)$$

Geht man nun davon aus, daß im Gleichgewicht kein Massenaustausch zwischen benachbarten Gitterknoten erfolgt,

$$f_{\sigma \bar{i}}(\vec{x}) = f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c} \delta t) \iff \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x} + \vec{c} \delta t) = - \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x}) \quad (9.28)$$

wobei \bar{i} die zu i entgegengesetzte Richtung bezeichnet, so ergibt sich aus Gleichung 9.27:

$$u_{\alpha}^{(0)} = \frac{1}{n} \left(1 - \frac{2\tau}{\delta t}\right) \sum_{\sigma} \sum_i c_{\sigma i \alpha} f_{\sigma i}(\vec{x}) \quad (9.29)$$

Vergleicht man nun die Gleichungen 9.29 und 9.26, so erhält man die makroskopische Geschwindigkeit im Gleichgewicht als Funktion der Dichte und der Modellparameter:

$$u_{\alpha}^{(0)} = - \frac{5c^2(2\tau - \delta t)\mathcal{G}}{\rho} \psi \partial_{\alpha} \psi \quad (9.30)$$

Bemerkung 9.4

Die makroskopische Geschwindigkeit im Gleichgewicht $\vec{u}^{(0)}$ ist nur an der Phasengrenze ungleich Null, da innerhalb einer inkompressiblen Phase $\partial_{\alpha} \psi = 0$ gilt.

Die makroskopische Geschwindigkeit \vec{u} zwischen den Phasen berechnet sich hingegen aus Gleichung 9.3 und Gleichung 9.4:

$$\vec{u}^{(0)} = \frac{(2\tau - \delta t)\vec{F}}{2\rho} + \vec{u} \quad (9.31)$$

Durch Einsetzen von $\vec{u}^{(0)}$ aus Gleichung 9.30 und \vec{F} aus Gleichung 9.6 ergibt sich das zu erwartende Ergebnis:

$$\begin{aligned}\vec{u} &= \vec{u}^{(0)} - \frac{(2\tau - \delta t)\vec{F}}{2\rho} \\ &= -\frac{5c^2(2\tau - \delta t)\mathcal{G}}{\rho}\psi\nabla\psi + \frac{(2\tau - \delta t)10c^2\mathcal{G}}{2\rho}\psi\nabla\psi = \vec{0}\end{aligned}\quad (9.32)$$

Setzt man nun Gleichung 9.30 in Gleichung 9.25 ein, so erhält man:

$$T_{\alpha\beta}^{(k)} = c^2\frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta)\rho\delta_{\alpha\beta} + \frac{25c^4(2\tau - \delta t)^2\mathcal{G}^2}{\rho}\psi^2\partial_\alpha\psi\partial_\beta\psi\quad (9.33)$$

Der Potentialterm aus Gleichung 9.24 berechnet sich unter Ausnutzung der Taylorreihenentwicklung 9.5 und der Tensoreigenschaften 8.6, 8.7 zu:

$$\begin{aligned}T_{\alpha\beta}^{(p)} &= c^2\mathcal{G}\psi \cdot \left[5\psi\delta_{\alpha\beta} - \frac{c^2\delta t^2}{2}\partial_\alpha\partial_\beta\psi\delta_{\alpha\beta\gamma\delta} + c^2\delta t^2\partial_\gamma\partial_\gamma\psi\delta_{\alpha\beta} + \right. \\ &\quad \left. 2c^2\delta t^2\partial_\alpha\partial_\beta\psi \right]\end{aligned}\quad (9.34)$$

Man beachte, daß alle Tensoren ungeradzahligter Stufe verschwinden. Es ist somit gleichgültig, ob $\psi[\vec{x} + \vec{c}_{\sigma_i}\delta t]$ oder $\psi[\vec{x} - \vec{c}_{\sigma_i}\delta t]$ in eine Taylorreihe entwickelt wird.

Die Addition des kinetischen Terms und des Potentialterms ergibt somit den Impulsstromtensor im Gleichgewicht, der nun außer von den Modellparametern nur noch von der Dichte abhängt:

$$\begin{aligned}T_{\alpha\beta}^{(0)} &= \left[c^2\frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta)\rho + 5c^2\mathcal{G}\psi^2 + c^4\delta t^2\mathcal{G}\psi\partial_\gamma\partial_\gamma\psi \right]\delta_{\alpha\beta} - \\ &\quad \frac{c^4\delta t^2\mathcal{G}}{2}\psi\partial_\alpha\partial_\beta\psi\delta_{\alpha\beta\gamma\delta} + 2c^4\mathcal{G}\delta t^2\psi\partial_\alpha\partial_\beta\psi + \\ &\quad \frac{25c^4(2\tau - \delta t)^2\mathcal{G}^2}{\rho}\psi^2\partial_\alpha\psi\partial_\beta\psi\end{aligned}\quad (9.35)$$

Für ein ruhendes Einphasensystem ist dieser Impulsstromtensor isotrop und Gleichung 9.35 reduziert sich auf die thermische Zustandsgleichung 9.16.

Betrachtet man nun ein Zweiphasensystem in Ruhe, so ist dieser Tensor mit dem Drucktensor identisch.

Zur Berechnung eines Dichteprofiles längs einer Phasengrenze wird nun eine ebene Begrenzung in der x, y -Ebene angenommen. Die Menge aller Punkte $\{(x, y, z) : z < 0\}$ befinden sich in flüssiger Phase, deren Dichte in hinreichender Entfernung von der Phasengrenze, mit ρ_l bezeichnet wird. Die Menge aller

Punkte $\{(x, y, z) : z > 0\}$ befinden sich in gasförmiger Phase, deren Dichte, in hinreichender Entfernung von der Phasengrenze, mit ρ_g bezeichnet wird. Das Gesamtsystem befindet sich in Ruhe, und die Phasengrenze bei $z = 0$ wird durch

$$\rho_s = \frac{\rho_g + \rho_l}{2} \quad (9.36)$$

festgelegt.

Für dieses geometrisch einfache Zweiphasensystem hat der Drucktensor $T_{\alpha\beta}^{(0)} = p_{\alpha\beta}$ aus Gleichung 9.35 Diagonalgestalt (beachte: $\partial_x = \partial_y = 0$):

$$p_{xy}(z) = p_{xz}(z) = p_{yz}(z) = 0 \quad (9.37)$$

Aus Symmetriegründen sind die beiden zur Phasengrenze tangential wirkenden Drücke gleich, und Gleichung 9.35 erlaubt die Berechnung des Tangentialdruckes p_T :

$$\begin{aligned} p_{xx}(z) &= p_{yy}(z) = p_T(z) \\ &= c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 + c^4 \delta t^2 \mathcal{G} \psi \partial_z \partial_z \psi \end{aligned} \quad (9.38)$$

Der zur Phasengrenze normal wirkende Druck $p_{zz} = p_N(z) = p_0$ muß aufgrund des mechanischen Gleichgewichts ($\nabla \cdot \vec{T} = 0$) konstant sein. Da dieser Druck im gesamten Zweiphasengebiet gleich ist, wird er auch als hydrostatischer Druck bezeichnet; p_0 läßt sich aus Gleichung 9.35 berechnen:

$$\begin{aligned} p_0 &= c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 + \frac{5c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{2} \psi \partial_z \partial_z \psi + \\ &\quad \frac{25c^4 (2\tau - \delta t)^2 \mathcal{G}^2}{\rho} \psi^2 (\partial_z \psi)^2 \end{aligned} \quad (9.39)$$

Da aber eine Gleichung gesucht ist, die den Dichteverlauf senkrecht zur Phasengrenze darstellt (des weiteren ist in den Funktionen ψ die Ortskoordinate z implizit, als Argument der Dichte ρ enthalten), werden die räumlichen Ableitungen in obiger Gleichung durch folgende Ausdrücke ersetzt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial z} &= \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (9.40)$$

Einsetzen in 9.39 liefert:

$$\begin{aligned} p_0 &= c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 + \frac{5c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{2} \psi \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right] + \\ &\quad \frac{25c^4 (2\tau - \delta t)^2 \mathcal{G}^2}{\rho} \psi^2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right)^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2 \end{aligned} \quad (9.41)$$

Dies ist eine gewöhnliche DGL zweiter Ordnung für die Funktion $\rho(z)$. Da im Grenzwert $z = \pm\infty$ die räumlichen Ableitungen von ρ nach z in Gleichung 9.41 verschwinden, gelten dort die thermischen Zustandsgleichungen:

$$\begin{aligned} p_0 &= c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho_g + 5c^2 \mathcal{G} \psi(\rho_g)^2 \quad \text{für } z = +\infty \\ p_0 &= c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho_l + 5c^2 \mathcal{G} \psi(\rho_l)^2 \quad \text{für } z = -\infty \end{aligned} \quad (9.42)$$

Die Lösung dieses Randwertproblems (DGL 9.41 mit den Randbedingungen: $d\rho/dz = 0$ für $z = \pm\infty$) errechnet sich folgendermaßen.

Mittels der Transformation

$$\phi := \left(\frac{d\rho}{dz} \right)^2 \iff \left| \frac{d\rho}{dz} \right| = \sqrt{\phi} \iff \frac{d\rho}{dz} = -\sqrt{\phi} \quad (9.43)$$

kann Gleichung 9.41 in eine gewöhnliche lineare DGL übergeführt werden. Mit

$$\frac{d^2\rho}{dz^2} = -\frac{1}{2}\phi^{-\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{dz} = -\frac{1}{2} \left| \frac{dz}{d\rho} \right| \frac{d\phi}{dz} = \frac{1}{2} \frac{d\phi}{d\rho} \quad (9.44)$$

folgt aus Gleichung 9.41:

$$\begin{aligned} \left[\frac{5c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{4} \psi \frac{d\psi}{d\rho} \right] \frac{d\phi}{d\rho} + \left[\frac{5c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{2} \psi \frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \frac{25c^4 (2\tau - \delta t)^2 \mathcal{G}^2}{\rho} \psi^2 \left(\frac{d\psi}{d\rho} \right)^2 \right] \phi \\ + c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 - p_0 = 0 \end{aligned} \quad (9.45)$$

Dies ist eine lineare DGL für die Funktion $\phi(\rho)$ der Form

$$\frac{d\phi}{d\rho} + P(\rho)\phi = Q(\rho) \quad (9.46)$$

mit den Randbedingungen:

$$\phi(\rho_g) = \phi(\rho_l) = 0 \quad (9.47)$$

Die allgemeine Lösung einer solchen linearen DGL ist gegeben durch:

$$\phi(\rho) = e^{-G(\rho)} \left[K + \int_{\rho_g}^{\rho} Q(t) e^{G(t)} dt \right] \quad (9.48)$$

Hierbei ist K eine Integrationskonstante, und die Funktion G ist definiert durch:

$$G(\rho) = \int_{\rho_g}^{\rho} P(k) dk \quad (9.49)$$

Die Funktionen $P(\rho)$ und $Q(\rho)$ ergeben sich aus Gleichung 9.45:

$$\begin{aligned} P(\rho) &= 2 \left[\frac{\psi''(\rho)}{\psi'(\rho)} + 10 \left(\frac{2\tau}{\delta t} - 1 \right)^2 \mathcal{G} \frac{\psi}{\rho} \psi'(\rho) \right] \\ Q(\rho) &= -\frac{4}{5c^4 \delta t^2 \mathcal{G}} \left(\psi(\rho) \cdot \psi'(\rho) \right)^{-1} \left[c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 - p_0 \right] \end{aligned}$$

Aus der Randbedingung $\phi(\rho_g) = 0$ folgt sofort $K = 0$.

Aus der Randbedingung $\phi(\rho_l) = 0$ folgt, da die Exponentialfunktion keine Nullstellen hat, daß der zweite Faktor in Gleichung 9.48 verschwinden muß:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} Q(\rho) e^{G(\rho)} d\rho = 0 \quad (9.50)$$

Setzt man hier die Definitionsgleichungen der Funktionen $Q(\rho)$ und $G(\rho)$ ein, so erhält man:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(\psi(\rho) \cdot \psi'(\rho) \right)^{-1} \left[c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 - p_0 \right] e^{\int_{\rho_g}^{\rho} P(k) dk} d\rho = 0 \quad (9.51)$$

Da der hydrostatische Druck p_0 konstant ist, kann man diese Gleichung nach p_0 auflösen:

$$p_0 = \frac{\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(\psi(\rho) \cdot \psi'(\rho) \right)^{-1} \left[c^2 \frac{2}{3} (1 - \alpha - 3\beta) \rho + 5c^2 \mathcal{G} \psi^2 \right] e^{\int_{\rho_g}^{\rho} P(k) dk} d\rho}{\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(\psi \frac{d\psi}{d\rho} \right)^{-1} e^{\int_{\rho_g}^{\rho} P(k) dk} d\rho} \quad (9.52)$$

Mit den Gleichungen 9.42 und 9.52 stehen nun also drei Gleichungen zur Verfügung, um die drei Unbekannten ρ_g, ρ_l, p_0 aus den Modellparametern zu ermitteln. Da in allen drei Gleichungen die Dichten aber nur implizit enthalten sind, liegt es nahe, ein iteratives Berechnungsverfahren zu wählen, welches an einer späteren Stelle dieser Arbeit (Paragraph 9.5) beschrieben wird.

Für spätere Simulationen ist es des weiteren von Bedeutung, das Dichteprofil orthogonal zur Phasengrenze zu berechnen. Die Integration von Gleichung 9.43 liefert unter Berücksichtigung von Gleichung 9.48 das inverse Dichteprofil:

$$z(\rho) = - \int_{\rho_s}^{\rho} \phi(t)^{-\frac{1}{2}} dt = - \int_{\rho_s}^{\rho} \left[e^{-G(t)} \int_{\rho_g}^t Q(k) e^{G(k)} dk \right]^{-\frac{1}{2}} dt \quad (9.53)$$

Der Verlauf des Dichteprofiles $\rho(z)$ ergibt sich, indem man obige Gleichung für verschiedene diskrete Dichten $\rho_g < \rho < \rho_l$ numerisch löst und über den so errechneten z -Werten aufträgt.

9.4 Oberflächenspannung

Für eine ebene Oberfläche in der x, y -Ebene ergibt sich die Oberflächenspannung per Definition aus folgendem Integral (siehe z.B. Spurk [26]):

$$\gamma_l = \int_{-\infty}^{\infty} (p_0(z) - p_T(z)) dz \quad (9.54)$$

Dieses Integral ergibt, unter Berücksichtigung der Gleichungen 9.38 und 9.39:

$$\gamma_l = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{3c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{2} \psi \partial_z \partial_z \psi + \frac{25c^4 (2\tau - \delta t)^2 \mathcal{G}^2}{\rho} \psi^2 (\partial_z \psi)^2 dz \quad (9.55)$$

Da $\left[\psi \cdot d\psi/dz \right]_{-\infty}^{\infty} = \left[\psi \cdot d\psi/d\rho \cdot d\rho/dz \right]_{\rho_l}^{\rho_g} = 0$ gilt, folgt aus obiger Gleichung mittels partieller Integration und Gleichung 9.40:

$$\gamma_l = \frac{3c^4 \delta t^2 \mathcal{G}}{2} \int_{\rho_l}^{\rho_g} \left[\frac{200}{3} \mathcal{G} \left(\frac{\tau}{\delta t} - \frac{1}{2} \right)^2 \frac{\psi^2}{\rho} - 1 \right] \left(\frac{d\psi}{d\rho} \right)^2 \frac{d\rho}{dz} d\rho \quad (9.56)$$

Setzt man hier Gleichung 8.81 ein, so erkennt man, daß die Oberflächenspannung quadratisch von der kinematischen Viskosität abhängt:

$$\gamma_l = \mathcal{G} \int_{\rho_l}^{\rho_g} \left[900\nu^2 \mathcal{G} \frac{\psi^2}{\rho} - \frac{3}{2} c^4 \delta t^2 \right] \left(\frac{d\psi}{d\rho} \right)^2 \frac{d\rho}{dz} d\rho \quad (9.57)$$

Für die praktische Anwendung des Gitter-Boltzmann Verfahrens muß diese Abhängigkeit bei der Einstellung der makroskopischen Zustandsgrößen berücksichtigt werden.

9.5 Modellparameter und Stoffgrößen

Für eine realitätsnahe Simulation mittels des hier beschriebenen Gitter-Boltzmann Verfahrens wäre es ideal, wenn sich die Modellparameter $\alpha, \beta, \tau, \mathcal{G}, \psi$ direkt aus den makroskopischen Zustandsgrößen $\rho_l, \rho_g, p_0, \gamma_l, \nu$ eines gegebenen Strömungsproblems berechnen ließen.

Wie sich in den vorherigen Paragraphen gezeigt hat, ist jedoch lediglich das hierzu inverse Problem (Berechnung der makroskopischen Zustandsgrößen aus den Modellparametern) lösbar und auch dieses, im Fall der Oberflächenspannung (γ_l) sowie des Gleichgewichtszustandes (ρ_l, ρ_g, p_0), nicht mit rein analytischen Methoden.

Des weiteren zeigt Gleichung 9.57, daß z.B. eine Änderung der kinematischen Viskosität ν (beispielsweise durch Variation des Modellparameters τ

nach Gleichung 8.81) immer auch eine Änderung der Oberflächenspannung γ_l impliziert. Die Einstellung der makroskopischen Stoffgrößen (bzw. der dimensionslosen Kennzahlen) durch die Modellparameter bedarf also einer genaueren Betrachtung.

Während die Berechnung der kinematischen Viskosität ν nach Gleichung 8.81 explizit möglich ist, erfordert die Berechnung des Gleichgewichtszustandes ρ_l , ρ_g , p_0 und damit auch die Berechnung der dynamischen Viskosität der flüssigen Phase $\eta_l = \nu \rho_l$ bzw. der Oberflächenspannung γ_l nach Gleichung 9.42 und 9.52 bzw. Gleichung 9.40 ein iteratives Berechnungsverfahren, welches hier im Systemprogramm *Mathematica* erstellt wurde, da dieses Programm die Möglichkeit der numerischen Integration beinhaltet. Der Aufbau dieses Iterationsverfahrens ist im Folgenden skizziert:

1. Eingabe der Modellparameter h , \mathcal{G} , m , δt , α , β , τ , $\psi(\rho)$.
2. Eingabe einer Fehlertoleranz ε .
3. Berechnung des Anfangsdruckes $p^{(0)}$ aus den Extrema der thermischen Zustandsgleichung 9.16:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d\rho} &= 0 \quad \longrightarrow \quad \rho_1, \rho_2 \\ p_{max} &= p(\min(\rho_1, \rho_2)) \\ p_{min} &= p(\max(\rho_1, \rho_2)) \\ p^{(0)} &= \frac{p_{max} + p_{min}}{2} \end{aligned}$$

4. Iteration über den Index n :

- (a) Berechnung der Dichten:

$$\begin{aligned} p(\rho) - p^{(n)} &= 0 \quad \rho \in [0, \min(\rho_1, \rho_2)] \longrightarrow \rho_g^{(n)} \\ p(\rho) - p^{(n)} &= 0 \quad \rho \in [0, \max(\rho_1, \rho_2)] \longrightarrow \rho_l^{(n)} \end{aligned}$$

- (b) Neuberechnung des Druckes:

Numerische Integration von Gleichung 9.52 in den Grenzen $\rho_g^{(n)}$ bis $\rho_l^{(n)}$ liefert $p^{(n+1)}$.

- (c) Abbruchkriterium:

$$\begin{aligned} \|p^{(n+1)} - p^{(n)}\| &> \varepsilon \longrightarrow p^{(n)} = p^{(n+1)} \\ \|p^{(n+1)} - p^{(n)}\| &\leq \varepsilon \longrightarrow p_0 = p^{(n+1)}, \rho_l = \rho_l^{(n)}, \rho_g = \rho_g^{(n)} \end{aligned}$$

5. Berechnung der Oberflächenspannung γ_l mittels numerischer Integration von Gleichung 9.40.

Mittels dieses Programms wurden nun für verschiedene Werte der Modellparameter $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$ die zugehörigen makroskopischen Zustandsgrößen und dimensionslosen Kennzahlen bestimmt. Dabei wurde $h = 1$, $m = 1$, $\delta t = 1$, $\alpha = 1/3$, $\beta = 1/18$, $\psi(\rho) = 1 - e^{-\rho}$ gesetzt.

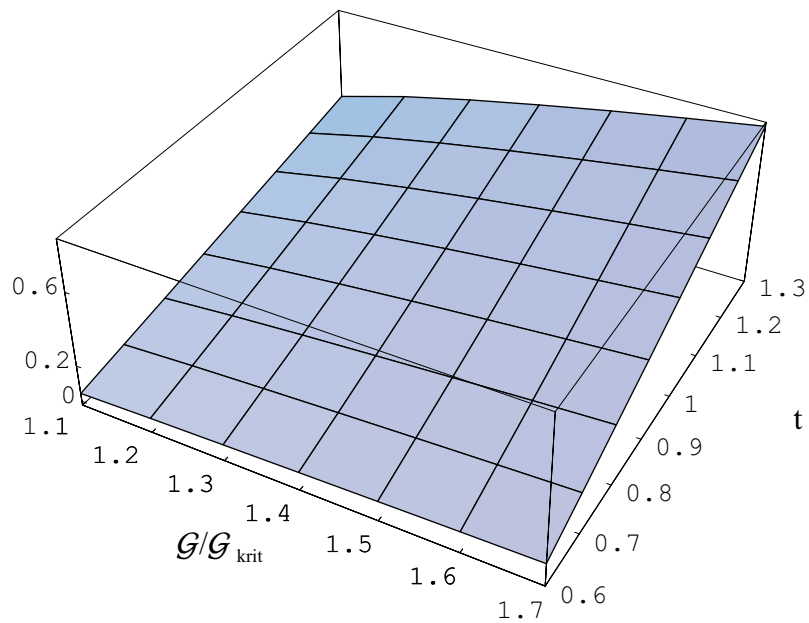


Abbildung 9.3: Dynamische Viskosität der flüssigen Phase η als Funktion der Modellparameter $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$.

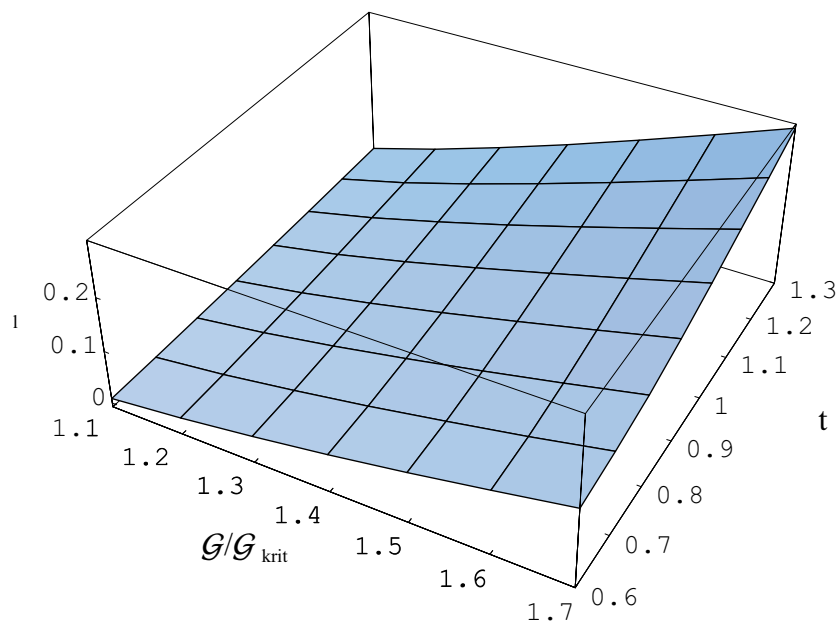


Abbildung 9.4: Oberflächenspannung γ_l als Funktion der Modellparameter $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$.

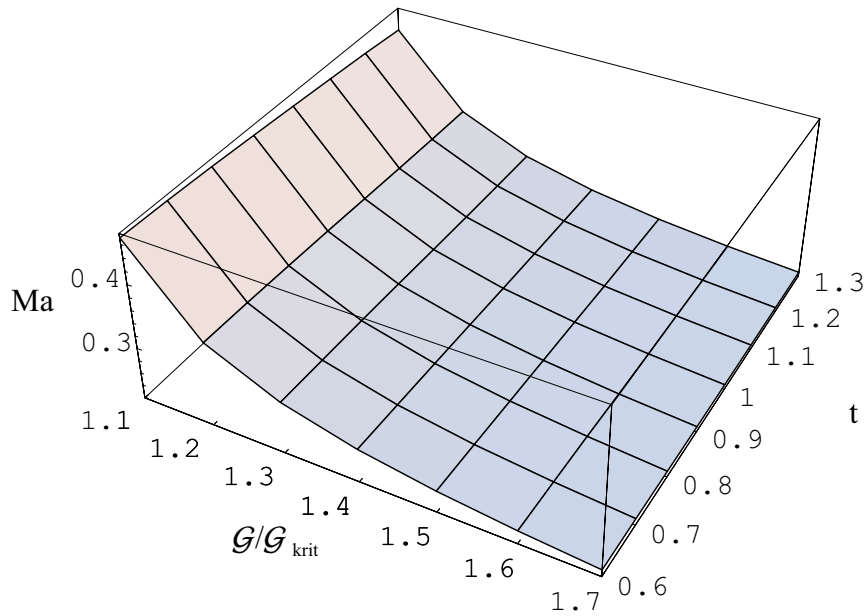


Abbildung 9.5: Machzahl Ma als Funktion der Modellparameter G/G_{krit} und $\tau/\delta t$.

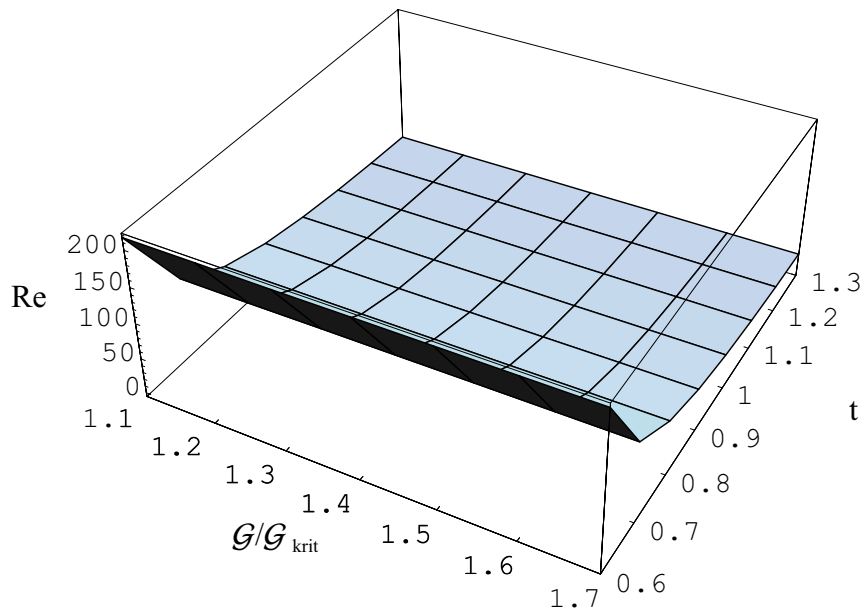


Abbildung 9.6: Reynoldszahl Re als Funktion der Modellparameter G/G_{krit} und $\tau/\delta t$.

