

Knut Küllmer

Pseudopotentialbasierte Lattice-Boltzmann-Verfahren für Mehrphasenströmungen

Herausgeber: Holger Foysi und Thomas Seeger

**Schriftenreihe des Lehrstuhls für
Strömungs- und Thermodynamik**

Band 5

Pseudopotentialbasierte Lattice-Boltzmann-Verfahren für Mehrphasenströmungen

dem Fachbereich Maschinenbau
der Universität Siegen
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

vorgelegte Dissertation
von

Knut Küllmer, M. Eng.

aus
Siegburg

Hauptreferent:	Prof. Dr.-Ing. H. Foysi
Koreferenten:	Prof. Dr. rer. nat. D. Reith Prof. Dr.-Ing. G. Brenner
Vorsitzender:	Prof. Dr.-Ing. T. Seeger
Dekan:	Prof. Dr. H. Schönherr
Tag der Einreichung:	08.11.2018
Tag der mündl. Prüfung:	01.07.2019

Siegen, Juli 2019

gedruckt auf alterungsbeständigem holz- und säurefreiem Papier

Impressum

Prof. Dr.-Ing., Dipl.-Phys. Holger Foyss

Lehrstuhl für Strömungsmechanik

Universität Siegen

57068 Siegen

Band 5

Zugl.: Siegen, Univ., Diss. 2019

Danksagung

Diese Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg. An dieser Stelle möchte ich mich bei all denjenigen bedanken, die mich während dieser Zeit unterstützt haben.

Zunächst möchte ich Prof. Dr.-Ing. Holger Foysi meinen Dank aussprechen: für die Möglichkeit diese Arbeit durchführen zu können, für das beständige Interesse, die gute Erreichbarkeit und die inspirierenden Gespräche.

Des Weiteren möchte ich mich bei Prof. Dr. Wolfgang Joppich und Prof. Dr. Dirk Reith bedanken, die die Betreuung seitens der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg übernommen haben: für die Schaffung guter Rahmenbedingungen, für die vielen Anregungen und Diskussionen sowie für die zeitlichen und fachlichen Freiräume, die ich nie als selbstverständlich angesehen habe.

Darüber hinaus danke ich dem Fachbereich EMT, dem Graduierteninstitut und dem Institut für Technik, Ressourcenschonung und Energieeffizienz für die fortwährende finanzielle Unterstützung und die Möglichkeit sowohl an nationalen als auch internationalen Konferenzen teilnehmen zu können.

Des Weiteren danke ich ganz herzlich Dr. Andreas Krämer und Dominik Wilde für die vielen fachlichen und nicht fachlichen Gespräche, die mich gleichermaßen inspiriert und motiviert haben, Martin Schenk, Dr. Karl Kirschner, Dr. Marco Hülsmann und Robin Strickstrock sowie allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe *Computational Science and Engineering* für den offenen Austausch und die stets freundliche Atmosphäre, und Christoph Mauel für die vielen Kilometer, die wir abseits der Wissenschaft zu Wasser und Land hinter uns gelassen haben.

Abschließend möchte ich mich ganz besonders bei meiner Familie für ihre Geduld und Unterstützung jeglicher Art bedanken. Danke, dass ihr immer für mich da seid.

Abstract

Pseudopotential (PP)-based lattice Boltzmann methods are widely used to simulate multiphase flows. As they ground on a phenomenological approach, their usage involves a high modelling effort and, additionally, they suffer from so-called spurious velocities that compromise numerical stability and accuracy. Therefore, this work advances PP-models by three novel aspects. First, the PP-model is shown to develop spurious droplets when contact angles are modelled with common approaches in combination with enhanced forcing schemes. These droplets are eliminated by a novel approach that relies on additional boundary conditions for all interaction forces. This not only prevents the spurious droplets from emerging but also increases the stability in wallbound flows. Second, a novel procedure to reduce spurious velocities is introduced. Therefore, the discretization of the interaction forces is extended and the additional free coefficients are optimized numerically using static droplet simulations. The resulting scheme is shown to greatly reduce spurious velocities and is successfully validated in stationary and transient testcases. Third and final, the diffusion characteristics in multicomponent systems are investigated in detail, revealing a critical dependency between the macroscopic diffusion coefficients and the forcing scheme. This analysis forms the basis for the comparison and development of new potential functions (in multicomponent systems) and reduces the modeling effort.

Zusammenfassung

Pseudopotential (PP)-basierte Lattice-Boltzmann-Methoden werden zunehmend für die Simulation von Mehrphasenströmungen eingesetzt. Da sie auf einem phänomenologischen Ansatz basieren, ist ihr Einsatz mit einem hohen Modellierungsaufwand verbunden. Zudem entstehen an den Phasengrenzen sogenannte Scheingeschwindigkeiten, welche Genauigkeit und numerische Stabilität beeinträchtigen. Daher werden PP-Modelle in dieser Arbeit um drei neue Aspekte erweitert. Erstens wird gezeigt, dass bei der Modellierung unterschiedlicher Kontaktwinkel mit gängigen Methoden in Kombination mit verbesserten Kräfteschemata Scheintröpfchen entstehen. Diese werden durch einen neuartigen Ansatz eliminiert, der auf zusätzlichen Randbedingungen für alle Wechselwirkungskräfte basiert. Diese Technik verhindert nicht nur das Auftreten der Scheintröpfchen, sondern erhöht auch die Stabilität in wandgebundenen Strömungen. Zweitens wird ein neuartiges Verfahren zur Reduktion von Scheingeschwindigkeiten eingeführt. Dabei wird die Diskretisierung der Interaktionskräfte erweitert und die zusätzlichen, freien Koeffizienten in Simulationen statischer Tropfen numerisch optimiert. Die resultierende Diskretisierung wurde in Simulationen stationärer und dynamischer Testfälle validiert, wobei Scheingeschwindigkeiten deutlich reduziert werden konnten. Drittens und letztens wurden die Diffusionseigenschaften in Mehrstoffsystemen detailliert untersucht, wobei eine kritische Abhängigkeit zwischen den makroskopischen Diffusionskoeffizienten und dem Kräfteschema aufgezeigt wird. Diese Analyse bildet die Grundlage für den Vergleich und die zukünftige Entwicklung neuer Potentialfunktionen (für Mehrstoffsysteme) und reduziert den Modellierungsaufwand.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Lattice-Boltzmann-Methode	9
2.1	Boltzmann-Gleichung	10
2.1.1	Approximation des Kollisionstermes	11
2.1.2	Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes	12
2.1.3	Diskretisierung der Zeit	16
2.1.4	Randbedingungen	17
2.1.5	Algorithmus	18
2.2	Approximation der makroskopischen Erhaltungsgleichungen	18
2.3	Dimensionslose Größen	20
2.4	Anwendung auf beliebige Probleme	20
2.5	Software	20
2.6	Zusammenfassung	21
3	Pseudopotentialmodelle für Mehrphasenströmungen	23
3.1	Allgemeine Formulierung	24
3.1.1	Isotrope Finite-Differenzen	25
3.1.2	Einstoff-Mehrphasen-Systeme (SCMP)	28
3.1.3	Mehrstoff-Mehrphasen-Systeme (MCMP)	33
3.1.4	Kräfte schemata	36
3.2	Scheingeschwindigkeiten	39
3.2.1	Struktur der Scheingeschwindigkeiten	40

3.2.2	Ursache der Scheingeschwindigkeiten	40
3.3	Benetzbarkeit von Oberflächen	43
3.3.1	Kontaktwinkel in binärem Gemisch	45
3.3.2	Optimierte Randbehandlung	47
3.4	Zusammenfassung	52
4	Numerische Optimierung	55
4.1	Ansatz	55
4.2	Definition des Testfalls	56
4.3	Optimierung	58
4.4	Validierung	59
4.4.1	Statischer Tropfen: Gleichgewichtsdichten	60
4.4.2	Statischer Tropfen: Scheingeschwindigkeiten	63
4.4.3	Statischer Tropfen: Oberflächenspannung	63
4.4.4	Oszillierender Tropfen	66
4.5	Diskussion und Zusammenfassung	69
5	Diffusion in Mehrstoffsystemen	71
5.1	Herleitung der Diffusionskoeffizienten	72
5.1.1	Makroskopische Momente	72
5.1.2	Chapman-Enskog-Analyse	73
5.1.3	Diffusion in binärem Gemisch	76
5.1.4	Diffusiver Massenfluss	78
5.1.5	Bestimmung des Transitionspunktes	78
5.2	Validierung	80
5.2.1	Mischbares Regime	81
5.2.2	Nicht mischbares Regime	83
5.2.3	Einfluss auf die Kontaktwinkelmodellierung	87
5.3	Zusammenfassung	89
6	Zusammenfassung	93
A	Kollisionsoperator mit multiplen Relaxationszeiten	99

B	Approximation der Maxwell-Boltzmann-Verteilung	101
B.1	Bestimmung der Koeffizienten	102
C	Rekonstruktion der Navier-Stokes-Gleichungen	103
C.1	Chapman-Enskog-Analyse	103
C.1.1	Rekonstruktion der Kontinuitätsgleichung	105
C.1.2	Rekonstruktion der Impulsgleichung	106
C.1.3	Allgemeine Formulierung des viskosen Spannungstensors	108
C.2	Zusammenfassung	109
D	Rekonstruktion der Diffusionsgleichung	111
D.1	Chapman-Enskog-Analyse	112
D.2	Zusammenfassung	114
E	Misch- und Komponentengeschwindigkeit	115
E.1	Weitere Bedingungen	116
F	Rekonstruktion der Navier-Stokes-Gleichungen für Gemische	117
F.1	Chapman-Enskog-Analyse	118
F.1.1	Rekonstruktion der Kontinuitätsgleichung	118
F.1.2	Rekonstruktion der Impulsgleichung	119
F.2	Zusammenfassung	122
G	Gleichgewichtseigenschaften in Einstoffsystemen	123
G.1	Bestimmung der Gleichgewichtsdichten	124
G.2	Bestimmung der Oberflächenspannung	125
G.3	Zusammenfassung	128
H	Potentialfunktion mit veränderbarem Transitionspunkt	129
H.1	Zusammenfassung	130

Abbildungsverzeichnis

2.1	<i>D2Q9</i> und <i>D3Q19</i> Diskretisierungen des Geschwindigkeitsraumes. . .	14
2.2	Bounceback-Schema für die <i>D2Q9</i> Diskretisierung.	18
3.1	Zweidimensionale Phasentrennungssimulation	31
3.2	Dichteprofile statischer Tropfen im Zweistoffsystem	34
3.3	Scheingeschwindigkeiten um einen statischen Tropfen.	39
3.4	Scheingeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Ordnung der Isotropie .	41
3.5	Tropfen auf hydrophiler und hydrophober Oberfläche	43
3.6	Schematische Darstellung Kontaktwinkelsimulation	45
3.7	Kontaktwinkel in Abhängigkeit der Fluid-Festkörper-Interaktion . . .	46
3.8	Fluid-Festkörper-Grenzfläche	47
3.9	Fluid-Festkörper-Grenzfläche mit optimierter Randbedingung	48
3.10	Fluid-Festkörper-Grenzfläche für optimiertes Verfahren	49
3.11	Fluid-Festkörper-Interaktionen im Vergleich	50
3.12	Ausprägung von Scheintröpfchen	51
3.13	Dichteverteilungen verschiedener Fluid-Festkörper-Interaktionen . . .	52
3.14	Stabilitätsbereich verschiedener Fluid-Festkörper-Interaktionen	53
4.1	Finite-Differenzen für numerische Optimierung in 2D	57
4.2	Schematische Darstellung statischer Tropfen	57
4.3	Parameterraum für eindimensionale numerische Optimierung	58
4.4	Eindimensionale numerische Optimierung	59
4.5	Simulierte Gleichgewichtsdichten mit $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ für verschiedene τ	60

4.6	Relative Fehler \mathcal{I}_{rel} der Gleichgewichtsdichten $\rho_{\text{flüssig}}$ und ρ_{Dampf}	62
4.7	Scheingeschwindigkeiten für $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$	64
4.8	Oberflächenspannungen für $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$	65
4.9	Oszillation eines elliptischen Tropfens	67
4.10	Natürliche Schwingungsfrequenzen für $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$	68
5.1	Schema der Dichteprofile zweier nicht mischbarer Fluide	79
5.2	Schematische Darstellung Konzentrationswelle	81
5.3	Diffusionskoeffizienten für Shan- und He-Kräftechema	83
5.4	Simulation des Transitionspunktes für verschiedene Kräfteschemata	85
5.5	Grenzflächenspannungen σ in Abhängigkeit von \mathcal{G}	86
5.6	Simulation des Transitionspunktes für verschiedene Relaxationszeiten	87
5.7	Kontaktwinkelmodellierung mit Shan- und He-Kräftechema	88
6.1	Dreidimensionale Simulation Electrowetting	96
D.1	$D2Q5$ Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes.	112
G.1	Dichteverteilung zur Bestimmung der Gleichgewichtseigenschaften	123
H.1	Potentialfunktion mit veränderbarem Transitionspunkt	130
H.2	Potentialfunktionen in Abhängigkeit der Dichte	130

Tabellenverzeichnis

2.1	Geschwindigkeitssatz $D2Q9$	14
2.2	Geschwindigkeitssatz $D3Q19$	14
3.1	Koeffizienten höher-isotrope Finite-Differenzen-Approximationen . . .	27
3.2	Definitionen der Kräfteschemata für MCMP-Systeme	37
3.3	Definitionen der Kräfteschemata für SCMP-Systeme	37
3.4	Definition der Komponentengeschwindigkeit \mathbf{u}_k^c für MCMP-Systeme .	38
4.1	Vektorsatz für numerisch optimierte Finite-Differenzen	57
4.2	Laufzeitvergleich unterschiedlicher Diskretisierungen	61
5.1	Potentialfunktionen für MCMP-Systeme	84
D.1	Geschwindigkeitssatz $D2Q5$	112
G.1	Gleichgewichtseigenschaften in SCMP-Systemen	127

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

$a^{(n)}$	Koeffizienten der Hermite-Transformation
$a^{\text{osz}}, b^{\text{osz}}, c^{\text{osz}}$	Freie Parameter zur Beschreibung einer abklingenden, harmonischen Schwingung
c_s	Isotherme Schallgeschwindigkeit
D, d	Räumliche Dimension
E	Energie
\mathbf{e}_i	Diskrete, mikroskopische Geschwindigkeit
f	Verteilungsfunktion
f_i	Diskrete Verteilungsfunktion mit diskreter mikroskopischer Geschwindigkeit \mathbf{e}_i
\bar{f}_i	Transformierte, diskrete Verteilungsfunktion
$f_{i,k}$	Diskrete Verteilungsfunktion der Komponente k mit diskreter mikroskopischer Geschwindigkeit \mathbf{e}_i
f^{eq}	Maxwell-Boltzmann-Verteilung
f_i^{eq}	Approximation der Maxwell-Boltzmann-Verteilung für die diskrete mikroskopische Geschwindigkeit \mathbf{e}_i
$f_{i,k}^{\text{eq}}$	Approximation der Maxwell-Boltzmann-Verteilung für die diskrete mikroskopische Geschwindigkeit \mathbf{e}_i für Komponente k
f_i^{temp}	Hilfsvariable für Postkollisionsverteilungen
\mathbf{f}	Vektor mit diskreten Verteilungsfunktionen
\mathbf{f}^{eq}	Vektor mit diskreten Gleichgewichtsverteilungen
\mathbf{f}^{temp}	Hilfsvektor für Postkollisionsverteilungen
\mathbf{F}	Allgemeine Volumenkraft
\mathbf{F}_k	Auf Komponente k wirkende Volumenkraft
\mathbf{F}_k^{SC}	Auf Komponente k wirkende Interaktionskraft des Pseudopotential-Modells
$\mathbf{F}_k^{\text{Wand}}$	Fluid-Festkörper-Interaktionskraft der Komponente k

$\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$	Fluid-Festkörper-Interaktionskraft nach Martys et al. [124]
$\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$	Fluid-Festkörper-Interaktionskraft nach Li et al. [109]
$\mathbf{F}_k^{\text{SC},*}$	Randoptimierte Formulierung der Fluid-Fluid-Interaktionskraft
$\mathbf{F}_k^{\text{Wand},*}$	Randoptimierte Formulierung der Fluid-Festkörper-Interaktion
g	Funktion zur Bestimmung der Zerfallsrate einer abklingenden, harmonischen Schwingung
H	Gemessene Höhe eines Tropfens auf einem Festkörper
\mathbf{j}_k	Diffusiver Massenfluss der Komponente k
\tilde{k}	Wellenzahl
L	Gemessene Kontaktlänge eines Tropfens mit einem Festkörper
\mathbf{m}	Vektor mit diskreten Momenten
\mathbf{m}^{eq}	Vektor mit diskreten Gleichgewichtsmomenten
Ma	Mach-Zahl
N	Anzahl Stoffe in einem Mehrstoffsystem
p	Druck
Q, q	Anzahl Quadraturpunkte in der Gauss-Hermite-Quadratur
r	Radius eines Tropfens
r_{eq}	Äquilibrierter Radius eines Tropfens
s	Indikatorfunktion für Festkörperpunkte
S_i	Quellterm in der Lattice-Boltzmann-Gleichung
$S_{i,k}$	Quellterm in der Lattice-Boltzmann-Gleichung für Komponente k
t	Zeit
T	Temperatur
T_{krit}	Kritische Temperatur
T_{red}	Reduzierte Temperatur
\mathbf{u}	Makroskopische Geschwindigkeit
\mathbf{u}'	Kompositgeschwindigkeit in einem Gemisch
\mathbf{u}_k^{c}	Komponentengeschwindigkeit der Komponente k
\mathbf{u}^{eq}	Gleichgewichtsgeschwindigkeit
\mathbf{u}_k^{eq}	Gleichgewichtsgeschwindigkeit der Komponente k
\mathbf{u}^{p}	Physikalische Geschwindigkeit in einem Einstoffsystem
\mathbf{u}^{m}	Mischgeschwindigkeit eines Gemisches
w	Gaußsche Gewichtsfunktion
w_i	Diskrete Gewichtsfunktion der Gleichgewichtsverteilung
\mathbf{x}	Ortsvektor
x_z, y_z	Mittelpunktskoordinaten 2D

Griechische Symbole

Γ	Hilfsvariable zur Beschreibung der Isotropiebedingungen
----------	---

δ_t	Zeitschrittweite
δ_x	Maschenweite
$\delta_{\alpha\beta}$	Kronecker Delta
δ	Amplitude einer Dichtestörung
$\zeta(\mathbf{x})$	Variabler Diffusionskoeffizient
η	Volumenviskosität (engl. <i>bulk viscosity</i>)
θ	Kontaktwinkel zwischen Tropfen und Festkörper
Λ	Zielgröße Diffusionsgleichung
λ	Relaxationszeit
$\bar{\lambda}$	Transformierte Relaxationszeit
μ	Dynamische Viskosität
μ^m	Dynamische Viskosität eines Gemisches
ν	Kinematische Viskosität
ξ	Mikroskopische Geschwindigkeit
ρ	Makroskopische Dichte
ρ_k	Makroskopische Dichte der Komponente k
ρ_{krit}	Kritische Dichte
ρ^m	Gesamtdichte eines Gemisches (Mehrstoffsystem)
ρ_{Dampf}	Dampfdichte (Einstoffsystem)
$\rho_{\text{flüssig}}$	Flüssigdichte (Einstoffsystem)
ρ_k^{Haupt}	Hauptdichte der Komponente k (Mehrstoffsystem)
$\rho_k^{\text{gelöst}}$	Gelöste Dichte der Komponente k (Mehrstoffsystem)
ρ_0	Referenzdichte der Potentialfunktion
ρ_{red}	Reduzierte Dichte
ρ_{Mittel}	Mittlere Dichte einer harmonischen Konzentrationswelle
ρ^{GF}	Grenzflächendichte
σ	Oberflächenspannung, Grenzflächenspannung
τ	Dimensionslose Relaxationszeit
$\bar{\tau}$	Transformierte, dimensionslose Relaxationszeit
τ_i^*	Dimensionslose Relaxationszeiten in MRT-Modellen
τ_k	Dimensionslose Relaxationszeit der Komponente k
ϕ_k	Randoptimierte Formulierung der Pseudopotentialfunktion
Ψ	Pseudopotentialfunktion
Ψ_k	Pseudopotentialfunktion der Komponente k
Ω	Kollisionsoperator der Boltzmann-Gleichung
ω	Natürliche Schwingungsfrequenz eines elliptischen Tropfen

Sonstige Symbole

\mathcal{B}	Breite der Grenzfläche
---------------	------------------------

\mathcal{C}_i	Verschiebungsvektor in der Finite-Differenzen-Approximation
\mathcal{D}_{kl}	Diffusionskoeffizient zwischen den Stoffen k und l
ε	Expansionsparameter in der Chapman-Enskog-Analyse
$\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}$	Gittertensor der Ordnung n
$\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$	Numerisch optimierte Finite-Differenzen-Approximation vierter Ordnung in der Isotropie
$\mathcal{G}_{k\bar{k}}$	Modellparameter zur Regulierung der Interaktionskräfte zwischen Komponente k und \bar{k}
$\mathcal{G}_k^{\text{Wand}}$	Modellparameter zur Regulierung der Fluid-Festkörper-Interaktionskraft der Komponente k
$\mathcal{G}_{\text{krit}}$	Kritischer Wert des Modellparameters, Bedeutung variiert je nach betrachteter Kraft (Einstoff- beziehungsweise Mehrstoffsystem)
\mathcal{G}_{red}	Mit dem kritischen Wert normierter Modellparameter
$\mathcal{H}^{(n)}$	Eindimensionales Hermite-Polynom vom Grad n
\mathcal{I}_{rel}	Relativer Fehler
\mathcal{K}	Oberflächenspannungskoeffizient
\mathcal{L}	Transformationsvariable für Berechnung der Koeffizienten der Hermite'schen Funktionen
$\mathcal{M}_{\alpha\beta}$	Transformationsmatrix Momentenraum
$\mathcal{P}_{\alpha\beta}$	Drucktensor
\mathcal{R}_{C}	Modellbedingter Fehlerterm in der kompressiblen Impulsgleichung
\mathcal{R}_{S}	Durch das Kräfteschema bedingte Fehler
\mathcal{R}_{F}	Terme fünfter und höherer Ordnung der Interaktionskraft
\mathcal{R}_{t}	Zeitlicher Fehler
$\mathcal{S}_{\alpha\beta}$	Kollisionsmatrix für MRT-Modelle
$\mathcal{T}_{\alpha\beta}$	Viskoser Spannungstensor
\mathcal{V}	Konvergenzkriterium
\mathcal{W}_i	Mit c_s^2 skaliertes Wichtungskoeffizient in der Finite-Differenzen-Approximation
\mathcal{W}_i^*	Normalisierter Wichtungskoeffizient in der Finite-Differenzen-Approximation
$\mathcal{W}_i^{\text{opt}}$	Numerisch optimierte Finite-Differenzen-Koeffizienten
$\mathcal{W}_i^{\text{opt},*}$	Normierte, numerisch optimierte Finite-Differenzen-Koeffizienten
\mathcal{Z}	Transformationsvariable zur Bestimmung der Gleichgewichtseigenschaften in Einstoffsystemen

Abkürzungsverzeichnis

BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
HCZ	He-Chen-Zhang(-Modell)
KBC	Karlin-Bösch-Chikatamarla
LBM	Lattice-Boltzmann-Methode(n)
LBGK	Lattice-Bhatnagar-Gross-Krook
MCMP	engl. <i>Multicomponent-Multiphase</i> - „Mehrstoff-Mehrphasen-“ (System)
MRT	engl. <i>Multiple-Relaxation-Time</i>
NS	Navier-Stokes
PP	Pseudopotential(-Modelle), pseudopotentialbasierte (Modelle)
SC	Shan-Chen
SCMP	engl. <i>Single-Component-Multiphase</i> - „Einstoff-Mehrphasen-“ (System)
SRT	engl. <i>Single-Relaxation-Time</i>

1 Einleitung

„Both for engineering and for many of the less exact sciences, such as biology, there is a demand for rapid methods, easy to be understood and applicable to unusual equations and irregular bodies.“

– Lewis Fry Richardson

Was wäre wenn? Eine Frage, die sich jeder Mensch schon einmal gestellt hat. Zur Beantwortung wird üblicherweise ein Gedankenexperiment durchgeführt, bei dem auf Basis von Erfahrungswerten versucht wird vorherzusagen, was unter gegebenen Umständen passieren könnte. Der betrachtete Prozess läuft dabei nicht tatsächlich, sondern nur zum Schein (in Gedanken) ab: Er wird simuliert (lat. *simulatio* „Schein, Täuschung“).