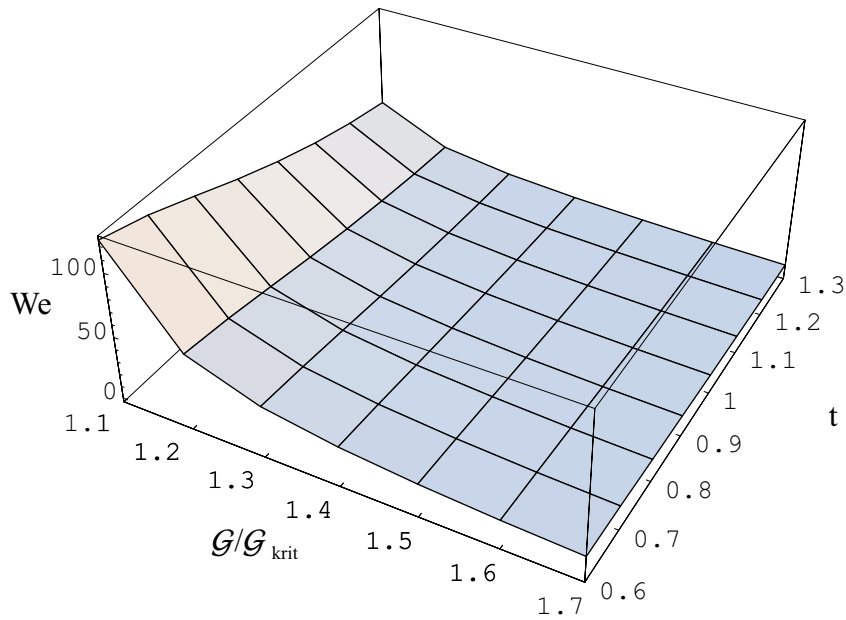


Abbildung 9.7: Weberzahl We als Funktion der Modellparameter G/G_{krit} und $\tau/\delta t$.

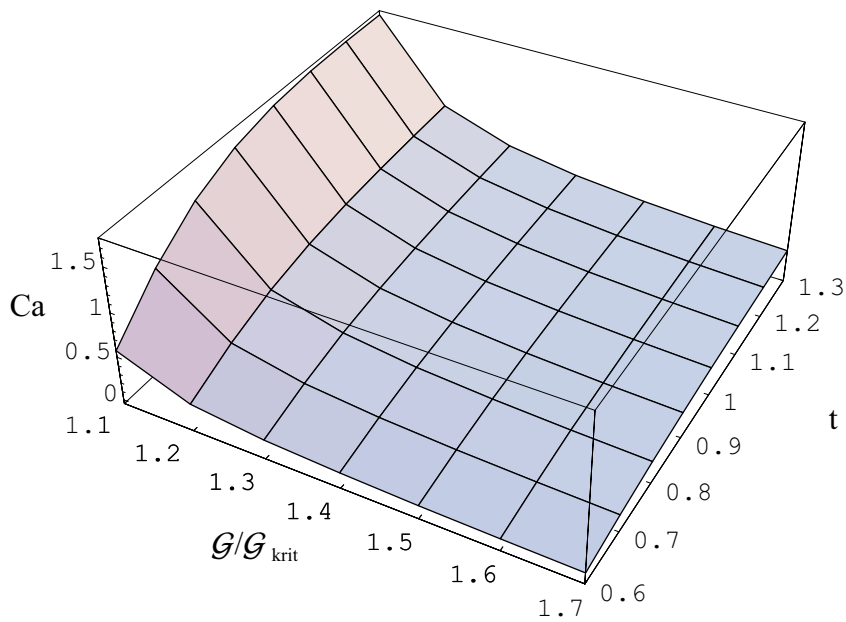


Abbildung 9.8: Kapillarzahl Ca als Funktion der Modellparameter G/G_{krit} und $\tau/\delta t$.

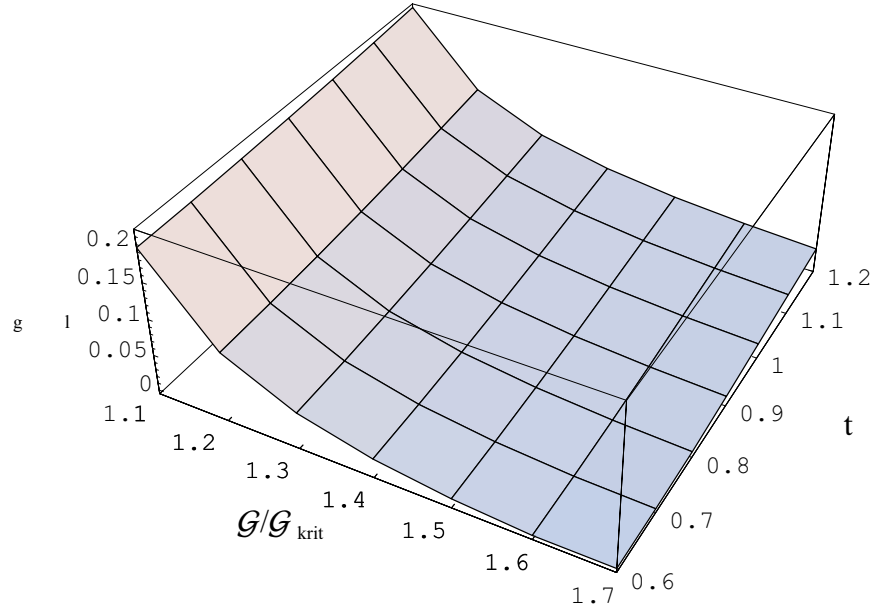


Abbildung 9.9: Dichteverhältnis ρ_g/ρ_l als Funktion der Modellparameter $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$.

An den Abbildungen 9.3 und 9.4 erkennt man, daß sowohl die Oberflächenspannung γ_l als auch die dynamische Viskosität der flüssigen Phase $\eta_l = \rho_l \nu$ mit steigenden Modellparametern $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$ anwachsend sind. Es ist jedoch ersichtlich, daß die Viskosität η_l dabei stärker von der Relaxationszeit τ , die Oberflächenspannung γ_l jedoch stärker von der Größe des Parameters \mathcal{G} beeinflußt wird, so daß es möglich ist, diese beiden Größen weitestgehend unabhängig voneinander einzustellen.

Zur Berechnung der relevanten dimensionslosen Kennzahlen wird noch eine charakteristische Länge L und ein charakteristischer Geschwindigkeitsbetrag v benötigt, welche hier vollkommen willkürlich gesetzt wurden: $L = 65$, $v = 0.1112$.

Die Machzahl Ma der flüssigen Phase ergibt sich mittels Gleichung 8.72 und Gleichung 9.16:

$$Ma := \frac{v}{c_s} = \frac{v}{\sqrt{\frac{dp}{d\rho}}} = \frac{v}{c\sqrt{\frac{2}{3}(1-\alpha-3\beta) + 10\mathcal{G}\psi(\rho_l)\frac{d\psi}{d\rho}(\rho_l)}} \quad (9.58)$$

Die Machzahl ist eine für die Gitter-Boltzmann Simulation sehr wichtige dimensionslose Kennzahl, da sie darüber entscheidet, ob ein Strömungsproblem als inkompressibel angesehen werden kann, was in guter Näherung nur für

$Ma < 0.3$ erfüllt ist. Wie man aus Abbildung 9.5 erkennt, muß zur Simulation einer inkompressiblen Strömung mit dem hier gewählten charakteristischen Geschwindigkeitsbetrag v , $\mathcal{G} > 1.3 \cdot \mathcal{G}_{krit}$ gesetzt werden, um dieses Kriterium zu erfüllen.

Da die Machzahl nach Gleichung 9.58 linear von der charakteristischen Geschwindigkeit v abhängt, ist diese untere Schranke $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit} = 1.3$ selbstverständlich nicht allgemeingültig, sondern ebenfalls v -abhängig. Des weiteren zeigt Abbildung 9.5, daß die Machzahl wesentlich empfindlicher auf Änderungen des Parameters \mathcal{G} als auf Änderung der Relaxationszeit τ reagiert.

Realistische Machzahlen im Druckprozess sind auf Grund der hohen Schallgeschwindigkeit in der Farbe und der im Vergleich dazu geringen Druckgeschwindigkeit durchweg kleiner, als sie in der Simulation eingestellt werden können. Solange aber die Machzahl der Simulation eine inkompressible Strömung garantiert ($Ma < 0.3$), ist der Einfluß dieser Abweichung auf das Strömungsverhalten als gering zu erachten.

Die Reynoldszahl Re einer Gitter-Boltzmann Simulation ist, im Gegensatz zu allen anderen relevanten dimensionslosen Kennzahlen, explizit berechenbar. Sie gibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu Zähigkeitskräften an und ist damit maßgebend für die Ausbildung von Turbulenzen im Strömungsbild. Für die Reynoldszahl gilt nach Gleichung 8.81:

$$Re := \frac{vL\rho_l}{\eta_l} = \frac{vL}{\nu} = \frac{3vL}{c^2(\tau - \frac{\delta t}{2})} \quad (9.59)$$

Wie man an dieser Gleichung und an Abbildung 9.6 erkennt, ist die Reynoldszahl also unabhängig vom Parameter \mathcal{G} und besitzt bei $\tau = \delta t/2$ eine Polstelle. Die Wahl von $\tau \leq \delta t/2$ liefert daher auch instabile Simulationen.

Abbildung 9.7 zeigt die Abhängigkeit der Weberzahl We , welche das Verhältnis von Trägheitskräften zu Oberflächenspannungskräften angibt, von den Modellparametern $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ und $\tau/\delta t$. Die Weberzahl der flüssigen Phase ist dabei folgendermaßen definiert:

$$We := \frac{v^2 L \rho_l}{\gamma_l} \quad (9.60)$$

Es ist leicht ersichtlich, daß der Einfluß der Oberflächenspannungskräfte für kleine Werte des Parameters $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ stark abnehmend ist, wodurch sich die Weberzahl erhöht.

Das Verhältnis von Zähigkeitskräften in der flüssigen Phase zu Oberflächenspannungskräften wird durch die Kapillarzahl beschrieben:

$$Ca := \frac{We}{Re} = \frac{v\eta_l}{\gamma_l} \quad (9.61)$$

Kleine Werte des Parameters \mathcal{G} erhöhen diese dimensionslose Kennzahl (durch Verringerung der Oberflächenspannung), während kleine Werte des Parameters τ sie verkleinern (durch Verringerung der dynamischen Viskosität).

Mit Hilfe der oben beschriebenen Zusammenhänge ist es nun möglich, die relevanten dimensionslosen Kennzahlen (Re , We , Ca) auf ein gegebenes Strömungsproblem einzustellen.

Es sei an dieser Stelle noch bemerkt, daß die obigen Kennzahlen (Ma , We , Ca) sich jeweils auf die flüssige Phase beziehen. Der Einfluß der Umgebung, also der gasförmigen Phase, wird daher als klein angenommen. Diese Annahme ist in der Realität der Farbspaltung auf Grund des sehr kleinen Dichteverhältnisses ρ_g/ρ_l sicherlich gerechtfertigt. In der Simulation sollte dieses Verhältnis daher ebenfalls so klein wie möglich gewählt werden. Aus Abbildung 9.9 läßt sich ersehen, daß diese Bedingung mit wachsendem $\mathcal{G}/\mathcal{G}_{krit}$ immer besser erfüllt wird. Realistische Werte des Parameters ρ_g/ρ_l im Druckprozess sind jedoch erheblich kleiner, als sie in der Simulation verwirklicht werden können. Ein bemerkbarer Einfluß der gasförmigen- auf die flüssige Phase ergibt sich aber erst ab einem Verhältnis von $\rho_g/\rho_l > 1/30$, so daß bei Simulationen darauf geachtet werden muß, diese Schranke nicht wesentlich zu überschreiten.

9.6 Randbedingungen

Literatur: Neben der Arbeit von Schelkle [1] ist hier in erster Linie die Arbeit von Takada und Tsutahara [48] von Bedeutung. Die dort beschriebene Randbedingung zur Implementierung von bewegten Festkörpern in zweidimensionale Gitter-Boltzmann Verfahren wird in Paragraph 9.6.2 auf das hier verwendete dreidimensionale Gitter übertragen.

Dieses Kapitel behandelt die Schwierigkeiten bei der Berechnung der Verteilungsfunktionen an den Rändern des zu Grunde liegenden Gitters. Alle sich dort befindenden Gitterknoten werden im Folgenden als **Randknoten** bezeichnet, während alle anderen Gitterknoten als **innere Knoten** bezeichnet werden.

Vor der Berechnung der zwischenmolekularen Kräfte für die inneren Knoten des Berechnungsgitters muß die Dichte ρ an allen Randknoten bekannt sein, da auf diese nach Gleichung 9.1 zugegriffen wird. Des weiteren werden für den Verschiebungsschritt all diejenigen Verteilungsfunktionen von Randknoten benötigt, die in Richtung eines inneren Knotens weisen.

Neben den bei Schelkle [1] beschriebenen symmetrischen, periodischen und dirichletschen Randbedingungen, auf die hier nicht näher eingegangen wird, sind im Zusammenhang mit der Farbspaltung weitere Randbedingungen notwendig. Diese ergeben sich aus der Tatsache, daß im Gegensatz zur freien Tropfenkollision bei Schelkle [1] eine Simulation der Farbspaltung die Implementierung von Festkörpern erfordert.

9.6.1 Ruhende, ebene Festkörper

Die hier beschriebene Randbedingung zur Implementierung ruhender, ebener Festkörper kommt bei der Simulation der quasistatischen Punktspaltung nach Abbildung 2.1 zum Einsatz (siehe Paragraph 10.1).

Betrachtet man z.B. die ($z = 0$)-Ebene in Abbildung 2.1, so stellt sich die Frage nach einer geeigneten Wahl der Verteilungsfunktionen f_{σ_i} für die sich dort befindenden Randknoten.

Um sicherzustellen, daß keine Masse über diese Ebene ausgetauscht wird, werden vor der Verschiebung der Verteilungsfunktionen symmetrische Randbedingungen gesetzt:

$$\begin{aligned} f_5(x, y, z = 0) &= f_6(x, y, z = h) \\ f_{11}(x, y, z = 0) &= f_{13}(x, y, z = h) \\ f_{14}(x, y, z = 0) &= f_{12}(x, y, z = h) \\ f_{15}(x, y, z = 0) &= f_{17}(x, y, z = h) \\ f_{18}(x, y, z = 0) &= f_{16}(x, y, z = h) \end{aligned}$$

Vor der Berechnung der zwischenmolekularen Kräfte nach Gleichung 9.1 muß die Dichte an den Randpunkten bekannt sein. Setzt man beispielsweise $\rho(x, y, z = 0) = \rho(x, y, z = h)$, so ergibt sich ein Randwinkel ϑ_0 von 90° . Dieser Randwinkel kann allerdings über einen Faktor k variiert werden:

$$\rho(x, y, z = 0) = k \cdot \rho(x, y, z = h) \quad (9.62)$$

Wählt man $k < 1$, so folgt hieraus, daß die Kohäsionskräfte zwischen den Fluidpartikeln größer als die Adhäsionskräfte zwischen Fluid und Festkörper sind, und es ergibt sich ein Randwinkel größer als 90° ; wählt man $k > 1$, so ergibt sich entsprechend ein Randwinkel kleiner als 90° .

Der Einfluß unterschiedlicher Randwinkel an der Dreiphasenkontaktlinie bzw. unterschiedlicher Oberflächenspannungen des Fluids auf den Verlauf der Phasengrenze wird in Paragraph 10.1 untersucht.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß obige Randbedingung zur Implementierung eines ruhenden, ebenen Festkörpers an der ($z = 0$)-Ebene analog für die anderen fünf Ränder des Berechnungsgitters formuliert werden kann.

9.6.2 Bewegte, gekrümmte Festkörper

Die hier beschriebene Randbedingung zur Implementierung sich bewegend gekrümmter Festkörper kommt bei der Simulation der dynamischen Schichtspaltung in Paragraph 10.2 zum Einsatz. Die sich bewegend gekrümmten Festkörper sind dort rotierende Walzen.

Im Gegensatz zur Randbedingung „ruhender, ebener Festkörper“, welche im vorigen Paragraphen beschrieben wurde, lassen sich Dichte und Verteilungsfunktionen an den Randknoten nun nicht mehr aus entsprechenden Größen von benachbarten inneren Knoten berechnen. Dies liegt zum einen daran, daß eine einfache Spiegelung der Verteilungsfunktionen bzw. der Dichte, wie in Paragraph 9.6.1, hier nicht möglich ist, da sich gekrümmte Festkörperoberflächen nicht der Gittersymmetrie anpassen. Zum anderen muß die Eigengeschwindigkeit der Festkörper in die Verteilungsfunktionen an den Randknoten einfließen.

Entwickelt und überprüft wurde diese Randbedingung von Takada und Tsutahara [48] auf einem zweidimensionalen hexagonalen Gitter. Die Übertragung auf das hier verwendete dreidimensionale Gitter bereitet jedoch keinerlei Schwierigkeiten und sei im Folgenden kurz skizziert. An den Randknoten sind, genau wie an allen inneren Knoten, zu Beginn eines Zeitschrittes alle 19 Verteilungsfunktionen f_{σ_i} und die Dichte ρ (für die Berechnung der zwischenmolekularen Kraft nach Gleichung 9.1) gegeben (siehe Abbildung 9.10 (a)).

Da keine Masse über die feste Wand ausgetauscht werden kann, bleiben diejenigen Verteilungsfunktionen, welche von einem Randknoten in Richtung des Festkörpers zeigen, während der Verschiebung der Verteilungsfunktionen erhalten. Diejenigen Verteilungsfunktionen, welche von einem Randknoten in Richtung eines inneren Knotens zeigen, werden, genau wie es an allen inneren Knoten der Fall ist, gemäß ihrer Richtung verschoben. Mittels dieser Verteilungsfunktionen (siehe Abbildung 9.10 (b)) wird die Dichte ρ an den Randknoten nach Gleichung 8.23 neu berechnet.

Die neuen Verteilungsfunktionen an den Randknoten berechnen sich nun aus der Gleichgewichtsverteilung nach Gleichung 8.90 mittels der Wandgeschwindigkeit U_W und der neu berechneten Dichte ρ , so daß für den nächsten

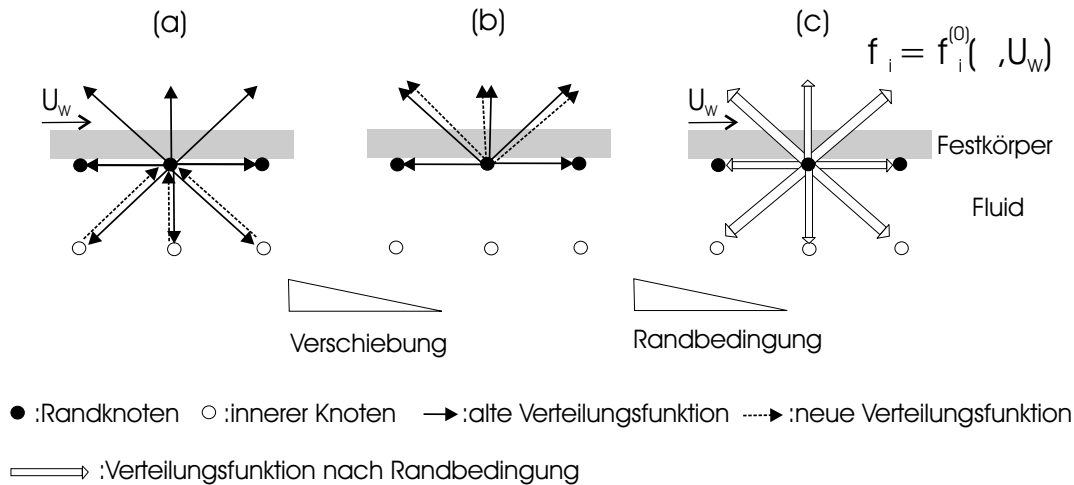


Abbildung 9.10: Randbedingung bewegter, gekrümmter Festkörper. Dargestellt ist lediglich die zweidimensionale Projektion des dreidimensionalen Gitters.

Zeitschritt Dichte und Verteilungsfunktionen an den Randknoten erneut gegeben sind (siehe Abbildung 9.10 (c)).

Ein großer Vorteil dieser Randbedingung, gegenüber der bei Schelkle beschriebenen dirichletschen Randbedingung, liegt in der dynamischen Berechnung der Dichte. Hierdurch wird die Ausbildung einer Phasengrenze flüssig-gasförmig an der Festkörperoberfläche ermöglicht.

9.7 Algorithmus

Der Algorithmus des hier verwendeten Gitter-Boltzmann Verfahrens ist in Abbildung 9.11 schematisch dargestellt. Anfangs erfolgt die Eingabe der Gitterparameter, der Modellparameter sowie der Anfangs- und Randbedingungen für die Strömung. Aus diesen Größen wird das Berechnungsgitter erzeugt und mittels Gleichung 8.90 eine Anfangsverteilung $f_{\sigma i} = f_{\sigma i}^{(0)}$ berechnet. Es ist zu beachten, daß im Fall der dynamischen Schichtspaltung unnötige Gitterknoten innerhalb der Walzenkörper, auf die von keinem inneren Punkt des Fluids zugegriffen werden kann, aus dem orthogonalen Gitter entfernt werden sollten, um Speicherplatz einzusparen. Die verbleibenden Gitterknoten werden in die folgenden Klassen unterteilt:

1. Innere Knoten (Bezeichnung: I).
2. Randknoten mit symmetrischer Randbedingung (Bezeichnung: RS).

3. Randknoten mit periodischer Randbedingung (Bezeichnung: RP).
4. Randknoten mit dirichletscher Randbedingung (Bezeichnung: RD).
5. Randknoten: ruhender, ebener Festkörper (Bezeichnung: RR).
6. Randknoten: bewegter, gekrümmter Festkörper (Bezeichnung: RB).

Nun beginnt die Iterationsschleife, in der zunächst die Dichte ρ nach Gleichung 8.23 (für I, RB) berechnet wird. Für die Randknoten RS, RP und RR ergibt sich ρ aus der Dichte entsprechender innerer Knoten. Für die Randknoten RD ist ρ vorgegeben.

Es folgt die Berechnung der zwischenmolekularen Kraft \vec{F} nach Gleichung 9.1 (für I). Randknoten müssen hier nicht berücksichtigt werden.

Mittels der zwischenmolekularen Kraft \vec{F} bestimmt man nun aus den Gleichungen 9.3 bzw. 9.4 die Geschwindigkeiten $\vec{u}^{(0)}$ und \vec{u} (für I). Für die Randknoten RD und RB ist die Geschwindigkeit $\vec{u}^{(0)}$ vorgegeben. An allen anderen Randknoten werden keine Geschwindigkeiten benötigt.

Nach Ausgabe der Dichte- bzw. Geschwindigkeitsverteilung können im Post-processing der Verlauf der freien Oberfläche bzw. das Strömungsbild grafisch dargestellt werden.

Es folgt die Berechnung der Gleichgewichtsverteilung $f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t)$ nach Gleichung 8.90 (für I, RD und RB).

Im Kollisionsschritt werden die Verteilungsfunktionen für den nächsten Zeitschritt $t + \delta t$ berechnet. Für alle inneren Knoten wird hierfür Gleichung 8.20 verwendet, für die Randknoten RD und RB gilt $f_{\sigma i}(\vec{x}, t + \delta t) = f_{\sigma i}^{(0)}(\vec{x}, t)$, und für alle verbleibenden Randknoten ergeben sich die $f_{\sigma i}(\vec{x}, t + \delta t)$ aus den Verteilungsfunktionen geeigneter innerer Knoten.

Der Iterationsschritt wird mit der Verschiebung der Verteilungsfunktionen (für I und RB) abgeschlossen. An allen inneren Knoten \vec{x} verschieben sich die $f_{\sigma i}(\vec{x}, t + \delta t)$ dabei auf die Nachbarknoten $\vec{x} + \vec{c}_{\sigma i} \delta t$. Für die Randknoten RB ist der Verschiebungsschritt in Paragraph 9.6.2 erläutert.

Der Iterationsschritt ist hiermit abgeschlossen und wird solange wiederholt bis das Ende der Simulationszeit erreicht ist.

Für eine erste Überprüfung des obigen Algorithmus wurden, wie bei Schelkle [1], Tropfenkollisionen simuliert. Die erzeugten Simulationsergebnisse unterscheiden sich nicht von den bei Schelkle [1] erzeugten Ergebnissen, so daß davon auszugehen ist, daß obiger Algorithmus reales Fluidverhalten simuliert. Die neuen Randbedingungen zur Implementierung von Festkörpern, RR und RB, werden im folgenden Kapitel verwendet, um druckspezifische Zweiphasenströmungen zu simulieren.

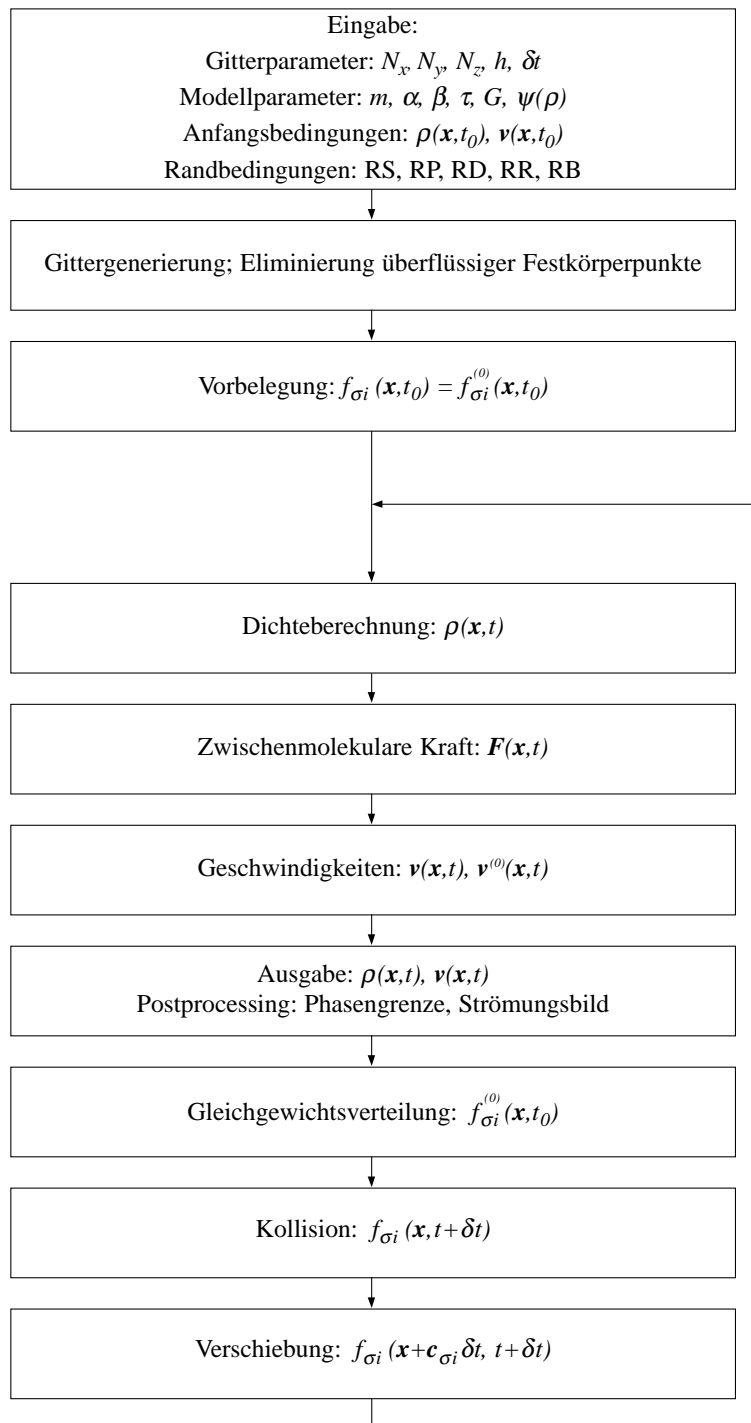


Abbildung 9.11: Algorithmus des Gitter-Boltzmann Verfahrens.