Da derartige Simulationen weder zuverlässig noch reproduzierbar sind, wird das subjektive, auf Erfahrungswerten basierende Modell in der Regel durch ein wissenschaftlich fundiertes ersetzt. Für die meisten technischen Anwendungen besteht dieses aus partiellen Differentialgleichungen, welche – trotz stark vereinfachender Annahmen – normalerweise nicht allgemeingültig, analytisch lösbar sind. In diesen Fällen kann eine Lösung jedoch mittels *numerischer Methoden* approximiert werden.

Sind Modell und Lösungsverfahren ausreichend genau, können Simulationen sowohl zur Vorhersage der Zukunft als auch als Alternative für schwer zugängliche, gefährliche oder kostenintensive Experimente eingesetzt werden. So ist es möglich, neue Produkte zu entwickeln oder die zugrundeliegenden Mechanismen komplexer Vorgänge (besser) zu verstehen. Da die damit verbundenen aufwändigen Rechnungen mittels moderner Hochleistungsrechner heute schnell durchgeführt werden können, haben sich numerische Simulationen als Standardwerkzeug in der Entwicklung etabliert.

Eine wichtige Rolle spielen dabei numerische Strömungssimulationen (engl. *Computational Fluid Dynamics* „Numerische Strömungsmechanik“), wobei es das Ziel ist, die Fließcharakteristiken von Fluiden, also von Flüssigkeiten und Gasen, zu simulieren. Die wohl bekanntesten Anwendungen sind Simulationen der Strömung um Fahr- [174] und Flugzeugkomponenten [125], um beispielsweise die Form bezüglich des Luftwi-

derstandes zu optimieren.

Als Modellgleichungen dienen dabei in der Regel die Navier-Stokes (NS)-Gleichungen, welche das Strömungsverhalten reibungsbehafteter (also viskoser) Fluide beschreiben [88]. Klassischerweise werden diese Gleichungen mittels Finite-Differenzen- [146], Finite-Elemente- [177] oder Finite-Volumen-Methoden [127] diskretisiert und näherungsweise gelöst. Wie diese konventionellen numerischen Methoden approximiert auch die in dieser Arbeit verwendete Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) [128] die NS-Gleichungen, sie verfolgt jedoch einen grundsätzlich anderen Ansatz [2, 20].

Eine Alternative für Strömungssimulationen

Statt direkt die NS-Gleichungen zu lösen, wird in der LBM die Boltzmann-Gleichung mittels eines regulären Gitters diskretisiert und gelöst. Diese wiederum beschreibt, wie sich Teilchenverteilungen in dünnen Gasen aufgrund von Freiflugphasen und Kollisionsvorgängen verändern. Im kontinuierlichen Grenzbereich approximieren die gemittelten Eigenschaften dieser Verteilungen (die makroskopischen Größen) die NS-Gleichungen. Auf der einen Seite liegt der Methode also eine partikelbasierte Betrachtung zugrunde. Dabei wird angenommen, dass ein Fluid aus einer großen Menge Teilchen besteht, deren Dynamik über eine statistische Verteilungsfunktion erfasst wird. Im Gegensatz zu makroskopischen Ansätzen ermöglicht dies den Zugriff auf mikroskopische Informationen. Auf der anderen Seite kann über die Momente dieser Verteilungen eine Verknüpfung zu den makroskopischen Größen (Dichte, Impuls) hergestellt werden, was im Gegensatz zu mikroskopischen Ansätzen die Simulation makroskopischer Systeme ermöglicht. Die Methode ist daher zwischen den mikroskopischen und makroskopischen Sichtweisen einzuordnen – man spricht von einer *mesoskopischen* Methode (griech. *mesos* „Mitte“).

Die Evolutionsgleichung der LBM wird in zwei aufeinanderfolgenden Schritten gelöst: einem Strömungs- und einem Kollisionsschritt. Die Nichtlinearität der Gleichung ist im Kollisionsschritt vereint, welcher *lokal* an jedem Gitterpunkt berechnet wird. Der lineare Strömungsschritt wiederum ist auf die unmittelbare Nachbarschaft eines Gitterpunktes beschränkt, wobei die Verteilungen mit konstanter Geschwindigkeit zu ihren direkten Nachbarn verschoben werden. Aufgrund dieser Lokalität der Rechenoperationen ist die LBM für die Ausführung auf Parallelrechnern besonders geeignet [56, 64, 118]. Zudem werden keine körperangepassten Gitter zur Diskretisierung benötigt, sondern kompliziert geformte Strukturen stufenweise approximiert. Derartige Geometrien können daher schnell und effizient vernetzt werden [99].

Zuletzt erlaubt es die mikroskopische Verankerung der Methode, Prozesse auf Teilchenebene auf natürliche Weise zu berücksichtigen [20]. Dies ist besonders vorteilhaft bei der Simulation von Strömungen, in denen unterschiedliche Phasen simultan vorhanden sind, denn die für diese Systeme charakteristischen Prozesse – beispielsweise Kondensations- und Verdampfungsvorgänge, die Ausprägung von Grenzflächen

zwischen unterschiedlichen Phasen oder aber Diffusionsprozesse – sind das Resultat mikroskopischer Wechselwirkungen [7, 17]. Neben den kontinuumsbasierten Ansätzen zur Simulation von Mehrphasenströmungen, beispielsweise den Level-Set- [138] oder Volume-of-Fluid-Methoden [65], wurden daher eine Vielzahl LBM-basierter Mehrphasenmodelle entwickelt [50, 58, 75, 110, 137, 192]. Unter diesen werden in der Literatur primär pseudopotential (PP)-basierte Modelle [158] verwendet [19], welche im Fokus dieser Arbeit liegen. Neben diesen zählen das Farbgradient- (engl. *Color-gradient*) [50], das Freie-Energie- (engl. *Free-Energy*-) [173] und das He-Chen-Zhang (HCZ)-Modell (benannt nach den Entwicklern) [58] zu den bekanntesten Vertretern.¹

Zu den Hauptvorteilen des PP-Modells zählen Effizienz und Einfachheit. Während Freie-Energie-Modelle in ihrer Grundform die Berechnung mehrerer, nicht-lokaler Terme erfordern (Ableitungen erster und zweiter Ordnung) [173], muss im PP-Modell nur ein einzelner, zusätzlicher nicht-lokaler Term (Gradient der Pseudopotentialfunktion) bestimmt werden, sodass diese sich besser mit der Parallelisierbarkeit der LBM in Einklang bringen lassen. Im Gegensatz zu PP- und Freie-Energie-Modellen muss in der Grundformulierung der Color-Gradient-Modelle ebenfalls nur ein zusätzlicher nicht-lokaler Term – der sogenannte Farbgradient (engl. *Color-gradient*) – bestimmt werden, jedoch wird hier der Kollisionsschritt um einen Term erweitert und es muss zusätzlich vor dem Strömungsschritt ein sogenannter Rekolorierungsschritt durchgeführt werden. In HCZ-Modellen wird neben den NS-Gleichungen zusätzlich eine Cahn-Hilliard Gleichung zur Verfolgung der Grenzfläche gelöst, weshalb ein zusätzlicher Satz Verteilungen benötigt wird (erhöhter Aufwand, Speicherbedarf).

Schließlich ist es mit PP-Modellen möglich die Benetzungseigenschaften von Festkörpern einfach zu modellieren – entweder durch die Vorgabe einer zusätzlichen Randdichte oder durch Einbringung einer weiteren, am Festkörper wirkenden Interaktionskraft, während dies beispielsweise in Freie-Energie-Methoden die Vorgabe wandnormaler Dichtegradienten erfordert [13, 72].

Diese Einfachheit und Effizienz sind das Resultat des zugrundeliegenden Ansatzes, welcher auf wenigen Zusatztermen – und daher auch auf wenigen Modellparametern – basiert. Die Modellierbarkeit ist dadurch im Gegensatz zu komplexeren Ansätzen eingeschränkt. Im Folgenden wird daher näher auf den Ansatz des PP-Modells und auf die damit verbundenen Vor- und Nachteile sowie auf Einschränkungen eingegangen.

Pseudopotentialbasierte Verfahren

Das PP-Modell verfolgt einen phänomenologischen Ansatz, bei welchem intermolekulare Kräfte auf Basis eines Pseudopotentials berücksichtigt werden [158]. Richtung und Stärke dieser Kräfte werden über numerische Modellparameter kontrolliert und

¹Die zugehörigen Pionierarbeiten wurden nach *Thomson Reuters Web of Knowledge* 759 [50], 719 [173] beziehungsweise 556 [58] mal zitiert und damit deutlich seltener als die des PP-Modells mit 1579 Zitationen (Stand 2018). Siehe auch Referenz [72].

beeinflussen so die makroskopische Dynamik. Wirkt beispielsweise eine ausreichend große, abstoßende Kraft zwischen zwei unterschiedlichen Fluiden, trennen sich diese voneinander. Dabei entwickelt sich eine über mehrere Gitterpunkte verschmierte Grenzfläche in Form eines Dichteüberganges, sodass sich das Modell den *Diffuse-Interface*-Methoden zuordnen lässt [3, 116]. Diese Grenzfläche ist somit implizit in der global definierten Dichteverteilung enthalten und muss im Gegensatz zu *Front-Tracking*-Methoden nicht explizit nachverfolgt werden [97]. Sie entsteht auf natürliche Weise durch die Interaktionskraft und kann zu jedem Zeitpunkt aus der Dichteverteilung rekonstruiert werden (ähnlich der Volume-of-Fluid-Methode); man spricht von einer *Front-Capturing*-Methode [15, 169].

Ein weiterer Vorteil, dem das PP-Modell seinen Erfolg zu verdanken hat, ist dessen Einfachheit. So ist es möglich, durch die Einbindung einer einfach formulierten Interaktionskraft, eine Vielzahl unterschiedlicher physikalischer Prozesse (Phasenübergänge, Diffusion, freie Oberflächen) zu simulieren. Zudem lässt sich das Modell intuitiv durch zusätzliche Feldterme erweitern, beispielsweise um die Benetzungseigenschaften von Festkörpern zu modellieren [109, 124]. So wurde es für die Simulation von Intrusionsvorgängen in Brennstoffzellen [39, 139], der Tröpfchenverteilungen in Sprays [33, 34], von Verdrängungsprozessen in porösen Medien [71, 72, 124] und Kavitationsvorgängen [197], der Tropfendynamik [107, 117, 122] in Mikrokanälen [188], des Mischverhaltens mischbarer Fluide [149], von gekoppelten Systemen beispielsweise in der Elektrohydrodynamik [43, 113, 195], von Elektrobenetzungsprozessen (engl. *Electrowetting*) [24, 25, 105, 106] oder von viskoelastischen Fluiden [54] verwendet.

Dieses Anwendungsspektrum spiegelt das enorme Potential der Methode wider, jedoch ist das PP-Modell (wie jedes andere numerische Verfahren) nicht frei von Defiziten. Zu einem der Hauptkritikpunkte gehören diskretisierungsbedingte, unphysikalische Geschwindigkeiten an den Phasengrenzen (Dichteübergängen), welche als Scheingeschwindigkeiten bezeichnet werden. Diese skalieren mit den Dichtegradienten und führen zu einem zirkulierenden Massentransport, welcher die Dynamik in transienten Simulationen verfälscht und zu Instabilitäten führen kann [26, 110]. In PP-Modellen können diese zwar durch die Verwendung von lokalen Gitterverfeinerungen [151, 186], Diskretisierungen höherer Isotropie für die Interaktionskräfte [121, 133, 156] oder größeren Geschwindigkeitssätzen [122, 164] reduziert, jedoch nicht vollständig eliminiert werden. Dadurch wird allerdings der Rechenaufwand je Gitterpunkt gesteigert und bei letzteren beiden Ansätzen die Lokalität durch Einbeziehung zusätzlicher Nachbarpunkte zunehmend verletzt. Es ist daher erstrebenswert, Methoden zu entwickeln, die Scheingeschwindigkeiten reduzieren und die Lokalität der Methode weitestgehend erhalten.

Des Weiteren führt der phänomenologische Charakter des Verfahrens zu einem hohen Modellierungsaufwand. So besteht zwischen den Modellparametern und physikalischen Größen wie der Temperatur, der Oberflächen- beziehungsweise Grenzflächenspannung, den Diffusionskoeffizienten oder (bei Vorhandensein von Festkörpern) dem Kontaktwinkel ein funktionaler Zusammenhang, welcher jedoch noch nicht für

alle Größen gefunden wurde. Für den Kontaktwinkel in Einstoffsystemen ist es beispielsweise nötig, in zusätzlichen Simulationen einen empirischen Zusammenhang zum Modellparameter herzustellen, bevor tatsächliche Simulationen durchgeführt werden können [25]. Für einige dieser Größen existieren Näherungsformeln, welche teilweise auf physikalischen Annahmen beruhen (beispielsweise für die Bestimmung der Grenzflächenspannung [141] oder den Kontaktwinkeln in *Mehrstoffsystemen* [73]), jedoch verlieren diese ihre Gültigkeit, sobald ein numerisches Element der Methode verändert wird. So ist es bekannt, dass das Kräfteschema, also die Art, wie die Interaktionskraft in der LBM berücksichtigt wird, zu erheblichen Fehlern in den makroskopischen Gleichungen führen kann [51, 53, 191]. Ungeachtet dessen werden jedoch bis heute mangelhafte Kräfteschemata verwendet [7, 63, 166], um auf bestehende Näherungsformeln zurückgreifen zu können. Es ist daher erstrebenswert, das Zusammenspiel der zugrundeliegenden numerischen Mechanismen besser zu verstehen und die Zusammenhänge zwischen Modellparametern und makroskopischen Größen auf allgemeingültige Art und Weise zu bestimmen, um so schließlich den Modellierungsaufwand zu reduzieren und die Nutzung des PP-Modells in Kombination verschiedener Erweiterungen der LBM zu ermöglichen.

Zusammengefasst bietet das PP-Modell eine einfache und effiziente Möglichkeit Mehrphasenströmungen zu simulieren, weshalb es in einer Vielzahl von Arbeiten verwendet wird [19]. Dabei werden jedoch bis heute häufig fundamentale Zusammenhänge verschiedener Weiterentwicklungen der Methode und den Modellparametern außer Acht gelassen (beispielsweise der Einfluss von Kräfteschemata auf die Kontaktwinkelmodellierung oder auf die Diffusionseigenschaften). Da zudem Scheingeschwindigkeiten den Stabilitätsbereich einschränken und die simulierten Geschwindigkeitsverteilungen in dynamischen Simulationen verfälschen [113, 195], bildet die Entwicklung effizienter Methoden zu deren Reduktion bis heute ein aktives Feld der Forschung.

Zielsetzung

Aus den oben genannten kritischen Punkten geht die Zielsetzung dieser Arbeit hervor. Zum einen ist es nötig, Scheingeschwindigkeiten zu reduzieren, um den Stabilitätsbereich und die Genauigkeit der Simulationen zu erhöhen. Da ein großer Erfolgsfaktor der LBM die Lokalität der aufwändigen Anteile der Rechenoperationen ist, ist diese dabei so weit wie möglich zu erhalten.

Zum anderen muss der Modellierungsaufwand durch ein tieferes theoretisches Verständnis der Methode reduziert werden. Da das PP-Modell in seiner ursprünglichen Form auf einem Kräfteschema aufbaut, welches zu einer Vielzahl von Fehlertermen in den makroskopischen Gleichungen führt, muss es um neuartige Kräfteschemata erweitert und untersucht werden, welchen Einfluss diese auf die Zusammenhänge zwischen Modellparametern und physikalischen Größen haben.

Aufbau der Arbeit

In dieser Arbeit werden drei neue Aspekte für die Nutzung von PP-Modellen vorgestellt: Eine neuartige Methode zur optimalen Reduktion von Scheingeschwindigkeiten, eine theoretische und numerische Analyse der Diffusionseigenschaften in Mehrstoffsystemen, welche den Modellierungsaufwand reduziert, und eine neuartige Randbedingung für die Modellierung der Benetzungseigenschaften an Festkörperoberflächen. Dazu wird zunächst in Kapitel zwei die Grundform der LBM für die Simulation von Strömungen, also zur Lösung der NS-Gleichungen, vorgestellt. Dabei werden die grundlegenden Gleichungen eingeführt, der Lösungsalgorithmus präsentiert sowie Vor- und Nachteile der Methode aufgezeigt.

Im dritten Kapitel wird der Grundalgorithmus um das PP-Modell erweitert. Es wird gezeigt, welche Mechanismen Einfluss auf Genauigkeit und Stabilität der Methode haben und auf existierende Weiterentwicklungen eingegangen. Dabei werden die Spezialisierungen des Modells für Einstoff-Mehrphasen- und Mehrstoff-Mehrphasen-Systeme eingeführt. Es wird auf die Modellierung der Benetzungseigenschaften von Festkörperoberflächen und einer im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Weiterentwicklung dieser Ansätze eingegangen, welche numerische Artefakte (Scheintröpfchen) eliminiert und den Stabilitätsbereich in wandgebundenen Strömungen erhöht.

Im vierten Kapitel wird die numerische Optimierung des Modells bezüglich Scheingeschwindigkeiten vorgestellt, wodurch Genauigkeit und Stabilität der Methode verbessert werden. Dieses optimierte Verfahren wird schließlich anhand stationärer und dynamischer Testfälle validiert.

Im fünften Kapitel werden die Diffusionseigenschaften mittels der sogenannten Chapman-Enskog-Analyse in *Mehrstoffsystemen* für verschiedene Kräfteschemata detailliert hergeleitet und untersucht. Dabei wird aufgedeckt, dass das Kräfteschema einen zwingend zu beachtenden, kritischen Einfluss auf die makroskopischen Diffusionseigenschaften hat. Darauf aufbauend wird gezeigt, welche Auswirkung diese Veränderung auf grenzflächenspannungsabhängige Prozesse hat (beispielsweise der Modellierung von Kontaktwinkeln) und wie unterschiedliche Kräfteschemata und Potentialfunktionen auf Basis von reduzierten Variablen miteinander verglichen werden können.

Im sechsten und letzten Kapitel folgt eine kurze Zusammenfassung der Arbeit inklusive eines Ausblicks bezüglich möglicher Forschungsfragen, die aus dieser Arbeit hervorgehen.

Anmerkungen zu Aufbau und Notation

Die gesamte Arbeit ist so strukturiert, dass im Hauptteil lediglich die für diese Arbeit wichtigen Kernaspekte detailliert erläutert werden. Grundlegende und vor allem auch lange Rechnungen, die dem Verständnis der Arbeit dienen, wurden detailliert durch-

geführt, jedoch für den interessierten Leser in entsprechende Anhänge ausgelagert. Um Gleichungen so übersichtlich wie möglich zu gestalten, werden im Folgenden sowohl Operator- als auch Index-Schreibweise genutzt. Bei Letzterer werden zur Angabe der Tensordimensionen grundsätzlich griechische Indizes verwendet, welche – falls nicht explizit anders erwähnt – die Einsteinsche Summenkonvention implizieren. Lateinische Indizes sind von dieser wiederum ausgeschlossen. Zudem werden für partielle Ableitungen die gängigen Kurzschreibweisen

$$\frac{\partial}{\partial t} = \partial_t, \quad \frac{\partial}{\partial x_\alpha} = \partial_\alpha$$

verwendet, wobei (in diesem Fall) α dem Richtungsindex des Raums entspricht. Einführende Beispiele zu Indexnotation und Kurzschreibweise sind in den Referenzen [98, 180, 181] und im Anhang von Referenz [87] zu finden. Des Weiteren werden Vektoren in Operatorschreibweise fett geschrieben und als Dezimaltrenner Punkt statt Komma verwendet.

2 Lattice-Boltzmann-Methode

„If you try and take a cat apart to see how it works, the first thing you have on your hands is a nonworking cat.“

– Douglas Adams

Die LBM ist ein numerisches Verfahren zur approximativen Lösung partieller Differentialgleichungen. Historisch aus den Gittergasen [38] hervorgegangen, wird sie hauptsächlich für Problemstellungen der Strömungsmechanik genutzt [2, 20], hat sich darüber hinaus aber als eigenständiges und vielseitig einsetzbares Lösungsschema etabliert [163, 168]. Wie die folgende Aufstellung zeigt, ist sie im Vergleich zu klassischen Ansätzen jung, obwohl seit ihrer Einführung Ende der 1980er-Jahre bereits rund drei Dekaden vergangen sind.