Kapitel 10

Simulationsbeispiele

10.1 Quasistatische Punktspaltung

Wie in Paragraph 2.1 gezeigt wurde, ist die Bestimmung der Konturkurve $R(z)$ eines rotationssymmetrischen Tropfens zwischen parallelen Platten (siehe Abbildung 2.1) mit rein analytischen Mitteln nicht ohne weiteres möglich, da eine allgemeine Lösung der Gleichungen 2.3 bzw. 2.11 nicht ermittelt werden kann.

Im Folgenden soll dieses Problem der quasistatischen Punktspaltung daher mittels des oben beschriebenen Gitter-Boltzmann Verfahrens simuliert werden. Dafür wird ein orthogonales Gitter mit $Nx \cdot Ny \cdot Nz$ Knoten erzeugt. Die Randknoten der $(z = 0)$ -Ebene und der $(z = Nz - 1)$ -Ebene erhalten dabei die Randbedingung RR (Paragraph 9.6.1); alle anderen Randknoten erhalten die symmetrische Randbedingung RS.

(Je nach Anzahl der Symmetrieebenen eines Problems, bezeichnet mit m , kann durch symmetrische Randbedingungen der Speicheraufwand um den Faktor $1/2^m$ reduziert werden.)

Die folgenden Modellparameter sind bei allen durchgeführten Simulationen konstant:

Parameter	α	β	γ	$\psi(\rho)$	ρ_0	h	δt	m
Wert	1/3	1/18	1/2	$\psi_1(\rho) = \rho_0(1 - e^{-\rho/\rho_0})$	1	1	1	1

Die Wahl von $\alpha = 1/3$ und $\beta = 1/18$ erfolgt gemäß Gleichung 8.97; die Wahl von $\gamma = 1/2$ erfolgt gemäß Gleichung 8.94. Über die in obiger Tabelle noch nicht festgesetzten Modellparameter τ und \mathcal{G} werden in den folgenden Simulationen die Stoffgrößen, insbesondere die Oberflächenspannung γ_l und der Gleichgewichtsdruck p_0 , gesteuert. Die Diskretisierungsparameter h , δt

und die Teilchenmasse m skalieren das Problem lediglich (siehe Schelkle [1]); die Wahl von $\psi(\rho) = \psi_1(\rho)$ erfolgt willkürlich und wäre z.B. durch die Funktionen $\psi_2(\rho)$ bzw. $\psi_3(\rho)$ aus Gleichung 9.18 ersetzbar.

Anfangs wird zwischen den parallelen Platten an der ($z = 0$)-Ebene und der ($z = Nz - 1$)-Ebene ein Flüssigkeitszylinder vom Radius R_0 initialisiert, welcher beide Platten gerade berührt (siehe z.B. Abbildung 10.1 bei $t = 0$).

Die zeitliche Entwicklung des Konturkurvenverlaufs ergibt sich dann aus dem Gitter-Boltzmann Verfahren gemäß des Algorithmus aus Abbildung 9.11.

Abbildung 10.1 zeigt die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche vom Anfangszustand bei $t = 0$ bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes bei $t = 2000$ für folgende Modellparameter:

Modellparameter	Nx	Ny	Nz	\mathcal{G}	τ	R_0	k_u	k_o
Wert	40	40	50	-0,185	0,75	25	1,5	1,5

Hierbei ist $(Nz - 1) \cdot h$ der Abstand der parallelen Platten; $R_0 \cdot h$ ist der anfangs konstante Radius des Flüssigkeitszylinders, und die dimensionslosen Größen k_u bzw. k_o bestimmen die Adhäsionskräfte an der unteren - bzw. oberen Platte (siehe Gleichung 9.62). Alle diese Größen haben einen unmittelbaren Einfluß auf die Form der freien Oberfläche im Gleichgewichtszustand, während die Größen Nx und Ny lediglich gewährleisten müssen, daß der sich verformende Flüssigkeitstropfen nicht die Grenzen des Berechnungsgebietes überschreitet. Aus den verbleibenden Modellparametern τ und \mathcal{G} berechnen sich, mittels des in Paragraph 9.5 beschriebenen Algorithmus, folgende makroskopische Stoffgrößen:

Stoffgröße	ρ_l	ρ_g	ρ_l/ρ_g	η_l	p_0	γ_l
Wert	2,3015	0,0654	35,18	0,1918	0,0181	0,0704

Von diesen makroskopischen Stoffgrößen haben sowohl der Wert der Oberflächenspannung γ_l als auch der Wert des Gleichgewichtsdruckes p_0 , bei dem beide Phasen gleichberechtigt existieren können, einen unmittelbaren Einfluß auf die Form der freien Oberfläche im Gleichgewichtszustand (siehe Young-Laplace Gleichung 2.1). Die Größe der dynamischen Viskosität η_l ist ein Maß für die Geschwindigkeit, mit der sich das System seinem Gleichgewichtszustand annähert, beeinflusst diesen stationären Zustand aber nicht direkt. Das Verhältnis der Dichten $\rho_l/\rho_g \geq 30$ sichert den dominanten Einfluß der flüssigen - gegenüber der gasförmigen Phase. Die Absolutwerte der Dichten haben keinen Einfluß auf den Gleichgewichtszustand, da im vorliegenden Problem

äußere Volumenkräfte wie z.B. die Gravitation nicht berücksichtigt werden. Die für den Gleichgewichtszustand $R(z)$ unmittelbar relevanten Größen sind in der folgenden Dimensionsmatrix noch einmal zusammengefaßt:

	$R(z)$	$H = Nz - 1$	R_0	k_u	k_o	p_0	γ_l
Länge [m]	1	1	1	0	0	-1	0
Masse [kg]	0	0	0	0	0	1	1
Zeit [s]	0	0	0	0	0	-2	-2

Der Rang dieser Dimensionsmatrix besitzt den Wert 2, so daß sich das vorliegende Problem mittels des π -Theorems von Buckingham (siehe z.B. Spurk [27]) auf die folgenden 5 dimensionslosen Kenngrößen reduzieren läßt:

1. Die, die Kontur beschreibende, dimensionslose Größe $\mathbf{R}(\mathbf{z})/\mathbf{H}$.
2. Die bereits dimensionslosen Kenngrößen \mathbf{k}_u und \mathbf{k}_o , welche den Einfluß der Adhäsionskräfte an den Platten und damit die Randwinkel festlegen.
3. Das Verhältnis der beiden geometrischen Größen H und R_0 : \mathbf{R}_0/\mathbf{H} .
4. Das Verhältnis der Druckspannung zur Oberflächenspannung: $\mathbf{p}_0\mathbf{R}_0/\gamma_l$

Man erwartet daher folgenden funktionalen Zusammenhang für die gesuchte dimensionslose Größe $R(z)/H$:

$$\frac{R(z)}{H} = f\left(k_u, k_o, \frac{R_0}{H}, \frac{p_0 R_0}{\gamma_l}\right) \quad (10.1)$$

Ausgehend von Abbildung 10.1 ($k_u = k_o = 1,5$, $R_0/H \approx 0,5$, $p_0 R_0/\gamma_l \approx 6,4$) werden diese vier dimensionslosen Kennzahlen nun gezielt variiert.

Erhöht man die Werte der dimensionslosen Kennzahlen k_u und k_o und vergrößert somit die Adhäsionskräfte an den Platten, so sollten sich die Randwinkel verkleinern.

Abbildung 10.3 zeigt dieses zu erwartende Verhalten für verschiedene Gleichgewichtszustände eines Tropfens bei unterschiedlichen Werten von $k_u = k_o = k$. Die verbleibenden beiden dimensionslosen Kenngrößen behalten dabei ihre Werte von $R_0/H \approx 0,5$ und $p_0 R_0/\gamma_l \approx 6,4$ aus Abbildung 10.1 bei.

Selbstverständlich müssen die Werte von k_u und k_o nicht identisch sein, so daß sich an den Platten unterschiedliche Randwinkel einstellen lassen. Es

ist jedoch zu beachten, daß für diesen Fall mehr Speicherplatz erforderlich ist als bei identischen Werten von k_u und k_o , da eine Symmetrieebene des Problems wegfällt. Abbildung 10.2 zeigt die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche vom Anfangszustand bei $t = 0$ bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes bei $t = 5000$ für $k_u = 1,4$ und $k_o = 1,8$ bei sonst identischen dimensionslosen Kenngrößen wie in Abbildung 10.1.

Eine Variation der dimensionslosen Kenngröße $p_0 R_0 / \gamma_l$ erfolgt über die Modellparameter τ und \mathcal{G} . Abbildung 10.4 zeigt die Gleichgewichtszustände eines Tropfens für zwei unterschiedliche Werte dieses Parameters. Wie nach Gleichung 2.1 zu erwarten, erhöht sich dabei die Krümmung der Tropfenoberfläche, wenn sich der Einfluß der Oberflächenspannung verringert.

Erhöht man den Wert von $k_u = k_o = k$ nun noch weiter und verkleinert gleichzeitig den Radius R_0 des Flüssigkeitszylinders, so werden alle vier dimensionslosen Kenngrößen variiert. Abbildung 10.5 zeigt die zeitliche Entwicklung eines Flüssigkeitszylinders für die Kenngrößen $k = k_u = k_o = 2,5$, $R_0/H \approx 0,3$ und $p_0 R_0 / \gamma_l \approx 3,9$. Auf Grund des kleinen Wertes von R_0/H kommt es hier zur Spaltung der Flüssigkeit und zur gleichzeitigen Ausbildung eines Satellitentropfens.

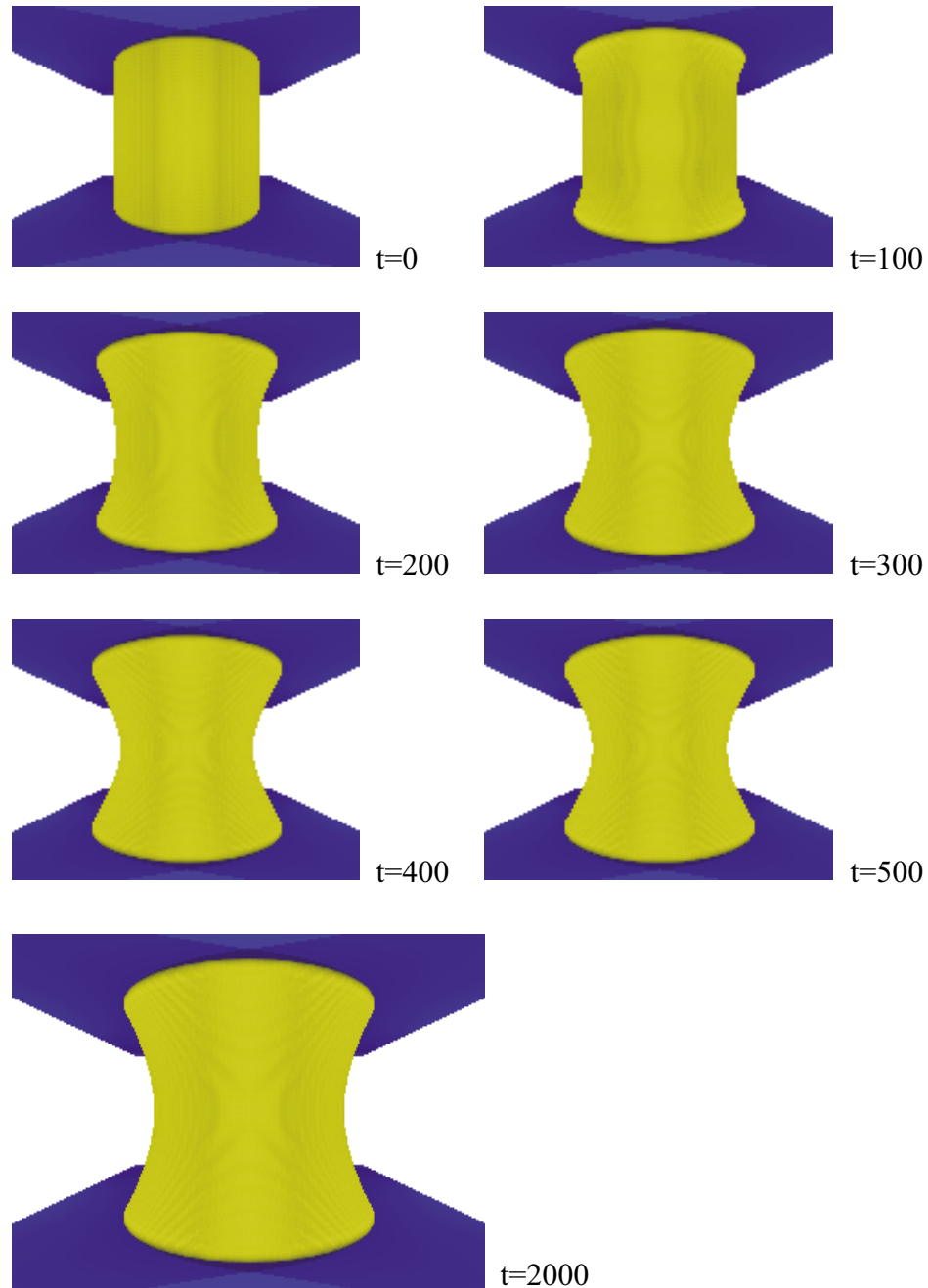


Abbildung 10.1: Zeitliche Entwicklung des Oberflächenverlaufs eines Flüssigkeitszylinders zwischen parallelen Platten. In der dreidimensionalen Gitter-Boltzmann Simulation wurde $k_u = k_o = 1,5$ und $R_0/H = 0,5$ gesetzt. Aus $\tau = 0,75$ und $\mathcal{G} = -0,185$ folgt $p_0 R_0 / \gamma_l \approx 6,4$.

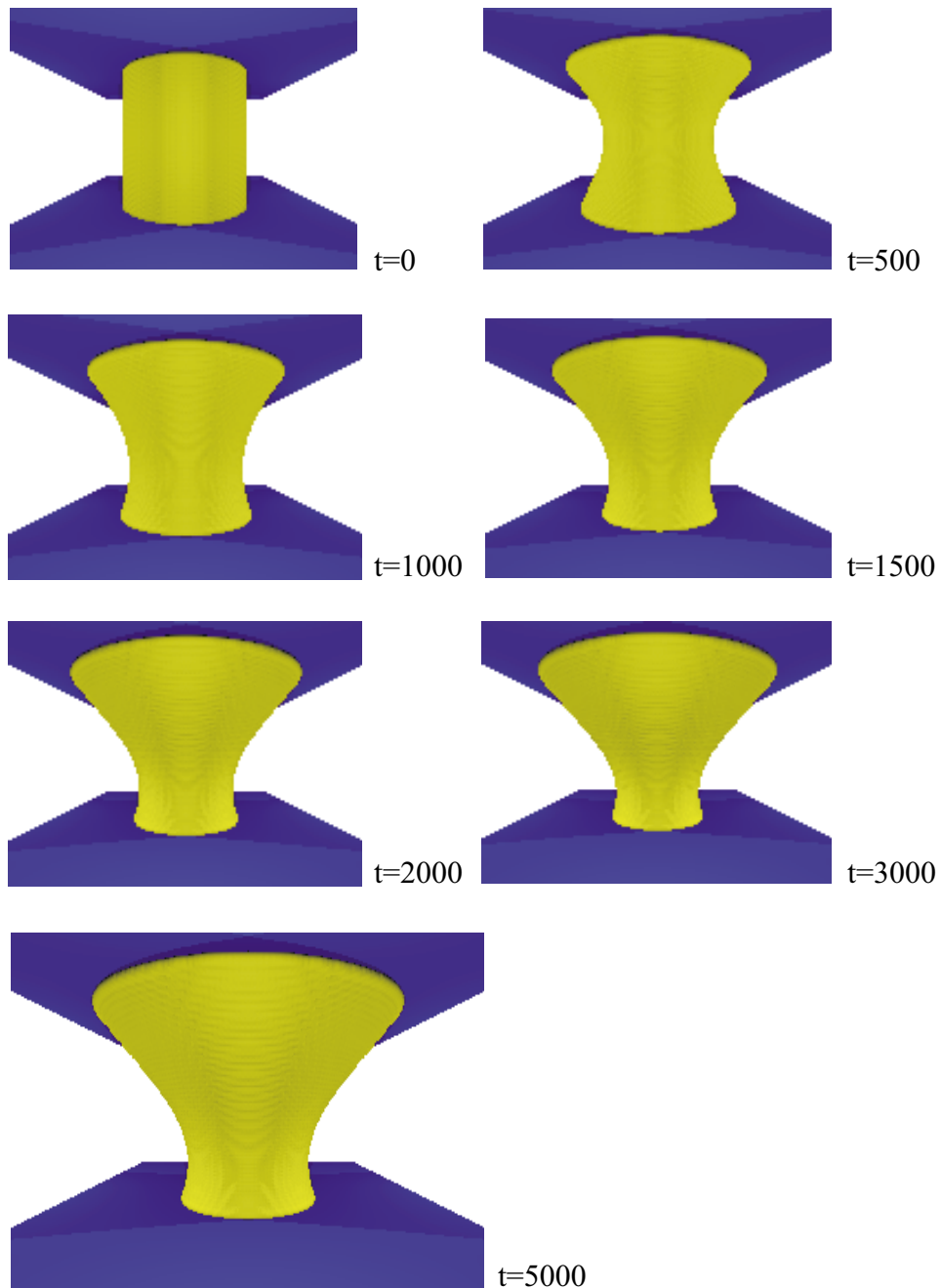


Abbildung 10.2: Zeitliche Entwicklung des Oberflächenverlaufs eines Flüssigkeitszylinders zwischen parallelen Platten. In der dreidimensionalen Gitter-Boltzmann Simulation wurde $k_u = 1,4$, $k_o = 1,8$, $R_0/H = 0,5$ gesetzt. Aus $\tau = 0,75$ und $\mathcal{G} = -0,185$ folgt $p_0 R_0 / \gamma l \approx 6,4$.

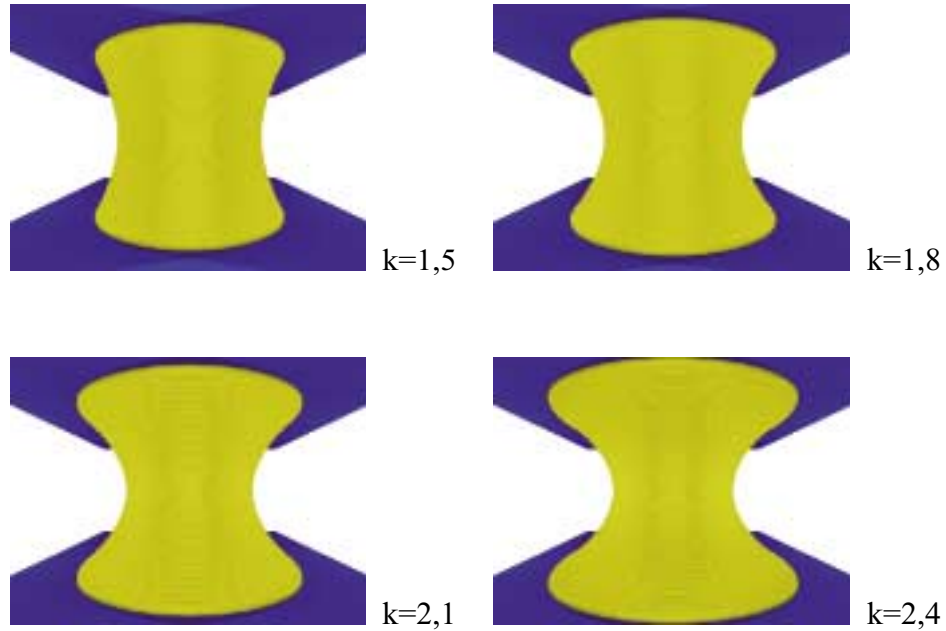


Abbildung 10.3: Gleichgewichtszustände eines Flüssigkeitstropfens zwischen parallelen Platten. In den dreidimensionalen Gitter-Boltzmann Simulationen wurde $R_0/H = 0,5$ gesetzt. Aus $\tau = 0,75$ und $\mathcal{G} = -0,185$ folgt $p_0 R_0 / \gamma_l \approx 6,4$; $k_u = k_o = k$ variiert von 1,5 bis 2,4.

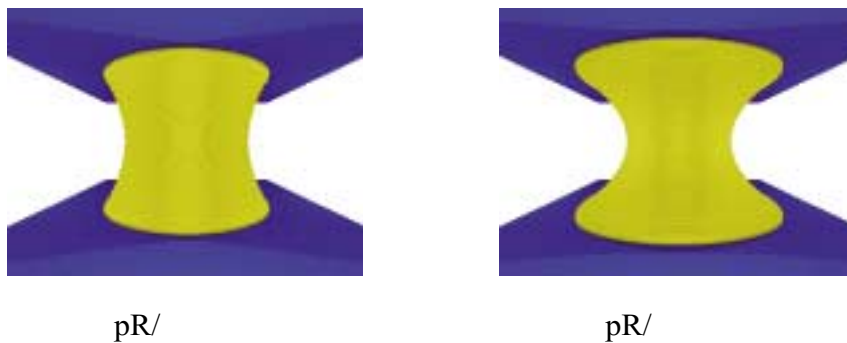


Abbildung 10.4: Gleichgewichtszustände eines Flüssigkeitstropfens zwischen parallelen Platten. In den dreidimensionalen Gitter-Boltzmann Simulationen wurde $R_0/H = 0,5$ und $k_u = k_o = 2,5$ gesetzt. Über τ und \mathcal{G} wird $p_0 R_0 / \gamma_l$ variiert.

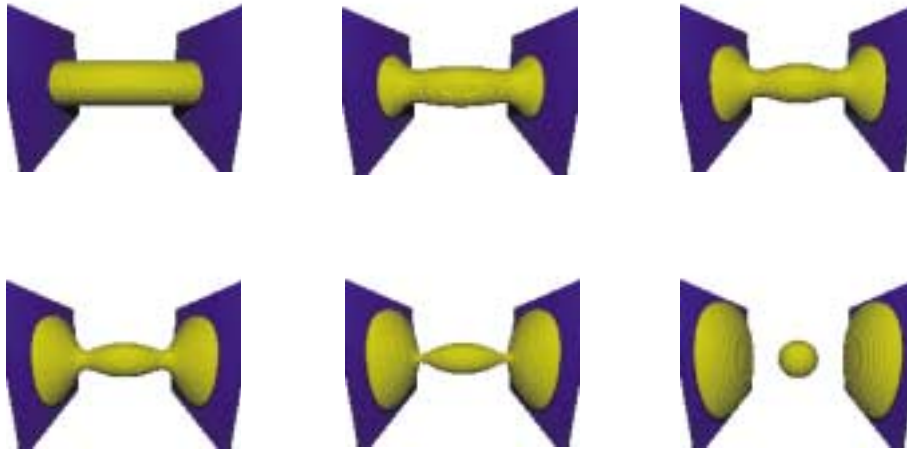


Abbildung 10.5: Zeitliche Entwicklung des Oberflächenverlaufs eines Flüssigkeitszylinders zwischen parallelen Platten. In der dreidimensionalen Gitter-Boltzmann Simulation wurde $R_0 = 15$, $Nz = 50$, $k_u = k_o = 2,6$, $\tau = 0,75$ und $\mathcal{G} = -0,185$ gesetzt. Folglich ist $R_0/H = 0,3$ und $p_0 R_0/\gamma_l \approx 3,86$.

10.1.1 Vergleich von Experiment und Simulation

In diesem Paragraphen sollen die Ergebnisse der Gitter-Boltzmann Simulation mit realen Versuchen zur quasistatischen Punktspaltung verglichen werden.

Dazu betrachtet man die linke Spalte von Abbildung 10.6, welche der Arbeit von Hübner [3] entnommen ist. Diese zeigt die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche eines Flüssigkeitstropfens, welcher mit langsamer Trenngeschwindigkeit zwischen parallelen Platten gespalten wird. Die Fotografien entstanden bei Umgebungsdruck unter einem Mikroskop bei einer Trenngeschwindigkeit von ca. 1mm/s ; bei der Flüssigkeit handelt es sich um Glycerin, die parallelen Platten bestehen aus Teflon. Die wesentlichen Parameter dieses Versuchs (Trenngeschwindigkeit v , Tropfenvolumen V , Umgebungsdruck p_0 so wie die dynamische Viskosität η , Dichte ρ_l und Oberflächenspannung γ_l von Glycerin) sind in folgender Tabelle zusammengefaßt:

$v[\text{m/s}]$	$V[\text{m}^3]$	$\eta[\text{Ns/m}^2]$	$\rho_l[\text{kg/m}^3]$	$p_0[\text{N/m}^2]$	$\gamma_l[\text{N/m}]$
$1 \cdot 10^{-3}$	$0,37 \cdot 10^{-9}$	1,48	$1,261 \cdot 10^3$	$1,01325 \cdot 10^5$	$6,57 \cdot 10^{-2}$

Die Grenzflächenspannung zwischen Teflon und Glycerin $\gamma_{s,l}$ ist in obiger Ta-

belle nicht enthalten, da diese lediglich für die Größe der Randwinkel verantwortlich ist (Young-Dupre Gleichung 2.13). Die Randwinkel lassen sich in der Gitter-Boltzmann Simulation aber nur durch „Ausprobieren“ (Wahl von $k_u = k_o = k$) einstellen. Das Tropfenvolumen V ergibt sich aus Abbildung 10.6 Bild a) durch Abmessen des mittleren Radius $R_0 = (R_{max} + R_{min})/2$ sowie des Plattenabstands H aus $V = \pi R_0^2 H \approx 0,377 \text{ mm}^3$ und bleibt während des Trennvorgangs konstant.

Aus diesen Parametern ergeben sich (mit $L = V^{1/3}$) folgende dimensionslose Kenngrößen:

$$We = \frac{\rho_l L v^2}{\gamma_l} \approx 1,39 \cdot 10^{-12} \quad (10.2)$$

$$Re = \frac{\rho_l L v}{\eta} \approx 6,15 \cdot 10^{-10} \quad (10.3)$$

$$Ca = \frac{We}{Re} \approx 2,3 \cdot 10^{-3} \quad (10.4)$$

$$Fr = \frac{v^2}{Lg} \approx 141 \quad (10.5)$$

$$Bo = \frac{\rho_l g L^2}{\gamma_l} \approx 9,82 \cdot 10^{-15} \quad (10.6)$$

Die kleine Bondzahl Bo und die relativ große Froudezahl Fr besagen, daß die Gravitation in diesem Versuch vernachlässigbar ist. Die kleinen Werte von Reynolds - und Weberzahl besagen, daß die Trägheitskräfte ebenfalls vernachlässigbar sind. Der kleine Wert der Kapillanzahl Ca besagt schließlich, daß der Einfluß der Oberflächenspannung über den Einfluß der Zähigkeit dominiert.

Folglich kann davon ausgegangen werden, daß sich der Flüssigkeitstropfen trotz der vorhandenen kleinen Trenngeschwindigkeit zu jedem Zeitpunkt in der Nähe seines Gleichgewichtszustandes befindet, welcher durch die Young-Laplace Gleichung 2.1 gegeben ist.

Die für das Problem dominanten dimensionslosen Kennzahlen sind also neben den Randwinkeln (gegeben durch die Young-Dupre Gleichung 2.13) sowohl das Größenverhältnis R_0/H ($R_0 = \sqrt{V/\pi H}$) als auch das Verhältnis der Druckspannung zur Oberflächenspannung $p_0 R_0/\gamma_l$. Da das Tropfenvolumen $V \approx 0,377 \text{ mm}^3$ während des Trennvorgangs konstant bleibt und der Plattenabstand H gleichzeitig anwächst, variieren diese beiden Kennzahlen. Die folgende Tabelle zeigt die Werte der Kennzahlen für die fünf Momentaufnahmen aus Abbildung 10.6 (linke Spalte).

Versuch	Bild a)	Bild b)	Bild c)	Bild d)	Bild e)
$H[mm]$	0,62	0,79	1,1	1,26	1,31
$R_0[mm]$	0,44	0,39	0,33	0,31	0,3
$R_0/H[-]$	0,71	0,49	0,3	0,25	0,23
$p_0 \cdot R_0/\gamma_l[-]$	68	60	51	48	47

Diese Verhältnisse sollen nun in den Gitter-Boltzmann Simulationen nachgestellt werden. Wählt man $\tau = \mathbf{0,7}$ und $\mathcal{G} = -\mathbf{0,16}$, so ergibt sich, mittels des in Paragraph 9.5 beschriebenen Algorithmus, ein Gleichgewichtsdruck von $\mathbf{p_0} \approx \mathbf{0,036}$ und eine Oberflächenspannung von $\gamma_l \approx \mathbf{0,0263}$. Durch geeignete Wahl von R_0 sichert man die Übereinstimmung von $p_0 \cdot R_0/\gamma_l$ in Simulation und Experiment. Daraufhin wird H so gewählt, daß auch das Größenverhältnis R_0/H mit den Experimenten übereinstimmt. Mittels dieser Wahl von R_0 und H wird gleichzeitig ein konstantes Tropfenvolumen $V_{sim}[h^3] \approx 5,388 \cdot 10^5$ für alle Simulationen garantiert. In der nachfolgenden Tabelle sind die so errechneten Größen für die Simulation angegeben:

Simulation	Bild 1)	Bild 2)	Bild 3)	Bild 4)	Bild 5)
H	70	89	124	141	148
R_0	50	44	37	35	34
R_0/H	0,71	0,49	0,3	0,25	0,23
$p_0 \cdot R_0/\gamma_l$	68	60	51	48	47

Die Einstellung der Randwinkel (bzw. der Grenzflächenspannung $\gamma_{s,l}$) erfolgt über die Wahl des dimensionslosen Parameters $k = k_u = k_o$ in der Randbedingung RR.

Die rechte Spalte in Abbildung 10.6 zeigt die jeweiligen Gleichgewichtszustände der Simulationen für $k = k_u = k_o = 1,19$. Bei diesen Bildern handelt es sich um Projektionen der freien Oberfläche auf die x, z -Ebene, wobei an jedem Gitterknoten der Dichte des Fluids ein entsprechender Grauwert zugeordnet wurde. Es zeigt sich, daß Experiment und Simulation sehr gut übereinstimmen.

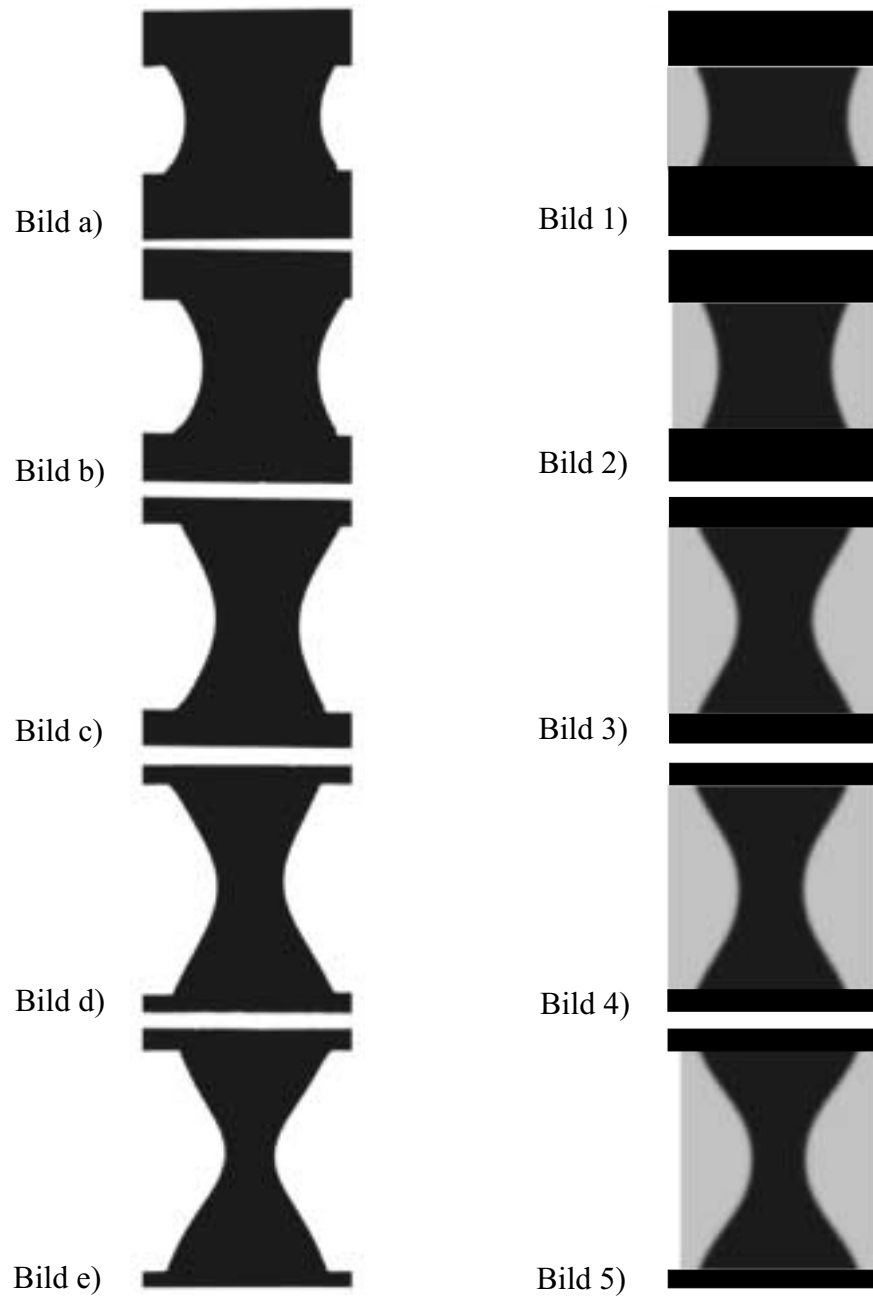


Abbildung 10.6: links: Experiment, rechts: Simulation

Zusammenfassung:

In diesem Paragraphen konnte gezeigt werden, daß sich das vorgestellte Gitter-Boltzmann Verfahren zusammen mit der Randbedingung RR hervorragend zur Simulation der quasistatischen Farbspaltung eignet. Die kleinen Abweichungen zwischen Simulation und Experiment ergeben sich durch die Ungenauigkeit bei der Bestimmung des konstanten Tropfenvolumens V im Experiment und bei der Wahl der Simulationsparameter k_u und k_o , welche nur durch Ausprobieren ermittelt werden konnten. Trotz dieser Unsicherheiten stimmen die Simulationsergebnisse sehr gut mit den experimentellen Daten überein.

Der Algorithmus wurde in der Programmiersprache C++ auf einem herkömmlichen PC implementiert. Bei einem Arbeitsspeicher von 256 MB (ist in obigen Simulationsbeispielen ausreichend, um das Schreiben von Auslagerungsdateien auf die Festplatte zu verhindern) und einem Prozessor mit einer Taktfrequenz von 800 MHz beträgt die benötigte Simulationszeit vom Anfangszustand bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes für jede der durchgeführten Simulationen ca. 15 Stunden.

10.2 Dynamische Schichtspaltung

Eine Simulation der, z.B. für den Druck von Volltonflächen relevanten, dynamischen Schichtspaltung stellt sich wesentlich schwieriger dar als die Simulation der quasistatischen Farbspaltung 2. Klasse, welche im vorigen Paragraphen beschrieben wurde. Der Grund hierfür ist weniger in der Dynamik des Prozesses, sondern vielmehr in den komplizierteren geometrischen Verhältnissen zu suchen.

Dies sei im Folgenden an dem geometrisch einfachsten Beispiel eines Walzenspaltes, einem beidseitig hart berandeten Walzenspalt zwischen zwei Walzen mit gleichem Radius $R_1 = R_2 = R$ und gleicher Tangentialgeschwindigkeit $w_1 = w_2 = w$, erläutert. Der Einfachheit halber sei zusätzlich angenommen, daß beide Walzen dem Spalteinlauf die gleiche Menge Flüssigkeit zuführen, also mit der gleichen Farbschichtdicke $S_1 = S_2 = S$ eingefärbt sind. Der kleinste Abstand der beiden Walzen sei mit H bezeichnet. Zusätzlich sind die Oberflächenspannung γ_l , die dynamische Viskosität η_l und die Dichte ρ_l der Flüssigkeit sowie der Umgebungsdruck p_0 wesentliche Parameter, die den Prozess der Schichtspaltung beeinflussen. Die dynamische Viskosität und Dichte der umgebenden Luft werden, wie der Einfluß der Erdbeschleunigung, vernachlässigt. Da sich bei einer vollflächigen Einfärbung der Walzen keine Dreiphasenkontaktlinie an der Walzenoberfläche befindet, wird die Grenzflächenspannung γ_{sl} für die folgende Dimensionsanalyse ebenfalls ver-

nachlässigt. (Bei den Simulationen der Strömung im Spaltauslauf wird die Grenzflächenspannung γ_{sl} berücksichtigt. Siehe Paragraph 10.2.2) Alle relevanten Parameter, die den Prozess der Schichtspaltung in diesem idealisierten Modell beeinflussen, sind in der folgenden Dimensionsmatrix zusammengefaßt.

	R	H	S	w	γ_l	p_0	ρ_l	η_l
Länge [m]	1	1	1	1	0	-1	-3	-1
Masse [kg]	0	0	0	0	1	1	1	1
Zeit [s]	0	0	0	-1	-2	-2	0	-1

Da der Rang dieser Dimensionsmatrix den Wert 3 hat, verbleiben nach dem π -Theorem von Buckingham 5 dimensionslose Kenngrößen, die diesen idealisierten Farbspaltungsprozess charakterisieren.

Unter diesen 5 Kenngrößen befinden sich unter anderem die Größenverhältnisse $\mathbf{R/S}$ und $\mathbf{H/S}$. Im idealisierten, beidseitig hart berandeten Walzenspalt sollte $H/S \approx 2$ gelten:

Gilt $H/S \gg 2$, so kommen die Farbschichten der beiden Walzen nicht in Kontakt und man kann somit nicht von einer Spaltung sprechen.

Gilt $H/S \ll 2$, so wird dem Walzenspalt mehr von der als inkompressibel angenommenen Flüssigkeit zugeführt, als durch ihn transportiert werden kann. Da sich der Walzenspalt bei beidseitig harter Berandung nicht weiten kann, würde der Spalteinlauf nach kurzer Zeit mit Farbe „vollaufen“. Die Einstellung der dimensionslosen Kenngröße $H/S \approx 2$ bereitet in der Simulation nur geringe Probleme.

Ganz anders stellt sich die Problematik beim zweiten Größenverhältnis R/S dar. Setzt man hier für den Druckprozess typische Werte ein, so erhält man, beispielsweise für einen Walzenradius $R = 10\text{cm}$ und eine Farbschichtdicke $S = 10\mu\text{m}$, die dimensionslose Kennzahl $R/S = 10^4$. Der relativ große Wert dieser Kennzahl bedingt einen enorm hohen Speicherbedarf für eine realitätsnahe Simulation, welcher im Folgenden einmal grob abgeschätzt wird:

In einem Simulationsmodell sollte, bei hinreichend genauer Auflösung des Spaltvorgangs, die Farbschichtdicke S mindestens 15 Gitterknoten beinhalten ($S \geq 15 \cdot h$). Hieraus folgt, daß für realitätsnahe Größenverhältnisse der Walzenradius R mindestens 150000 Gitterknoten beinhalten muß ($R \geq 150000 \cdot h$).

Möchte man also beispielsweise zwei Walzen mit dem Radius $R = 10\text{cm}$ und einer Breite von $B = 1\text{mm}$ (entspricht demnach 1500 Knoten) bei hinreichend genauer Auflösung in ein kubisches Berechnungsgitter implementieren, so muß dieses mindestens ein Volumen von $4R \cdot 2R \cdot B$ besitzen, d.h. aus min-

destens $600000 \cdot 300000 \cdot 1500 = 2,7 \cdot 10^{14}$ Knoten bestehen. Zusätzlich müssen an jedem Gitterknoten ca. 50 Größen (19 Verteilungen $f_{\sigma i}$, 19 Gleichgewichtsverteilungen $f_{\sigma i}^{(0)}$, 3 Geschwindigkeitskomponenten, 3 Kraftkomponenten ...) mit einem Speicherbedarf von je ca. 10 Byte pro Zeitschritt berechnet werden. Insgesamt ergibt sich also ein enorm großer Speicherbedarf von ca. 10^{17} Byte.

Selbst wenn alle Gitterknoten innerhalb der beiden Walzen aus dem Berechnungsgitter entfernt werden (Knoten innerhalb der Walzen ohne inneren Nachbarknoten werden für die Simulation nicht benötigt) und symmetrische Randbedingungen genutzt werden (wegen $R_1 = R_2$, $S_1 = S_2$ und $w_1 = w_2$, besitzt die betrachtete Geometrie eine Symmetrieebene), bleibt der Speicherbedarf so groß, daß weitere Einschränkungen notwendig sind:

1. Die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen zur dynamischen Schichtspaltung sind auf zwei räumliche Dimensionen beschränkt. In z -Richtung (axiale Richtung der Walzen) werden also lediglich drei Ebenen in das Berechnungsgitter implementiert:
Aus den Verteilungsfunktionen der Gitterknoten innerhalb der ($z = 1$)-Ebene ergibt sich das zweidimensionale Strömungsverhalten; an den Gitterknoten der ($z = 0$)-Ebene und der ($z = 2$)-Ebene werden symmetrische Randbedingungen gesetzt. Damit entspricht die hier gewählte Vorgehensweise zur zweidimensionalen Simulation mittels eines dreidimensionalen Gitters prinzipiell der Vorgehensweise im FCHC-Modell (siehe Paragraph 8.1.1), welches dreidimensionale Simulationen mittels vierdimensionaler Gitter ermöglicht.
2. Das Größenverhältnis R/S muß in der Simulation kleiner als im realen Druckprozess gewählt werden.
3. Es kann nur ein kleiner Ausschnitt des Walzenspaltes betrachtet werden.
4. Spalteinlauf und Spaltauslauf werden voneinander getrennt betrachtet.

Aus dem zweiten Punkt ergeben sich nun weitere Schwierigkeiten bei der Behandlung der drei verbleibenden dimensionslosen Kennzahlen für die Simulation:

Die dimensionslosen Kennzahlen $Re = L\rho_l v/\eta_l$, $We = L\rho_l v^2/\gamma_l$ und $p_0 L/\gamma_l$ enthalten alle die charakteristische Länge L , welche hier beliebig aus der Menge $L \in \{R, H, S\}$ gewählt werden kann. Es macht daher keinen Sinn, diese Kennzahlen in der Simulation so einzustellen, daß sie der Realität des Druckprozesses entsprechen, wenn nicht gleichzeitig die geometrischen

Größenverhältnisse der Realität gewahrt bleiben können.

In Kapitel 5 der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, daß die Kapillarzahl $Ca = v\eta_l/\gamma_l$, also das Verhältnis von Weber- zu Reynoldszahl, welche die charakteristische Länge L nicht enthält, entscheidend für die Stabilität der Schichtspaltung ist.

Es muß jedoch beachtet werden, daß sich bei veränderten geometrischen Verhältnissen auch das Verhältnis der beiden Geschwindigkeitskomponenten einer zweidimensionalen Strömung ändert. So bewirkt eine Verkleinerung der realen Walzenradien R_{real} auf einen für den Arbeitsspeicher zu bewältigenden Simulationswert R_{sim} bei gleicher Druckgeschwindigkeit $w_{real} = w_{sim}$ eine Vergrößerung der typischen Strömungsgeschwindigkeit $v_{sim} > v_{real}$. Der Grund hierfür liegt in der vergrößerten Trenngeschwindigkeit bei verkleinerten Walzen und gleichbleibender Druckgeschwindigkeit. Die in der Kapillarzahl enthaltene typische Geschwindigkeit v ist also ebenfalls geometrieabhängig, so daß die Tangentialgeschwindigkeit der rotierenden Walzen in der Simulation kleiner als die reale Druckgeschwindigkeit gewählt werden muß.

10.2.1 Spalteinlauf

In diesem Paragraphen soll die Zweiphasenströmung im Spalteinlauf zwischen zwei rotierenden Zylindern mit Hilfe des Gitter-Boltzmann Verfahrens simuliert werden. Dafür wird ein orthogonales Berechnungsgitter bestehend aus $Nx \cdot Ny \cdot Nz$ Knoten angelegt, in welches die Spaltgeometrie nach Abbildung 10.7 implementiert wird:

Die Symmetrieachsen der beiden gleich großen Walzen ($R_1 = R_2 = R$) seien parallel zur z -Achse; der minimale Abstand der beiden Walzen sei an der Stelle $x = X_2$ gegeben und mit H bezeichnet. Da, wie oben beschrieben, nicht das Gesamtsystem der beiden Walzen in ein Berechnungsgitter implementierbar ist, schneiden die Walzenoberflächen den Berechnungsrand an der ($y = 0$) bzw. ($y = Ny - 1$)-Ebene. Im Spalteinlauf seien diese Schnittpunkte mit $(X_1, 0, z)$ bzw. $(X_1, Ny - 1, z)$ bezeichnet. Das Berechnungsgitter wird nun längs der x -Achse in drei Abschnitte unterteilt, in denen die folgenden **Randbedingungen** gesetzt werden:

1. Um Speicherplatz einzusparen wird nur die Hälfte des symmetrischen Rechengebietes betrachtet. An der ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene werden symmetrische Randbedingungen gesetzt.
2. $\{(x, y, z) | 0 \leq x < X_1\}$
Hier wird, mittels der Randbedingung RB, an der ($y = 0$)-Ebene eine glatte Platten mit der Eigengeschwindigkeit w implementiert, die dem

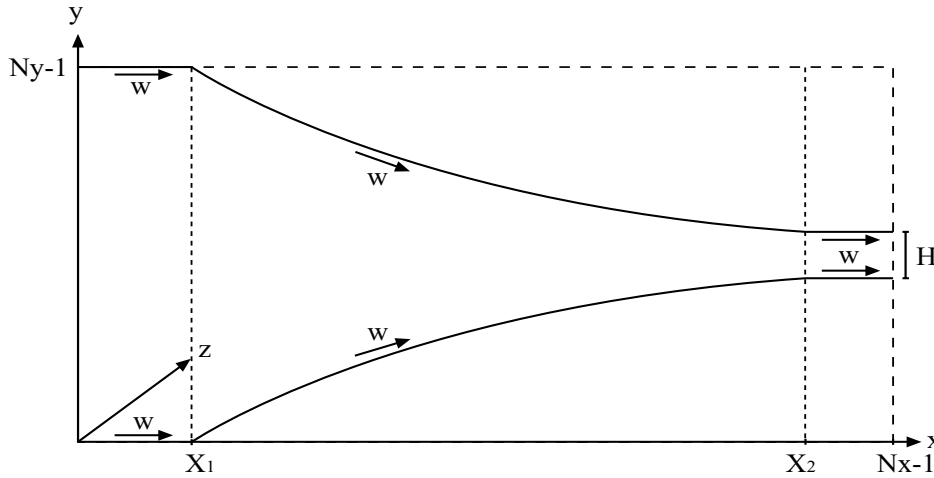


Abbildung 10.7: Simulationsgeometrie des Walzenspaltens

Walzenspalt das Fluid zuführt. Diese Geometrie wird gewählt, da die Strömung längs einer Gittersymmetrie gut in die Randbedingung an der $(x = 0)$ -Ebene implementierbar ist, indem dort alle Werte (ρ und $f_{\sigma i}$) der $(x = h)$ -Ebene übernommen werden. Man geht also davon aus, daß sich die eigentliche Spaltströmung im Bereich $\{(x, y, z) | X_1 \leq x \leq X_2\}$ nicht bis zum $(x = 0)$ -Rand des Berechnungsgitters auswirkt, so daß obige Randbedingung eine konstante Flüssigkeitszufuhr garantiert.

3. $\{(x, y, z) | X_1 \leq x \leq X_2\}$
Hier wird, mittels der Randbedingung RB, eine rotierende Walzen mit der Tangentialgeschwindigkeit w implementiert. Alle Gitterknoten innerhalb der Walze werden aus dem Berechnungsgitter entfernt, um Speicherplatz einzusparen.
4. $\{(x, y, z) | X_2 < x \leq Nx - 1\}$
Die Strömung im Spalteingang wird hier in eine ebene Kanalströmung überführt. Es wird wieder die Randbedingung RB und die Eigengeschwindigkeit w für die Gitterknoten an der Kanalwand benutzt. Alle Gitterknoten, für die $\|y - (Ny - 1)/2\| > H/2$ gilt, werden ebenfalls aus dem Berechnungsgitter entfernt, um Speicherplatz einzusparen. Die verbleibenden Randknoten an der $(x = Nx - 1)$ -Ebene übernehmen die Werte der Dichte und der Verteilungsfunktionen von ihren Nachbarn der $(x = Nx - 2)$ -Ebene.

Anfangsbedingungen: Zu Beginn der Simulation sei der Spalteinlauf nach Abbildung 10.7 im Ruhezustand ($w = 0$). Anfangs werden beide Zylinder

und die ebenen Platten mit einer Flüssigkeitsschicht der Höhe $S = H/2$ bedeckt (siehe z.B. Abbildung 10.8 bei $t = 0$). Dabei wird ein lineares Übergangsbereich von 8 Knoten zwischen der flüssigen - und gasförmigen Phase implementiert (siehe Schelkle [1] Abbildung 3.2-2).

Mit $D(\vec{x}) := \min\{\|\vec{x} - \vec{y}\| : \vec{y} \in \text{RB}\}$ und $\rho_s := (\rho_g + \rho_l)/2$ gilt also:

$$\rho(\vec{x}, t = 0) = \begin{cases} \rho_g & \text{falls } D(\vec{x}) \geq S + 4h \\ \rho_l & \text{falls } D(\vec{x}) \leq S - 4h \\ \left((\rho_g - \rho_l)/8h \right) \left(D(\vec{x}) - S \right) + \rho_s & \text{falls } \|D(\vec{x}) - S\| \leq 3h \end{cases}$$

Diese Anfangsbelegung der Dichteverteilung dient der Vermeidung großer Dichtegradienten und dadurch hervorgerufener großer Beträge der zwischenmolekularen Kraft \vec{F} (nach Gleichung 9.1) an der Phasengrenze. Der nicht vermeidbare „Anfangsfehler“ bei der Vorbelegung der im Detail unbekanntes Dichteverteilung im ruhenden Walzenspalt soll in der Simulation also möglichst klein gehalten werden, um große Geschwindigkeitsbeträge (nach Gleichung 9.3 bzw. Gleichung 9.4) am Simulationsbeginn zu vermeiden.

Während der Zeititeration werden die beiden Zylinder und Platten langsam vom Wert $w = 0$ auf ihren Maximalwert $w = w_{max}$ beschleunigt. Diese Beschleunigungsphase ist notwendig, da die Geschwindigkeitsverteilung im kinematischen Walzenspalt ($w \neq 0$) nicht bekannt ist. Daher muß die Belegung eines Anfangszustandes bei ruhenden Walzen ($w = 0$) erfolgen. Es wird also für alle Gitterknoten $\vec{v}(\vec{x}, t = 0) = \vec{v}^{(0)}(\vec{x}, t = 0) = \vec{0}$ gesetzt.

Des weiteren muß die Geschwindigkeitvergrößerung sehr langsam erfolgen, damit sich Störungen der freien Oberfläche, welche durch die Beschleunigung hervorgerufen werden, nicht bis zum ($x = 0$)-Rand des Berechnungsgitters ausbreiten und somit die zugeführte Farbschichtdicke $S \approx H/2$ verändern können.

Bemerkung 10.1

Die Implementierung der dirichletschen Randbedingung am ($x = 0$)-Rand, welche die Schwierigkeit bei der konstanten Flüssigkeitszufuhr beseitigen würde, ist hier nicht möglich, da sowohl das Dichte- als auch das Geschwindigkeitsfeld an diesen Randknoten unbekannte Größen sind. Es sei aber darauf hingewiesen, daß bei der Simulation der Strömung im Spaltauslauf (Paragraph 10.2.2) die dirichletsche Randbedingung Verwendung findet, da dort keine Phasengrenze im Bereich der Flüssigkeitszufuhr vorhanden ist.

Die zeitliche Entwicklung des Dichte- und Geschwindigkeitsfeldes ergibt sich nun aus dem Algorithmus gemäß Abbildung 9.11.

Eine erste Simulation wurde für folgende Modellparameter durchgeführt:

Modell	N_x	N_y	N_z	$\psi(\rho)$	α	β	h	m	δt	τ	\mathcal{G}
Wert	690	92	3	$1 - e^{-\rho}$	1/3	1/18	1	1	1	1,0	-0,2

Die in das Berechnungsgitter implementierten geometrischen Größen R , H , S , X_1 , X_2 und w_{max} sind in folgender Tabelle zusammengefaßt.

Geometrie	R	H	S	X_1	X_2	w_{max}
Wert	2203	32	16	80	650	0,1

Aus den Modellparametern berechnen sich, mittels des in Paragraph 9.5 beschriebenen Algorithmus, folgende makroskopische Stoffgrößen:

Stoffgröße	ρ_l	ρ_g	ρ_l/ρ_g	η_l	p_0	γ_l
Wert	2,6522	0,07657	34,64	0,442	0,0201	0,1378

Setzt man die typische Strömungsgeschwindigkeit v gleich der Maximalgeschwindigkeit der Walzen bzw. der Kanalwände w_{max} so ergibt sich folgender Wert für die Machzahl (siehe Gleichung 9.58): $Ma \approx 0,2$.

Die Machzahl ist, wie bereits in Paragraph 9.5 angedeutet, wesentlich größer als im realen Druckprozess, garantiert aber in hinreichend guter Näherung eine inkompressible Strömung. Das Verhältnis ρ_l/ρ_g sichert den dominanten Einfluß der flüssigen - über die gasförmige Phase.

Abbildung 10.8 zeigt die zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung zwischen dem Anfangszustand bei $t = 0$ und dem Ende der Beschleunigungsphase bei $t = 15000$. Es zeigt sich, daß die Position der freien Oberfläche des Fluids während dieser Beschleunigungsphase instationär ist und sich keinem Gleichgewichtszustand annähert. Vielmehr werden einzelne „Luftblasen“ mit anwachsender Frequenz durch den Walzenspalt transportiert. Auch nach Erreichen der Maximalgeschwindigkeit $w_{max} = 0,1 \cdot h/\delta t$ stellt sich keine stationäre Dichteverteilung ein. Abbildung 10.9 (oben) zeigt, daß sich auch lange nach Beendigung der Beschleunigungsphase einzelne „Luftblasen“ von der freien Oberfläche lösen deren zeitliche Frequenz nun allerdings konstant ist.