- 1911 :** Erste Anwendungen von **Finite-Differenzen-Methoden** auf partielle Differentialgleichungen durch Richardson [146, 147].
- 1956 :** Pionierarbeit zur **Finite-Elemente-Methode** von Turner et al. [177].
- 1971 :** Pionierarbeit zur **Finite-Volumen-Methode** von McDonald [127].
- 1988 :** Pionierarbeit zur **Lattice-Boltzmann-Methode** von McNamara und Zanetti [128].

Im Gegensatz zu Finite-Differenzen-, Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Methoden approximiert die LBM die dem Problem zugrundeliegende Differentialgleichung indirekt durch die Lösung einer vereinfachten Boltzmann-Gleichung. Wie sich zeigen wird, ist diese auf den ersten Blick umständliche Vorgehensweise in vielerlei Hinsicht vorteilhaft.

Da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf der Strömungsmechanik liegt, wird im Folgenden die LBM zur Lösung der NS-Gleichungen vorgestellt, welche das Strömungsverhalten reibungsbehafteter Fluide (Flüssigkeiten und Gase) beschreiben. Dazu wird kurz die Boltzmann-Gleichung vorgestellt und gezeigt, wie diese in drei separaten

Schritten vereinfacht und diskretisiert wird. Anschließend werden die in dieser Arbeit verwendeten Randbedingungen und der Lösungsalgorithmus der LBM präsentiert. Darauffolgend wird die Verbindung zwischen den mikroskopischen Größen der Boltzmann-Gleichung und den makroskopischen Größen der NS-Gleichungen hergestellt, also gezeigt, dass sich die Methode für die Simulation von Strömungen eignet. In den abschließenden Abschnitten wird kurz auf die Verwendung dimensionsloser Größen und auf die LBM als allgemeines Lösungsverfahren eingegangen. Es wird die in dieser Arbeit verwendete Software vorgestellt und Eigenschaften, Vor- und Nachteile der Methode werden kurz zusammengefasst.

2.1 Boltzmann-Gleichung

Die Boltzmann-Gleichung hat ihren Ursprung in der kinetischen Gastheorie, welche sich mit der statistischen Beschreibung von Gasen beschäftigt. Moleküle werden dabei auf kugelförmige, harte Teilchen ohne innere Struktur reduziert, welche sich mit gleichförmiger Geschwindigkeit im Raum bewegen und ideal elastisch miteinander kollidieren. Mit diesen Vereinfachungen ließe sich bereits die gesamte Dynamik eines Fluids mithilfe der Newtonschen Bewegungsgleichungen beschreiben [171]. Aufgrund der hohen Teilchenzahlen und der geringen Kollisionszeiten ist dieses Vorgehen für makroskopische Systeme jedoch ungeeignet. Für diese sind normalerweise nur die gemittelten Eigenschaften vieler Teilchen, *die makroskopischen Größen*, von Bedeutung. Das individuelle Verhalten einzelner Moleküle ist bis auf einzelne Ausnahmen irrelevant. So ist es möglich, die Dynamik einer Teilchenverteilung rein statistisch zu beschreiben und daraus die entsprechenden makroskopischen Größen zurückzugewinnen. Dazu wird die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion (meist einfach *Verteilungsfunktion*) $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ eingeführt, welche als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden kann, ein Teilchen zum Zeitpunkt t am Ort $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ mit der mikroskopischen Geschwindigkeit $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(t)$ anzutreffen [55]. Der Übersichtlichkeit halber werden im Folgenden die Abhängigkeiten nicht mehr aufgeführt.

Die gesuchten makroskopischen Größen ergeben sich dann aus den statistischen Momenten dieser Verteilung. Die ersten drei Momente entsprechen der Massendichte (Dichte), der Impulsdichte und der Energiedichte

$$\rho = \int f d\boldsymbol{\xi}, \quad \rho u_\alpha = \int \xi_\alpha f d\boldsymbol{\xi}, \quad \rho E = \frac{1}{2} \int \xi_\alpha \xi_\alpha f d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1)$$

mit der makroskopischen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} und der Energie E . Die zeitliche Entwicklung der Momente erfolgt also indirekt durch die Verteilungsfunktion, welche der Boltzmann-Gleichung

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} + \frac{F_\alpha}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha} = \Omega(f)}$$

folgt [87]. Während die linke Seite einen Advektions- und einen Feldterm mit Volumenkraft \mathbf{F} enthält, beschreibt der Quellterm $\Omega(f)$ Veränderungen aufgrund von Teilchenkollisionen (daher meist auch *Kollisionsterm*). Da die linke Seite dem totalen zeitlichen Differential der Verteilungsfunktion entspricht, wird fortan, wie auch häufig in der Literatur [87, 178], die verkürzte Schreibweise

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f) \quad (2.2)$$

verwendet. Im Folgenden wird diese kontinuierliche Gleichung in drei Schritten in eine iterativ lösbare Form überführt. Dabei wird der Kollisionsterm durch einen geeigneten Ausdruck approximiert und sowohl der Geschwindigkeitsraum als auch der Ort und die Zeit diskretisiert.

2.1.1 Approximation des Kollisionstermes

Die einfachste Möglichkeit den Kollisionsterm $\Omega(f)$ zu berechnen bietet der sogenannte Stoßzahlansatz [55]. Obwohl sich dieser auf Zwei-Teilchen-Kollisionen beschränkt und davon ausgeht, dass Teilchen zwischen Kollisionen vollkommen unkorreliert sind, muss ein Doppelintegral berechnet werden, in welchem die Postkollisionsgeschwindigkeiten implizit auftauchen [47]. Um das Lösen dieses Ausdrucks zu vereinfachen, wird der Einfluss von Kollisionen in der Regel mit dem sogenannten *Bhatnagar-Gross-Krook* (BGK)-Operator approximiert [11]. Dieser wiederum modelliert den Einfluss von Kollisionen auf eine beliebige Verteilung als eine Relaxation zu einer lokalen Gleichgewichtsverteilung, der Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi c_s^2)^{\frac{d}{2}}} \exp\left[-\frac{(\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\alpha - u_\alpha)}{2c_s^2}\right]. \quad (2.3)$$

Dabei entspricht c_s der isothermen Schallgeschwindigkeit, d der räumlichen Dimension und \mathbf{u} der makroskopischen Strömungsgeschwindigkeit der betrachteten Teilchenwolke. Der Kollisionsoperator ergibt sich dann aus

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{\text{eq}})$$

mit der Relaxationszeit λ (häufig auch *Kollisionszeit*), welche angibt, wie schnell sich eine beliebige Nichtgleichgewichtsverteilung dem Gleichgewicht annähert. In diesem Fall ist zur Charakterisierung des gesamten Kollisionsvorgangs nur eine einzige Relaxationszeit nötig, weshalb man von einem *Single-Relaxation-Time* (SRT)-Modell spricht. Wie sich zeigen wird, besteht zwischen der Relaxationszeit und der makroskopischen Viskosität ein direkter Zusammenhang.

Eingesetzt in die Boltzmann-Gleichung (2.2) ergibt dies die sogenannte *BGK-Gleichung*

$$\boxed{\frac{df}{dt} = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{\text{eq}})}. \quad (2.4)$$

Aufgrund der Annahme ideal elastischer Kollisionen bleiben die physikalischen Momente bei Anwendung des Kollisionsoperators erhalten. Es gilt also

$$\begin{aligned}\rho &= \int f d\xi = \int f^{\text{eq}} d\xi, \\ \rho u_\alpha &= \int \xi_\alpha f d\xi = \int \xi_\alpha f^{\text{eq}} d\xi, \\ \rho E &= \frac{1}{2} \int \xi_\alpha \xi_\alpha f d\xi = \frac{1}{2} \int \xi_\alpha \xi_\alpha f^{\text{eq}} d\xi,\end{aligned}\tag{2.5}$$

sodass sich die Momente aus der Gleichgewichtsverteilung berechnen lassen.

Eine Verallgemeinerung des hier präsentierten SRT-Modells bilden Modelle mit multiplen Relaxationszeiten, welche der Vollständigkeit halber in Anhang A kurz vorgestellt werden.

2.1.2 Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes

Ziel dieses Schritts ist es, den kontinuierlichen Geschwindigkeitsraum auf wenige Geschwindigkeiten zu reduzieren, ohne dabei makroskopisch relevante Informationen zu verlieren. Voraussetzung dafür ist, dass für die makroskopischen Erhaltungsgleichungen nur wenige Momente von Bedeutung sind und auch nur diese exakt berechnet werden müssen. Da sich diese aus der Gleichgewichtsverteilung ergeben, wäre es für deren Bestimmung nötig, die Integrale (2.5) über den gesamten Geschwindigkeitsraum zu berechnen, was jedoch leicht umgangen und damit stark vereinfacht werden kann. Dafür wird die Gleichgewichtsverteilung zunächst in eine Basis von Hermite-schen Funktionen

$$f^{\text{eq}}(\xi) = w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^{(n)} \mathcal{H}^{(n)}(\xi)\tag{2.6}$$

entwickelt [87, 162], wobei

$$w(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}\tag{2.7}$$

der Gaußschen Gewichtsfunktion entspricht. Die Hermite-Polynome $\mathcal{H}^{(n)}$ [46] sind definiert als

$$\mathcal{H}^{(n)}(\xi) = (-1)^n \frac{1}{w(\xi)} \frac{d^n}{d\xi^n} w(\xi)$$

und die Koeffizienten ergeben sich gemäß der Hermite-Transformation als

$$a^{(n)} = \int f^{\text{eq}}(\xi) \mathcal{H}^{(n)}(\xi) d\xi\tag{2.8}$$

(der Einfachheit halber beschränkt auf eine Dimension). Aufgrund der Ähnlichkeit zwischen der Gewichtsfunktion (2.7) und der Gleichgewichtsverteilung (2.3) können

die Koeffizienten $a^{(n)}$ in der Reihenentwicklung (2.6) mit den physikalischen Momenten der entsprechenden Ordnung identifiziert werden. Die Approximation (2.6) bis zur zweiten Ordnung enthält somit alle Momente aus Gleichung (2.5) und lässt sich dimensionsunabhängig als

$$f^{\text{eq}}(\xi) = w(\xi) \rho \left(1 + \xi_\alpha u_\alpha + \frac{\xi_\alpha \xi_\beta u_\alpha u_\beta}{2} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{2} \right)$$

ausdrücken¹. Durch Einsetzen dieser Approximation in die Koeffizienten (2.8) und unter Ausnutzung der Orthogonalitätseigenschaften der Hermite-Polynome [46] können die Koeffizienten $a^{(n)}$ beziehungsweise die Momente berechnet werden. Die dabei entstehenden kontinuierlichen Integrale der Form

$$\begin{aligned} a^{(n)} &= \int w(\xi) (a^{(0)} \mathcal{H}^{(0)} + a^{(1)} \mathcal{H}^{(1)} + a^{(2)} \mathcal{H}^{(2)}) \mathcal{H}^{(n)} d\xi \\ &= a^{(0)} \int w(\xi) \mathcal{H}^{(0)} \mathcal{H}^{(n)} d\xi + a^{(1)} \int w(\xi) \mathcal{H}^{(1)} \mathcal{H}^{(n)} d\xi + a^{(2)} \int w(\xi) \mathcal{H}^{(2)} \mathcal{H}^{(n)} d\xi \end{aligned}$$

werden mit der Gauss-Hermite-Quadratur exakt gelöst, wobei in Abhängigkeit der räumlichen Dimension unterschiedlich viele Quadraturpunkte ξ_i mit Gewichtung $w(\xi_i)$ nötig sind. Diese Quadraturpunkte ergeben sich aus den Nullstellen der Hermite-Polynome und enthalten daher meist irrationale Faktoren, weshalb sie der Einfachheit halber auf ganze Zahlen skaliert werden [87]. Der Skalierungsfaktor wiederum repräsentiert eine charakteristische Konstante, welche mit der isothermen Schallgeschwindigkeit c_s identifiziert werden kann [98]. Damit ergeben sich die skalierten Quadraturpunkte

$$e_{i,\alpha} = c_s \xi_{i,\alpha} \quad (2.9)$$

und (nach Wiederholung der Herleitung, siehe Anhang B) die Gleichgewichtsverteilung

$$f^{\text{eq}}(\mathbf{e}_i) = f_i^{\text{eq}} = w(\mathbf{e}_i) \rho \left(1 + \frac{e_{i,\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{e_{i,\alpha} e_{i,\beta} u_\alpha u_\beta}{2c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{2c_s^2} \right). \quad (2.10)$$

Die Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes für die räumliche Dimension d ist dann durch q skalierte Quadraturpunkte \mathbf{e}_i mit den entsprechenden Gewichten $w(\mathbf{e}_i) = w_i$ definiert und wird mit $DdQq$ abgekürzt [132]. Die Zusammenstellung von Gewichten und Geschwindigkeiten wird als *Geschwindigkeitssatz* bezeichnet [87]. In Anlehnung an die Darstellung in den Referenzen [62, 87] sind die gängigen Diskretisierungen $D2Q9$ und $D3Q19$ beispielhaft in Abbildung 2.1 mit den zugehörigen Geschwindigkeitssätzen in den Tabellen 2.1 und 2.2 dargestellt. Da die gleiche Transformation auch für die Verteilungen f durchgeführt werden kann [162], lassen sich

¹Um diesen Ausdruck zu erhalten muss zusätzlich von einem isothermen System ausgegangen werden [87, 162]

die makroskopischen Momente dann durch endliche Summen ausdrücken, sodass sich Dichte und Impulsdichte mit

$$\rho = \sum_{i=0}^{q-1} f_i = \sum_{i=0}^{q-1} f_i^{\text{eq}}, \quad \rho u_\alpha = \sum_{i=0}^{q-1} e_{i,\alpha} f_i = \sum_{i=0}^{q-1} e_{i,\alpha} f_i^{\text{eq}} \quad (2.11)$$

berechnen lassen.

Abschließend kann durch die Beschränkung auf endlich viele \mathbf{e}_i die Abhängigkeit der Verteilungen von den mikroskopischen Geschwindigkeiten gelöst

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i, t) = f_i(\mathbf{x}, t),$$

und die BGK-Gleichung (2.4) in q *geschwindigkeitsdiskretisierte BGK-Gleichungen*

$$\boxed{\frac{df_i}{dt} = -\frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}})} \quad (2.12)$$

überführt werden. Obwohl die Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes damit abgeschlossen ist, sind an diesem Punkt einige zusätzliche Bemerkungen nötig.

So wird nur eine Näherung der Gleichgewichtsverteilung verwendet, was jedoch keinen Einfluss auf die Genauigkeit (Konvergenzordnung) des resultierenden numerischen Verfahrens hat, denn mit der Gauss-Hermite-Quadratur werden die physikalischen Momente exakt berechnet. Approximationen höherer Ordnung der Gleichgewichtsverteilung ermöglichen lediglich die exakte Rekonstruktion höherer Momente, wobei zusätzliche Quadraturpunkte benötigt würden.

Des Weiteren müssen die Geschwindigkeitssätze für die Lösung der NS-Gleichungen zusätzliche Isotropiebedingungen erfüllen [38, 59, 185]. Dazu werden die sogenannten Gittertensoren

$$\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)} = \sum_i w_i \underbrace{e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} \dots}_n \quad (2.13)$$

bestimmt und sichergestellt, dass diese bis zum Grad fünf isotrop sind, sie also

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{(0)} &= \sum_i w_i = 1, \\ \mathcal{E}_\alpha^{(1)} &= \sum_i w_i e_{i,\alpha} = 0, \\ \mathcal{E}_{\alpha\beta}^{(2)} &= \sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \\ \mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} &= \sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} = 0, \\ \mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} &= \sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} e_{i,\delta} = c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \\ \mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon}^{(5)} &= \sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} e_{i,\delta} e_{i,\epsilon} = 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

erfüllen [87]. Da die Bedingungen ungerader Ordnung für symmetrische Geschwindigkeitssätze trivialerweise erfüllt sind [151], der Geschwindigkeitssatz also nur die Bedingungen bis zur vierten Ordnung erfüllen muss, wird ihnen häufig nur Isotropie vierter Ordnung zugeschrieben [143]. Im Folgenden impliziert – falls nicht explizit anders erwähnt – eine gerade Ordnung der Isotropie daher immer die nächst höhere ungerade Ordnung.

Der notwendige Grad der Isotropie hängt von der Komplexität der makroskopischen Gleichungen ab. So ist beispielsweise für die Lösung der Laplace-Gleichung [195], der Advektions-Diffusions-Gleichung [132] oder der Strahlungstransportgleichung [131] in zwei Dimensionen der $D2Q5$ Geschwindigkeitssatz ausreichend.

Abschließend ist anzumerken, dass die Geschwindigkeitssätze $D2Q7$ beziehungsweise $D3Q15$ zur exakten Berechnung der hydrodynamischen Momente ausreichen [162]. Obwohl diese weniger Verteilungen (und dementsprechend weniger Speicher) verwenden als $D2Q9$ beziehungsweise $D3Q19$, werden sie aufgrund der schlechter zu handhabenden Gitter kaum verwendet.

2.1.3 Diskretisierung der Zeit

Im letzten Schritt werden die geschwindigkeitsdiskretisierten BGK-Gleichungen (2.12) zeitlich und örtlich diskretisiert. Dazu werden sie über einen Zeitschritt δ_t integriert, welcher über

$$e_{i,\alpha} = \frac{1}{\delta_t} \delta_{x_\alpha} \quad (2.15)$$

direkt mit der räumlichen Auflösung gekoppelt wird. Diese Kopplung hat zur Folge, dass Verteilungen der Geschwindigkeit \mathbf{e}_i innerhalb eines Zeitschritts genau auf den Punkten eines regulären Gitters mit der richtungsunabhängigen Maschenweite δ_x landen. Die mikroskopischen Geschwindigkeiten spannen dann ein Bravais-Gitter [40] für die räumliche Diskretisierung eines Problems auf [154].

Damit liefert die Integration

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i = \int_t^{t+\delta_t} -\frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}}) dt,$$

wobei der Advektionsterm entlang der charakteristischen Richtungen i exakt gelöst wird. Das Integral des Kollisionstermes wird in der Regel mit der Trapez-Regel

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i = -\frac{\delta_t}{2\lambda} [f_i - f_i^{\text{eq}} + f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t)]$$

genähert [103, 178]. Die dabei entstehende implizite Gleichung kann durch Verwendung der Transformation

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{\delta_t}{2\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}}) \quad (2.16)$$

in eine explizite Form

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \bar{f}_i - \frac{\delta_t}{\bar{\lambda}} (\bar{f}_i - f_i^{\text{eq}}) \quad (2.17)$$

mit der transformierten Relaxationszeit

$$\bar{\lambda} = \lambda + \frac{\delta_t}{2}$$

überführt werden. Als zusätzliche Vereinfachung wird $\bar{\lambda}$ mit dem Zeitschritt normiert, wodurch sich die dimensionslose Relaxationszeit

$$\bar{\tau} = \frac{\bar{\lambda}}{\delta_t}$$

ergibt. Mit ihr kann Gleichung (2.17) in die bekannte *Lattice-BGK* (LBGK)-Gleichung

$$\boxed{f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i - \frac{1}{\bar{\tau}} (f_i - f_i^{\text{eq}})} \quad (2.18)$$

gebracht werden, wobei – wie auch im Folgenden – der Überstrich für die Darstellung der Transformation vernachlässigt wurde. Es ist anzumerken, dass die Transformation (2.16) nur zulässig ist, weil die makroskopischen Momente kollisionsinvariant sind (siehe Abschnitt 2.1.1), weshalb die Momente der transformierten Verteilungen mit denen der nicht-transformierten übereinstimmen. Das Ergebnis ist eine explizite Iterationsvorschrift zweiter Ordnung in der Zeit, die der eines expliziten Euler-Verfahrens ähnelt, jedoch implizite Stabilitätseigenschaften aufweist.

2.1.4 Randbedingungen

Für die Durchführung von Simulationen ist es noch nötig, Randbedingungen zu definieren, welche das Verhalten der Verteilungen an den Rändern des Rechengebiets beschreiben. Dafür werden in dieser Arbeit ausschließlich periodische und Festkörperrandbedingungen verwendet [167].

Erstere sind dadurch charakterisiert, dass Verteilungen, die das Gebiet auf einer Seite verlassen auf der gegenüberliegenden wieder hineinströmen und umgekehrt. So wird das Rechengebiet entlang der Periodizität geschlossen, wobei Randpunkte – wie auch die Gebietsinneren – Fluid enthalten.

Festkörperränder werden als Punkte modelliert, an denen die Strömungsgeschwindigkeit auf Null abfällt. Um dies zu erzielen, gibt es verschiedene Ansätze [167], wobei in dieser Arbeit das sogenannte Bounceback-Schema [199] verwendet wird. Dabei werden die in den Randpunkt hineinströmenden Verteilungen in ihre Herkunftsrichtung reflektiert, was die Impulsdichte (2.11) verschwinden lässt. Der Prozess ist beispielhaft für die *D2Q9* Diskretisierung in Abbildung 2.2 dargestellt.

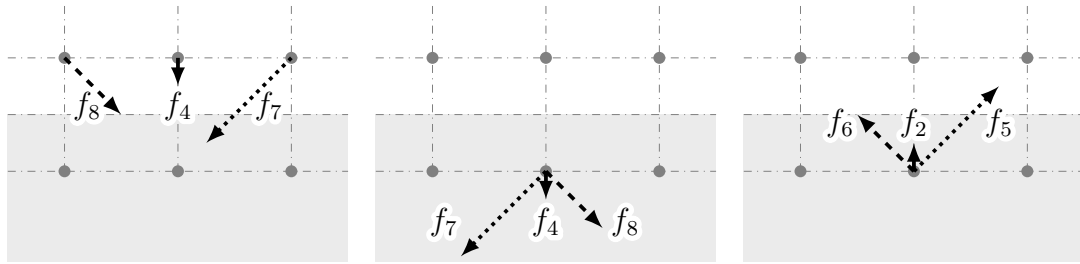


Abbildung 2.2: Anwendung des Bounceback-Schemas bei $y = 0$ für die $D2Q9$ Diskretisierung. Von links nach rechts strömen die Verteilungen zunächst in den Randpunkt, bevor die Randbedingung angewendet wird und sie den Randpunkt im Folgeschritt wieder verlassen. Die tatsächliche Position des Festkörpers liegt mittig zwischen Rand- und Fluidpunkt.