Erhöht man in einer weiteren Simulation die Maximalgeschwindigkeit auf $w_{max} = 0,15 \cdot h/\delta t$, so ergibt sich qualitativ das gleiche Bild. Abbildung 10.9 (unten) zeigt jedoch, daß sich die Frequenz der „Luftblasen“ dabei vergrößert, während ihr Volumen abnimmt.

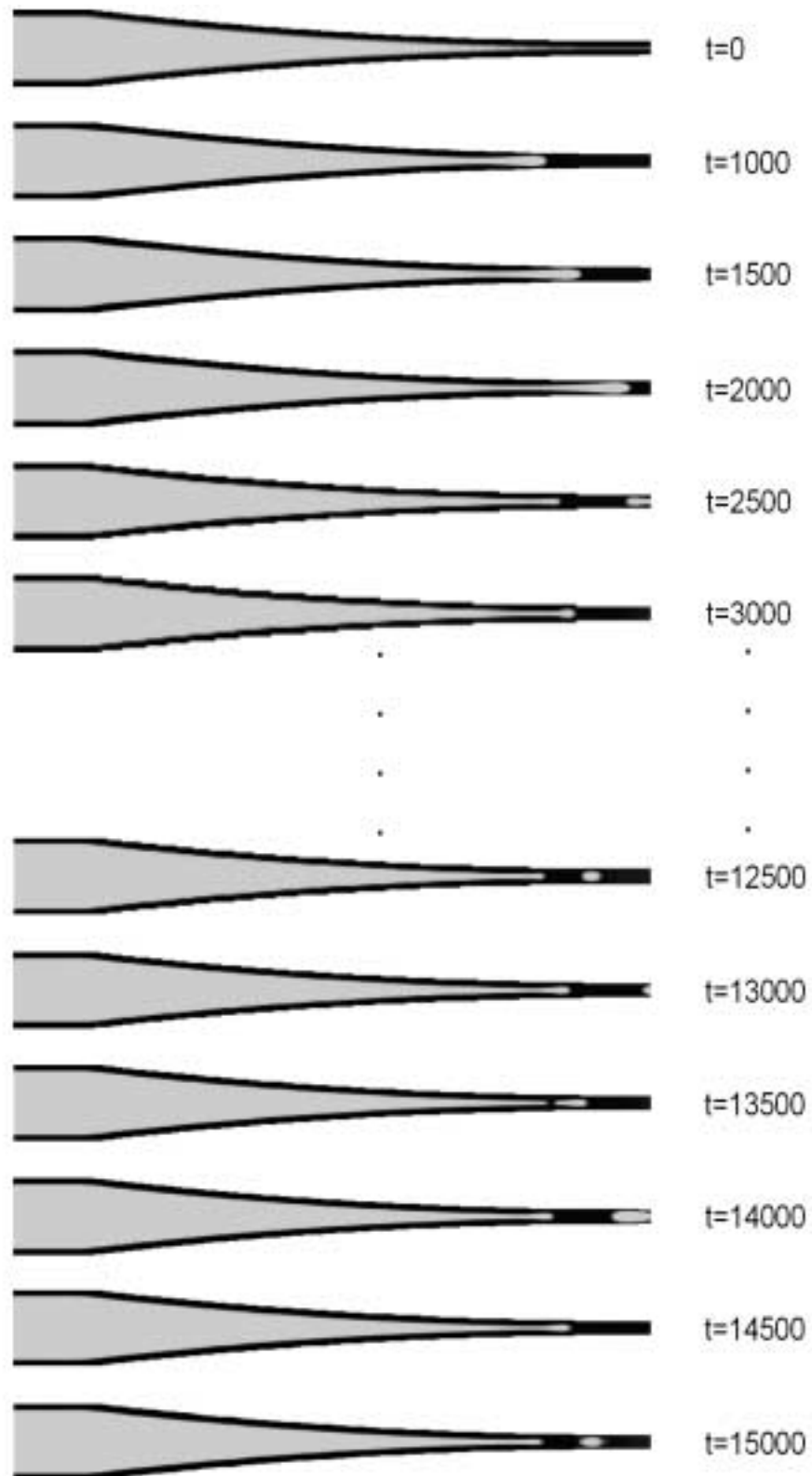


Abbildung 10.8: Beschleunigungsphase im Spalteinlauf

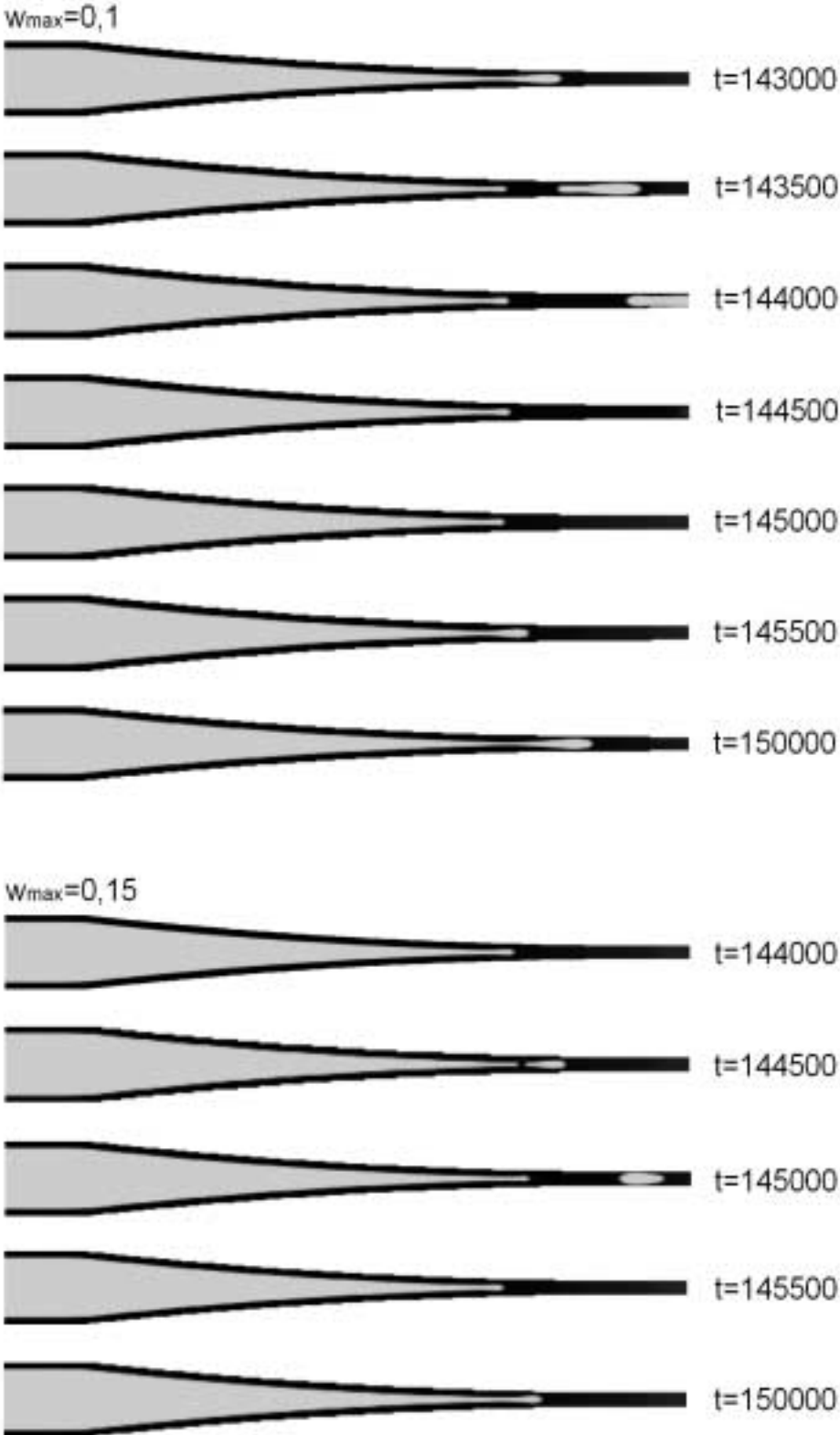


Abbildung 10.9: Spalteinlauf bei verschiedenen Geschwindigkeiten

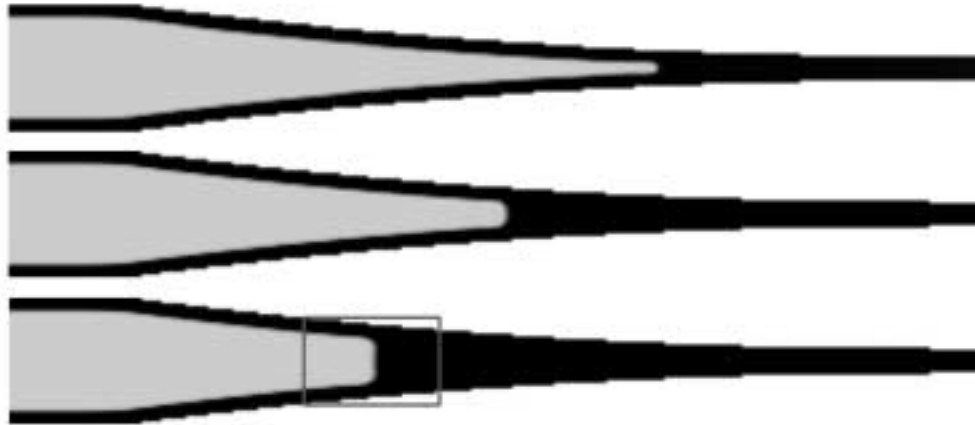


Abbildung 10.10: Vollaufen des Walzenspaltes für $H/S \approx 1,8$

Zusammenfassung:

In diesem Paragraphen sollte lediglich gezeigt werden, daß das vorgestellte Gitter-Boltzmann Verfahren mit der Randbedingung RB die Untersuchung von instationären Zweiphasenströmungen im Walzenspalt erlaubt. So konnte gezeigt werden, daß bei den gegebenen Randbedingungen (von Abbildung 10.8 und Abbildung 10.9) Luft durch den Walzenspalt transportiert wird, und daß sowohl die Frequenz als auch das Volumen dieser Luftblasen geschwindigkeitsabhängig ist.

Auf intensivere Untersuchungen des Strömungsverhaltens wurde hier verzichtet (vorstellbar wären eine variable Oberflächenspannung, Grenzflächenspannung, Viskosität...), da das gegebene Modell die Realität des Druckprozesses gerade im Spalteinlauf nur unzureichend beschreibt. Der Grund hierfür liegt in der harten Berandung des Walzenspaltes, welche im Simulationsmodell den dimensionslosen Parameter H/S auf einen Wert $H/S \approx 2$ festlegt. Während der weich berandete Walzenspalt im realen Druckprozesses unterschiedliche Beistellungen zuläßt, da die Spaltweite H variabel und von der Schichtdicke S abhängig ist, führt eine Verkleinerung des Verhältnisses $H/S \ll 2$ in der Simulation zum unrealistischen „Vollaufen“ des Walzenspaltes (siehe Abbildung 10.10). Zudem ist, wie bereits in Bemerkung 10.1 erläutert, eine exakte Einstellung des Parameters H/S in der Simulation nicht möglich, da der vorhandene Phasenübergang am $(x = 0)$ -Rand des Berechnungsgitters die Implementierung der dirichletschen Randbedingung nicht erlaubt.

Als Beispiel betrachte man Abbildung 10.10, welche die zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung für $H/S \approx 1,8$ zeigt.

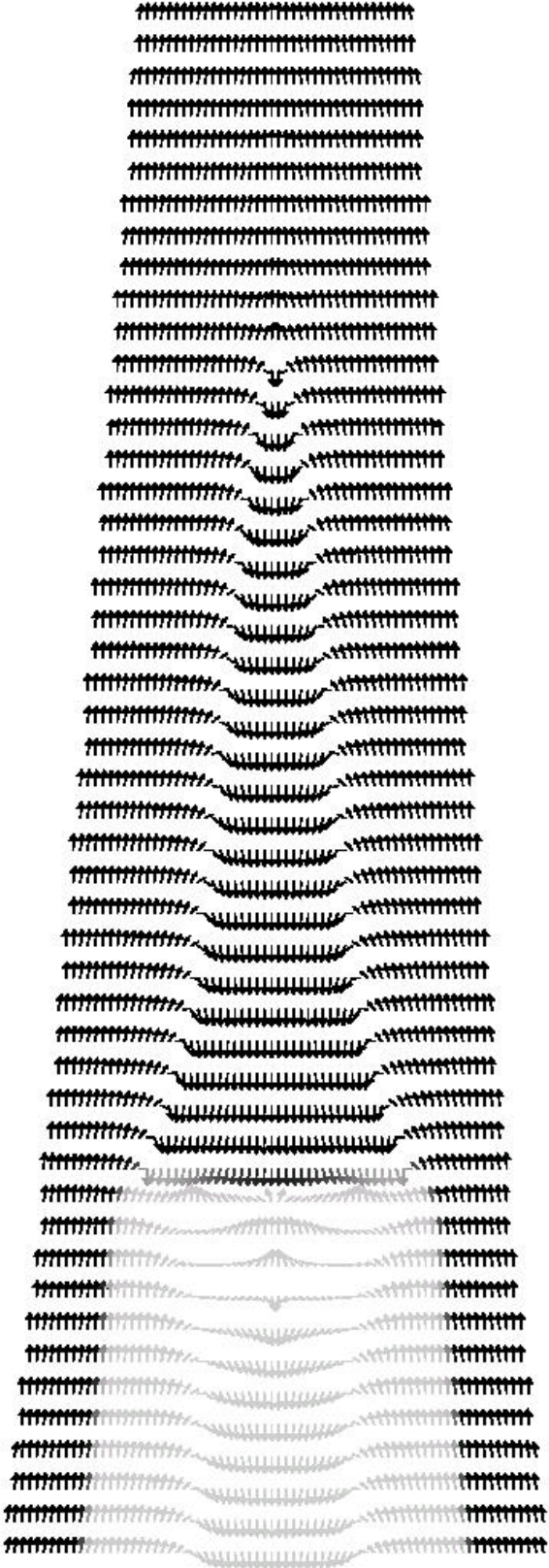


Abbildung 10.11: Geschwindigkeitsfeld an der Phasengrenze.

Ein typisches Strömungsbild im Bereich der Phasengrenze für $H/S < 2$ zeigt die in Abbildung 10.11 dargestellte Vergrößerung des in Abbildung 10.10 markierten Rechtecks. Alle Geschwindigkeitsvektoren in dieser Abbildung sind auf den Betrag eins normiert, um die Strömungsrichtung deutlich sichtbar zu machen. In beiden Phasen des Fluids bilden sich Bereiche aus, in denen die Strömungsrichtung der eigentlichen Druckrichtung entgegengesetzt gerichtet ist. Diese Rückstromwirbel zeigen, daß sich auch bei den hier gegebenen Randbedingungen keine rein laminare Strömung ausbildet.

Jede der durchgeführten Simulationen benötigte auf einem herkömmlichen PC (Arbeitsspeicher: 256 MB, Taktfrequenz: 800 MHz) eine Rechendauer von ca. 50 Stunden. Eine Ausdehnung auf drei räumliche Dimensionen ist daher nur mittels einer sehr großen Rechenkapazität möglich.

10.2.2 Spaltauslauf

In diesem Paragraphen soll die spaltauslaufseitige Strömung der Schichtspaltung im Walzenspalt möglichst praxisnah simuliert werden. Optimal wäre es daher, wenn nicht nur die physikalischen Eigenschaften der Farbe sondern zusätzlich die Geometrie des Druckwerks in das Simulationsmodell implementierbar wären. Dies ist aber auf Grund des großen Speicherbedarfs bei realistischen Werten von R/S bisher nicht möglich. Es sei daher noch einmal darauf hingewiesen, daß die notwendige Verkleinerung der Walzenradien um einen Faktor $k < 1$, $R_{sim} = k \cdot R_{real}$, auch eine Verkleinerung der Druckgeschwindigkeit $w_{sim} < w_{real}$ bedingt. Besonders deutlich wird dies am Beispiel der Zentripetalbeschleunigung $b = w^2/R$ die sich für $w_{sim} = w_{real}$ um den Faktor $1/k$ vergrößern würde.

Die Geometrie zur Simulation der Strömung im Spaltauslauf wird durch Abbildung 10.7 beschrieben. Die dort eingezeichneten Geschwindigkeitsvektoren \vec{w} an den Festkörperoberflächen müssen jedoch durch $-\vec{w}$ ersetzt werden. Die **Randbedingungen** sind in den drei Abschnitten des Berechnungsgitters folgendermaßen gesetzt:

1. Um Speicherplatz einzusparen wird das gesamte Rechengebiet längs der Symmetrieebene halbiert. An der ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene werden symmetrische Randbedingungen gesetzt.
2. $\{(x, y, z) | 0 \leq x < X_1\}$
Hier wird, mittels der Randbedingung RB, an der ($y = 0$)-Ebene eine glatte Platte mit der Eigengeschwindigkeit w implementiert. An der

$(x = 0)$ -Ebene werden alle Werte der Dichte ρ und der Verteilungsfunktionen f_{σ_i} der $(x = h)$ -Ebene übernommen. Diese Randbedingung garantiert einen freien Auslauf des Fluids aus dem Berechnungsgitter.

3. $\{(x, y, z) | X_1 \leq x \leq X_2\}$

Hier wird, mittels der Randbedingung RB, eine rotierende Walze mit der Tangentialgeschwindigkeit w implementiert. Alle Gitterknoten innerhalb der Walzen werden aus dem Berechnungsgitter entfernt, um Speicherplatz einzusparen.

4. $\{(x, y, z) | X_2 < x \leq Nx - 1\}$

Es wird die Randbedingung RB und die Eigengeschwindigkeit w für die Gitterknoten an der Kanalwand benutzt. Alle Gitterknoten, für die $\|y - (Ny - 1)/2\| > H/2$ gilt, werden aus dem Berechnungsgitter entfernt, um Speicherplatz einzusparen. An den verbleibenden Randknoten der $(x = Nx - 1)$ -Ebene werden dirichletsche Randbedingungen mit $\rho(Nx - 1, y, z, t) = \rho_l$ und $\vec{v}(Nx - 1, y, z, t) = (-w, 0, 0)$ gesetzt. Damit ist eine konstante Flüssigkeitszufuhr garantiert.

Die Implementierung einer Grenzflächenspannung γ_{sl} an den Gitterknoten mit der Randbedingung RB erfolgt während der Berechnung der zwischenmolekularen Kraft nach Gleichung 9.1:

Ist an einem inneren Gitterknoten \vec{x} zu einem Zeitpunkt t die Dichte $\rho(\vec{x}, t)$ größer als die Dichte an der Phasengrenze $\rho(\vec{x}, t) > \rho_s$, d.h. dieser Knoten befindet sich innerhalb der flüssigen Phase, und besitzt dieser Gitterknoten einen Nachbarknoten $\vec{y} \in RB$, so wird die Dichte dieses Nachbarknotens für die Berechnung der zwischenmolekularen Kraft (und nur hierfür) um den Faktor k erweitert $\rho(\vec{y}, t) \rightarrow k \cdot \rho(\vec{y}, t)$. Diese Vorgehensweise ermöglicht die Implementierung von Adhäsionskräften (gemäß Paragraph 9.6.1) ohne auf eine dynamische Dichteberechnung an den Gitterknoten RB zu verzichten.

Anfangsbedingungen: Zu Beginn der Simulation sei der Spalteinlauf nach Abbildung 10.7 im Ruhezustand ($w = 0$) und ganz mit der gasförmigen Phase des Fluids ausgefüllt. Lediglich die dirichletschen Randknoten der $(x = Nx - 1)$ -Ebene werden, wie während der gesamten Simulationszeit, mit der flüssigen Phase vorbelegt:

$$\rho(\vec{x}, t = 0) = \begin{cases} \rho_g & \forall \vec{x} \in I \cup RB \cup RS \\ \rho_l & \forall \vec{x} \in RD \end{cases}$$

$$\vec{v}(\vec{x}, t = 0) = 0 \quad \forall \vec{x} \in I \cup RB \cup RD \cup RS$$

Mit diesen Rand- und Anfangsbedingungen kann das reale Strömungsverhalten im Spaltauslauf wesentlich besser beschrieben werden als dies beim Spalteinlauf in Paragraph 10.2.1 der Fall war:

Zum einen garantiert dieses Modell eine konstante Flüssigkeitszufuhr mittels der dirichletschen Randbedingung, wodurch auch eine Beschleunigung von $w = 0$ auf die Maximalgeschwindigkeit $w = w_{max}$ in wenigen Zeititerationen erfolgen kann.

Zum anderen muß kein Fehler bei der Anfangsbelegung der Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung hingenommen werden, da an allen inneren Knoten des Gitters die gasförmige Phase des Fluids implementiert wird, und somit kein Phasenübergang im inneren Berechnungsgitter vorhanden ist.

Auch die Auswirkungen des hart berandeten Walzenspaltes, welcher nicht der Realität des Druckprozesses entspricht, sind für die Simulation der Strömung im Spaltauslauf weniger folgenschwer als im Spalteinlauf:

Die weiche Berandung des Walzenspaltes beeinflußt im realen Druckprozess spalteinlaufseitig sowohl die Spaltgeometrie als auch den Betrag der maximalen Flüssigkeitsmenge, welche durch ihn transportiert werden kann. Im Spaltauslauf ist diese Flüssigkeitsmenge dann fest vorgegeben, was in der Simulation mittels der dirichletschen Randbedingung ausgenutzt wird, so daß die weiche Berandung hier lediglich die Spaltgeometrie verändert.

Trotz dieser kleinen geometrischen Abweichung zwischen Realität und Simulation kann man davon ausgehen, daß die folgenden Simulationen das reale Strömungsverhalten der Schichtspaltung im Spaltauslauf, zumindest qualitativ, gut approximieren.

Eine erste Simulation wurde für folgende Modellparameter durchgeführt:

Modell	N_x	N_y	$\psi(\rho)$	α	β	h	m	δt	τ	\mathcal{G}	k
Wert	1040	210	$1 - e^{-\rho}$	1/3	1/18	1	1	1	1,0	-0,2	1,8

Die in das Berechnungsgitter implementierten geometrischen Größen R , H , X_1 , X_2 und w_{max} sind in folgender Tabelle zusammengefaßt.

Geometrie	R	H	X_1	X_2	w_{max}
Wert	5046	32	60	1000	0,15

Aus den Modellparametern berechnen sich, mittels des in Paragraph 9.5 beschriebenen Algorithmus, folgende makroskopische Stoffgrößen:

Stoffgröße	ρ_l	ρ_g	ρ_l/ρ_g	η_l	p_0	γ_l
Wert	2,6522	0,07657	34,64	0,442	0,0201	0,1378

Diese Werte sollen nun (lediglich zum besseren Verständnis) skaliert werden, indem den Diskretisierungsparametern h , m und δt feste Werte zugeordnet werden. Setzt man z.B.

$$m = 6 \cdot 10^{-13} \text{ kg}, \quad h = 10^{-6} \text{ m}, \quad \delta t = 2 \cdot 10^{-6} \text{ s}, \quad (10.7)$$

so besitzen die beiden gleich großen Walzen einen Radius von $R = 5046 \cdot h = 5,046 \text{ mm}$ und führen dem Walzenspalt beide ein Flüssigkeitsvolumen von $S = 16 \cdot h = 16 \text{ ml/m}^2$ zu. Da der Walzenradius nicht auf realistische Werte des Druckprozesses einstellbar ist (Stichwort: Speicherbedarf), und somit auch die Druckgeschwindigkeit kleiner als in der Realität zu wählen ist (Stichwort: Trenngeschwindigkeit, Zentripetalkraft $K = mw^2/R$), soll hier eine realitätsnahe Winkelgeschwindigkeit erreicht werden.

Mit einer Tangentialgeschwindigkeit der Walzen von $w_{max} = 0,15 h/\delta t = 0,075 \text{ m/s}$ erhält man eine Winkelgeschwindigkeit von $u_{max} = w_{max}/R \approx 15/s$. Diese Winkelgeschwindigkeit ergibt für einen realitätsnahen Walzenradius $R = 10 \text{ cm}$ eine Druckgeschwindigkeit von $w_{max} = 90 \text{ m/min}$.

Für die Viskosität und die Oberflächenspannung der Flüssigkeit ergeben sich ebenfalls Werte die sich im Bereich typischer Flexodruckfarben befinden:

$$\begin{aligned} \eta_l &= 0,442 \frac{m}{h \cdot \delta t} = 3 \cdot 0,0442 \frac{kg}{m \cdot s} = 0,1326 \text{ Pa} \cdot s \\ \gamma_l &= 0,1378 \frac{m}{\delta t^2} = \frac{3}{2} \cdot 0,01378 \frac{kg}{s^2} = 0,02067 \frac{N}{m} \end{aligned} \quad (10.8)$$

Setzt man die typische Strömungsgeschwindigkeit v gleich der Maximalgeschwindigkeit der Walzen bzw. der Kanalwände w_{max} , so ergibt sich nach Gleichung 9.58 der folgende maximale Simulationswert für die Machzahl:

$$\begin{aligned} Ma_{max} &= \frac{w_{max} \cdot h/\delta t}{h/\delta t \cdot \sqrt{\frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta) + 10\mathcal{G}\psi(\rho_l) \frac{d\psi}{d\rho}(\rho_l)}} \\ &= \frac{0,15}{\sqrt{\frac{2}{3}(1 - \alpha - 3\beta) + 10\mathcal{G}\psi(\rho_l) \frac{d\psi}{d\rho}(\rho_l)}} \approx 0,33 \end{aligned}$$

Der relativ große Wert der maximalen Machzahl besagt, daß die Strömung an den inneren Nachbarknoten der Randknoten RB in der Simulation schwach kompressibel ist. Ein unmittelbarer Einfluß dieser lokalen, schwachen Kompressibilität auf das makroskopische Strömungsverhalten im Walzenspalt ist aber nicht zu erwarten.

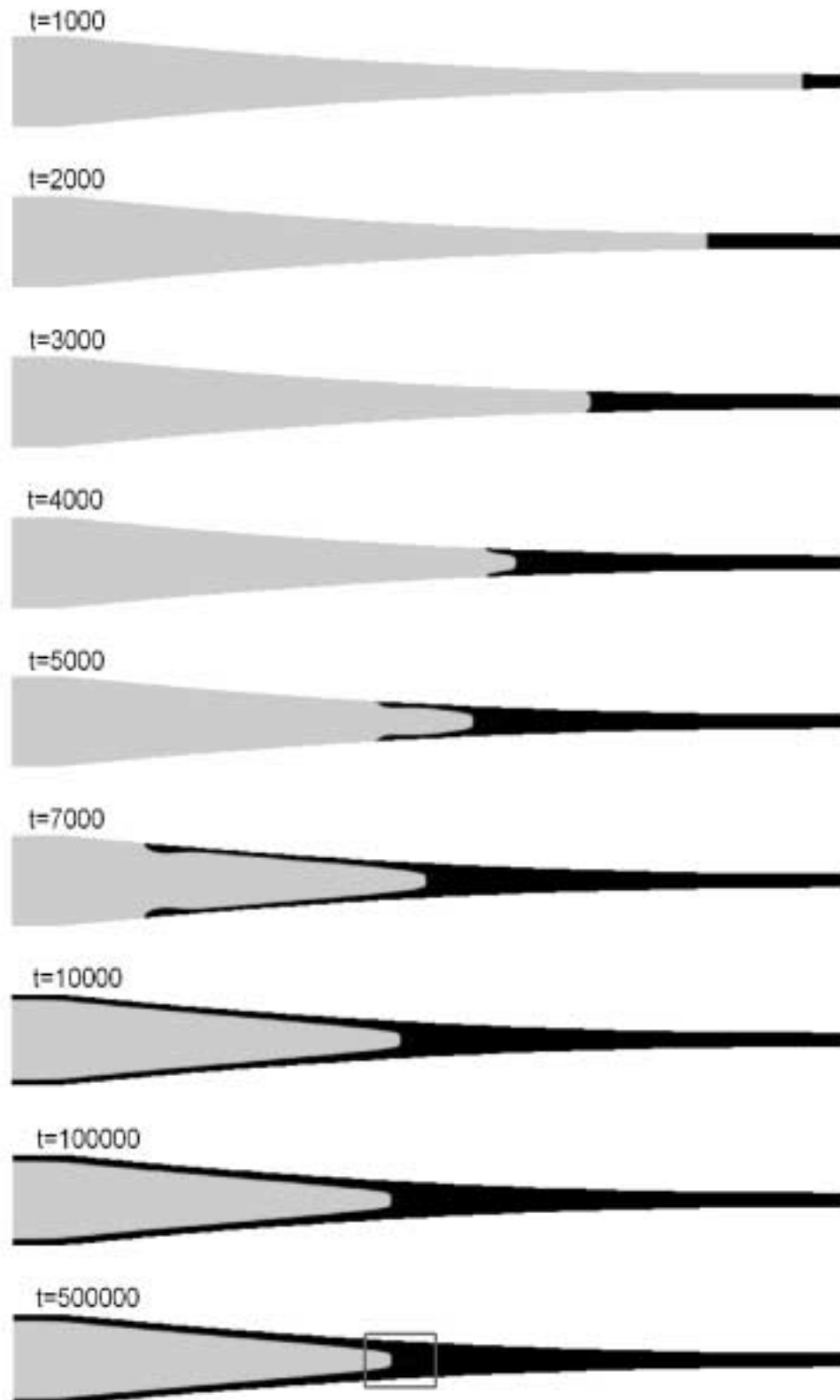


Abbildung 10.12: Dichteverteilung im Spaltauslauf

Abbildung 10.12 zeigt die zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung während und nach der Beschleunigungsphase, die innerhalb von 2000 Zeitschritten, zwischen $t = 0$ und $t = 2000 \cdot \delta t$ stattfindet. Skaliert man die diskreten Zeitschritte mittels Gleichung 10.7, so erfolgt die Beschleunigung in $4 \cdot 10^{-3} s$. Der gesamte in Abbildung 10.12 gezeigte Vorgang dauert demnach $T = 5 \cdot 10^5 \cdot \delta t = 1 s$. In diesem Zeitraum rotieren die Zylinder ca. $k = T \cdot \omega_{max} / 2\pi R \approx 2,4$ mal um ihre Rotationsachse.

Man erkennt, wie über die Dirichletsche Randbedingung an der ($x = Nx - 1$)-Ebene, die flüssige Phase in den Walzenspalt transportiert wird. Der sich ausbildende Randwinkel zwischen der Phasengrenze des Fluids und den Festkörperoberflächen ist dabei sowohl von der Oberflächenspannung des Fluids als auch von der implementierten Grenzflächenspannung, und damit vom dimensionslosen Faktor k , abhängig.

Nach Ausbildung eines bereits in Paragraph 5.2 vermuteten Flüssigkeitsreservoirs, nähert sich die Dichteverteilung einem stationären Zustand, der in obiger Simulation nach ca. $1,5 \cdot 10^5$ Zeitschritten erreicht ist.

Abbildung 10.13 (dies ist eine Vergrößerung des in Abbildung 10.12 am Spalt-punkt eingezeichneten Rechtecks) zeigt die Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der Phasengrenze nach Erreichen der stationären Dichteverteilung. Es zeigt sich, daß die Flüssigkeitsströmung kurz vor dem Spalt-punkt P_s nicht rein laminar ist sondern sich kleine Rückstromgebiete ausbilden. Diese beeinflussen auch das charakteristische Strömungsbild oberhalb des Spalt-punktes. Es zeigt sich, daß dort zwei weitere Staupunkte P_1, P_2 mit $\vec{v}(P_1) = \vec{v}(P_2) = \vec{0}$ existieren.

Dieses Strömungsverhalten steht nicht im Einklang mit der von Van der Bergh [5] beobachteten und von Brötz [4] beschriebenen Rückströmung, welche auf der Existenz zweier Staupunkte aufbaut und in Abbildung 10.14 schematisch dargestellt ist. Zudem unterscheiden sich die beiden Strömungsformen aus den Abbildungen 10.13 und 10.14 durch entgegengesetzt gerichtete Wirbel.

Eine **mögliche** Ursache hierfür liegt in der Verwendung der symmetrischen Randbedingung an der ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene, welche keinen Massetransport über diese Symmetrieebene erlaubt, und somit jede Wirbelausbildung, deren Geschwindigkeitsvektoren eine zur ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene orthogonale Komponente besitzen, unterdrückt. Beim Übergang von einer laminaren - in eine turbulente Strömung ist dieses, durch die symmetrische Randbedingung vorausgesetzte Strömungsverhalten unphysikalisch. In den nachfolgenden Simulationen wird daher auf die symmetrische Randbedingung an der ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene verzichtet (\rightarrow verdoppelter Speicherbedarf).

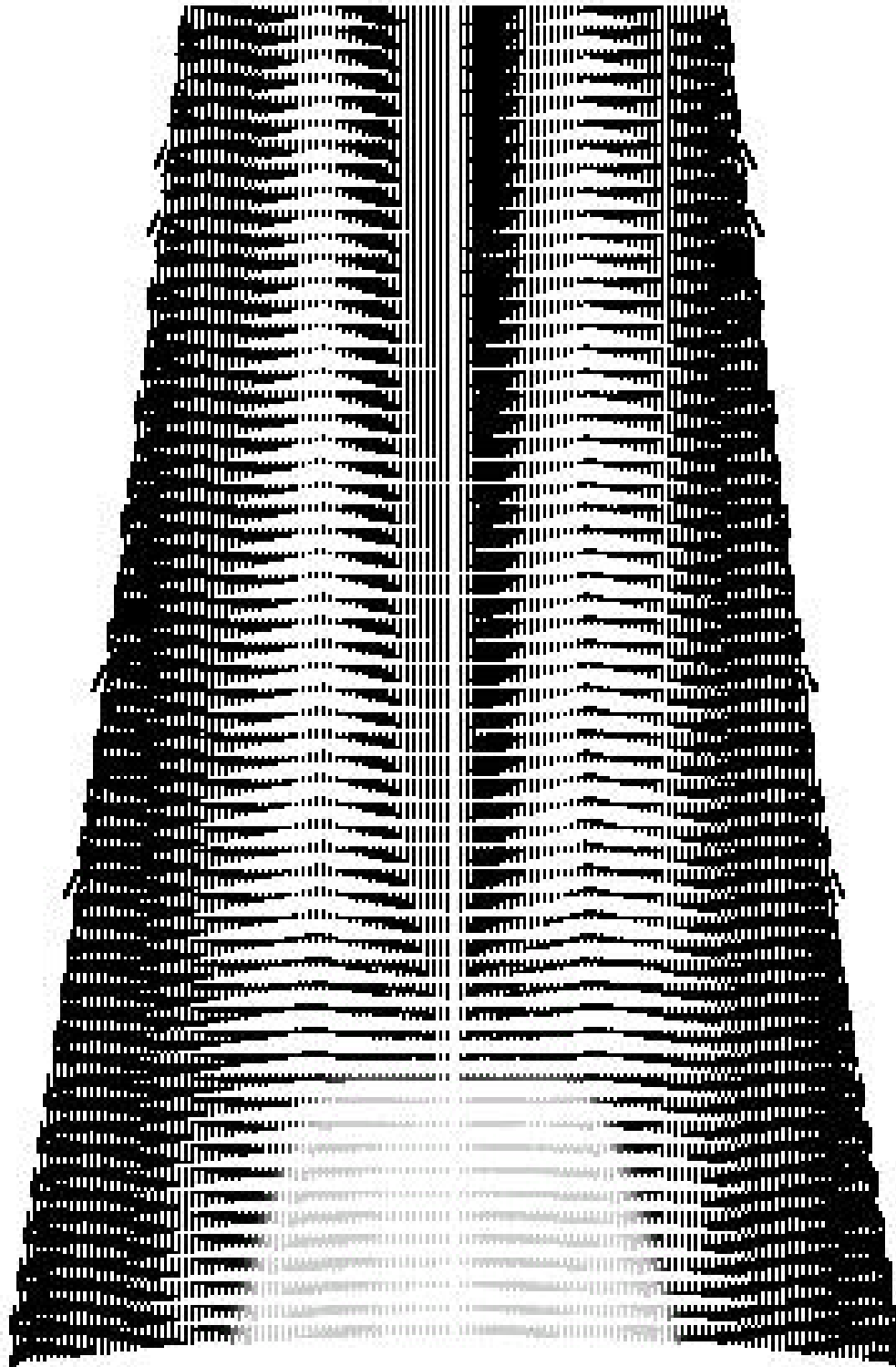


Abbildung 10.13: Geschwindigkeitsverteilung an der Phasengrenze.

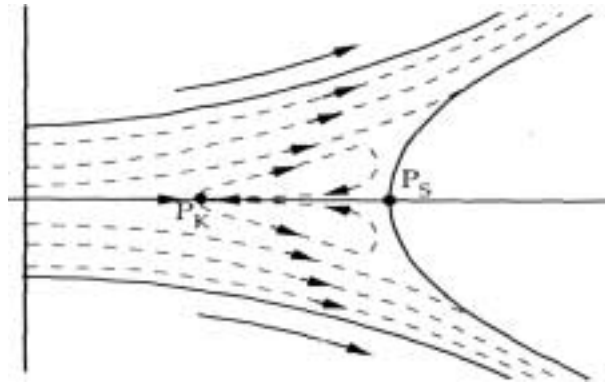


Abbildung 10.14: Rückstromwirbel nach Van der Bergh bzw. Brötz

Weitere Simulationen zeigten jedoch, daß die sich ausbildenden Rückstromwirbel, trotz Verzicht auf die symmetrische Randbedingung, die falsche Orientierung besitzen und sich anstatt von den impulsgebenden Walzen weg (siehe Abbildung 10.14) - zu ihnen hin drehen (siehe Abbildung 10.13).

Dieses unphysikalische Strömungsverhalten wird in der Simulation durch die Berechnung der zwischenmolekularen Kraft \vec{F} in Verbindung mit der Randbedingung RB, den implementierten Anfangsbedingungen und der Diskretisierung der Walzenoberflächen durch einen Polygonzug verursacht. Abbildung 10.15 zeigt eine zweidimensionale schematische Darstellung dieses Sachverhaltes.

Die Randknoten RB auf der diskretisierten Walzenoberfläche unterteilen sich in vier unterschiedliche Typen, die sich jeweils durch Anzahl und Lage ihrer inneren Nachbarknoten auszeichnen.

Die Dichte an diesen Randknoten RB ergibt sich mittels der in Paragraph 9.6.2 beschriebenen Randbedingung aus denjenigen Verteilungsfunktionen, welche zu einem Nachbarknoten RB weisen (diese in Abbildung 10.15 rot markierten Verteilungsfunktionen können nicht abgegeben werden) und denjenigen Verteilungsfunktionen, welche von einem inneren Knoten zum jeweiligen Randknoten verschoben werden (diese Verteilungsfunktionen sind in Abbildung 10.15 gelb markiert).

Für die Ermittlung der Verteilungsfunktionen zur Zeit $t + \delta t$ mittels der so berechneten Dichte ρ und der Tangentialgeschwindigkeit \vec{v} (Gleichung 8.90) sichert diese Art der Dichteberechnung, daß keine Masse über die Festkörperoberfläche ausgetauscht werden kann. Eine Ausbildung von Quellen bzw. Senken an den Randknoten wird somit verhindert.

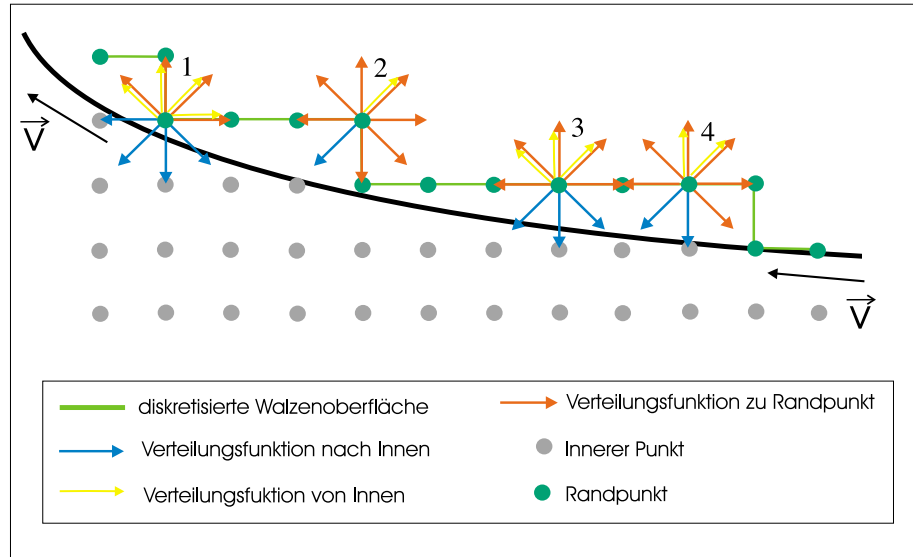


Abbildung 10.15: Diskretisierungsfehler durch die Randbedingung RB.

Für die Berechnung der zwischenmolekularen Kraft \vec{F} an den benachbarten inneren Knoten (Gleichung 9.1) darf diese Dichte jedoch nur dann benutzt werden, wenn sie sich nicht durch große Dichtegradienten gegenüber den inneren Nachbarn auszeichnet. Betrachtet man beispielsweise Strömungsprobleme bei denen sich die Dichte an den Festkörperoberflächen nicht entscheidend mit der Zeit verändert, so regulieren sich die Dichteunterschiede zwischen Randknoten und benachbartem inneren Knoten (hervorgerufen durch die Randbedingung RB) über die Verschiebung der Verteilungsfunktionen mit der Zeit von selbst. Dies gilt z.B. für einphasige Strömungen oder die Simulation des Spalteinlaufes in Paragraph 10.2.1, da die Walzenkörper dort bereits am Simulationsbeginn mit der flüssigen Phase bedeckt sind. Bei den hier gewählten Anfangsbedingungen stellt sich die Situation jedoch anders dar:

Anfangs sind alle Randknoten RB mit der Dichte der gasförmigen Phase ρ_g vorbelegt. Über die dirichletsche Randbedingung an der $(x = Nx - 1)$ -Ebene und die Eigengeschwindigkeit \vec{v} der Walzen wird im Laufe der Zeititeration die flüssige Phase zu den Randknoten transportiert (siehe Abbildung 10.12). Die mittels der Randbedingung RB an den Randknoten errechnete Dichte gleicht sich dabei in unterschiedlichem Maß an die veränderten Verhältnisse an:

Während diejenigen Randknoten, welche in Abbildung 10.15 mit Typ 1 bzw. Typ 3 bezeichnet sind, in drei Dimensionen jeweils 8 bzw. 5 Verteilungs-

funktionen mit ihren benachbarten inneren Knoten austauschen, und die berechneten Dichten sich somit relativ schnell den veränderten Verhältnissen anpassen, stellen sich bei den Randknoten vom Typ 4 und insbesondere vom Typ 2 große Dichtegradienten zu ihren inneren Nachbarn ein. Dies wird nachfolgend für die Randknoten vom Typ 2 erläutert:

Ist der einzige innere Nachbarknoten eines Randknotens vom Typ 2 mit der flüssigen Phase $\rho(\vec{x}, t) = \rho_l$ belegt, so sind seine Gleichgewichtsverteilungsfunktionen $f_{\sigma i}^{(0)}$ (nach Gleichung 8.90) und damit auch seine Verteilungsfunktionen $f_{\sigma i}$ gemäß der vorhandenen Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} gerichtet. Dies hat zur Folge, daß die Verteilungsfunktion in Richtung des Randknotens vom Typ 2 (diese Richtung schließt mit der Strömungsrichtung einen stumpfen Winkel ein), nur einen sehr kleinen Anteil der Teilchendichte $n(\vec{x}, t)$ an diesen übermittelt. Im Gegensatz dazu gibt ein Randknoten vom Typ 2 einen relativ großen Anteil (spitzer Winkel zwischen Richtung zum inneren Nachbarn und Strömungsrichtung) seiner Teilchendichte an seinen einzigen inneren Nachbarn ab. Durch diesen Effekt können sich die Dichten an den Randknoten vom Typ 2 nie an die Dichteentwicklung ihrer inneren Nachbarn anpassen und die errechneten Dichten bleiben während der gesamten Simulationszeit im Bereich von ρ_g .

Folglich ist die resultierende zwischenmolekulare Kraft an einem inneren Knoten, welcher einen Randnachbarn des Typs 2 besitzt, immer von diesem weg gerichtet. Dieses Phänomen erklärt die falsche Orientierung der Rückstromwirbel aus Abbildung 10.13. Diese werden durch die oben beschriebene unphysikalische, vom Randknoten des Typs 2 weg weisende, Impulszufuhr angetrieben.

Zur Vermeidung dieses unphysikalischen Kraftterms wird daher in den nachfolgenden Simulationen bei der Ermittlung der zwischenmolekularen Kraft nicht auf die **berechnete** Dichte der Randknoten RB zurückgegriffen:

Besitzt ein innerer Knoten der sich bereits in flüssiger Phase befindet einen Nachbarn RB, so wird zur Berechnung der zwischenmolekularen Kraft (und nur hierfür) für diesen Randknoten stattdessen eine **gemittelte** Dichte geeigneter innerer Knoten verwendet.

Betrachtet man beispielsweise den einzigen inneren Nachbarn des Randknotens vom Typ 2 aus Abbildung 10.15, so benötigt man zur Berechnung der Kraft \vec{F} mittels Gleichung 9.1 die Dichte an diesem Randknoten (selbstverständlich wird auch die Dichte an allen anderen Nachbarknoten benötigt). Diese sollte dann die realen Dichteverhältnisse an der Walzenoberfläche widerspiegeln. Dies wird, wie oben beschrieben, von der errechneten Dichte i.a. nicht erfüllt. Da der Schnittpunkt der realen Walzenoberfläche und der

Verbindungsline vom Randpunkt 2 zu seinem inneren Nachbarn aber in unmittelbarer Nähe des inneren Punktes selbst liegt, wird die Dichte des Randnachbarn gleich der Dichte des inneren Knotens gesetzt. Mit den anderen Randnachbarn innerer Knoten wird in entsprechender Weise verfahren.

In den nachfolgenden Simulationen wird diese Vorgehensweise bei der Berechnung der zwischenmolekularen Kraft verwendet. Auf die symmetrische Randbedingung an der ($y = (Ny - 1)/2$)-Ebene wird verzichtet, so daß der erhöhte Speicherbedarf eine Verkleinerung der Walzenradien bedingt.

Ausgangspunkt für weitere Betrachtungen sind die Modell- bzw. Geometrieparameter und die daraus resultierenden makroskopischen Stoffgrößen und dimensionslosen Kennzahlen welche in Tabelle 10.1 zusammengefasst sind. Dabei sind die charakteristische Länge L und die charakteristische Geschwindigkeit v zur Berechnung der dimensionslosen Kennzahlen Re , We , Ma und Ca folgendermaßen definiert: $L := H$ $v := w_{max}$

Eine Umrechnung in physikalische Einheiten kann z.B. mittels Gleichung 10.7 erfolgen, so daß für diese Skalierung Viskosität und Oberflächenspannung der Flüssigkeit weiterhin durch Gleichung 10.8 gegeben sind.

Tabelle 10.1: Modell- und Geometrieparameter; resultierende makroskopische Stoffgrößen und dimensionslose Kennzahlen

Modell	Wert	Stoffgröße - Kennzahl	Wert	Geometrie	Wert
Nx	795	ρ_l	2,6522	R	3597
Ny	181	ρ_g	0,07657	H	24
$\psi(\rho)$	$1 - e^{-\rho}$	ρ_l/ρ_g	34,64	X_1	25
α	1/3	η_l	0,442	X_2	770
β	1/18	p_0	0,0201	w_{max}	0,125
h	1	γ_l	0,1378		
m	1	Ma	0,28		
δt	1	We	7,2		
τ	1,0	Re	18		
\mathcal{G}	-0,2	Ca	0,4		
k	1,8				

Einfluß der Druckgeschwindigkeit auf die Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung:

Abbildung 10.16 zeigt die Dichteverteilung zu unterschiedlichen diskreten Zeitpunkten während der Einlaufphase des Fluids für die drei Geschwindigkeiten $w_{max} = 0,1 \cdot h/\delta t$, $w_{max} = 0,125 \cdot h/\delta t$ und $w_{max} = 0,15 \cdot h/\delta t$. Die anderen Modell- und Geometrieparameter bleiben in den drei Simulationen unverändert, so daß sich für $w_{max} = 0,1$ und $w_{max} = 0,15$ die dimensionslosen Kennzahlen im Vergleich zu Tabelle 10.1 folgendermaßen ändern:

$$w_{max} = 0,1 \Rightarrow \begin{cases} Ma = 0,22 \\ We = 4,6 \\ Re = 14 \\ Ca = 0,33 \end{cases} \quad w_{max} = 0,15 \Rightarrow \begin{cases} Ma = 0,34 \\ We = 10,4 \\ Re = 21,6 \\ Ca = 0,48 \end{cases} \quad (10.9)$$

Die Beschleunigung beträgt in allen Simulationen: $b = 10^{-4}h/\delta t^2$. Dies bedeutet, daß zum Erreichen einer Maximalgeschwindigkeit vom Betrag $w_{max} = n \cdot h/\delta t$ die Beschleunigungsphase $n \cdot 10^4$ Zeitschritte δt benötigt.

Selbstverständlich wird, wie aus Abbildung 10.16 ersichtlich ist, die flüssige Phase umso schneller in den Walzenspalt transportiert je größer die Wandgeschwindigkeit ist.

Des weiteren zeigt Abbildung 10.16 eine geschwindigkeitsabhängige Verlagerung des Spaltpunktes:

Je größer die Wandgeschwindigkeit w_{max} ist, desto größer wird auch das Volumen des sich ausbildenden Flüssigkeitsreservoirs (dies ändert sich auch nicht nach Erreichen eines stationären Zustandes).

Die physikalische Begründung für diesen Sachverhalt hat ihren Ursprung im Anwachsen der Weberzahl $We = \rho_l H w_{max}^2 / \gamma_l$ bei Vergrößerung der Wandgeschwindigkeit w_{max} . Dadurch steigt der Einfluß der Trägheitskraft, welche hier in Richtung einer Vergrößerung des Flüssigkeitsreservoirs wirkt, gegenüber dem Einfluß der Oberflächenspannung, welche einer Vergrößerung des Flüssigkeitsreservoirs entgegen wirkt.

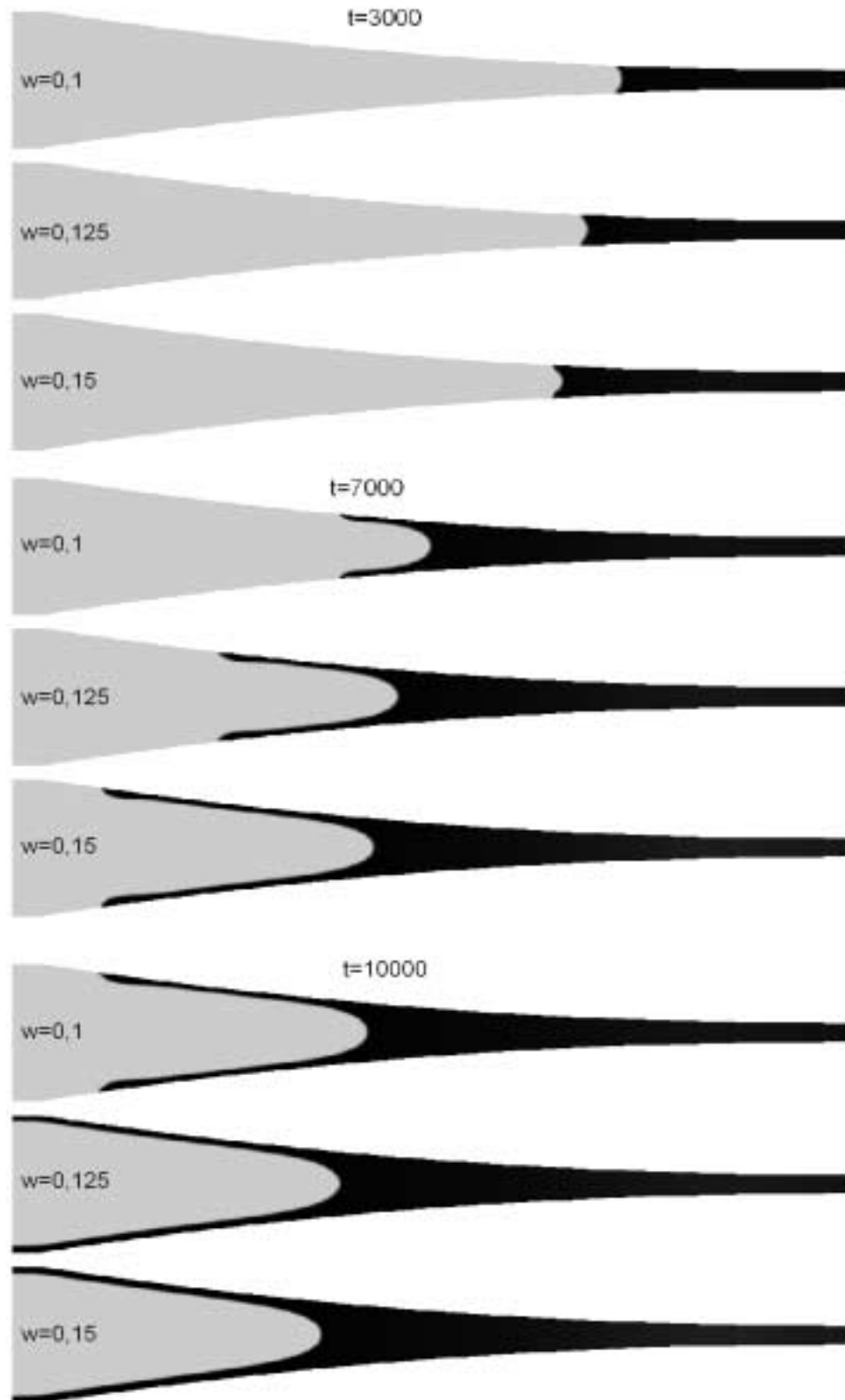


Abbildung 10.16: Dichteverteilung im Spaltauslauf bei unterschiedlichen Maximalgeschwindigkeiten.