2.1.5 Algorithmus

Mit der Approximation der Gleichgewichtsverteilung (2.10) und den Momenten (2.11) lässt sich nun die Evolutionsgleichung (2.18) unter Verwendung eines Geschwindigkeitssatzes und entsprechender Randbedingungen lösen. Dies erfolgt in zwei separaten, aufeinanderfolgenden Schritten, wobei zunächst (im Kollisionsschritt) Veränderungen aufgrund des Kollisionstermes berechnet und in einer Zwischenvariablen

$$f_i^{\text{temp}} = f_i - \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{\text{eq}})$$

gespeichert werden. Handelt es sich um einen Randpunkt, wird statt der Kollisionsvorschrift die entsprechende Randbedingung angewendet. Erst im Anschluss werden die Verteilungen (im Strömungsschritt) entlang der Richtung i zu den entsprechenden Nachbarpunkten verschoben

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{\text{temp}},$$

wobei die Verwendung der Zwischenvariablen das Überschreiben bereits aktualisierter Informationen verhindert.

2.2 Approximation der makroskopischen Erhaltungsgleichungen

Der Grundalgorithmus der LBM ist damit vollständig, sodass nun nur noch gezeigt werden muss, dass dessen Lösung tatsächlich die NS-Gleichungen approximiert. Diese Verbindung wird in der Regel [20] mithilfe der sogenannten Chapman-Enskog-Analyse [18] hergestellt. Dabei handelt es sich um eine Multiskalenanalyse, bei der das Zusammenspiel von Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsanteilen beliebiger Verteilungsfunktionen auf unterschiedlichen zeitlichen Skalen separat untersucht wird.

Nach einigen algebraischen Umformungen können dann die NS-Gleichungen durch Rekombination der modifizierten, skalenseparierten Terme rekonstruiert werden. Da diese Herleitung lang, aber essentiell für das Verständnis der Methode und auch den weiteren Verlauf dieser Arbeit ist, wird sie in Anhang C für das bis zu diesem Punkt vorgestellte Basismodell beispielhaft durchgeführt. Der restliche Teil dieses Abschnitts beschränkt sich auf die Kernpunkte, die unmittelbar aus dieser Rechnung hervorgehen.

Für Kontinuumsströmungen [55] erfüllen die Momente der Verteilungen die kompressiblen NS-Gleichungen

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0, \\ \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\alpha p + \partial_\beta [\nu \rho (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)] \end{aligned} \quad (2.19)$$

mit der kinematischen Viskosität

$$\nu = \delta_t c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (2.20)$$

und dem makroskopischen Druck

$$p = c_s^2 \rho. \quad (2.21)$$

Während die kinematische Viskosität ν linear von der Relaxationszeit τ abhängt, folgt der Druck einer idealen Gasgleichung und kann somit lokal über die Dichte (und damit über die Verteilungen) ermittelt werden.

Eine der Chapman-Enskog-Analyse vorausgehende Taylorentwicklung der LBGK-Gleichung (2.18) führt zu einem Fehler zweiter Ordnung in der Zeit. Da der Zeitschritt über die mikroskopischen Geschwindigkeiten direkt mit der räumlichen Auflösung gekoppelt ist (siehe Gleichung (2.15)), impliziert dies einen Fehler zweiter Ordnung im Raum.

Hinzu kommt ein Fehlerterm dritter Ordnung in der Geschwindigkeit in der Impulsgleichung, welcher die LBM auf kleine Geschwindigkeiten und damit auf kleine Mach-Zahlen

$$Ma = \frac{|u_\alpha|}{c_s} \ll 1$$

beschränkt, welche wiederum ein Maß für die Kompressibilitätseinflüsse auf die Strömung [88] ist. Um diese Fehler gering zu halten, wird in der Praxis die maximale, dimensionslose Strömungsgeschwindigkeit meist auf 0.1 beschränkt [35, 171]. Aufgrund dieses Fehlers konvergiert die LBM nur im schwach-kompressiblen Grenzbereich gegen die kompressiblen NS-Gleichungen [20], ermöglicht aber das Auftreten von Schallwellen [87]. Unter Berücksichtigung der aufgeführten Einschränkungen ist die LBM also für die Durchführung numerischer Strömungssimulationen geeignet.

2.3 Dimensionslose Größen

Um die Konvergenzordnung des Verfahrens zu zeigen, wurden bis zu diesem Punkt alle Variablen dimensionsbehaftet betrachtet. Der Einfachheit halber werden jedoch bei der numerischen Berechnung einer Strömung in der Regel dimensionslose Größen verwendet, wobei die Simulation über Ähnlichkeitsparameter an die reale Problemstellung angepasst wird. Zusätzlich werden in der LBM (in den meisten Fällen) Zeitschritt δ_t und Maschenweite δ_x auf eins normiert, sodass sich sowohl die Gleichungen als auch die Implementierung erheblich vereinfachen lassen. Im Folgenden wird daher – wenn nicht explizit anders erwähnt – mit dimensionslosen Größen und *normierter* Zeitschritt- sowie Maschenweite gerechnet.

2.4 Anwendung auf beliebige Probleme

Bis zu diesem Punkt wurde die LBM für die Lösung der NS-Gleichungen vorgestellt, wobei ein physikalischer Zusammenhang zwischen den Momenten der Verteilungsfunktion und den Größen in den makroskopischen Erhaltungsgleichungen besteht. Darüber hinaus ist es jedoch auch möglich, Momente, Gleichgewichtsverteilung, Kollisionsoperator und Randbedingungen so umzudefinieren, dass durch Anwendung derselben Evolutionsgleichung beliebige, alternative Differentialgleichungen gelöst werden können [163]. In diesem Fall kann die Methode als allgemeingültiges Näherungsverfahren für beliebige Probleme interpretiert werden. So wurde sie bereits für die Lösung der Strahlungstransportgleichung [131], der Wellengleichung [49], der Advektions-Diffusions-Gleichung [132], der Burgers-Gleichung [196], der Flachwasser-Gleichungen [198] sowie der Maxwell-Gleichungen [43,129,195] genutzt. Shi et al. [163] konnten die Chapman-Enskog-Analyse erstmalig für beliebige nichtlineare Gleichungen verallgemeinern und unter anderem für die Lösung der Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung und der Korteweg-de Vries-Kawahara-Gleichung einsetzen. Um das Prinzip zu verdeutlichen, wird in Anhang D das Verfahren für die Lösung der Diffusionsgleichung mit variablem Koeffizienten exemplarisch durchgeführt.

Auch wenn die LBM hauptsächlich für Probleme der Strömungsmechanik eingesetzt wird, zeigt dies das enorme Potential der Methode und warum sie bis heute auch über rein strömungsmechanische Fragestellungen hinaus ein aktives Feld der Forschung bildet [168].

2.5 Software

Der gesamte in dieser Arbeit entwickelte Code basiert auf der, unter der *open-source AGPLv3* Lizenz frei verfügbaren, Software *Palabos* (Version 1.5r1) [23]. Dabei handelt es sich um eine MPI-parallelisierte C++-Bibliothek mit umfangreicher Funktionalität.

lität für die Durchführung von Simulationen mit der LBM. Sie beinhaltet verschiedene Kollisions-, Turbulenz- und Mehrphasenmodelle (auch eine Basisimplementierung des in dieser Arbeit verwendeten Pseudopotentialmodells) sowie zahlreiche *Pre-* und *Postprocessing*-Anwendungen (Ausgabe *.vtk* und *.gif*, Checkpointing, Gittergenerierung). Die Bibliothek wurde für mehr als 100 Publikationen eingesetzt und wird durch die Firma *FlowKit* kontinuierlich weiterentwickelt.

2.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die LBM als Näherungsverfahren für partielle Differentialgleichungen mit Fokus auf den makroskopischen NS-Gleichungen vorgestellt. Da die Herleitung mathematisch anspruchsvoll ist und die Grundidee der Approximation einer Differentialgleichung durch die Lösung einer anderen umständlich erscheinen mag, wird im Folgenden kurz auf Vor- und Nachteile der LBM eingegangen.

- + Das in Abschnitt 2.1.5 vorgestellte Iterationsverfahren löst die LBGK-Gleichung in zwei separaten, aufeinanderfolgenden Schritten. Da der *nichtlineare* Kollisionsterm nur lokale Größen enthält und der *lineare* Strömungsschritt auf die unmittelbare Nachbarschaft eines Gitterpunktes beschränkt ist, eignet sich das Verfahren sehr gut für die Berechnung auf Parallelrechnern [2].
- + Während die Bestimmung des makroskopischen Drucks beim direkten Berechnen der *inkompressiblen* NS-Gleichungen die (numerische) Lösung einer zusätzlichen Poisson-Gleichung erfordert [36], ist dieser in der LBM über eine ideale Zustandsgleichung (2.21) direkt mit der Dichte verknüpft. Dadurch kann der Druck lokal aus den Verteilungsfunktionen gewonnen werden.
- + Als Folge der Kopplung von Zeitschritt und Maschenweite über die konstanten, mikroskopischen Geschwindigkeiten wird der Advektionsterm im Strömungsschritt exakt gelöst [178]. Dieser verschiebt die Verteilungen lediglich entlang der charakteristischen Richtungen zu den unmittelbaren Nachbarn und kann somit sehr effizient implementiert werden.
- + Der Methode liegt eine partikelbasierte Betrachtung zugrunde, sodass Teilcheninteraktionen berücksichtigt werden können [158]. Da diese die Ursache für die Entstehung von Grenzflächen zwischen verschiedenen Komponenten sind, eignet sich die LBM besonders für die Darstellung von Mehrphasenströmungen [110].
- Es ist nötig, an jedem Gitterpunkt für jede mikroskopische Geschwindigkeit Speicherplatz für eine Verteilungsfunktion zu reservieren, sodass (je nach räumlicher Dimension) im Vergleich zu direkten Diskretisierungen der NS-Gleichungen ein Vielfaches an Speicher nötig ist. Dies ist besonders nachteilig bei dem Einsatz von Mehrschrittverfahren [164].

- Durch Anwendung der LBGK-Gleichung (2.18) wird die Lösung grundsätzlich in festen Zeitschritten aktualisiert. Die LBM ist damit inhärent transient und folglich nur bedingt für stationäre Probleme geeignet [168]. Mittels Prädiktionierung [52] kann das Konvergenzverhalten für diese Fälle jedoch erheblich verbessert werden [76].
- Der Strömungsschritt beschränkt die LBM auf reguläre Gitter, sodass einerseits die kleinsten Strukturen die Gesamtauflösung festlegen und andererseits irreguläre Geometrien nur gestuft dargestellt werden können. Um dies zu umgehen, können entweder lokale Gitterverfeinerungen [175, 186] oder sogenannte *off-lattice* Verfahren [85] genutzt werden, welche den einfachen, exakten Strömungsschritt durch die numerische Lösung einer Advektionsgleichung ersetzen und damit die Verwendung unstrukturierter Gitter ermöglichen.

Trotz der Nachteile hat sich die LBM seit ihrer Einführung als konkurrenzfähiges Verfahren etabliert, was sich in der Vielzahl an sowohl frei verfügbarer (Palabos [23], OpenLB [86], Musubi [56], Sailfish [126], Taxila LBM [27]) als auch kommerzieller Software (PowerFLOW, XFlow, ultraFluidX, M-Star CFD) widerspiegelt. Hauptgründe für ihren Erfolg sind die einfache Iterationsvorschrift (die trotz ihrer Einfachheit zu einer relativ hohen Ordnung führt), die gute Parallelisierbarkeit und (vor allem auch für den weiteren Verlauf dieser Arbeit) ihre besondere Eignung für Mehrphasensysteme.

3 Pseudopotentialmodelle für Mehrphasenströmungen

„Die einfachsten Dinge führen oft zu einem komplizierten Ende.“

– Katharina Eisenlöffel

Das PP-Modell ist eine Erweiterung der Standard LBM für Mehrphasenströmungen und wurde 1993 von Xiaowen Shan und Hudong Chen [158] entwickelt (daher häufig als *Shan-Chen-Modell* (SC) bezeichnet). Es beruht auf der Annahme, dass die charakteristischen Prozesse derartiger Strömungen (beispielsweise die Ausprägung von Grenzflächen zwischen Phasen oder Änderungen des Aggregatzustands eines Stoffes) das Resultat molekularer Wechselwirkungen sind. Anders als bei rein molekulardynamischen Ansätzen, bei denen Moleküle aufgrund einer Vielzahl unterschiedlicher Potentiale miteinander interagieren, berücksichtigt das Modell nur den Einfluss einer (pseudo-)potentialbasierten Interaktionskraft auf eine Verteilung von Teilchen. Molekulare Wechselwirkungen werden also nur stark vergrößert betrachtet, sodass sich die Bezeichnung *Pseudopotential-Modell* durchgesetzt hat [110].

Dieser Ansatz ermöglicht die Darstellung einer Vielzahl unterschiedlicher Mehrphasensysteme [19] und lässt sich zudem direkt mit physikalischen Phänomenen koppeln, welche durch zusätzliche Feldterme ausgedrückt werden können (beispielsweise in der Elektrohydrodynamik [113, 195]).

Das Anwendungsspektrum des Modells kann grob in drei Kategorien eingeteilt werden:

- i) Einstoffsysteme, in denen Änderungen des Aggregatzustandes erfolgen können, beispielsweise Verdampfung und Kondensation [82, 159, 189]. Derartige Strömungen werden in der Regel (und auch im Folgenden dieser Arbeit) als **SCMP** (engl. *Single-Component-Multiphase* „Einstoff-Mehrphasen“-)Systeme bezeichnet [19, 45, 171].
- ii) Mehrstoffsysteme mit unterschiedlichen, chemischen Substanzen des *gleichen*

Aggregatzustandes (gasförmig oder flüssig), deren Fließverhalten ausschließlich durch Diffusionsprozesse beeinflusst wird [114, 160, 161]. Diese werden üblicherweise (und auch im Folgenden dieser Arbeit) als **MCMP** (engl. *Multicomponent-Multiphase* „Mehrstoff-Mehrphasen“-) Systeme bezeichnet [7, 171, 194].

iii) Kombinationen der beiden [7, 117, 166].

Diese Spezialisierungen ergeben sich aus einer allgemeinen Formulierung des Modells, unterscheiden sich aber erheblich in ihrer Modellierung und den auftretenden physikalischen Effekten. Daher wird im Folgenden zunächst der Basis-Algorithmus der LBM durch die Einbindung der allgemeinen Formulierung der Interaktionskraft erweitert. Anschließend wird auf Besonderheiten bei der numerischen Berechnung dieser Kraft eingegangen, bevor sie für die Fälle i) und ii) detailliert wird. Darauf folgend wird erläutert, wie die Interaktionskraft in die Evolutionsgleichung der LBM eingebracht werden kann und welche Auswirkungen dies auf die approximierten makroskopischen Gleichungen hat. Es wird auf die Entstehung sogenannter Scheingeschwindigkeiten eingegangen (diskretisierungsbedingte, unphysikalische Geschwindigkeiten, welche die Dynamik verfälschen) und gezeigt, wie diese durch Anwendung unterschiedlicher Maßnahmen reduziert werden können. Im Anschluss wird auf die Modellierung der Benetzungseigenschaften von Festkörperoberflächen eingegangen und eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelt *neuartige Methode* vorgestellt, mit der die Entstehung unphysikalischer Fluid-Festkörper-Grenzflächen und von Scheintröpfchen vermieden werden kann.

3.1 Allgemeine Formulierung

Für ein System mit $k = 1, \dots, N$ chemischen Komponenten wird eine Interaktionskraft

$$F_{k,\alpha}^{\text{SC}} = -\Psi_k \sum_{\bar{k}=1}^N \mathcal{G}_{k\bar{k}} \sum_i \mathcal{W}_i \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} \quad (3.1)$$

definiert, welche so in die Evolutionsgleichung eingebracht wird, dass sie als Volumenkraft \mathbf{F}_k in der Impulsgleichung auftaucht und so die makroskopische Dynamik verändert [53]. Sie modelliert Interaktionen zwischen Komponente k am Gitterpunkt \mathbf{x} und allen Komponenten \bar{k} an den Nachbarnpunkten $\mathbf{x} + \mathbf{C}_i$. In dieser allgemeinen Form existieren Terme für $k \neq \bar{k}$, welche zwischen verschiedenen Komponenten wirken [160], und jeweils ein Term für $k = \bar{k}$, welcher kohäsive Kräfte innerhalb einer Komponente repräsentiert [159]. Der numerische Parameter $\mathcal{G}_{k\bar{k}} = \mathcal{G}_{\bar{k}k}$ reguliert Stärke und Richtung (attraktiv oder repulsiv) der jeweiligen Kräfte [158]. Über die frei wählbare Potentialfunktion $\Psi_k(\mathbf{x}) = \Psi[\rho_k(\mathbf{x})]$ wird das Interaktionspotential eines Stoffs modelliert (auch *Pseudopotentialfunktion* [191], *effektive Masse* [19, 158] oder

Pseudopotential [9, 33]).

Die Gewichte \mathcal{W}_i und Verschiebungsvektoren \mathbf{C}_i sind so zu wählen, dass die innere Summe \sum_i einer Finite-Differenzen-Approximation des Gradienten der Potentialfunktion $\Psi_{\bar{k}}$ entspricht. Je nach Anzahl einbezogener Nachbarpunkte, können die räumliche Ordnung und die Ordnung der Isotropie dieser Approximation erhöht werden [185]. Da die Diskretisierung dieses Gradienten einen erheblichen Einfluss auf die Stabilität [141] und die Genauigkeit [151, 156] des Modells hat, werden Finite-Differenzen höherer Isotropie in Abschnitt 3.1.1 vorgestellt.

Unter Berücksichtigung der Interaktionskraft wird dann für jede Komponente k eine modifizierte (dimensionslose) LBGK-Gleichung

$$\boxed{f_{i,k}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_{i,k} - \frac{1}{\tau_k} [f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}(\mathbf{u}_k^{\text{eq}})] + S_{i,k}} \quad (3.2)$$

mit zusätzlichem Quellterm $S_{i,k}$ gelöst. Dabei können die Interaktionskräfte (sowie beliebige Volumenkräfte) entweder rein über eine modifizierte Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}_k^{eq} , rein über den zusätzlichen Quellterm oder über eine Kombination der beiden in die Gleichung eingebracht werden [51, 53]. Die Art dieser Krafteinbindung wird als Kräfteschema (engl. *forcing scheme*) bezeichnet und ist ebenfalls von zentraler Bedeutung für Genauigkeit und Stabilität des Modells. Die in dieser Arbeit verwendeten Kräfteschemata werden daher in Abschnitt 3.1.4 vorgestellt.

3.1.1 Isotrope Finite-Differenzen

In den meisten Arbeiten zum Pseudopotentialmodell werden für die Finite-Differenzen-Approximation in Gleichung (3.1) die Vektoren und Gewichte des Geschwindigkeitssatzes verwendet [26, 70, 71, 78]. In diesem Fall gilt $\mathcal{W}_i = w_i$ und $\mathbf{C}_i = \mathbf{e}_i \delta_t$, sodass eine Taylorentwicklung der inneren Summe in Gleichung (3.1)

$$\begin{aligned} \sum_i w_i \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) e_{i,\alpha} \delta_t &= \delta_t \Psi_{\bar{k}} \underbrace{\sum_i w_i e_{i,\alpha}}_{=\mathcal{E}_{\alpha}^{(1)}} + \delta_t^2 \partial_{\beta} \Psi_{\bar{k}} \underbrace{\sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta}}_{\mathcal{E}_{\alpha\beta}^{(2)}} \\ &+ \frac{\delta_t^3}{2} \partial_{\beta} \partial_{\gamma} \Psi_{\bar{k}} \underbrace{\sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma}}_{\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}} \\ &+ \frac{\delta_t^4}{6} \partial_{\beta} \partial_{\gamma} \partial_{\delta} \Psi_{\bar{k}} \underbrace{\sum_i w_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} e_{i,\delta}}_{\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}} + \mathcal{O}(\delta_t^5) \end{aligned} \quad (3.3)$$

liefert (um die Ordnung der Approximation zu zeigen, werden in *diesem* Abschnitt der *nicht-normierte* Zeitschritt beziehungsweise die *nicht-normierte* Maschenweite

verwendet). Mit den Isotropiebedingungen (2.14) ergibt dies

$$\sum_i w_i \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) e_{i,\alpha} \delta_t = c_s^2 \delta_t^2 \partial_\alpha \Psi_{\bar{k}} + \frac{\delta_t^4 c_s^4}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\beta \Psi_{\bar{k}} + \mathcal{O}(\delta_t^6)$$

und dementsprechend eine Finite-Differenzen-Formel

$$\frac{1}{\delta_t} \sum_i w_i \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) e_{i,\alpha} = c_s^2 \partial_\alpha \Psi_{\bar{k}} + \mathcal{O}(\delta_t^2)$$

für den Gradienten der Potentialfunktion, wobei Folgendes hervorzuheben ist:

- i) Da der Zeitschritt mit der räumlichen Auflösung gekoppelt ist (siehe Gleichung (2.15)), entsteht ein Fehler zweiter Ordnung im Raum. Fehlerterme höherer Ordnung wiederum enthalten Gittertensoren höherer Ordnung, welche beispielsweise bei Verwendung des *D2Q9* Geschwindigkeitssatzes bis zur Ordnung vier isotrop sind, darüber hinaus aber anisotrope Anteile enthalten [151]. Um die Isotropiebedingungen für Gittertensoren höherer Ordnung erfüllen zu können, muss die Anzahl einbezogener Punkte schichtweise erhöht werden, wobei Vektoren \mathbf{C}_i gleichen Abstands das gleiche Gewicht $\mathcal{W}_i = \mathcal{W}(|\mathbf{C}_i|^2)$ erhalten [156].
- ii) Der Gradient ist mit der Gitterkonstanten c_s^2 skaliert, was auf die skalierten Quadraturpunkte \mathbf{e}_i (also auf das reguläre Gitter) zurückzuführen ist. Um dies zu umgehen, werden die Gewichte in einigen Arbeiten mit c_s^2 normiert [151, 156], was zu einem entsprechenden Versatz in allen makroskopischen Größen führt, welche direkt von der Interaktionskraft (beziehungsweise der Gradientenberechnung) abhängen. Zwecks Klarheit werden daher an dieser Stelle die normierten Gewichte

$$\boxed{\mathcal{W}_i^* = \frac{\mathcal{W}_i}{c_s^2}} \quad (3.4)$$

eingeführt. Für die in dieser Arbeit verwendeten Gitter sind die skalierten Gewichte \mathcal{W}_i gegenüber den normierten Gewichten \mathcal{W}_i^* – beispielsweise aus den Referenzen [133, 151, 156] – mit dem Faktor $c_s^2 = 1/3$ skaliert (für alle kubischen Gitter, für hexagonale Gitter gilt beispielsweise $c_s^2 = 1/4$ [162]). Bei Vergleichen ist daher stets auf die verwendeten Gewichte zu achten (der Großteil der Literatur verwendet skalierte Gewichte).