Abbildung 10.17: stationärer Zustand der Dichteverteilung



Abbildung 10.18: Geschwindigkeitsverteilung am $(x = 0)$ -Rand des Berechnungsgitters

Nach der Einlaufphase nähern sich die Dichteverteilungen einem stationären Zustand, welcher für $w = 0,125$ in Abbildung 10.17 dargestellt ist.

Abbildung 10.18 zeigt die Geschwindigkeitsverteilung am $(x = 0)$ -Rand des Berechnungsgitters (Vergrößerung des Rechtecks aus Abbildung 10.17). Das Geschwindigkeitsfeld der flüssigen Phase besitzt am $(x = 0)$ -Rand des Gitters einen deutlich sichtbaren Gradienten $\nabla \vec{v} \neq \vec{0}$. Dieses Phänomen erklärt sich durch das Strömungsverhalten des Fluids unterhalb des Spaltpunktes (siehe Abbildung 10.19):

Nachdem das Fluid den Spaltpunkt passiert hat, besitzt das Geschwindigkeitsfeld innerhalb der beiden Flüssigkeitsschichten einen senkrecht zur Walzenoberfläche gerichteten, Gradienten. Dieser Geschwindigkeitsgradient vergrößert sich bei anwachsender Wandgeschwindigkeit ($w_1 > w_2 \Rightarrow \nabla v_1 > \nabla v_2$), da am Spaltpunkt (nach Erreichen eines stationären Zustandes des Dichtefeldes) die x-Komponente des Geschwindigkeitsfeldes verschwinden muß, während sie an den Walzenoberflächen proportional zur Wandgeschwindigkeit ist.

Der Geschwindigkeitsgradient verkleinert sich durch die innere Reibung der Flüssigkeit (gegeben durch η_l) je weiter sich die Strömung vom Spaltpunkt entfernt. Während dieser Phase verkleinert sich selbstverständlich auch die Schichtdicke der Flüssigkeit.

Dieses Phänomen erklärt den Geschwindigkeitsgradienten in Abbildung 10.18. Dieser ergibt sich durch die räumliche Begrenzung des Berechnungsgitters:

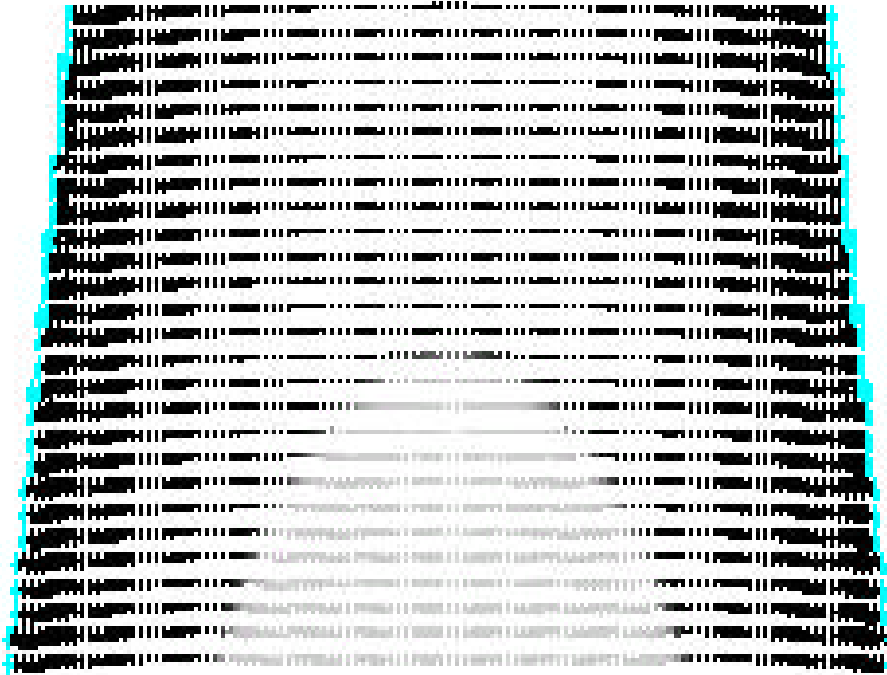


Abbildung 10.19: Geschwindigkeitsverteilung am Spaltspunkt

Die Phase der Verkleinerung des Geschwindigkeitsgradienten ist am ($x = 0$)-Rand des Gitters noch nicht abgeschlossen, so daß die endgültige Schichtdicke noch nicht erreicht ist.

Will man also in späteren Simulationen die Weberzahl deutlich erhöhen und damit das Flüssigkeitsreservoir vergrößern, so muß demnach auch das Berechnungsgitter um einige Knoten erweitert werden.

Da in Abbildung 10.19 das Richtungsfeld der Strömung nicht gut erkennbar ist, sind in Abbildung 10.20 (diese ist eine Vergrößerung des in Abbildung 10.17 am Spaltspunkt eingezeichneten Rechtecks) alle Geschwindigkeitsvektoren auf die Länge 1 normiert. Die in Abbildung 10.19 bzw. 10.20 blau gefärbten Richtungsvektoren markieren dabei die Lage der diskretisierten Walzenoberfläche.

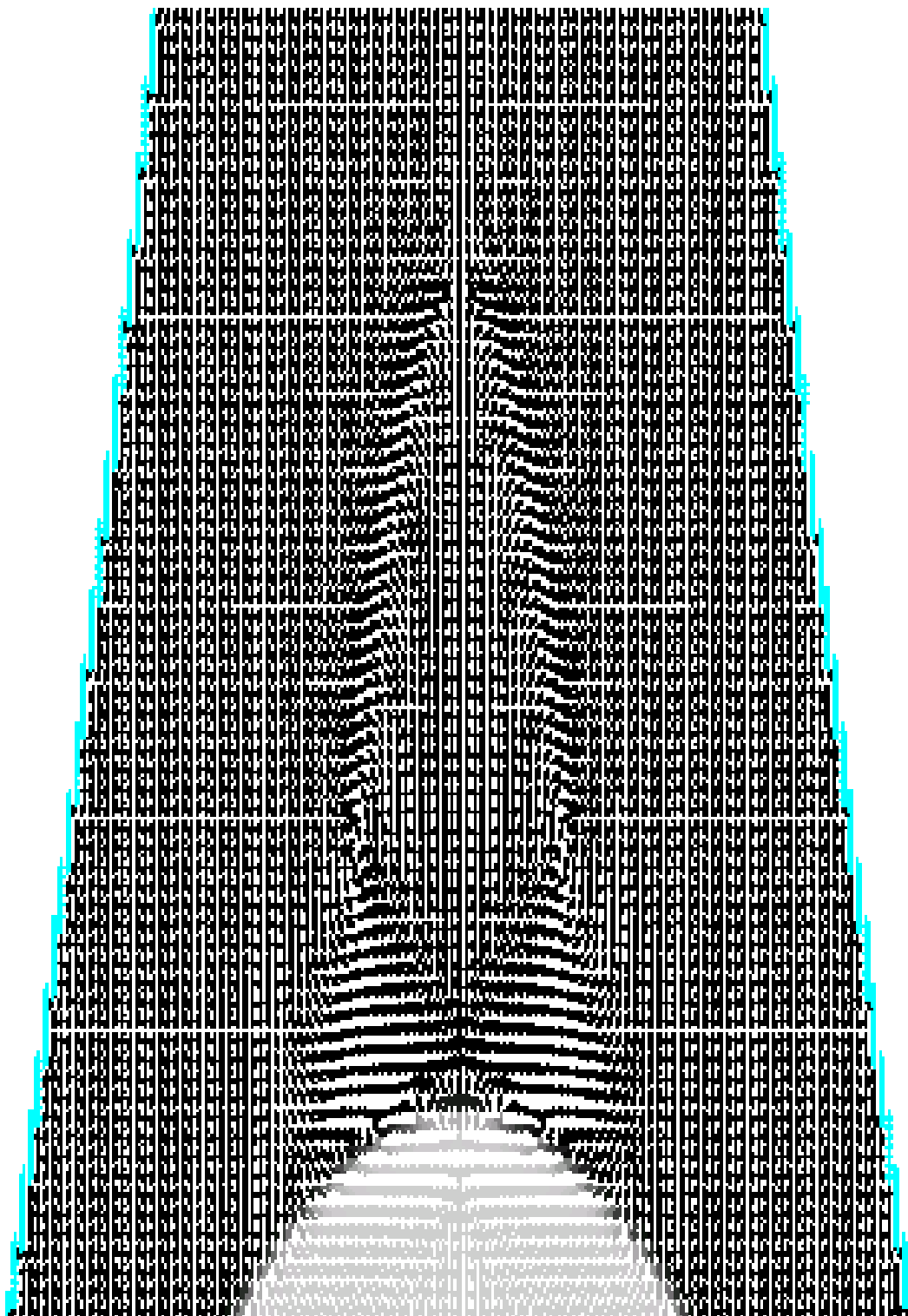


Abbildung 10.20: Rückstromwirbel für Parameter aus Tabelle 10.1.

Es zeigt sich, daß die sich ausbildende Rückströmung nun exakt dem von Van der Bergh [5] beobachteten Strömungsverhalten entspricht, welches in Abbildung 10.14 dargestellt ist. Es bilden sich nun, im Gegensatz zu Abbildung 10.13, zwei Staupunkte aus, und die Rückströmung besitzt die von Van der Bergh beobachtete Orientierung.

Die Geometrie dieses Rückströmgebietes und insbesondere die Lage des zweiten, dem eigentlichen Spalt punkt vorgelagerten Staupunktes, bestimmen dabei das Spaltungsverhältnis des Flüssigkeitsfilms. Ein solches Spaltungsmodell wurde schon Ende der fünfziger Jahre von Hopkins [6] vorgeschlagen und kann nun, mittels der oben beschriebenen Randbedingung an der diskretisierten Walzenoberfläche, erstmals an Hand einer Gitter-Boltzmann Simulation untersucht werden.

Die Strömungsbilder der stationären Zustände für $w_{max} = 0,1$ und $w_{max} = 0,15$ unterscheiden sich lediglich durch die räumliche Ausdehnung des Rückstromwirbels von Abbildung 10.20: Das Rückstromgebiet nimmt ein umso größeres Volumen ein je höher die Maximalgeschwindigkeit w_{max} ist.

Dieses Phänomen wird durch die Vergrößerung von Weber- und Reynoldszahl bei anwachsender Rotationsgeschwindigkeit der Walzen hervorgerufen und ist daher besser zu beobachten, wenn diese Kennzahlen im Vergleich zu Tabelle 10.1 **deutlich** erhöht werden.

Dies ist jedoch nicht durch eine weitere Vergrößerung der Wandgeschwindigkeit möglich, da die Machzahl $Ma = 0,34$ für $w_{max}=0,15$ (siehe Gleichung 10.9) bereits am oberen Ende des vertretbaren Bereiches einer inkompressiblen Strömung liegt. Aus diesem Grund ist es notwendig die makroskopischen Stoffgrößen zu variieren. Dies wird im nachfolgenden Abschnitt demonstriert.

Einfluß von Weber- und Reynoldszahl auf die Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung:

Eine Erhöhung von Weber- und Reynoldszahl erfolgt über eine Variation der makroskopischen Stoffgrößen und diese wiederum über eine Veränderung der Modellparameter \mathcal{G} und τ gemäß Tabelle 10.2. Die Maximalgeschwindigkeit der Walzen und der minimale Walzenabstand werden ebenfalls erhöht. Auch die Geometrieparameter aus Tabelle 10.1 müssen dabei verändert werden, um große Geschwindigkeitsgradienten am ($x = 0$)-Rand des Berechnungsgitters (siehe Abbildung 10.18) bzw. das „Herauswandern“ des Spaltpunktes aus dem Berechnungsgitter, zu verhindern. Die Verkleinerung von $\|\mathcal{G}\|$

Tabelle 10.2: Modell- und Geometrieparameter; resultierende makroskopische Stoffgrößen und dimensionslose Kennzahlen

Modell	Wert	Stoffgröße	Wert	Geometrie	Wert
Nx	850	ρ_l	2,3004	R	3597
Ny	182	ρ_g	0,06467	H	26
$\psi(\rho)$	$1 - e^{-\rho}$	ρ_l/ρ_g	35,57	X_1	80
α	1/3	η_l	0,2	X_2	850
β	1/18	p_0	0,018	w_{max}	0,14
h	1	γ_l	0,072		
m	1	Ma	0,336		
δt	1	We	18,7		
τ	0,75	Re	44,9		
\mathcal{G}	-0,185	Ca	0,42		
k	1,8				

($\|\mathcal{G}\| = 0,2 \rightarrow \|\mathcal{G}\| = 0,185$) bewirkt nach Abbildung 9.4 eine Verkleinerung der Oberflächenspannung und damit nach Abbildung 9.7 eine Vergrößerung der Weberzahl. Die Verkleinerung von τ bewirkt nach Abbildung 9.3 eine Verkleinerung der Viskosität und damit nach Abbildung 9.6 eine Vergrößerung der Reynoldszahl. Die Auswirkungen dieser Änderungen sind sowohl an der Dichte- jedoch besonders deutlich an der Geschwindigkeitsverteilung zu beobachten. Abbildung 10.21 zeigt die Geschwindigkeitsverteilungen welche sich gemäß der Parameter aus Tabelle 10.2 nach Erreichen eines stationären Dichtezustandes ergibt.

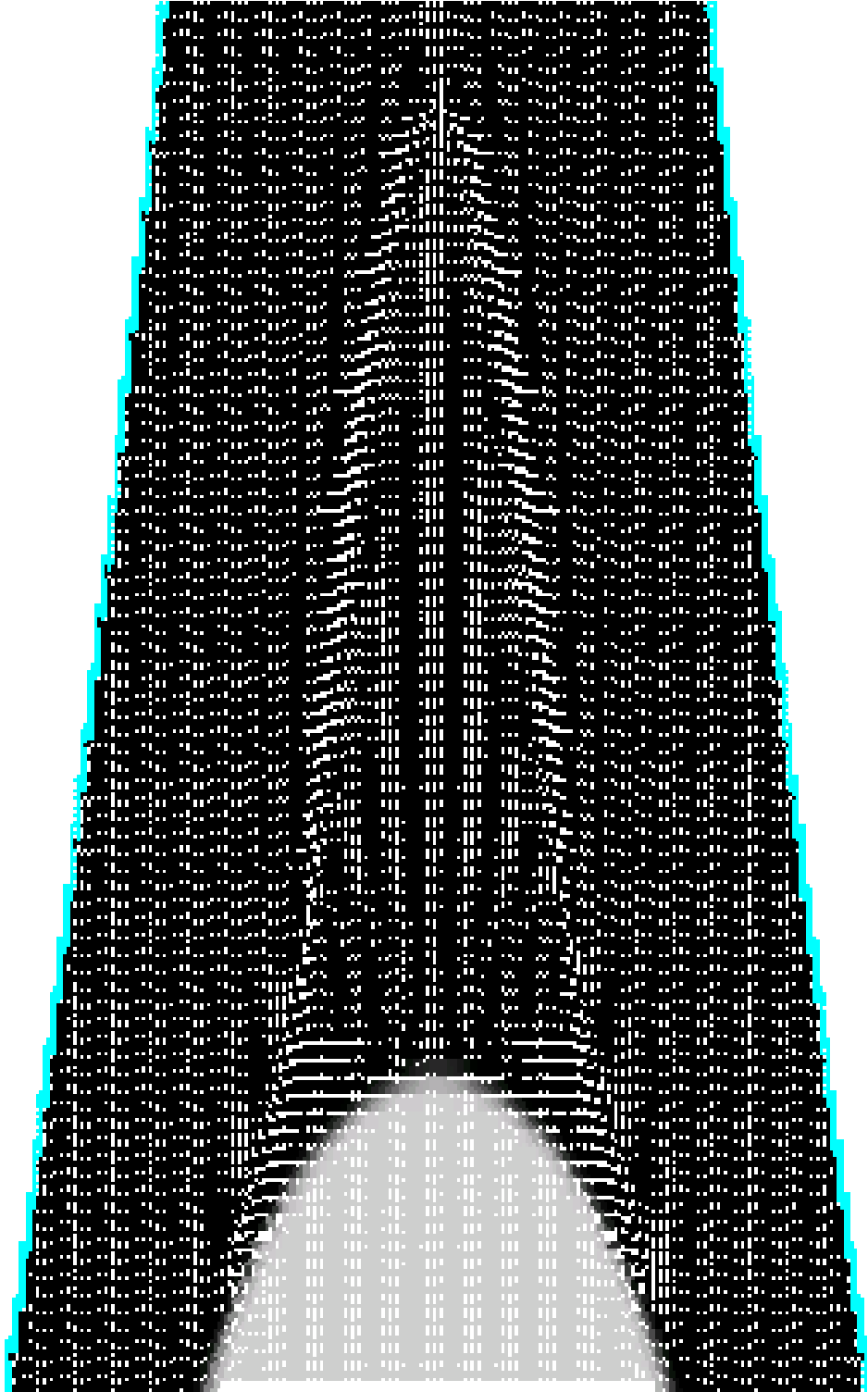


Abbildung 10.21: Rückstromwirbel für Parameter aus Tabelle 10.2.

Ein Vergleich von Abbildung 10.21 und Abbildung 10.20 zeigt, daß sich Form und Ausdehnung des Rückstromgebietes durch die Variation von Weber- und Reynoldszahl deutlich verändern.

In beiden Abbildungen ist in x -Richtung nur jeder zweite Gitterknoten mit seiner jeweiligen Geschwindigkeit dargestellt. Demnach beträgt der Abstand der beiden Staupunkte aus Abbildung 10.20 ca. $86 \cdot h$. Durch die Vergrößerung von Weber- und Reynoldszahl wird diese Distanz in Abbildung 10.21 auf einen Wert von ca. $120 \cdot h$ erhöht. Die von der Rückströmung insgesamt eingenommene Fläche wird durch die Erhöhung der Kennzahlen mehr als verdoppelt.

Des weiteren zeigt sich, daß das Rückstromgebiet oberhalb (stromaufwärts) des Spaltpunktes in Abbildung 10.21 das Strömungsverhalten der Flüssigkeit über den Spaltpunkt hinaus (stromabwärts) wesentlich stärker beeinflußt als dies in Abbildung 10.20 der Fall ist. Dieses Verhalten erklärt sich durch den vergrößerten Abstand vom Spaltpunkt zu den Walzenoberflächen (hervorgehoben durch das vergrößerte Flüssigkeitsreservoir) und dem erhöhten Einfluß der Trägheitskräfte gegenüber den Zähigkeitskräften.

Insgesamt ergibt sich also, daß die Dichte- und die Geschwindigkeitsverteilung sehr empfindlich auf Änderungen der dimensionslosen Kennzahlen reagieren.

Einfluß der Grenzflächenspannung auf die Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung:

In diesem Abschnitt soll der Einfluß der Grenzflächenspannung zwischen Festkörper und Fluid auf die Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung untersucht werden. Während alle weiteren Werte aus Tabelle 10.1 unverändert bleiben, wird der dimensionslose Faktor k in der Randbedingung RB vom Wert $k = 1,8$ auf $k = 2,2$ erhöht. Abbildung 10.22 zeigt den großen Einfluß der Grenzflächenspannung auf die Dichteverteilung während der Einlaufphase der Flüssigkeit zur Zeit $t = 7000 \cdot \delta t$. Da sich die Geschwindigkeit des Fluids in diesem Zeitabschnitt aus einer Überlagerung der Wand- und Benetzungsgeschwindigkeit ergibt, erfolgt der Flüssigkeitstransport umso schneller, je größer die zwischenmolekulare Kraft zwischen Festkörper und Fluid und damit die Grenzflächenspannung ist. Des weiteren läßt Abbildung 10.22 erahnen, daß sich der Randwinkel an der Dreiphasenkontaktlinie mit anwachsender Grenzflächenspannung verkleinert. Dieser zu erwartende Einfluß der Grenzflächenspannung auf den Randwinkel wurde in Paragraph 10.1 jedoch wesentlich ausführlicher untersucht.

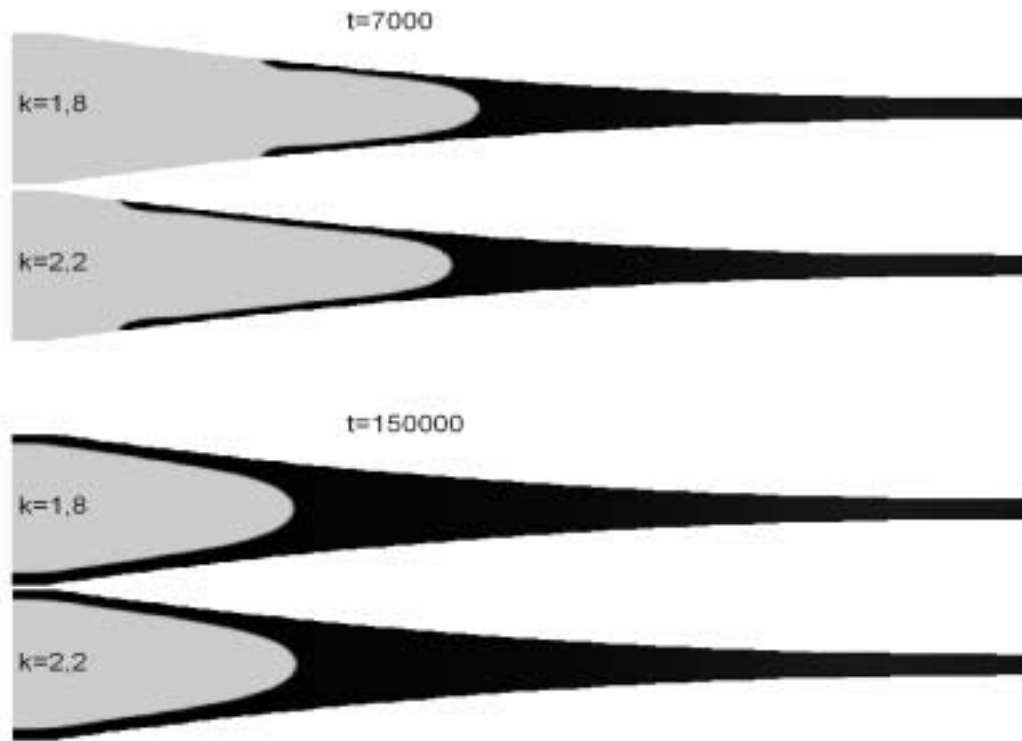


Abbildung 10.22: Dichteverteilung im Spaltauslauf bei unterschiedlichen Grenzflächenspannungen.

Sobald die Festkörper aber vollständig mit der flüssigen Phase bedeckt sind, und sich somit keine Dreiphasenkontaktlinie mehr an den Festkörperoberflächen befindet, beginnen sich die Dichteverteilungen einander anzugleichen, bis sie schließlich einen nahezu identischen stationären Zustand erreicht haben, welcher in Abbildung 10.22 bei $t = 150000$ erreicht ist.

Abbildung 10.23 zeigt das Richtungsfeld der Strömung im Bereich des Spaltpunktes nach Erreichen der stationären Dichteverteilung. Ein Vergleich mit Abbildung 10.20 zeigt, daß sich auch die Geschwindigkeitsverteilungen im Bereich des Spaltpunktes nach Erreichen des stationären Zustandes nicht erkennbar voneinander unterscheiden.

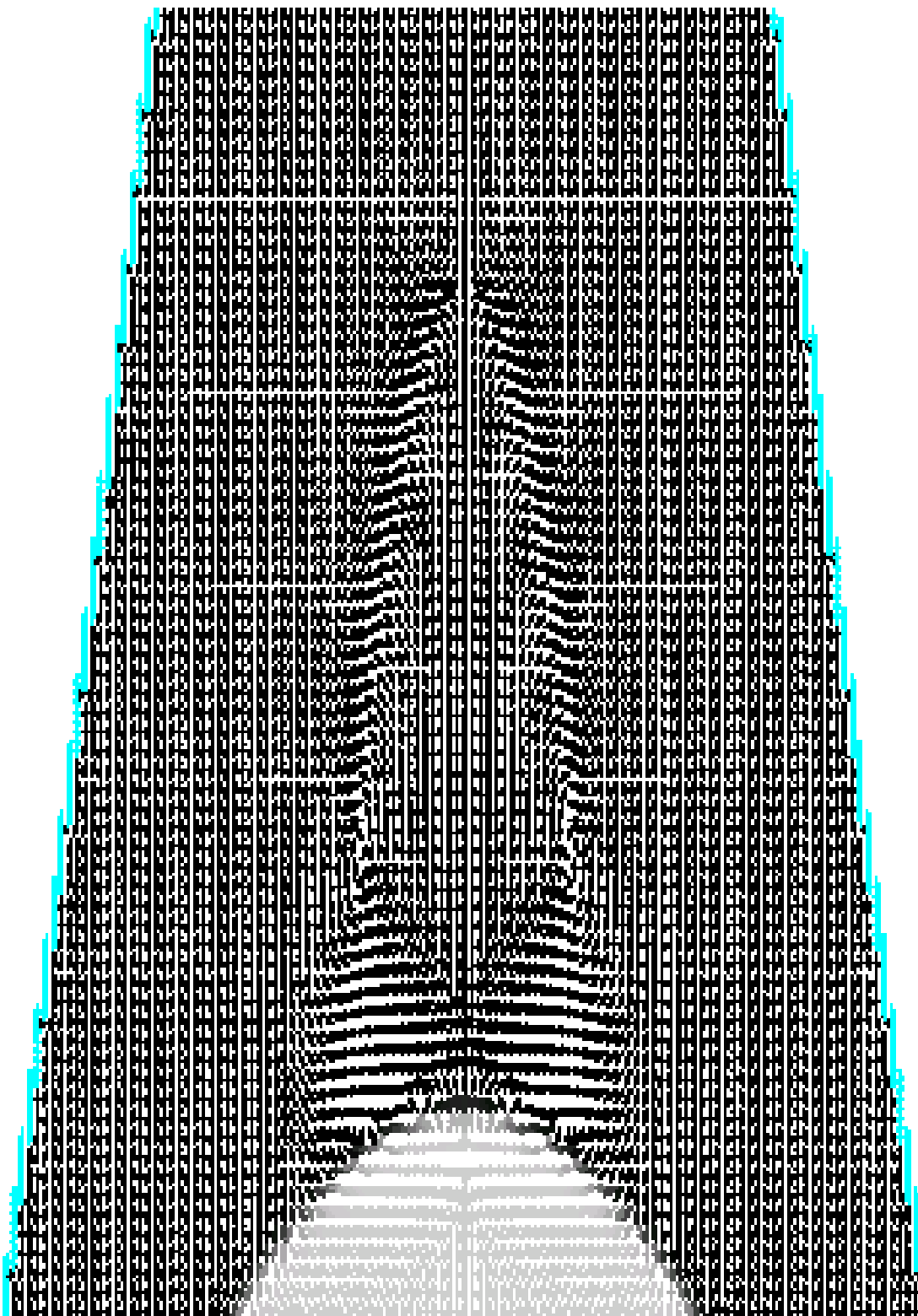


Abbildung 10.23: Rückstromwirbel für Parameter aus Tabelle 10.1 und $k=2,2$.

Physikalisch ist dieses Verhalten durch die nur sehr geringe Reichweite der Grenzflächenspannung begründet. Diese beträgt in der Realität nur wenige Pikometer; in der Simulation ist sie durch die Gittergeometrie auf den Wert $\sqrt{2} \cdot h$ (von einem Festkörperknoten bis zum nächsten inneren Nachbarknoten längs einer Flächendiagonalen) beschränkt. Eine makroskopische Auswirkung dieser lokalen Kraft nur dann zu erwarten, wenn sie die gegebenen Randbedingungen am Festkörper maßgeblich beeinflusst, wie es z.B. bei der Farbspaltung 2. Klasse (Stichwort: Randwinkel) der Fall ist.