Die *normierten* Gewichte für Diskretisierungen unterschiedlicher Ordnung in der Isotropie sind in Tabelle 3.1 aufgelistet.

- iii) Die zusätzlichen Gewichte dienen ausschließlich der Steigerung der Isotropie, sodass *alle aufgelisteten Finite-Differenzen-Approximationen zweiter Ordnung im Raum* sind. Wie sich zeigen wird, können numerische Artefakte durch die Verwendung von Diskretisierungen gesteigerter Isotropie reduziert werden.

- iv) Der Geschwindigkeitssatz (\mathbf{e}_i und w_i) und die Koeffizientensätze der Finite-Differenzen-Approximation (\mathcal{C}_i und \mathcal{W}_i) müssen nicht übereinstimmen, weshalb in dieser Arbeit unterschiedliche Variablen verwendet werden.
- v) Aufgrund der Multiplikation mit dem Verschiebungsvektor tritt in der kontinuierlichen Form der Interaktionskraft kein Gittertensor $\mathcal{E}^{(0)}$ auf, sodass die entsprechende Isotropiebedingung nullter Ordnung nicht erfüllt sein muss (siehe Gleichung (3.3)).
- vi) Die Ordnung der Isotropie einer Diskretisierung ist durch den höchsten isotropen Gittertensor gegeben, welcher für die Ordnung n , n -dimensional ist. Der Übersichtlichkeit halber werden zur Angabe des Isotropiegrades im Folgenden die griechischen Indizes für die Tensor Dimensionen vernachlässigt, also $\mathcal{E}^{(4)}$ statt $\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ angegeben.

Tabelle 3.1: Normierte Gewichte $\mathcal{W}_i^* = \mathcal{W}^* (|\mathcal{C}_i|^2)$ für Finite-Differenzen-Approximationen in 2D (links) und 3D (rechts) aus Referenz [151]. Die Ordnung der Isotropie wird durch den höchsten isotropen Gittertensor angegeben (Dimension vernachlässigt). Aufgrund der Multiplikation mit \mathcal{C}_i entfällt der Nullvektor.

Grad	$\mathcal{E}^{(4)}$	$\mathcal{E}^{(6)}$	$\mathcal{E}^{(8)}$	$\mathcal{E}^{(10)}$	Grad	$\mathcal{E}^{(4)}$	$\mathcal{E}^{(6)}$	$\mathcal{E}^{(8)}$
Anzahl	8	12	24	36	Anzahl	18	32	92
\mathcal{W}_1^*	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{15}$	$\frac{4}{21}$	$\frac{262}{1785}$	\mathcal{W}_1^*	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{4}{45}$
\mathcal{W}_2^*	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{4}{45}$	$\frac{93}{1190}$	\mathcal{W}_2^*	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{2}{21}$
\mathcal{W}_4^*		$\frac{1}{120}$	$\frac{1}{60}$	$\frac{7}{340}$	\mathcal{W}_3^*		$\frac{1}{60}$	$\frac{2}{105}$
\mathcal{W}_5^*			$\frac{2}{315}$	$\frac{6}{595}$	\mathcal{W}_4^*		$\frac{1}{120}$	$\frac{5}{504}$
\mathcal{W}_8^*			$\frac{1}{5040}$	$\frac{9}{9520}$	\mathcal{W}_5^*			$\frac{1}{315}$
\mathcal{W}_9^*				$\frac{2}{5355}$	\mathcal{W}_6^*			$\frac{1}{630}$
\mathcal{W}_{10}^*				$\frac{1}{7140}$	\mathcal{W}_8^*			$\frac{1}{5040}$

Unter Berücksichtigung dieser Punkte und Verwendung der dimensionslosen, normierten Zeitschritt- und Maschenweite lässt sich die geläufige Finite-Differenzen-Approximation als

$$\boxed{\sum_i \mathcal{W}_i \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathcal{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} = c_s^2 \partial_\alpha \Psi_{\bar{k}}} \quad (3.5)$$

formulieren [72, 78, 192].

Während die räumliche Ordnung einer Finite-Differenzen-Formel angibt, wie sich der *betragliche* Fehler mit der Auflösung eines Problems verändert, gibt die Ordnung

der Isotropie an, bis zu welcher Ordnung die Fehlerterme isotrop sind. Es handelt sich also um eine Eigenschaft der vorhandenen Fehlerterme, die angibt, wie sich der *Richtungsfehler* bei der Berechnung eines isotropen Problems mit der Auflösung verändert. Im Gegensatz zur räumlichen Ordnung einer diskreten Ableitung, welche nur durch Einbeziehen weiterer Nachbarpunkte *entlang der entsprechenden Richtung* erfolgen kann, kann die Isotropie-Ordnung nur durch weitere Richtungsfreiheitsgrade erhöht werden. Um sie zu messen, wird beispielsweise in den Referenzen [100,101] der Winkelfehler bei der Berechnung einer rotierten, sinusoidalen Funktion erfasst. Damit ist die Diskretisierung der Interaktionskraft abgeschlossen, sodass diese nun für SCMP- und MCMP-Systeme detailliert werden kann.

3.1.2 Einstoff-Mehrphasen-Systeme (SCMP)

Bei Betrachtung eines einzelnen Stoffs reduziert sich die Interaktionskraft (unter Vernachlässigung des Komponentenindex und $\mathcal{G}_{kk} = \mathcal{G}$) auf den kohäsiven Term

$$F_{\alpha}^{\text{SC}} = -\Psi \mathcal{G} \sum_i \mathcal{W}_i \Psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha}. \quad (3.6)$$

In diesem Fall wird entsprechend der einen Komponente auch nur eine Evolutionsgleichung (3.2) gelöst, sodass die Momente die makroskopischen Gleichungen

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_{\alpha} (\rho u_{\alpha}^{\text{p}}) &= 0, \\ \partial_t (\rho u_{\alpha}^{\text{p}}) + \partial_{\beta} (\rho u_{\alpha}^{\text{p}} u_{\beta}^{\text{p}}) &= -\partial_{\alpha} (\rho c_s^2) + \partial_{\beta} [\mu (\partial_{\beta} u_{\alpha}^{\text{p}} + \partial_{\alpha} u_{\beta}^{\text{p}})] + F_{\alpha}^{\text{SC}} \end{aligned}$$

approximieren. Zur Erhöhung der Genauigkeit wird dabei *in Abhängigkeit des Kräfteschemas* eine kraftkorrigierte physikalische Geschwindigkeit \mathbf{u}^{p} definiert (Details in Abschnitt 3.1.4). Die Interaktionskraft kann dann mit dem idealen Druckterm mittels

$$\begin{aligned} -\partial_{\beta} \mathcal{P}_{\alpha\beta} &= -\partial_{\alpha} (\rho c_s^2) + F_{\alpha}^{\text{SC}} \\ &= -\partial_{\beta} (\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + F_{\alpha}^{\text{SC}} \end{aligned} \quad (3.7)$$

zu einem modifizierten Drucktensor $\mathcal{P}_{\alpha\beta}$ kombiniert werden, welcher schließlich mit der bekannten Form des Drucktensors für SCMP-Strömungen aus Referenz [3] verglichen werden kann, um die thermodynamischen Eigenschaften des Modells zu bestimmen [70, 121]. Im Folgenden wird daher die Interaktionskraft in mehreren Schritten umgeformt und der Drucktensor hergeleitet.

Unter Verwendung der in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten skalierten Gewichte \mathcal{W}_i kann die Interaktionskraft durch

$$F_{\alpha}^{\text{SC}} = -\mathcal{G} c_s^2 \Psi \partial_{\alpha} \Psi - \mathcal{G} \frac{c_s^4}{2} \Psi \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \partial_{\beta} \Psi \quad (3.8)$$

approximiert werden, was sich durch Anwendung der Produktregel für die Terme

$$\begin{aligned}\Psi \partial_\alpha \Psi &= \frac{1}{2} \partial_\alpha \Psi^2, \\ \partial_\alpha (\Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi) &= \Psi \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\beta \Psi + \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi\end{aligned}$$

zu

$$F_\alpha^{\text{SC}} = -\frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \left\{ \partial_\alpha \Psi^2 + c_s^2 [\partial_\alpha (\Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi) - \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi] \right\}$$

umformulieren lässt. Durch Hinzufügen des Terms

$$\frac{1}{2} \partial_\alpha |\partial_\beta \Psi|^2 - \partial_\beta \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi = 0$$

ergibt sich

$$F_\alpha^{\text{SC}} = -\frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \left\{ \partial_\alpha \Psi^2 + c_s^2 \left[\partial_\alpha (\Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi) + \frac{1}{2} \partial_\alpha |\partial_\beta \Psi|^2 - \partial_\beta \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi - \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi \right] \right\},$$

was durch erneutes Anwenden der Produktregel für den Term

$$\partial_\beta (\partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi) = \partial_\beta \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi + \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi$$

schließlich zu

$$F_\alpha^{\text{SC}} = -\frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \left\{ \partial_\alpha \Psi^2 + c_s^2 \left[\partial_\alpha (\Psi \partial_\beta \partial_\beta \Psi) + \frac{1}{2} \partial_\alpha |\partial_\beta \Psi|^2 \right] \right\} + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \partial_\beta (\partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi) \quad (3.9)$$

führt. Das Einsetzen dieses Ausdrucks in Gleichung (3.7) ergibt

$$-\partial_\beta \mathcal{P}_{\alpha\beta} = -\partial_\beta \left[\left(c_s^2 \rho + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \Psi \partial_\gamma \partial_\gamma \Psi + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} |\partial_\gamma \Psi|^2 \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi \right]$$

und nach Integration schließlich den Drucktensor

$$\boxed{\mathcal{P}_{\alpha\beta} = \left(c_s^2 \rho + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \Psi \partial_\gamma \partial_\gamma \Psi + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} |\partial_\gamma \Psi|^2 \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi.} \quad (3.10)$$

Ein Vergleich mit dem Drucktensor aus den Referenzen [3, 48]

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta} = \left(p - \mathcal{K} \rho \partial_\gamma \partial_\gamma \rho - \frac{1}{2} \mathcal{K} |\partial_\gamma \rho|^2 \right) \delta_{\alpha\beta} + \mathcal{K} \partial_\alpha \rho \partial_\beta \rho$$

zeigt, dass der thermodynamische Druck einer nicht-idealen Zustandsgleichung

$$p = c_s^2 \left(\rho + \frac{\mathcal{G}}{2} \Psi^2 \right) \quad (3.11)$$

folgt und der Oberflächenspannungskoeffizient

$$\mathcal{K} = -\frac{c_s^4 \mathcal{G}}{2} \quad (3.12)$$

dem Vorfaktor der dritten Ableitungen in der Interaktionskraft (3.8) entspricht. Zudem sind die Ausdrücke nur zueinander konsistent wenn $\Psi \propto \rho$ gilt [93, 151].

Damit sind die grundlegenden Eigenschaften des Modells für SCMP-Systeme geschaffen. Bei geeigneter Parametrisierung der Zustandsgleichung (3.11) kann ein Stoff unter subkritischen Bedingungen simuliert werden, sodass sich gleichzeitig eine Flüssig- und eine Dampfphase ausprägen oder bei Variation der Temperatur Änderungen des Aggregatzustandes erfolgen können. Dieser Prozess wird im Folgenden am Beispiel einer Phasentrennungssimulation gezeigt.

3.1.2.1 Simulation Phasentrennung

In einer Phasentrennungssimulation bildet sich aus einer zunächst homogenen Dichteverteilung mit geringer, zufälliger Störung ein flüssiger, kreisrunder Tropfen höherer Dichte $\rho_{\text{flüssig}}$, der von einer kontinuierlichen Dampfphase niedrigerer Dichte ρ_{Dampf} umgeben ist [171]. Das Ergebnis einer derartigen Simulation ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Der ablaufende Prozess lässt sich auf zwei Arten erklären:

- a) Phänomenologisch über die Interaktionskraft (3.6) und
- b) thermodynamisch über die nicht-ideale Zustandsgleichung (3.11).

Zu a): Die Interaktionskraft skaliert mit dem Potentialgradienten und, da $\Psi = \Psi[\rho(\mathbf{x})]$, mit der Dichteänderung. Da sie in diesem Beispiel attraktiv wirkt ($\mathcal{G} < 0$), transportiert sie Masse entlang des Gradienten hin zu Gitterpunkten höherer Dichte und fällt in Bereichen konstanter Dichte auf Null ab. Folglich reichert sich um eine positive Störung herum Masse in Form einer Flüssigphase an, während in der Umgebung eine zweite (Dampf-)Phase niedrigerer Dichte zurückbleibt.

Zu b): Die nicht-ideale Zustandsgleichung hängt von der Form der Potentialfunktion ab, wobei der Parameter $\mathcal{G} \sim 1/T$ die Rolle einer Temperatur übernimmt [158]. Damit kann der kritische Punkt in allgemeingültiger Form durch

$$\begin{aligned} \partial_\rho p &= 1 + \mathcal{G}\Psi\partial_\rho\Psi \stackrel{!}{=} 0, \\ \partial_\rho^2 p &= \Psi\partial_\rho^2\Psi + (\partial_\rho\Psi)^2 \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

ausgedrückt werden [93]. Für die in diesem Beispiel verwendete Potentialfunktion $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$ führt dies zu den kritischen Parametern

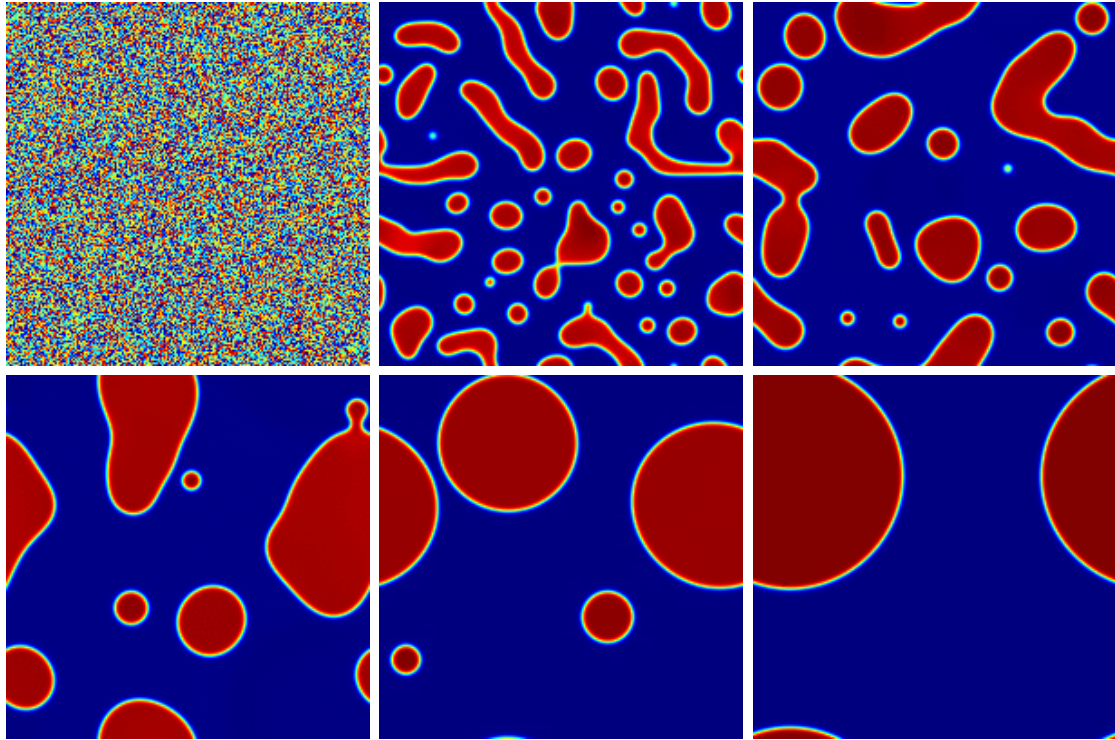


Abbildung 3.1: Zweidimensionale Phasentrennungssimulation (subkritisch) in einem doppelt-periodischen Rechengebiet mit 201×201 Gitterpunkten für $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$ und $\mathcal{G} = -5$. Die kritischen Werte betragen für diese Potentialfunktion $\rho_{\text{krit}} = \log(2)$ und $\mathcal{G}_{\text{krit}} = -4$. Die Simulation wurde mit $\rho_{\text{init}} = \rho_{\text{krit}} \pm 0.1\%$ bei $\mathbf{u} = 0$ im Gleichgewicht initialisiert. Von links nach rechts sind die Zeitschritte $t = 0, 400, 800$ (oben) und $t = 2000, 10000, 50000$ (unten) dargestellt.

$\rho_{\text{krit}} = \rho_0 \log(2) = \log(2)$ und $\mathcal{G}_{\text{krit}} = -4/\rho_0 = -4$, sodass $\mathcal{G} = -5$ einer subkritischen Temperatur entspricht und eine Flüssig- und eine Dampfphase koexistieren.

Werden nun geeignete Anfangsbedingungen gewählt, entfällt die Äquilibration der Dichteverteilung und es können zweiphasige Einstoffsysteme simuliert werden, wobei sich die einzelnen Phasen grundsätzlich in ihrer Dichte unterscheiden.

3.1.2.2 Eigenschaften, Vor- und Nachteile

Im Vorangegangenen wurden die wichtigsten Eigenschaften des PP-Modells für SCMP-Systeme vorgestellt. Der Vollständigkeit halber werden im Folgenden kurz weitere Eigenschaften sowie Vor- und Nachteile dieser Spezialisierung des Modells aufgelistet.

- + Die Grenzfläche zwischen zwei Phasen ist das Resultat der Interaktionskraft, sodass sie nicht gesondert verfolgt werden muss [83], wie es beispielsweise bei sogenannten *Front-Tracking-Methoden* der Fall ist [95, 176].

- + Durch Auflösen des nicht-idealen Drucks (3.11) nach der Potentialfunktion

$$\Psi = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_s^2 \mathcal{G}}}$$

können bei Einsatz eines entsprechenden Ausdrucks für p beliebige thermodynamische Zustandsgleichungen vorgegeben werden [82, 189]. In diesem Fall ist der Betrag von \mathcal{G} ohne Bedeutung, lediglich das Vorzeichen muss so gewählt werden, dass der Radikand positiv ist. Die Temperatur ist dann ein freier Parameter der Zustandsgleichung.

Da jede Potentialfunktion nur bis zu einem kritischen Dichteverhältnis $\rho_{\text{flüssig}}/\rho_{\text{Dampf}}$ stabil ist [19], muss je nach Anwendung eine geeignete Form gewählt werden. So ist es beispielsweise bei Verwendung der Carnahan-Starling- oder der Peng-Robinson-Gleichung möglich, Dichteverhältnisse im Größenordnungsbereich 1000 : 1 abzubilden und so beispielsweise Wasser-Luft-Systeme zu simulieren [7, 189].

- + Ist das Dichteverhältnis zwischen Flüssigkeit und Dampf sehr groß, können mit dieser Spezialisierung des Modells Systeme mit freien Oberflächen simuliert werden. In diesem Fall ist die Strömung durch die Eigenschaften der Flüssigphase charakterisiert, sodass die (nicht unabhängig veränderbaren) Eigenschaften der Dampfphase vernachlässigbar sind. Da derartige Strömungen in einer Vielzahl von Anwendungen auftreten, beispielsweise in Zerstäubungsprozessen von Einspritzanlagen [16] oder Electrowetting-Anwendungen [22], wird primär diese Vereinfachung des Modells verwendet [179].
- Dampf- und Flüssigphase unterscheiden sich ausschließlich in ihrer Dichte und sind durch einen mehrere Gitterpunkte breiten Übergangsbereich – einer diffusiven Grenzfläche – voneinander getrennt [73, 108, 155]. In der Realität ist diese Grenzfläche wenige Ångström breit [12, 119], was in einer Simulation nicht aufgelöst werden kann und damit zu einer Verfälschung der Strömungscharakteristiken führt.
- Der Parameter \mathcal{G} ist über die Zustandsgleichung (3.11) mit der Temperatur verknüpft und bestimmt zudem den Oberflächenspannungskoeffizienten (3.12) (jeweils die Terme erster und dritter Ordnung). Gleichgewichtsdichten und Oberflächenspannung sind also fälschlicherweise miteinander gekoppelt. Um diese Größen voneinander zu lösen, können jedoch geeignete Kräfteschemata verwendet [123] oder verschieden gewichtete, unterschiedliche Diskretisierungen der Interaktionskraft miteinander kombiniert werden [67–69, 92].
- Die Äquilibration eines Systems mit anfänglich vielen (beispielsweise flüssigen) Tropfen resultiert immer in einer zusammenhängenden Flüssigphase. Einerseits verschmelzen dabei Teilgebiete bei Kontakt miteinander (physikalisch), andererseits lösen sich kleine Tropfen auf, wenn Größere vorhanden sind. Dieses

Phänomen wurde in den Referenzen [44, 45] erstmalig systematisch untersucht, die Ursachen konnten jedoch noch nicht eindeutig identifiziert werden.

Damit ist die Einführung des PP-Modells für SCMP-Systeme abgeschlossen. Im Folgenden wird das Modell für MCMP-Systeme präsentiert.

3.1.3 Mehrstoff-Mehrphasen-Systeme (MCMP)

Eine weitere, gängige Spezialisierung des Modells bilden MCMP-Strömungen [114, 124, 141, 160, 161]. Dabei werden die kohäsiven Kräfte für $k = \bar{k}$ vernachlässigt und nur die zwischen den Komponenten wirkenden Kräfte

$$F_{k,\alpha}^{\text{SC}} = -\Psi_k \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq \bar{k}}}^N \mathcal{G}_{k\bar{k}} \sum_i \mathcal{W}_i \Psi_{\bar{k}} (\mathbf{x} + \mathcal{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} \quad (3.13)$$

berücksichtigt und pro Komponente eine Evolutionsgleichung (3.2) gelöst. Die Interaktionskraft koppelt die einzelnen Gleichungen miteinander, sodass die Momente die makroskopischen Gleichungen

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^{\text{m}} + \partial_\alpha (\rho^{\text{m}} u_\alpha^{\text{m}}) &= 0, \\ \partial_t (\rho^{\text{m}} u_\alpha^{\text{m}}) + \partial_\beta (\rho^{\text{m}} u_\alpha^{\text{m}} u_\beta^{\text{m}}) &= -\partial_\alpha p + \partial_\beta [\mu^{\text{m}} (\partial_\alpha u_\beta^{\text{m}} + \partial_\beta u_\alpha^{\text{m}})], \\ \partial_t \rho_k + \partial_\alpha (\rho_k u_\alpha^{\text{m}}) &= -\partial_\alpha \sum_{l=1}^N \mathcal{D}_{kl} \partial_\alpha \rho_l = -\partial_\alpha j_{k,\alpha} \end{aligned}$$

approximieren [160, 161]. Das Fließverhalten *des Gemisches* wird in diesem Fall durch die NS-Gleichungen mit Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^{m} , Mischdichte $\rho^{\text{m}} = \sum_k \rho_k$, Komponentendichte $\rho_k = \sum_i f_{i,k}$, dynamischer Mischviskosität

$$\mu^{\text{m}} = c_s^2 \sum_k \rho_k \left(\tau_k - \frac{1}{2} \right)$$

und Druck

$$p = c_s^2 \left(\rho^{\text{m}} + \frac{1}{2} \sum_{k\bar{k}} \mathcal{G}_{k\bar{k}} \Psi_k \Psi_{\bar{k}} \right) \quad (3.14)$$

beschrieben, wobei die Summe $\sum_{k\bar{k}}$ alle möglichen, paarweisen Kombinationen von k und \bar{k} berücksichtigt. Im Gegensatz zu SCMP-Systemen, befolgt jeder Stoff zusätzlich eine Advektions-Diffusions-Gleichung mit den Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_{kl} , dem diffusiven Massenfluss $\mathbf{j}_k = \rho_k (\mathbf{u}_k^{\text{c}} - \mathbf{u}^{\text{m}})$ und der Komponentengeschwindigkeit \mathbf{u}_k^{c} . Die Geschwindigkeiten \mathbf{u}^{m} und \mathbf{u}_k^{c} sind – wie auch bei SCMP-Systemen – kraftkorrigiert und hängen vom Kräfteschema ab (Details in Abschnitt 3.1.4).

In diesem Kontext charakterisieren $\mathcal{G}_{k\bar{k}}$ und Ψ_k sowohl den makroskopischen Druck (3.14) als auch die, je nach Anzahl der Komponenten beliebig komplizierten Diffusionskoeffizienten [161]. Die Herleitung Letzterer ist lang, bildet jedoch einen Kernpunkt dieser Arbeit, weshalb sie ausführlich in Kapitel 5 durchgeführt wird. Das Vorzeichen dieser Koeffizienten kann über eine geeignete Kombination von Potentialfunktion und $\mathcal{G}_{k\bar{k}}$ verändert werden, sodass die unterschiedlichen Komponenten mischbar oder nicht mischbar sind.

3.1.3.1 Simulation Statischer Tropfen

Um den Unterschied zur Simulation von SCMP-Strömungen zu verdeutlichen, ist in Abbildung 3.2 das Ergebnis einer Simulation eines Zweistoffsystems dargestellt. Zu

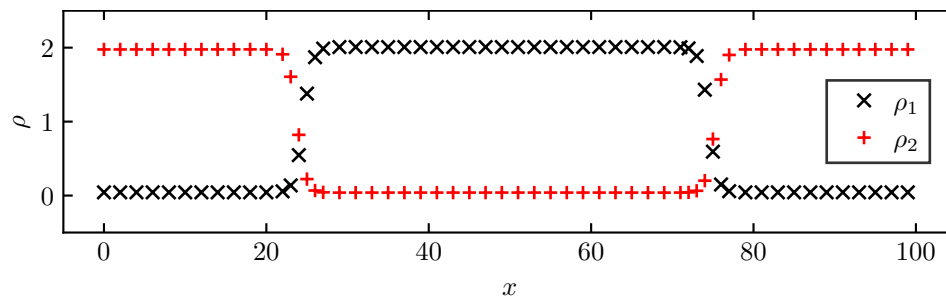


Abbildung 3.2: Dichteprofile durch einen statischen Tropfen der Komponente 1 umgeben von Komponente 2 in einem zweidimensionalen, doppelt-periodischen Rechengebiet mit 101×101 Gitterpunkten. Die Dichte im Hauptteil der jeweiligen Komponente fällt entlang der Grenzfläche auf einen Wert *nahe* Null ab. Innerhalb von Komponente 2 ist somit eine geringe Restdichte $\rho_1^{\text{gelöst}}$ von Komponente 1 enthalten und umgekehrt. Die Simulationsparameter sind $\Psi_k = \rho_k$ und $\mathcal{G}_{12} = \mathcal{G}_{21} = 1$. Die initialen Dichten beider Komponenten betragen $\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = 1.94$ und $\rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = 0.06$.

sehen sind die Dichteprofile durch die Mitte eines zweidimensionalen Rechengebiets, welches einen statischen Tropfen einer Komponente 1 enthält, der von Komponente 2 umgeben ist. In diesem Fall sorgt die repulsive Interaktionskraft ($\mathcal{G}_{12} = \mathcal{G}_{21} = 1$) dafür, dass Masse von Komponente 1 entgegengesetzt dem Potentialgradienten von Komponente 2 bewegt wird, Komponente 2 also 1 verdrängt und umgekehrt. Ist die Kraft (wie im dargestellten Fall) von ausreichender Stärke, bleiben zwei separate, durch eine diffusive Grenzfläche getrennte Fluide bestehen, wobei grundsätzlich eine geringe, gelöste Restdichte des jeweiligen Stoffs im Hauptteil des Anderen zurückbleibt. Für diese Hauptdichten beziehungsweise gelösten Dichten werden im Folgenden die Bezeichnungen ρ_k^{Haupt} beziehungsweise $\rho_k^{\text{gelöst}}$ verwendet. So ermöglicht diese Spezialisierung des Modells die Simulation mehrerer Fluide *gleicher Hauptdichten* beziehungsweise *gelöster Dichten*, welche sich über die Relaxati-

onszeit in ihren Viskositäten unterscheiden können. Bei geeigneter Wahl von Potentialfunktion, Stoffdichte und $\mathcal{G}_{k\bar{k}}$ können Systeme beliebig vieler mischbarer und nicht mischbarer Komponenten dargestellt werden.

3.1.3.2 Eigenschaften, Vor- und Nachteile

Auch wenn die Spezialisierung für MCMP-Strömungen auf demselben phänomenologischen Ansatz beruht wie die für SCMP-Strömungen, so unterscheiden sich die beiden in den auftretenden physikalischen Effekten. Während der numerische Modellparameter $\mathcal{G}_{k\bar{k}}$ in SCMP-Systemen Temperatur und Oberflächenspannung bestimmt, charakterisiert er in MCMP-Systemen Grenzflächenspannung und Diffusionskoeffizienten.

Im Folgenden werden kurz weitere Eigenschaften, sowie Vor- und Nachteile der Spezialisierung für MCMP-Strömungen aufgelistet.

- + Die einfache Formulierung der Interaktionskraft (3.13) für eine beliebige Anzahl an Komponenten ermöglicht auch die Einbindung zusätzlicher (beispielsweise oberflächenaktiver) Stoffe [179].
- + Wie in SCMP-Systemen ist es nicht nötig, die Grenzfläche nachzuverfolgen.
- + Es lassen sich sowohl mischbare als auch nicht mischbare Fluide darstellen.
- Im Gegensatz zu SCMP-Systemen gibt es keine physikalische Grundlage für die Form der Potentialfunktion [110], weshalb der Einfachheit halber meist $\Psi_k = \rho_k$ verwendet wird [43, 54, 73, 79, 112, 141, 160]. In einigen Arbeiten wird $\Psi_k = \rho_0 [1 - \exp(-\rho_k/\rho_0)]$ verwendet, jedoch ohne dies zu begründen [63, 124, 155, 166].
- Ähnlich wie in SCMP-Systemen sind die Grenzflächenspannung σ und die Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_{kl} über den numerischen Parameter $\mathcal{G}_{k\bar{k}}$ gekoppelt.
- Es können nur Phasen gleicher Dichte simuliert werden. Da in einer Vielzahl von Anwendungen jedoch verschiedene Fluide ähnlicher Dichte auftreten, beispielsweise bei Mischvorgängen in verfahrenstechnischen Anlagen [134] oder der tröpfchenbasierten Mikrofluidik [77], können trotz der Vernachlässigung dieser geringen Dichteunterschiede qualitativ sehr gute Vorhersagen gemacht werden [107]. Zudem ist es möglich Phasen unterschiedlicher Dichte durch die Kombination der beiden präsentierten Ansätze darzustellen [194].

Damit sind die Grundlagen für die Darstellung von MCMP-Systemen geschaffen. Im Folgenden wird erläutert, wie die Interaktionskräfte (und damit auch allgemeine Volumenkräfte) in die Evolutionsgleichung eingebracht werden können.

3.1.4 Kräfteschemata

Bis zu diesem Punkt wurde ausschließlich auf die Berechnung der Interaktionskraft eingegangen, im Detail auf Gradienten gesteigerter Isotropie und auf die reduzierten Formen der Interaktionskraft für SCMP- und MCMP-Systeme. Neben der eigentlichen *Berechnung* der Kraft spielt ihre *Einbindung* in die Evolutionsgleichung (3.2) eine zentrale Rolle. Methoden für die Krafteinbindung werden als Kräfteschemata (engl. *forcing schemes*) bezeichnet und haben einen erheblichen Einfluss auf die Genauigkeit [70, 191] und die Stabilität [107, 141] des Modells. So kann ein ungeeignetes Kräfteschema dazu führen, dass physikalische Größen wie Oberflächenspannung und Viskosität fälschlicherweise miteinander gekoppelt sind [19, 70, 151].

Da sie eine derartig wichtige Rolle spielen, existiert eine Vielzahl Kräfteschemata [14, 53, 57, 61, 92, 120, 123, 158, 183], welche zu unterschiedlichen Fehlern in den makroskopischen Erhaltungsgleichungen führen [51, 53]. Im Bereich der Mehrphasenströmungen sind dabei Terme dritter Ordnung in der Dichte von zentraler Bedeutung, da sie die Oberflächen- beziehungsweise Grenzflächenspannung bestimmen [7, 94]. Um diese zu erfassen, wurde die gängige Chapman-Enskog-Analyse zweiter Ordnung (siehe Anhang C) in kürzlich erschienenen Arbeiten bezüglich der für die Krafteinbindung notwendigen Quellterme bis zur dritten Ordnung erweitert [74, 123, 193]. Obwohl so für SCMP-Systeme kraftbedingte Fehlerterme in den makroskopischen Gleichungen identifiziert und eliminiert werden konnten, steht eine derartige Analyse für MCMP-Systeme noch aus, sodass Kräfteschemata bis heute ein aktives Feld der Forschung bilden. Die Definitionen der in dieser Arbeit verwendeten Kräfteschemata inklusive aller nötigen Spezifikationen für die Lösung der Evolutionsgleichung (3.2) sind in den Tabellen 3.2 und 3.4 für MCMP- sowie in Tabelle 3.3 für SCMP-Systeme dargestellt. Dazu gehören das *Shan-* [158], das *EDM-* (engl. *Exact-Difference-Method*) [92], das *He-* [60] und das *Guo-Kräfteschema* [53]. Spezifische Gründe für die Wahl dieser Schemata werden im Folgenden angeführt.

Eine Besonderheit jedes Kräfteschemas ist die Definition kraftkorrigierter Geschwindigkeiten, welche in den makroskopischen Gleichungen auftauchen. Für MCMP-Systeme sind dies die Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^m sowie die Komponentengeschwindigkeit \mathbf{u}_k^c , und für SCMP-Systeme die physikalische Geschwindigkeit \mathbf{u}^p . Durch die Verwendung dieser transformierten Größen werden Fehlerterme in den makroskopischen Gleichungen reduziert [51], wobei die einzelnen Geschwindigkeiten jeweils das Resultat einer Mittelung der Impulsdichte vor und nach Anwendung der rechten Seite von Gleichung (3.2) sind. Eine allgemeine Herleitung dieser Geschwindigkeiten ist in Anhang E zu finden.

Um die Notwendigkeit dieser Transformation zu verdeutlichen werden Kontinuitäts- und Impulsgleichung für ein Gemisch mehrerer Fluide (MCMP) unter Verwendung des *Shan-Kräfteschemas* [158] exemplarisch in Anhang F hergeleitet. Dabei wird ebenfalls gezeigt, dass das Kräfteschema zu Fehlern \mathcal{R}_S in den makroskopischen Erhaltungsgleichungen führt. Bei einer Chapman-Enskog-Analyse bis zur *zweiten Ordnung* können diese Fehler durch Verwendung der Kräfteschemata He und Guo vollständig

Tabelle 3.2: Definition der Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}_k^{eq} , der physikalischen Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^{m} und des Quellterms $S_{i,k}$ für MCMP-Systeme. Für die Kräfteschemata Shan, EDM, He und Guo ist die Mischgeschwindigkeit für alle Komponenten gleich.

Name	$u_{k,\alpha}^{\text{eq}}$	u_α^{m}	$S_{i,k}$	Referenz
Shan	$\frac{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}}{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i f_{i,k}} + \frac{\tau_k F_{k,\alpha}}{\sum_i f_{i,k}}$	$\frac{\sum_k (\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \sum_i f_{i,k}}$	0	[160]
EDM	$\frac{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}}{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i f_{i,k}}$	$\frac{\sum_k (\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \sum_i f_{i,k}}$	$f_{i,k}^{\text{eq}} \left(\rho_k, u_{k,\alpha}^{\text{eq}} + \frac{F_{k,\alpha}}{\rho_k} \right) - f_{i,k}^{\text{eq}} \left(\rho_k, u_{k,\alpha}^{\text{eq}} \right)$	[42]
He	$\frac{\sum_k \frac{1}{\tau_k} (\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i f_{i,k}}$	$\frac{\sum_k (\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \sum_i f_{i,k}}$	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k} \right) \frac{F_{k,\alpha} (e_{i,\alpha} - u_{k,\alpha}^{\text{eq}})}{\rho_k c_s^2} f_{i,k}^{\text{eq}} \left(\rho_k, u_{k,\alpha}^{\text{eq}} \right)$	[141]
Guo	$\frac{\sum_k \frac{1}{\tau_k} (\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \frac{1}{\tau_k} \sum_i f_{i,k}}$	$\frac{\sum_k (\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_{k,\alpha})}{\sum_k \sum_i f_{i,k}}$	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k} \right) w_i \left(\frac{e_{i,\alpha} - u_{k,\alpha}^{\text{eq}}}{c_s^2} + \frac{e_{i,\alpha} e_{i,\beta} u_{k,\beta}^{\text{eq}}}{c_s^4} \right) F_{k,\alpha}$	[150]

Tabelle 3.3: Definition der Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}^{eq} , der physikalischen Geschwindigkeit \mathbf{u}^{p} und des Quellterms S_i für SCMP-Systeme. Der Komponentenindex k wurde vernachlässigt.

Name	u_α^{eq}	u_α^{p}	S_i	Referenz
Shan	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \tau F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	0	[159]
EDM	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i}{\sum_i f_i}$	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$f_i^{\text{eq}} \left(\rho, u_\alpha^{\text{eq}} + \frac{F_\alpha}{\rho} \right) - f_i^{\text{eq}} \left(\rho, u_\alpha^{\text{eq}} \right)$	[92]
He	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$\left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{F_\alpha (e_{i,\alpha} - u_\alpha^{\text{eq}})}{\rho c_s^2} f_i^{\text{eq}} \left(\rho, u_\alpha^{\text{eq}} \right)$	[60]
Guo	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$\frac{\sum_i e_{i,\alpha} f_i + \frac{1}{2} F_\alpha}{\sum_i f_i}$	$\left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) w_i \left(\frac{e_{i,\alpha} - u_\alpha^{\text{eq}}}{c_s^2} + \frac{e_{i,\alpha} e_{i,\beta} u_\beta^{\text{eq}}}{c_s^4} \right) F_\alpha$	[53]

Tabelle 3.4: Definition der vom Kräfteschema abhängigen Komponentenimpulsdichten $\rho_k \mathbf{u}_k^c$ in MCMP-Systemen für die Kräfteschemata Shan, EDM, He und Guo.

Name	$\rho_k \mathbf{u}_{k,\alpha}^c$	Referenz
Shan	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k}\right) \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}}$	[161]
EDM	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k}\right) \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha}$	–
He	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k}\right) \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha}\right) + \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}}$	–
Guo	$\left(1 - \frac{1}{2\tau_k}\right) \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha}\right) + \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}}$	–

eliminiert werden, jedoch unterscheiden diese beiden sich in den Termen dritter und höherer Ordnung [51]. Daher sind sie prinzipiell dem in der Standardformulierung des Modells verwendeten Shan-Kräfteschema vorzuziehen.

Die Fehlerterme des Shan-Kräfteschema enthalten relaxationszeitabhängige Ausdrücke, welche die Gleichgewichtsdichten verfälschen [70, 191]. Da die Relaxationszeit die Viskosität bestimmt (siehe Abschnitt 2.2), führt dies zu einer unphysikalischen Abhängigkeit der Gleichgewichtsdichten und der Oberflächenspannung von der Viskosität. In Referenz [141] konnten diese Abhängigkeiten durch Verwendung des He-Kräfteschemas (und damit durch Elimination der entsprechenden Terme) gelöst werden. Dies ermöglichte ebenfalls die Simulation von MCMP-Systemen mit Viskositätsverhältnissen 1000 : 1.

Da die Oberflächen- beziehungsweise Grenzflächenspannungen durch Terme dritter Ordnung charakterisiert werden (siehe Abschnitt 3.1.2), wäre jedoch ein Kräfteschema wünschenswert, welches Fehlerterme dritter Ordnung eliminiert beziehungsweise die für die Oberflächenspannungen relevanten Terme über geeignete Parameter kontrolliert (He- und Guo-Kräfteschema sind jedoch nur exakt bis zur zweiten Ordnung). Nach bestem Wissen des Autors existiert eine derartige Weiterentwicklung allerdings nur für das Guo-Kräfteschema [123]; diese ist jedoch ausschließlich auf SCMP-Systeme anwendbar. Diese beiden Schemata sind damit diejenigen mit den geringsten Fehlern in den makroskopischen Gleichungen [51], welche für beliebige Systeme eingesetzt werden können. Aus diesen Gründen wurden diese beiden Schemata in dieser Arbeit aufgenommen. Zudem wurden sie bereits im Rahmen des PP-Modells für SCMP- und MCMP-Systeme eingesetzt¹. Das Shan-Kräfteschema wurde in dieser Arbeit genutzt, da es Bestandteil der ursprünglichen Standardformulierung des Modells war [158] und – trotz Fehlertermen – bis heute verwendet wird [7, 63, 166].

¹Das He-Kräfteschema wurde in Referenz [70] für SCMP- und in den Referenzen [107, 141] für MCMP-Systeme verwendet; das Guo-Kräfteschema in den Referenzen [123, 191] für SCMP- und in den Referenzen [54, 150] für MCMP-Systeme.

Schließlich wurde das EDM-Kräftechema aufgenommen, da es ebenfalls sowohl in SCMP-Systemen [66] als auch in MCMP-Systemen [42] häufig verwendet wird, obwohl es (ähnlich dem Shan-Kräftechema) zu Fehlertermen zweiter Ordnung in den makroskopischen Gleichungen führt [191].

Mit der Einführung der Kräfteschemata sind alle Elemente des PP-Modells definiert. Im Folgenden wird auf die Entstehung sogenannter Scheingeschwindigkeiten eingegangen und anschließend gezeigt, wie die Benetzungseigenschaften von Festkörperoberflächen modelliert werden können.

3.2 Scheingeschwindigkeiten

Ein Nachteil des PP-Modells sind Scheingeschwindigkeiten (engl. *spurious velocities*), welche an den Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Phasen entstehen [182] und die Geschwindigkeitsverteilung in dynamischen Simulationen verfälschen [26, 110]. Sie führen zu einem unphysikalischen Massentransport und können – gerade bei Überlagerung mit realen Geschwindigkeiten – so groß werden, dass die Beschränkung auf kleine Mach-Zahlen (siehe Abschnitt 2.2) verletzt wird und Instabilitäten auftreten [187]. Das Problem der Scheingeschwindigkeiten ist nicht auf PP-Modelle beschränkt, sondern tritt auch in alternativen LBM-basierten Mehrphasenmodellen, beispielsweise in Free-Energy- [148] oder Color-Gradient-Modellen [102] und darüber hinaus auch bei Verwendung von Volume-of-Fluid- [145, 148], Level-Set- [190] oder Phase-Field-Methoden [153] auf.

Abbildung 3.3 zeigt die Ausprägung derartiger Geschwindigkeiten um einen stati-

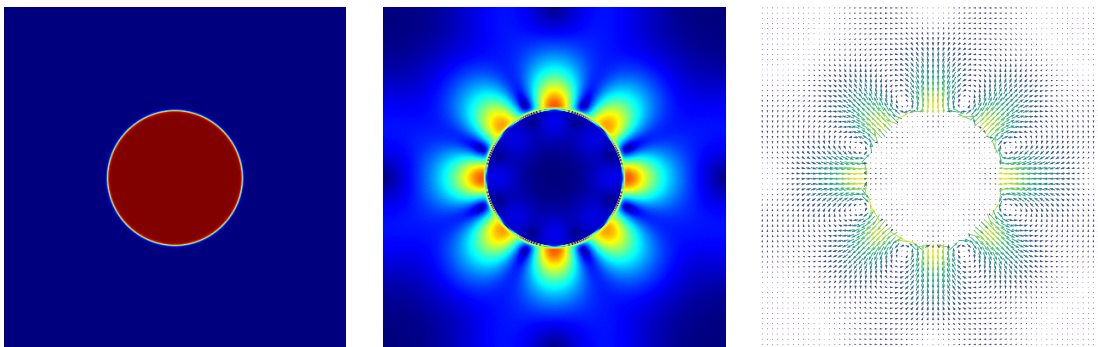


Abbildung 3.3: Scheingeschwindigkeiten um einen statischen Tropfen in einem SCMP-System. Dargestellt ist die Verteilung der Dichte $\rho(\mathbf{x})$ links, die Verteilung der Geschwindigkeitsbeträge $|u_\alpha^p(\mathbf{x})|$ in der Mitte und die Geschwindigkeitsvektoren $u_\alpha^p(\mathbf{x})$ rechts. Es prägen sich acht Wirbel entlang der Grenzfläche des Tropfens aus.

schen Tropfen am Beispiel eines *SCMP-Systems*. Dabei sind deutlich acht Geschwindigkeitspole zu erkennen, zwischen denen sich Wirbel ausprägen. Diese Geschwindig-

keiten skalieren mit dem Dichteunterschied zwischen der (in diesem Fall) Flüssigphase (Tropfen, rot) und der Dampfphase (Umgebung, blau). Sie hängen also vom Dichtegradienten ab und entstehen daher ebenso in MCMP-Strömungen (siehe Abbildung 3.2 für Dichtegradienten in MCMP-Systemen).