Bei der stabilen Schichtspaltung hingegen scheint der Einfluß der Grenzflächenenergie zwischen Festkörper und Fluid (solange sie Benetzung garantieren) auf den Farbspaltungsprozeß vernachlässigbar: Eine veränderte Grenzflächenspannung übt eine Kraft auf diejenigen Knoten (Moleküle) aus, welche sich unmittelbar an der Walzenoberfläche befinden. Diese Kraft ist im Falle einer vollflächigen Einfärbung normal zur Oberfläche gerichtet und verändert somit lediglich die Normalkomponente der Geschwindigkeit dieser Teilchen. Diese Geschwindigkeitskomponente ist gegenüber der Tangentialgeschwindigkeit rotierender Walzen jedoch vernachlässigbar.

Kommt es aber durch Instabilitäten (z.B. Mikrostreifen, Lufttransport durch den Walzenspalt) zum Ausbilden einer Dreiphasenkontaktlinie, so bewirken hohe Grenzflächenspannungen ein schnelleres Abklingen dieser Strukturen: Die zwischenmolekulare Kraft an einer Dreiphasenkontaktlinie besitzt eine Komponente tangential zur Festkörperoberfläche.

Zusammenfassung:

In diesem Kapitel wurde die Zweiphasenströmung im Spaltauslauf zwischen rotierenden Walzen mittels des vorgestellten Gitter-Boltzmann Verfahrens untersucht. Es konnte gezeigt werden, daß sich ein Rückstromgebiet einstellt, welches stromabwärts vom eigentlichen Spaltpunkt - und stromaufwärts von einem weiteren Staupunkt begrenzt wird. Dieses Strömungsverhalten entspricht den Beobachtungen von Van der Bergh [5] und scheint somit die realen Gegebenheiten im Walzenspalt gut zu approximieren.

Sowohl die Geschwindigkeitsverteilung als auch die Lage der freien Oberfläche werden dabei von den Geometrieparametern und den makroskopischen Stoffgrößen (zusammengefasst in den dimensionslosen Kennzahlen) stark beeinflusst. Eine Auswirkung der Grenzflächenenergie zwischen Festkörper und Fluid auf die stabile Schichtspaltung konnte hingegen ausgeschlossen werden.

Jede der durchgeführten Simulationen benötigte auf einem herkömmlichen PC (Arbeitsspeicher: 256 MB, Taktfrequenz: 800 MHz) eine Rechendauer von ca. 150 Stunden. Eine Ausdehnung auf drei räumliche Dimensionen bzw.

die Implementierung realitätsnaher Größenverhältnisse ist daher nur mittels einer sehr großen Rechenkapazität möglich.

Kapitel 11

Zusammenfassung und Ausblick

In den ersten Kapiteln der vorliegenden Arbeit wurde die quasistatische - und die dynamische Farbspaltung mit analytischen Mitteln untersucht, wobei jeweils eine Reduzierung der Problemstellung auf zwei räumliche Dimensionen erfolgte.

So wurde bei der quasistatischen Farbspaltung in Kapitel 2 die zu den Festkörperplatten parallele Ebene in den Berechnungen vernachlässigt. Diese Vorgehensweise ist für quasistatische und damit stabile Prozesse keine Einschränkung, da sich das dreidimensionale Verhalten durch eine periodische Fortsetzung der physikalischen Größen längs der verbleibenden Koordinatenachse im jeweiligen Koordinatensystem (kartesische Koordinaten bzw. Zylinderkoordinaten) ergibt.

Aufbauend auf der Arbeit von Hübner [3] konnten für die unbekanntes Konturkurven des Flüssigkeitstropfens bzw. der Flüssigkeitslamelle, mittels Methoden der Variationsrechnung, Differentialgleichungen 1. Ordnung hergeleitet werden. Im Fall der Flüssigkeitslamelle ergab sich als Lösung dieser DGL eine Kurvenschar, deren einzelne Funktionsgraphen Kreise beschreiben. Im Fall des Flüssigkeitstropfens ergab sich keine allgemeine Lösung.

In beiden Fällen konnten jedoch nur drei Randbedingungen aus der Menge $\{V, \vartheta_0, \vartheta_h, X_0, X_h\}$ gewählt werden, die eine spezielle Lösung der DGL dann eindeutig festlegen. Wählt man z.B. die Randbedingungen $\{V, \vartheta_0, \vartheta_h\}$, so werden Phänomene wie z.B. die Randwinkelhysterese und die Flüssigkeitshaftung am Festkörper in diesem Modell vernachlässigt.

In Paragraph 10.1 erfolgte daher eine Simulation der quasistatischen Punktspaltung. Dabei konnten erstmals benetzbare Festkörper in ein dreidimensionales Gitter-Boltzmann Verfahren zur Simulation von Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen implementiert werden. Die Grenzflächenspannung der Festkörper ist dabei über den dimensionslosen Faktor k in der Randbedingung RR beliebig variierbar. Wie der Vergleich zwischen Experiment

und Simulation anhand der Kombination Teflon-Glyzerin-Teflon zeigte (siehe Abbildung 10.6), ist die Übereinstimmung von Realität und Simulation sehr gut.

Durch wachsende Rechnerkapazitäten und durch eine Parallelisierung des Algorithmus sollte es in Zukunft möglich sein, neben den makroskopischen Stoffgrößen des Fluids und der Grenzflächenspannung der Festkörper, auch deren spezifische Oberflächentopologien in ein Simulationsmodell zu implementieren. Eine solche Strukturierung sollte nach Jung [7] den makroskopischen Randwinkel gemäß der Wenzelgleichung 2.22 verkleinern.

Dazu muß die hier verwendete Randbedingung RR lediglich durch die Randbedingung RB mit der Eigengeschwindigkeit $w = 0$ der Festkörper ersetzt werden, damit auch Oberflächentopologien implementierbar sind, die sich der Gittersymmetrie nicht anpassen. Es ist dabei jedoch zu beachten, daß kleine Rauigkeiten in den Festkörperoberflächen eine hohe örtliche Auflösung des Berechnungsgitters und damit einen sehr großen Speicherbedarf erfordern.

Nach einer kurzen Herleitung der hydrodynamischen Grundgleichungen, wurde in den Kapiteln 4 und 5 (aufbauend auf den Arbeiten von Behler [2] und Zhang [9]) die instabile, dynamische Farbspaltung 2. Klasse bzw. 1. Klasse analytisch untersucht. Die Komplexität der Navier-Stokes Gleichung erforderte auch hier eine Reduzierung des Problems auf zwei räumliche Dimensionen, so daß als Gleichung für die Impulserhaltung das Darcysche Gesetz herangezogen werden konnte. Dieses beschreibt die Strömung in einer Ebene deren Normalenvektor in Richtung der Trenngeschwindigkeit zeigt. Im Gegensatz zu stabilen Prozessen, stellt die Reduzierung auf zwei räumliche Dimensionen hier aber eine echte Einschränkung des realen Vorgangs dar: Eine einfache periodische Fortsetzung der physikalischen Größen längs der verbleibenden Koordinatenachse ist nicht möglich.

Die Kombination aus Darcyschem Gesetz und der Kontinuitätsgleichung führte auf die Grundgleichung aller in dieser Arbeit durchgeführten linearen Stabilitätsanalysen:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{3h^2}{12\eta} \nabla h \cdot \nabla p + \frac{h^3}{12\eta} \cdot \Delta p$$

Diese partielle Differentialgleichung 2. Ordnung für den Druck p innerhalb der Flüssigkeit, ist in dieser Allgemeinheit nicht analytisch lösbar, da mit dem Spalthöhenverlauf h i.a. auch der Druck p von beiden räumlichen Koordinaten abhängt.

In Kapitel 4 dieser Arbeit wurde daher die Spaltung eines abgeschlossenen Flüssigkeitsvolumens zwischen parallelen, ideal glatten Platten betrachtet. Hier entfällt die Ortsabhängigkeit des Spalthöhenverlaufs und die durch-

geführten Stabilitätsanalysen erlauben somit die Berechnung eines Stabilitätskriteriums und einer dominanten Wellenzahl des Spaltvorgangs. Es stellte sich heraus, daß in beiden Fällen (Tropfen, Lamelle) die Kapillanzahl die, für die Stabilität des Spaltvorgangs entscheidende, dimensionslose Kennzahl darstellt.

In Paragraph 4.3 wurde schließlich der Versuch unternommen den Einfluß strukturierter Platten auf ein Stabilitätskriterium zu berechnen. Dafür mußte der Spalthöhenverlaufs $h = h_0 + h_1$ in zwei Anteile zerlegt werden: Eine rein ortsabhängige, periodische Funktion h_1 , welche eine Parametrisierung der Oberflächentopologien darstellt und eine nur von der Zeit abhängige Funktion h_0 , welche den mittleren Abstand der beiden Platten beschreibt. Selbst einfachste Ansätze für die periodische Funktion h_1 lassen aber lediglich eine analytische Berechnung der stabilen Strömung zu.

Numerische Lösungsversuche des resultierenden instabilen Strömungsverhaltens, auf welche in dieser Arbeit verzichtet wurde, könnten interessante Themengebiete für zukünftige Arbeiten sein.

Die Modellierung der instabilen Schichtspaltung erfolgte über eine spezielle (nicht periodische), trigonometrische Funktion $h(x, t) = h_0 + x \tan(\omega t)$, welche den Spalthöhenverlauf in einer sich öffnenden Hele-Shaw Zelle beschreibt. Dieser Ansatz erlaubte die approximative Berechnung einer dominanten Wellenzahl der entstehenden Instabilitäten. Der errechnete Zusammenhang

$$n^* = \sqrt{\frac{2CaX}{h^3(X)}}$$

wurde in einem Druckversuch an der BUGH-Wuppertal experimentell überprüft, indem mittels unterschiedlicher Rasterwalzen verschiedene Farbvolumina als Volltonflächen übertragen wurden. Die Wellenzahlen der im Druckbild ausgezählten Mikrostreifen passen sich dabei qualitativ sehr gut an den theoretisch berechneten funktionalen Zusammenhang an. Ein absoluter Vergleich von Theorie und Experiment war auf Grund der unbekannt geometrischen Verhältnisse des weich berandeten Walzenspaltes und des sich ausbildenden Farbreservoirs nicht möglich.

Nebenbei konnte gezeigt werden, daß ein Einfluß der Rasterwalzenlineatur auf die Wellenzahl der Mikrostreifen im Druckbild zu vernachlässigen ist.

Nach einer Einführung in die Theorie der Gittergase wurde, aufbauend auf den Arbeiten von Schelkle [1] und Takada [48], ein Gitter-Boltzmann Verfahren entwickelt, welches eine genaue und effiziente Simulation von dreidimensionalen Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen erlaubt. Erstmals ist es in dieser Arbeit gelungen in ein solches Simulationsmodell benetzbare Festkörper zu implementieren. Durch eine Übertragung der von Takada

entwickelten Randbedingung auf das hier verwendete dreidimensionale Gitter, können diese Festkörper zusätzlich eine gekrümmte Oberfläche und eine Eigengeschwindigkeit tangential zu ihrer Oberfläche besitzen. Die Implementierung der Adhäsionskräfte erfolgt dabei während der Berechnung der zwischenmolekularen Kräfte.

Dieses Simulationsverfahren erlaubt neben der Berechnung der quasistatischen Flüssigkeitsspaltung zwischen parallelen Platten (Paragraph 10.1), auch die Simulation der dynamischen Schichtspaltung zwischen rotierenden Zylindern (Paragraph 10.2).

Die dynamische Berechnung der Dichteverteilung an den Festkörperknoten (Randbedingung RB) ermöglichte dabei, im Gegensatz zur dirichletschen Randbedingung (hier müßten Geschwindigkeit **und** Dichte an den Festkörperknoten vorgegeben werden), die Ausbildung von Dreiphasenkontaktlinien. Dies hat zum einen den Vorteil, daß z.B. die Einlaufphase der Flüssigkeit in den Walzenspalt oder die dynamische Punktspaltung zwischen rotierenden Zylindern etc. überhaupt simulierbar werden, und sich zum anderen Instabilitäten der Dichteverteilung beliebig über die Festkörperoberflächen ausbreiten können.

So konnte in Paragraph 10.2.1 gezeigt werden, daß bei den dort gewählten Rand- und Anfangsbedingungen, spalteinlaufseitig einzelne Luftblasen durch den Walzenspalt transportiert werden, deren Frequenz und Volumina geschwindigkeitsabhängig sind.

Abschließend wurden verschiedene Simulationen der spaltauslaufseitigen Zweiphasenströmung im Walzenspalt durchgeführt.

Auf Grund des großen Speicherbedarfs für die Implementierung realitätsnaher Größenverhältnisse im Walzenspalt, mußten diese Simulationen jedoch auf zwei räumliche Dimensionen beschränkt werden. Der Normalenvektor der Berechnungsebene weist dabei (im Gegensatz zur Betrachtungsebene in Kapitel 5) in Achsenrichtung der Walzen.

Es konnte gezeigt werden, daß sowohl die Dichte- als auch die Geschwindigkeitsverteilung im Walzenspalt sehr empfindlich auf eine Veränderung der Druckgeschwindigkeit und der makroskopischen Stoffgrößen des Fluids reagieren:

Das sich ausbildende Farbreservoir vergrößert sich mit anwachsender Weberzahl, welche über die Druckgeschwindigkeit w die Spalthöhe H oder die Oberflächenspannung γ_l gesteuert werden kann. Dabei ist zu beachten, daß ein vergrößertes Flüssigkeitsreservoir die Stabilität des Farbspaltungsprozesses negativ beeinflusst (siehe z.B. Abbildung 10.21), da durch den vergrößerten Abstand vom Spalt zum Walzenoberflächen der Einfluß der Trägheitskräfte ansteigt.

Die in den Simulationen errechnete Geschwindigkeitsverteilung entspricht den Beobachtungen von Van der Bergh:

Es stellt sich ein Rückstromgebiet ein, welches vom eigentlichen Spaltpunkt an der freien Oberfläche und einem weiteren Staupunkt begrenzt wird. Damit ist es in dieser Arbeit erstmals gelungen ein Gitter-Boltzmann Verfahren zu entwickeln, welches eine Untersuchung des von Hopkins [6] eingeführten Spaltungsmodells erlaubt, welches besagt, daß die Lage dieses Rückstromgebietes das Spaltungsverhältnis des Flüssigkeitsfilms bestimmt.

Mittels einer Variation der makroskopischen Stoffgrößen konnten in weiteren Simulationen Weber- und Reynoldszahl deutlich erhöht werden, wobei sich herausstellte, daß sich dabei sowohl das Volumen des Farbreservoirs als auch die räumliche Ausdehnung des Rückstromgebietes vergrößern. Für die drucktechnische Praxis ist es aber von großem Interesse eine möglichst laminare und damit stabile Strömung zu erzeugen. Mit dem vorgestellten Simulationsverfahren können somit in Zukunft Optimierungsmöglichkeiten in der geometrischen Anordnung des Druckwerks (Verhältnis der Walzenradien zueinander, Beistellung etc.) oder den physikalischen Eigenschaften der Druckfarbe gefunden werden, welche diese Rückströmung verhindern oder zumindest einschränken.

Abschließend wurde gezeigt, daß die Grenzflächenspannung zwischen Festkörper und Flüssigkeit die stabile Schichtspaltung nicht beeinflusst. Der oft diskutierte Zusammenhang zwischen grenzflächenenergetischen Eigenschaften von Substrat bzw. Druckplatte und dem Farbübertragungsverhalten kann somit zumindest bei vollflächiger Einfärbung ausgeschlossen werden.

Da in das vorgestellte Simulationsverfahren bereits drei räumliche Dimensionen implementiert sind und in dieser Arbeit die Achsenrichtung der Walzen lediglich auf Grund des hohen Speicherbedarfs unbeachtet blieb, sollte mittels Parallelisierung des Algorithmus und anwachsenden Rechnerkapazitäten zukünftig auch die Wirbelausbildung in Achsenrichtung simuliert werden können. Eine solche Turbulenz, die in der drucktechnischen Praxis eine weitere mögliche Ursache von unerwünschten Strukturen senkrecht zur Druckrichtung (Mikrostreifen bzw. Baumrindenstrukturen) darstellt, kann somit realitätsnah simuliert werden.

Des weiteren eignen sich die Gitter-Boltzmann Verfahren auf Grund ihres Teilchencharakters besonders gut zur Implementierung von Festkörperpartikeln, welche von der Strömung mittransportiert werden. Daher ist es vorstellbar die Flüssigkeit/Farbe zu „pigmentieren“ um Rückschlüsse auf eine optimale Größenverteilung der Farbpigmente ziehen zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] Schelkle, M.: *Lattice-Boltzmann-Simulation zur Simulation dreidimensionaler Zweiphasenströmungen mit freien Oberflächen*, Dissertation, Shaker Verlag Aachen (1997), ISBN 3-8265-2337-7.
- [2] Behler, H.: *Die Randstrukturen von Druckpunkten-eine experimentelle Untersuchung der Farbspaltungsströmung*, Dissertation, TH Darmstadt, (1993).
- [3] Hübner, G.: *Ein Beitrag zum Problem der Flüssigkeitsspaltung in der Drucktechnik*, Dissertation, TH Darmstadt (1991).
- [4] Brötz, H.: *Ein Beitrag zur Farbübertragung in Naßoffsetfarbwerken unter besonderer Berücksichtigung des Feuchtmittels*, Dissertation, TH Darmstadt, (1997).
- [5] Van der Bergh, H.: M. Sc. project, Mech. Engng., University of Leeds, (1974).
- [6] Hopkins, M. R.: Brit J. Appl. Phys 8, (1957).
- [7] Jung, U.: *Beitrag zur Benetzung rauher und poröser Festkörperoberflächen*, Dissertation, TH Darmstadt, (1992).
- [8] Behler, H; Hars, C.: *Übertragungs- und Entleerungsverhalten von Farbe aus Nüpfchen von Rasterwalzen und Tiefdruckzylindern*, Institut für Druckmaschinen und Druckverfahren der TH Darmstadt, Institutsbericht 2/90, (1990).
- [9] Zhang, S.-Z.: *Linear stability analysis of the Hele-Shaw cell with lifting plates*, European Physical Journal, Volume 1, S.123-127, (1998).
- [10] Paterson, L.: *Radial fingering in a Hele Shaw cell*, J.Fluid Mech., Vol 113, S.513-529 (1981).

- [11] Park, C.W.: *The instability of long fingers in Hele Shaw flows*, J.Fluid Mech., Vol 28, S.1583-1585 (1985).
- [12] Saffman, P.G.: *Viscous fingering in Hele Shaw cells*, J.Fluid Mech., Vol 173, S.73-94 (1986).
- [13] Bensimon, D.: *Stability of viscous fingering*, Physical Review A , Volume 33, Number 2, S.1302-1308 (1998).
- [14] Gorodtsov, V.A.; Yentov, V.M.: *Instability of the displacement fronts of non-newtonian fluids in a Hele-Shaw cell*, J.Appl Maths Mechs, Volume 61, S.111-126 (1998).
- [15] Miranda, J.M.; Widom, M.: *Radial fingering in a Hele-Shaw cell; a weakly nonlinear analysis*, Physica D, Volume 120, S.315-328 (1998).
- [16] Huntingford, C.: *An exact solution to the one-phase zero-surface-tension Hele-Shaw free-boundary problem*, Computers Math. Applic., Volume 29, S.45-50 (1995).
- [17] Tabeling, P.; Libchaber, A.: *Film draining and the Saffman-Taylor problem*, Physical Review A, Volume 33, Number 1, S.794-796 (1986).
- [18] Daccord, G.; Nittmann, J.: *Radial viscous fingers and diffusion-limited aggregation: Fractal dimension and growth sites* , Physical Review Letters, Volume 56, Number 4, S.336-339 (1986).
- [19] Pons, M.N.: *Characterization of viscous fingering in a radial Hele-Shaw cell by image analysis*, Experiments in Fluids, Volume 26, S.153-160 (1999).
- [20] Hadavinia, H.: *The evolution of radial fingering in a Hele-Shaw cell using C^1 continuous Oberhauser boundary element method*, Engineering Analysis with boundary elements, Volume 16, S.183-195 (1995).
- [21] Chuoke, R.L.; van Meurs, P.; van der Poel, C.: *The instability of slow, immiscible, viscous liquid-liquid displacements in permeable media*, Society of Petroleum Engineers office, S.188-194 (1958).
- [22] Martinez, I.: *Liquid bridge stability data*, Journal of crystal growth, Volume 78, S.369-378 (1986).
- [23] Martinez, I.: *Stability of axisymmetric liquid bridges*, Proceedings of the 4th European Symposium on Materials Sciences under Microgravity, S.267-273 (1983).

- [24] De Bisshop, F.R.E: *A physical Model for liquid capillary bridges between adsorptive solid spheres*, Journal of colloid and interface science, Volume 88, S.117-126 (1982).
- [25] Meseguer, J.: *Liquid bridges breakages aboard spacelab-D1*, Journal of crystal growth, Volume 78, S.325-334 (1986).
- [26] Spurk, J.H.: *Strömungslehre*, Springer-Verlag, ISBN 3-540-61308-0.
- [27] Spurk, J.H.: *Dimensionsanalyse in der Strömungslehre*, Springer-Verlag (1992), ISBN 3-540-54959-5.
- [28] Bird, G.A: *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon Press Oxford (1976), ISBN 0-19-856120-2.
- [29] Oertel, H.; Böhle, M.: *Strömungsmechanik*, Vieweg (1999), ISBN 3-528-03893-4.
- [30] Oertel, H.; Delf, J.: *Strömungsmechanische Instabilitäten*, Springer-Verlag (1996), ISBN 3-528-56984-7.
- [31] Drazin, P.G.; Reid, W.H.: *Hydrodynamic stability*, Cambridge University Press (1999), ISBN 0-521-28980-7.
- [32] Becker, E.: *Technische Strömungslehre*, Teubner Studienbücher (1982), ISBN 3-519-33019-9.
- [33] Stauffer, D.: *From Newton to Mandelbrot*, Springer-Verlag (1990), ISBN 3-540-52661-7.
- [34] Wieghardt, K.: *Theoretische Strömungslehre*, Teubner Studienbücher (1974).
- [35] Truckenbrodt, E.: *Lehrbuch der angewandten Fluidmechanik*, Springer-Verlag (1983), ISBN 3-540-12407-1.
- [36] Truckenbrodt, E.: *Fluidmechanik Band 1*, Springer-Verlag (1980), ISBN 3-540-09499-7.
- [37] Truckenbrodt, E.: *Fluidmechanik Band 2*, Springer-Verlag (1980), ISBN 3-540-10135-7.
- [38] Feynman, P.F.: *The Feynman lectures on physics*, Adison-Wesley Publishing Company (1974), ISBN 3-486-34211-8.

- [39] Grosswald, E.: *Bessel Polynomials*, Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag (1978), ISBN 3-540-09104-1.
- [40] Jänich, K.: *Vektoranalysis*, Springer-Verlag (1991), ISBN 3-540-55530-7.
- [41] Bronstein, I.N.; Semendjajew, K.A.: *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch (1979), ISBN 3-87144-016-7.
- [42] Farrell, O.J.: *Solved Problems in Analysis*, Dover Publications (1971), ISBN 0-486-62713-6.
- [43] Clegg, J.C.: *Variationsrechnung*, Teubner Studienbücher (1970).
- [44] Velte, W.: *Direkte Methoden der Variationsrechnung*, Teubner Studienbücher (1976), ISBN 3-519-02317-2.
- [45] Walter, W.: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Springer-Verlag (1993), ISBN 3-540-52017-1.
- [46] Walter, W.: *Analysis 2*, Springer-Verlag (1991), ISBN 3-540-55385-1.
- [47] Grauert, H.; Fischer, W.: *Differential- und Integralrechnung*, Springer-Verlag (1968).
- [48] Takada, N.; Tsutahara, M.: *Evolution of viscous flow around a suddenly rotating cylinder in the lattice-Boltzmann method*, Computer and fluids, Vol 27, S.807-828 (1998).
- [49] Frisch, U.; Hasslacher, B.; Pomeau, Y.: *Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation*, Physical Review Letters, Vol 56, Number 14, S.1505-1508 (1986).
- [50] Frisch, U.: *Lattice Gas Hydrodynamics in two and three dimensions*, Complex Systems, Vol 1, S.669 (1987).
- [51] Harlow, F.W.; Welch, J.E.: *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow*, Phys. Fluids, Vol 8, S.2182-2189 (1965).
- [52] Tome, M.F.; McKee, S.: *A computational marker and cell method for free surface flows in general domains*, J. Comp. Phys., Vol 110, S.171-186 (1994).
- [53] Hirt, C.W.; Nichols, B.D.: *Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries*, J. Comp. Phys., Vol 39, S.201-225 (1981).

- [54] Greenspan, D.: *Quasimolecular simulation of large liquid drops*, Int. J. for Num. Meth. in Fluids, Vol 10, S.247-257 (1990).
- [55] von Neumann, J.: *Theory of self-reproducing automata*, Univ. of Illinois Press, 1966.
- [56] D'Humieres, D.; Lallemand, P.: *Lattice gas models for 3D hydrodynamics*, Europhys. Lett., Vol 2, No.4, S.291-297 (1986).
- [57] Rothmann, D.H.; Keller, J.M.: *Immiscible cellular automaton fluids*, J. of Stat. Phys., Vol 52, No.3/4, S.1119-1127 (1988).
- [58] Hardy, J.; Pomeau, Y.; de Pazzis, O.: *Time evolution of a two-dimensional model system*, J. Math. Phys., Vol 14, S.1746-1759 (1973).
- [59] Hardy, J.; Pomeau, Y.; de Pazzis, O.: *Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions*, Physical Review A, Vol 13, S.1949-1961 (1976).
- [60] Rothman, D.H.; Zaleski, S.: *Lattice Gas Cellular Automata*, Cambridge University Press (1997), ISBN 0-521-55201-X.
- [61] Chopard, B.; Masselot, A.: *Cellular automata and lattice Boltzmann methods: a new approach to computational fluid dynamics and particle transport*, Future Generation Computer Systems , Vol 217, S.249-257 (1999).
- [62] Chopard, B.; O'Luthi, P.: *Lattice Boltzmann computations and applications to physic*, Theoretical Computer Science, Vol 217, S.115-130 (1999).
- [63] Chen, H.; Chen, S.; Matthaeus, W.H.: *Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas method*, Physical Review A, Vol 45, Number 8, S.5339-5342 (1991).
- [64] Martys, N.S.; Chen, H.: *Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method*, Physical Review E, Vol 53, Number 1, S.743-749 (1995).
- [65] Chen, H.; Shan, X.: *Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation*, Physical Review E, Volume 49, Number 4, S.2941-2948 (1993).
- [66] Chen, H.; Shan, X.: *Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components*, Physical Review E, Volume 47, Number 3, S.1815-1819 (1992).

- [67] Skordos, P.A.: *Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method*, Physical Review E, Volume 48, Number 6, S.4823-4842 (1993).
- [68] Peitgen, H.O.; Jürgens, H.; Saupe, D.: *Chaos Bausteine der Ordnung*, Rowohlt Verlag (1993), ISBN 3-499-60551-1.
- [69] Mandelbrot, B.B.: *Die fraktale Geometrie der Natur*, Birkhäuser Verlag (1991), ISBN 3-7643-2646-8.