Die Erklärung für das Auftreten von Scheingeschwindigkeiten ist zweigeteilt. So gibt es einen Mechanismus für die charakteristische Struktur mit den ausgeprägten Polen, und einen, der die Scheingeschwindigkeiten überhaupt erst entstehen lässt (unabhängig von der Struktur). Diese werden im Folgenden separat voneinander vorgestellt.

3.2.1 Struktur der Scheingeschwindigkeiten

Die blumenartige Struktur der Scheingeschwindigkeiten ist auf anisotrope Terme in der Finite-Differenzen-Approximation des Potentialgradienten zurückzuführen [151, 156]. Da ein kreisrunder Tropfen isotrop ist, sollten alle Dichtegradienten und dementsprechend auch alle Potentialgradienten radialsymmetrisch sein, also keine tangentialen Komponenten aufweisen. Da diese jedoch nur approximiert werden, entstehen Fehler, die in jeder Raumrichtung unterschiedlich sind und so zu einem Richtungsfehler und damit zu tangentialen Komponenten führen [151]. Der Potentialgradient wiederum bestimmt die Interaktionskraft (3.1), sodass diese Fehler in tangential gerichteten Kräften resultieren, welche Masse parallel zur Grenzfläche über mehrere Punkte hinweg beschleunigen. Die Größe dieser Richtungsfehler (und damit der auftretenden Scheingeschwindigkeiten) hängt vom Grad der Isotropie der Diskretisierung ab, welcher durch Verwendung geeigneter Koeffizienten (siehe Tabelle 3.1) systematisch erhöht werden kann [151, 156, 185]. Abbildung 3.4 zeigt am Beispiel eines statischen Tropfens, dass die Verwendung derartiger Diskretisierungen zu einer Reduktion der Geschwindigkeiten führt [141].

Weitere Möglichkeiten zur Minimierung dieser Richtungsfehler sind die Verwendung lokaler Gitterverfeinerungen zur Erhöhung der Auflösung der Grenzfläche, wodurch die Genauigkeit der Approximation des Gradienten verbessert wird [151, 186] oder die Variation der Potentialfunktion [189].

An ebenen Grenzflächen entfällt dieser Richtungsfehler und die damit verbundenen, tangentialen Beschleunigungen. Trotzdem entstehen auch hier Scheingeschwindigkeiten, welche jedoch um Größenordnungen geringer sind [135] und nicht direkt mit dem Grad der Isotropie zusammenhängen. Diese sind auf den tatsächlich treibenden Mechanismus der Scheingeschwindigkeiten zurückzuführen, welcher im Folgenden beschrieben wird.

3.2.2 Ursache der Scheingeschwindigkeiten

Die eigentliche Ursache der Scheingeschwindigkeiten ist ein Ungleichgewicht zwischen dem diskreten thermodynamischen Druckgradienten entlang der Grenzfläche und der Oberflächenspannung [121]. Dieses Ungleichgewicht wird im Folgenden am Beispiel

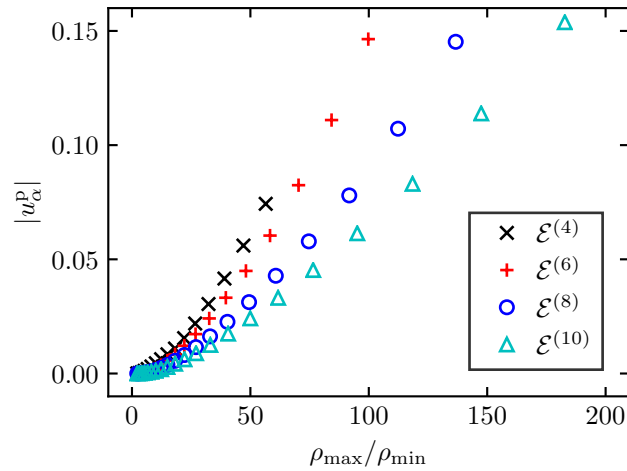


Abbildung 3.4: Maximale Scheingeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Ordnung der Isotropie. Simuliert wurde jeweils ein statischer Tropfen mit Radius $r = 32$ bei unterschiedlichen Temperaturen $T \sim 1/\mathcal{G}$ mit $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ und $\rho_0 = 1$ in einem 201×201 doppelt periodischen Rechengebiet. Die initialen Dichten bei jeder Temperatur wurden mithilfe der Maxwell-Konstruktion [32] aus der Zustandsgleichung ermittelt. Eine niedrigere Temperatur resultiert in einem größeren Dichteverhältnis ρ_{\max}/ρ_{\min} , also in größeren Dichtegradienten und dementsprechend in größeren Scheingeschwindigkeiten.

Die Erhöhung der Ordnung der Isotropie führt zu einer Reduktion der Scheingeschwindigkeiten und damit zu einer Erhöhung der Stabilität, was die Simulation größerer Dichteverhältnisse ermöglicht.

eines SCMP-Systems verdeutlicht. Die für diesen Fall durch das PP-Modell approximierte Impulsgleichung kann unabhängig vom Kräfteschema als

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha^p) + \partial_\beta (\rho u_\alpha^p u_\beta^p) = & \partial_\beta \left[c_s^2 \rho \left(\tau - \frac{1}{2} \right) (\partial_\beta u_\alpha^p + \partial_\alpha u_\beta^p) \right] - \partial_\beta \mathcal{P}_{\alpha\beta} \\ & + \mathcal{R}_{S,\alpha} + \mathcal{R}_{C,\alpha} + \mathcal{R}_{F,\alpha} + \mathcal{R}_{t,\alpha} \end{aligned}$$

ausgedrückt werden. Dabei repräsentiert \mathcal{R}_S durch das Kräfteschema bedingte Fehler (siehe Anhang F), \mathcal{R}_C den modellbedingten Fehler (siehe Anhang C), \mathcal{R}_t den durch das Zeitintegrationsverfahren bedingten Fehler (siehe Abschnitt 2.1.3) und \mathcal{R}_F Terme höherer Ordnung (fünfte und höhere Ableitungen) der Interaktionskraft. Der Drucktensor $\mathcal{P}_{\alpha\beta}$ hängt über die Potentialfunktion ausschließlich von der Dichte ab (siehe Gleichung (3.10)). Er beinhaltet den thermodynamischen Druck (3.11) und die Anteile der Interaktionskraft, die die Oberflächenspannung charakterisieren.

Unter Annahme der Dichteverteilung eines *stationären* Tropfens ($\mathbf{u}^p = 0$) reduziert sich der Ausdruck zu

$$-\partial_\beta \mathcal{P}_{\alpha\beta} + \mathcal{R}_{S,\alpha} + \mathcal{R}_{F,\alpha} = 0, \quad (3.15)$$

wobei \mathcal{R}_C und \mathcal{R}_t entfallen (da sie Geschwindigkeiten oder zeitliche Änderungen enthalten). Im mechanischen Gleichgewicht sollte $\partial_\beta \mathcal{P}_{\alpha\beta} = 0$ gelten, sodass keine Druckgradienten vorhanden sind, die Fluid beschleunigen könnten. Für das betrachtete, initial ruhende Systeme verhindern jedoch die Fehlerterme (\mathcal{R}_S , \mathcal{R}_F) in der *Dichte* ein entsprechendes Gleichgewicht. Infolge dieses Ungleichgewichtes entsteht ein geringer Druckgradient, welcher – bei einem initial ruhenden System – zur Bildung der Scheingeschwindigkeiten führt. Diese sind also das Resultat der Überlagerung der Fehlerterme höherer Ordnung in der *Dichte*.

Diese ganzheitliche Betrachtung aller Fehlerterme lässt – in Einklang mit bestehender Literatur – folgende Schlussfolgerungen zu

- i) Sobald sich Scheingeschwindigkeiten aufgrund der Fehler in der Dichte aufbauen (also verändern), wird das Ungleichgewicht der Ausdrücke zusätzlich durch den Fehlerterm \mathcal{R}_t beeinflusst. Dieser durch die Approximation des Zeitintegrals des Kollisionstermes bedingte Fehler kann durch Verwendung einer besseren Näherung – beispielsweise dem Adams-Moulton-Verfahren [184] – reduziert werden. Dies führte jedoch, wie Siebert et al. [164] zeigen konnten, zu einer Erhöhung der Scheingeschwindigkeiten, was daraufhin deutet, dass die Fehler in ihrer Gesamtheit betrachtet werden müssen.
- ii) Der durch das Kräfteschema bedingte Fehler \mathcal{R}_S enthält unter anderem reine Terme in der Volumenkraft (siehe Anhang F) und führt durch Einsetzen der Interaktionskraft zu Fehlern höherer Ordnung in Ψ , also der Dichte [51, 191]. Durch ein geeignetes Kräfteschema können diese Terme eliminiert und Scheingeschwindigkeiten reduziert werden [140, 172, 191].
- iii) Da es Terme dritter Ordnung in der Dichte sind, welche die Oberflächenbeziehungsweise die Grenzflächenspannung bestimmen, müssen alle Terme dritter Ordnung *in der Dichte* in den Fehlertermen bekannt sein (eliminiert oder kontrolliert werden), um genaue Vorhersagen bezüglich dieser Spannungen machen zu können [123].
- iv) Durch Verwendung größerer Geschwindigkeitssätze (also der Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes), beispielsweise $D2Q17$ [162], $D2Q35$ [164] oder $D3Q27$ [2], können Scheingeschwindigkeiten reduziert werden [122, 164]. Dies ist zurückzuführen auf *anisotrope* Fehlerterme höherer Ordnung, welche (in Abhängigkeit vom Kräfteschema) mit der Volumenkraft gekoppelt sind [74].

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Terme höherer Ordnung in der Dichte die Ursache für die Entstehung der Scheingeschwindigkeiten sind. Im Falle gekrümmter Oberflächen ist es besonders kritisch, wenn diese Terme anisotrop sind; Scheingeschwindigkeiten würden jedoch auch bei vollkommener Isotropie aufgrund des bloßen Vorhandenseins der Fehlerterme höherer Ordnung entstehen [121].

Die Erfolge, die in den einzelnen Publikationen erzielt werden konnten, zeigen, dass

durch Veränderung einzelner Fehlerterme Scheingeschwindigkeiten reduziert werden können, deuten jedoch an, dass das gesamte Zusammenspiel aller Fehlerterme in Betracht gezogen werden muss. Trotz der aufgeführten Verbesserungen bildet die Reduktion dieser numerischen Artefakte bis heute ein aktives Feld der Forschung, da so Genauigkeit und Stabilität der Simulationen erhöht werden können. Auch im Rahmen dieser Arbeit wird eine neue Methode vorgestellt, mit der Scheingeschwindigkeiten effizient reduziert werden können.

3.3 Benetzbarkeit von Oberflächen

Ein großer Vorteil des PP-Modells ist die einfache Modellierung der Benetzungseigenschaften von Oberflächen [69, 73, 109, 155]. Die charakteristische Größe für deren Beschreibung ist – wie in Abbildung 3.5 dargestellt – der innerhalb einer Phase gemessene Kontaktwinkel θ zwischen Phase und Festkörper. Übersteigt er 90° spricht man von einer hydrophoben, andernfalls von einer hydrophilen Oberfläche [10]. Zur Veränderung dieses Winkels stehen im PP-Modell zwei miteinander kombinierbare Ansätze zur Verfügung.

Beim Ersten wird eine fiktive Dichte ρ^{Wand} am Festkörper vorgegeben, welche bei

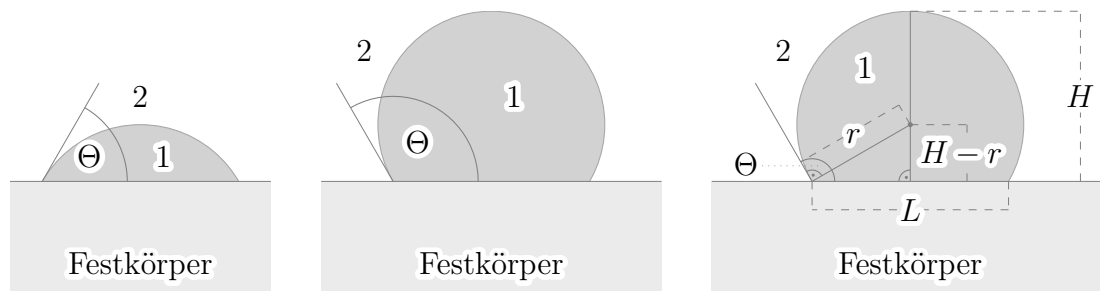


Abbildung 3.5: Aus Phase 1 bestehender Tropfen auf hydrophiler (links, $\theta < 90^\circ$) und hydrophober Oberfläche (Mitte, $\theta > 90^\circ$), umgeben von Phase 2. Rechts ist eine schematische Darstellung des Tropfens für die Bestimmung des Kontaktwinkels θ aus der Basislänge L und Höhe H .

der Berechnung der Interaktionskraft (3.1) in der angrenzenden Fluidschicht zu einer wandnormalen Komponente führt [78]. Je nach Verhältnis von Fluidichte ρ und Wanddichte ρ^{Wand} sind diese wandnormalen Komponenten unterschiedlich groß (oder sogar unterschiedlich gerichtet), sodass verschieden große Kräfte wirken, also unterschiedlich große Spannungen entstehen (dort, wo die Grenzfläche die Wand berührt). Die unterschiedlichen Spannungen zwischen den einzelnen Phasen, beziehungsweise zwischen jeder Phase und dem Festkörper, werden nach Youngs Gesetz [10, 73] durch eine Veränderung der Krümmung ausbalanciert, wodurch sich der Kontaktwinkel ändert.

Beim zweiten Ansatz wird eine zusätzliche, zwischen Komponente k und dem Fest-

körper wirkende Interaktionskraft

$$F_{k,\alpha}^{\text{Wand}} = -\mathcal{G}_k^{\text{Wand}} \Psi_k \sum_i \mathcal{W}_i s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} \quad (3.16)$$

definiert [124]. Dabei repräsentiert $s(\mathbf{x})$ eine Indikatorfunktion, welche an Festkörperpunkten eins und für alle Fluidpunkte null ist. Je nach Potential des Fluids und Vorzeichen von $\mathcal{G}_k^{\text{Wand}}$ wird durch diese Volumenkraft entweder Fluid in Richtung Festkörper oder von diesem wegbewegt, sodass sich (wie im ersten Ansatz) die einzelnen Spannungen und folglich der Kontaktwinkel verändern. In diesem Fall wird die gesamte, auf eine Komponente wirkende Volumenkraft um die Fluid-Festkörper-Interaktion erweitert

$$F_{k,\alpha} = F_{k,\alpha}^{\text{SC}} + F_{k,\alpha}^{\text{Wand}}.$$

Dabei ist anzumerken, dass der zweite Ansatz immer in Kombination mit dem ersten angewendet werden muss. Die Ursache dafür ist, dass in der am Festkörper angrenzenden Fluidschicht die Fluid-Fluid-Interaktion \mathbf{F}_k^{SC} berechnet werden muss. Da diese den *nicht-lokalen*, dichteabhängigen Potentialgradienten enthält, muss zur Berechnung der Finite-Differenzen-Approximation (3.5) eine Dichte ρ^{Wand} am Festkörper vorgegeben werden. Im einfachsten Fall wird diese mit Null angenommen [73, 171], was jedoch dazu führt, dass bereits die Fluid-Fluid-Interaktion eine wandnormale Komponente enthält (unabhängig von $\mathbf{F}_k^{\text{Wand}}$) und so das Spannungsgleichgewicht (also den Kontaktwinkel) beeinflusst. Infolge dieser zusätzlichen Volumenkraft bildet sich eine Fluid-Festkörper-Grenzfläche mit veränderter Dichte [69], sodass bei wandgebundenen Strömungen die am Festkörper auf das Fluid wirkenden Reibungskräfte verfälscht werden [81].

In Referenz [109] wird vorgeschlagen, die Fluid-Festkörper-Interaktion so zu modifizieren, dass sie von der gleichen Größenordnung wie die Fluid-Fluid-Interaktion ist. Dafür wird die Indikatorfunktion mit der Potentialfunktion gewichtet

$$\begin{aligned} F_{k,\alpha}^{\text{Wand}} &= -\mathcal{G}_k^{\text{Wand}} \Psi_k \sum_i \mathcal{W}_i \Psi_k(\mathbf{x}) s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} \\ &= -\mathcal{G}_k^{\text{Wand}} \Psi_k^2 \sum_i \mathcal{W}_i s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Im Folgenden wird die Modellierung der Kontaktwinkel am Beispiel eines binären Gemisches durchgeführt und die beiden Varianten aus den Gleichungen (3.16) – fortan als $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ bezeichnet – und (3.17) – fortan als $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ bezeichnet – miteinander verglichen (jeweils benannt nach den Autoren). Für MCMP-Systeme ist es gängig den zweiten Ansatz (auf Kräftebasis) zu verwenden, da es bei Verwendung von $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ eine analytische Abschätzung für den Kontaktwinkel θ in Abhängigkeit der Parameter $\mathcal{G}_{12} = \mathcal{G}_{21} = \mathcal{G}$, $\mathcal{G}_1^{\text{Wand}}$ und $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ gibt [72, 73, 112, 155]. In diesem Vergleich wird die Problematik der Fluid-Festkörper-Grenzfläche sowie die Entstehung von Scheintröpfchen detailliert erläutert und eine *neuartige* Methode zur Elimination dieser präsentiert.

3.3.1 Kontaktwinkel in binärem Gemisch

Im Folgenden wird das PP-Modell für MCMP-Systeme unter Verwendung des Shan-Kräftechemas für die Modellierung unterschiedlicher Kontaktwinkel in einem binären Gemisch genutzt. An dieser Stelle wird das Shan-Kräftechema verwendet, da in Referenz [73] eine analytische Näherungsformel zur Bestimmung des Kontaktwinkels unter Verwendung dieses Kräftechemas eingeführt wurde, welche im Folgenden zur Validierung der Kontaktwinkelmodellierung herangezogen werden kann. Wie sich zeigen wird, verliert diese jedoch ihre Gültigkeit, wenn das Kräftechema verändert wird.

Für die Simulationen wird ein halbkreisförmiger Tropfen von Komponente 1 mit scharfer Grenzfläche und Radius $r = 25$ in der unteren Mitte eines 201×101 großen Rechengebiets platziert, umgeben von Komponente 2. Es werden periodische Randbedingungen in x -Richtung und Festkörperwände mit einer fiktiven Dichte $\rho^{\text{Wand}} = 0$ an der Ober- und Unterseite des Rechengebiets vorgegeben. Die initialen Dichten beider Komponenten betragen $\rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = 0.06$ und $\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = 1.94$. Abbildung 3.6 zeigt eine schematische Darstellung des Aufbaus. Der Vergleichbarkeit

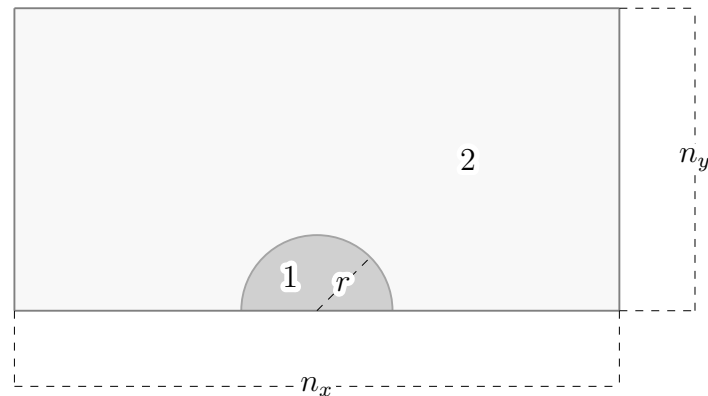


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Anfangsbedingungen für die Simulation unterschiedlicher Kontaktwinkel.

halber wird die Fluid-Festkörper-Interaktion auf $\mathcal{G}_1^{\text{Wand}} = -\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ beschränkt [62, 73] und $\mathcal{G}_{12} = \mathcal{G}_{21} = \mathcal{G} = 0.9$ gesetzt. Als Konvergenzkriterium wird

$$\mathcal{V}(\mathbf{u}^m) = \frac{\sum [|u_x^m(t) - u_x^m(t-2000)| + |u_y^m(t) - u_y^m(t-2000)|]}{\sum [|u_x^m(t)| + |u_y^m(t)|]} < 10^{-7} \quad (3.18)$$

verwendet [70], wobei die Summen über alle *Fluidpunkte* im Gebiet gebildet werden. Der Kontaktwinkel kann – wie in Abbildung 3.5 (rechts) dargestellt – aus den messbaren Größen L und H , der Kontaktlänge des Tropfens mit dem Boden und dessen

Höhe, mit

$$r = \frac{L^2 + 4H^2}{8H},$$

$$\theta = \arctan \left[\frac{2(H-r)}{L} \right] + \frac{\pi}{2}$$

bestimmt werden (siehe auch Referenzen [73, 155]). Um beispielsweise die Basislänge L zu messen, wird das Dichteprofil von Komponente 1 (des Tropfens) entlang der ersten Fluidschicht oberhalb des Festkörperwalls berechnet und angenommen, dass sich die Grenzfläche genau in der Mitte zwischen der Minimal- und Maximaldichte *dieses Profils* befindet. Bei der Messung der Höhe wird analog vorgegangen. Die Ergebnisse für die Verwendung der Kräfte $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ und $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ sind in Abbil-

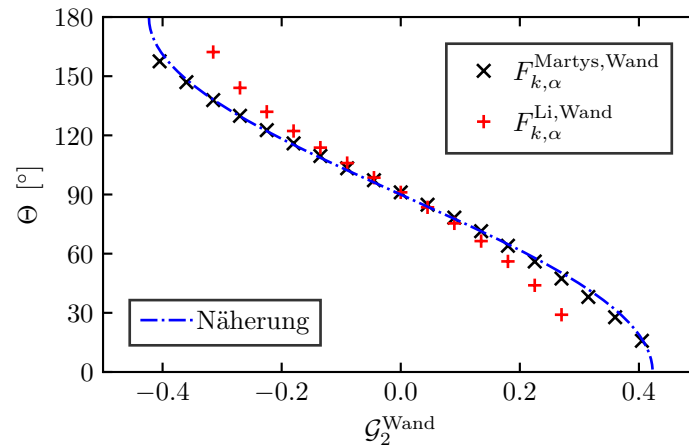


Abbildung 3.7: Kontaktwinkel in Abhängigkeit der Fluid-Festkörper-Interaktion für $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ aus Gleichung (3.16) und $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ aus Gleichung (3.17). Die analytische Näherungsformel (3.19) wurde auf Basis von Youngs Gesetz für $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ in Referenz [73] entwickelt, verliert jedoch ihre Gültigkeit für alternative Ansätze.

dung 3.7 dargestellt. Über die Einbringung der zusätzlichen Interaktionskraft können alle Kontaktwinkel zwischen 0° (vollständige Benetzung) und 180° (Ablösung) erreicht werden. Die in Referenz [73] für $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ entwickelte Näherungsformel

$$\cos(\theta) = \frac{\mathcal{G}_2^{\text{Wand}} - \mathcal{G}_1^{\text{Wand}}}{\mathcal{G}_1^{\text{Haupt}} - \frac{\rho_2^{\text{gelöst}}}{2}} \quad (3.19)$$

zur Bestimmung des Kontaktwinkels stimmt gut mit den durchgeführten Simulationen überein, sie verliert jedoch bei Veränderung der Fluid-Festkörper-Interaktion ihre Gültigkeit. Es ist deutlich erkennbar, dass bei Verwendung der Kraft $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ geringere Kräfte ($\sim \mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$) nötig sind, um denselben Kontaktwinkel zu erzielen.

3.3.2 Optimierte Randbehandlung

Die Fluidschicht am Festkörper erfährt sowohl die Fluid-Festkörper- ($\sim \mathcal{G}^{\text{Wand}}$) als auch die Fluid-Fluid-Interaktion ($\sim \mathcal{G}$). Aufgrund der wandnormalen Komponenten dieser Kräfte prägt sich deshalb grundsätzlich eine mehrere Gitterpunkte breite Grenzfläche zwischen Fluid und Festkörper aus. Diese ist in Abbildung 3.8 für die Verwendung von $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ und verschiedener Werte von $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ (verschiedener Kontaktwinkel θ) beispielhaft für ein binäres Gemisch dargestellt. Zu sehen sind die ersten Punkte des wandnormalen Dichteprofiles durch die Mitte eines auf dem Festkörper ruhenden Tropfens. Um diesen Effekt zu minimieren, ist es möglich, für die Berechnung

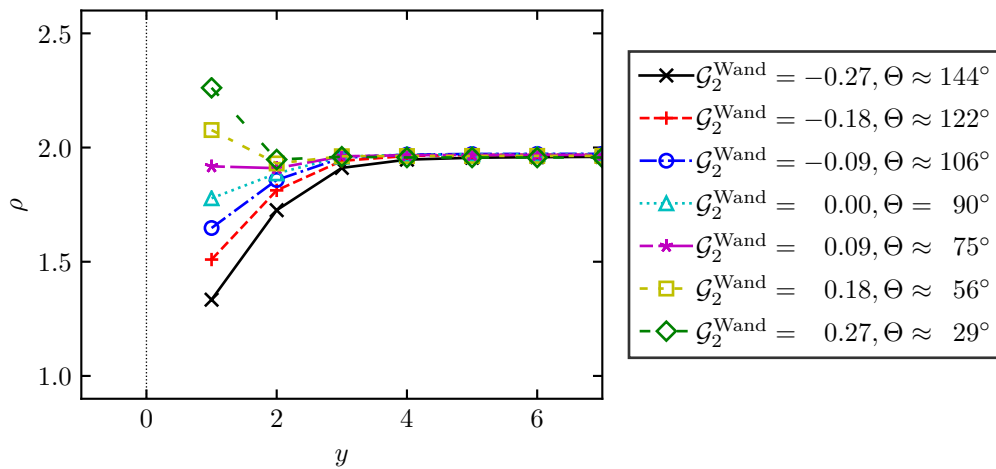


Abbildung 3.8: Fluid-Festkörper-Grenzfläche eines auf einer Oberfläche ruhenden Tropfens für verschiedene Kontaktwinkel θ . Die Simulationsparameter sind $\mathcal{G} = 0.9$, $\rho_{1,\text{init}}^{\text{gelöst}} = \rho_{2,\text{init}}^{\text{gelöst}} = 0.06$, $\rho_{1,\text{init}}^{\text{Haupt}} = \rho_{2,\text{init}}^{\text{Haupt}} = 1.94$ und $\Psi_k = \rho_k$. Es wurde das Shan-Kräftechema verwendet. Der Festkörper ist durch die gepunktete Linie angedeutet.

aller Interaktionskräfte eine verbesserte Randbehandlung zu verwenden, bei welcher die wandnormalen Komponenten näherungsweise eliminiert und somit alle zusätzlich wirkenden Kräfte auf die sogenannte Dreiphasenkontaktlinie (Fluid-Fluid-Festkörper) beschränkt werden. Dabei wird in zwei Schritten zunächst die Fluid-Fluid- und dann die Fluid-Festkörper-Interaktionskraft umformuliert.

3.3.2.1 Reformulierung Fluid-Fluid-Interaktion

Zur Reduktion der wandnormalen Komponenten in der Fluid-Fluid-Interaktion wird Gleichung (3.13) durch

$$F_{k,\alpha}^{\text{SC},*} = -\Psi_k \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq k}}^N \mathcal{G}_{k\bar{k}} \sum_i \mathcal{W}_i \phi_{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathcal{C}_{i,\alpha} \quad (3.20)$$

mit

$$\phi_k(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) = \begin{cases} \Psi(\mathbf{x}) & \text{für } s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) = 1, \\ \Psi(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) & \text{für } s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) = 0 \end{cases}$$

ersetzt. Die Fluid-Fluid-Interaktion wird so näherungsweise auf Punkte mit wandparallelen Potentialgradienten beschränkt. Diese wiederum existieren nur, wenn die Fluid-Fluid-Grenzfläche (beispielsweise eines Tropfens) den Festkörper berührt. Befindet sich nur eine Phase konstanter Dichte am Festkörper, entfällt der Term.

Abbildung 3.9 zeigt die Fluid-Festkörper-Grenzfläche unter Verwendung dieser zusätzlichen Randbedingung, wobei die Verfälschung der Dichte bereits erheblich reduziert ist. Da ein Teil der Fluid-Festkörper-Interaktion entfällt, sind für den gleichen Kontaktwinkel geringere Werte $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ nötig.

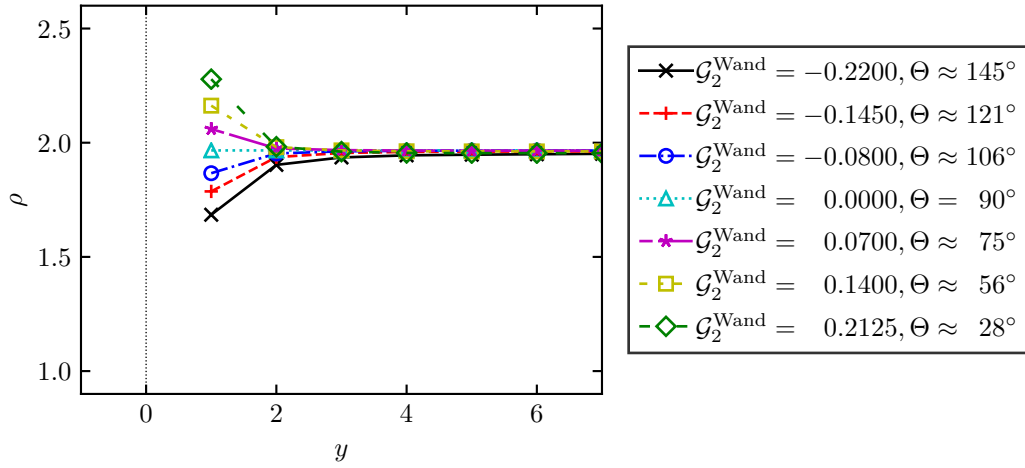


Abbildung 3.9: Fluid-Festkörper-Grenzfläche eines auf einer Oberfläche ruhenden Tropfens für verschiedene Kontaktwinkel θ unter Verwendung der optimierten Randbedingung für die Fluid-Fluid-Interaktion. Der Dichteübergang ist erheblich kleiner. Die verbleibende, geringe Dichteänderung ist auf die wandnormalen Komponenten der Fluid-Festkörper-Interaktion zurückzuführen.

3.3.2.2 Reformulierung Fluid-Festkörper-Interaktion

Unabhängig von der Formulierung von $\mathbf{F}_k^{\text{Wand}}$ und der Randdichte basiert die Fluid-Festkörper-Interaktion auf der Einbringung wandnormaler Kräfte, welche zwangsweise zur Ausprägung eines zusätzlichen Dichteüberganges führen. Um diesen ebenfalls zu reduzieren, wird eine alternative Fluid-Festkörper-Interaktion

$$F_{k,\alpha}^{\text{Wand},*} = \begin{cases} \mathcal{G}_k^{\text{Wand}} \Psi_k \sum_i \mathcal{W}_i \phi_k(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) \mathbf{C}_{i,\alpha} & \text{falls } \exists i : s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) = 1, \\ 0 & \text{falls } \forall i : s(\mathbf{x} + \mathbf{C}_i) = 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

eingeführt, welche auf Fluidpunkte mit angrenzendem Festkörper beschränkt wird. In dieser Formulierung wird der gleiche Potentialgradient wie in der Fluid-Fluid-Interaktion verwendet. Sie lässt sich zudem auf beliebige, stufenartig aufgelöste Geometrien anwenden. Da Fluid-Festkörper- und Fluid-Fluid-Interaktion in diesem Fall gleich gerichtet wären, muss das Vorzeichen ersterer im Gegensatz zu den Formulierungen in den Gleichungen (3.16) und (3.17) gedreht werden.

Durch Kombination der Fluid-Fluid-Interaktion (3.20) und der Fluid-Festkörper-Interaktion (3.21) wird die Fluid-Festkörper-Grenzfläche, wie in Abbildung 3.10 dargestellt, vollständig eliminiert. Dabei können – wie auch bei den vorgestellten Vorgän-

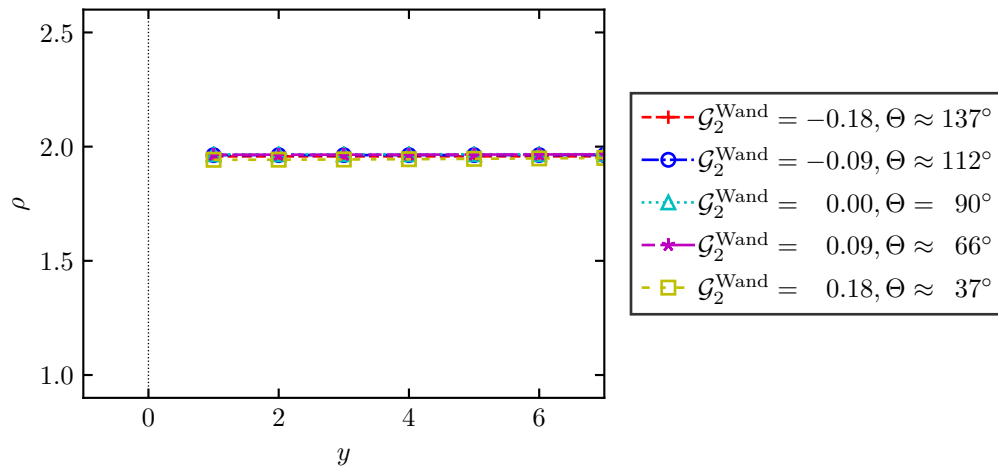


Abbildung 3.10: Fluid-Festkörper-Grenzfläche eines auf einer Oberfläche ruhenden Tropfens für verschiedene Kontaktwinkel θ unter Verwendung der modifizierten Interaktionskräfte – jeweils mit optimierter Randbehandlung.

gerverfahren – alle Kontaktwinkel zwischen 0° und 180° simuliert werden. Abbildung 3.11 zeigt die Abhängigkeit des Kontaktwinkels θ von $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ für alle möglichen Kombinationen der unterschiedlichen präsentierten Fluid-Fluid- beziehungsweise Fluid-Festkörper-Interaktionen. Dabei ist zu sehen, dass bereits die Verwendung von $\mathbf{F}_k^{\text{SC},*}$ in Kombination mit beliebigen Fluid-Festkörper-Interaktionen zu einer erheblichen Reduktion der notwendigen Fluid-Festkörper-Kräfte führt (Stauchung der Kurven). Die Kombination der in diesem Abschnitt vorgestellten Ansätze führt jedoch zu den geringsten Kräften.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Verwendung des optimierten Verfahrens zur Modellierung von Kontaktwinkeln sowohl die Fluid-Festkörper-Grenzfläche eliminiert als auch ohne Einschränkungen das gesamte Spektrum an Kontaktwinkeln ermöglicht, wobei die analytische Näherungsformel zur Bestimmung des Kontaktwinkels ihre Gültigkeit verliert. Die dargestellte Formulierung lässt sich mit bestehenden Ansätzen kombinieren, da keine neuen Parameter nötig sind und lediglich die Indikatorfunktion $s(\mathbf{x})$ als zusätzliche Variable in der Berechnung der Fluid-Fluid-Interaktion auftaucht.

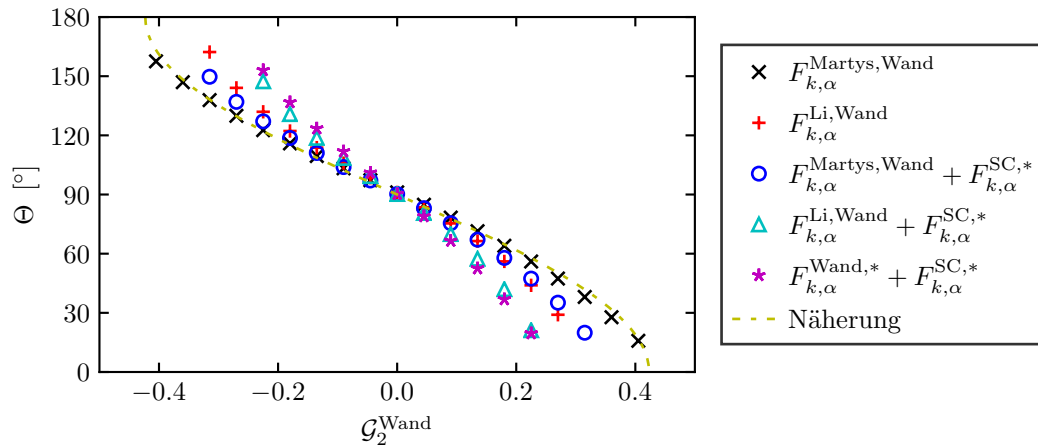


Abbildung 3.11: Fluid-Festkörper-Interaktionen im Vergleich. Durch die Verwendung der optimierten Randbehandlung können die notwendigen Kräfte erheblich minimiert werden. Für die Kombination von $F_k^{SC,*}$ mit $F_k^{Wand,*}$ sind die geringsten Kräfte ($\sim \mathcal{G}^{\text{Wand}}$) nötig.

Mit den optimierten Formulierungen der einzelnen Interaktionskräfte – Gleichungen (3.20) und (3.21) – wird die gesamte Kontaktwinkelmodellierung auf den Bereich beschränkt, in dem die Fluid-Fluid-Grenzfläche den Festkörper berührt, also ein zum Festkörper paralleler Potentialgradient vorliegt. In Simulationen mit lokal und zeitlich veränderlichen Kontaktwinkeln, wird also ausschließlich die Dreiphasenkontaktlinie bewegt. Ist der Tropfen wandfern, entfallen alle entsprechenden Terme. Im Gegensatz dazu wird bei Verwendung der Vorgängeransätze grundsätzlich – also auch fernab der Fluid-Fluid-Grenzfläche – Fluid in Richtung Festkörper oder von diesem weg beschleunigt, unabhängig davon ob der betrachtete Tropfen in Kontakt mit dem Festkörper steht. Dieser zusätzliche Massentransport der gelösten Dichten $\rho^{\text{gelöst}}$ führt zu einer Verfälschung der Dynamik und kann bei großen Grenzflächenspannungen bereits bei kleinen, wandnahen Dichtefluktuationen zur Bildung zusätzlicher, unphysikalischer Scheintropfen fernab des Hauptteils einer Phase führen. Die Ausprägung dieser und deren Elimination durch die präsentierten Weiterentwicklungen werden im Folgenden Abschnitt gezeigt.

3.3.2.3 Elimination Scheintröpfchen, Steigerung der Stabilität

Im Folgenden wird das Auftreten von Scheintröpfchen am Beispiel des He-Kräftechemas (da es zu den geringsten Fehlern \mathcal{R}_S in den makroskopischen Gleichungen führt, siehe Abschnitt 3.1.4) demonstriert und gezeigt, dass dieses Phänomen bei Verwendung der optimierten Randbehandlung nicht auftritt.

Abbildung 3.12 zeigt die Simulation eines stationären Tropfens auf einer Festkörperoberfläche für $\mathcal{G} = 2.2$, $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}} = 0.36$ unter Verwendung der Wandinteraktion $F_k^{\text{Martys,Wand}}$. Die Anfangswerte für die gelösten Dichten beziehungsweise Hauptdich-

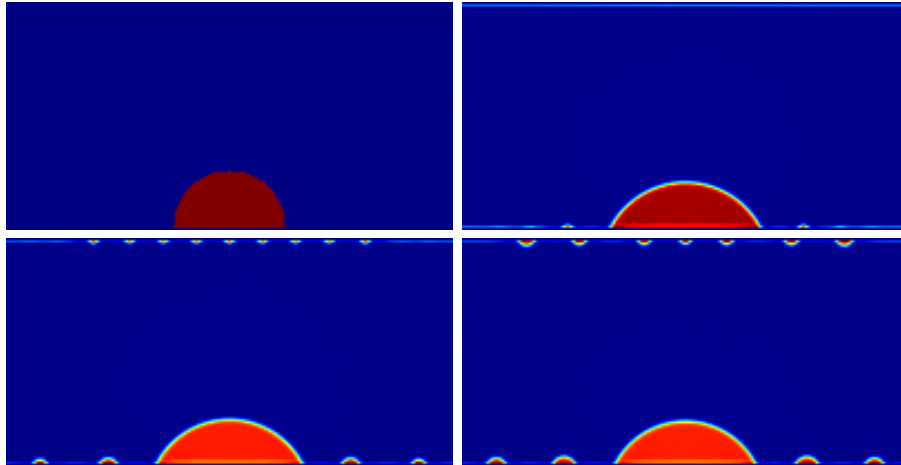


Abbildung 3.12: Ausprägung von Scheintröpfchen auf hydrophiler Oberfläche. Von links nach rechts sind die Zeitschritte $t = 0, 20\,000$ (oben) und $t = 50\,000, 100\,000$ dargestellt.

ten wurden (vorab) in einer zusätzlichen Simulation eines stationären Tropfens ermittelt und betragen $\rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = 0.007619601$ beziehungsweise $\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = 2.058536$. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich abseits des Hauptteils des Tropfens zusätzliche *Scheintröpfchen* ausprägen, was aufgrund der Massenerhaltung dazu führt, dass der Tropfen selbst schrumpft.

Dieses Phänomen ist auf die wandnormalen Komponenten der Interaktionskraft zurückzuführen, welche an allen Randpunkten wirken und bei kleinen Störungen in der Dichte dazu führen, dass sich Masse in Form eines Tröpfchens anreichert. Diese Störungen können einerseits auf die Anfangsbedingungen (initial scharfe Grenzfläche) und andererseits auf Scheingeschwindigkeiten zurückgeführt werden, welche an der Fluid-Fluid-Grenzfläche entstehen. Die Scheingeschwindigkeiten wiederum sind auf die Fluid-Fluid-Interaktionskraft zurückzuführen, welche sich dort, wo die Grenzfläche den Festkörper berührt, mit der Fluid-Festkörper-Interaktion überlagern, sodass die Geschwindigkeiten dort maximal werden. In zusätzlichen Simulationen, in denen die Fluid-Festkörper-Interaktion mit höher-isotropen Diskretisierungen berechnet wurde, konnte das Auftreten von Scheintröpfchen reduziert werden.

Die Ausprägung der Scheintröpfchen wird zudem durch schlechte Anfangsbedingungen gefördert. Wird beispielsweise die gelöste Dichte zu groß gewählt, diffundiert Masse aus der Umgebung in Richtung des Tropfens, welche bei einer Störung zum Rand gezogen werden kann.

Um den Erfolg des optimierten Verfahrens zu demonstrieren, wurde die Simulation aus Abbildung 3.12 noch einmal mit optimierten Randbedingungen ($\mathbf{F}_k^{\text{Wand},*}$ und $\mathbf{F}_k^{\text{SC},*}$) durchgeführt. Abbildung 3.13 zeigt die Ergebnisse im Vergleich. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich weder eine Fluid-Festkörper-Grenzfläche ausprägt noch Scheintröpfchen entstehen.

Abbildung 3.14 zeigt die Simulation aller möglichen Kontaktwinkel unter Verwen-

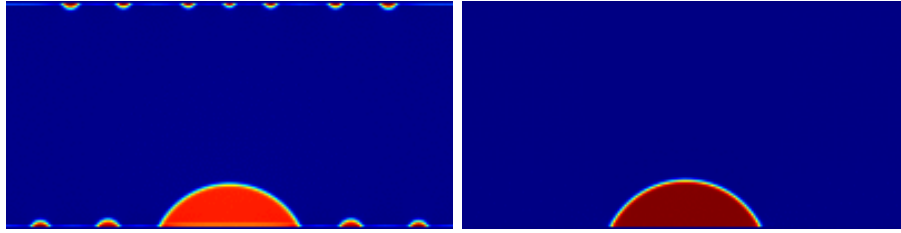


Abbildung 3.13: Dichteverteilungen verschiedener Fluid-Festkörper-Interaktionen unter Verwendung des He-Kräftechemas und $\mathcal{G} = 2.2$ nach 100 000 Iterationen. Für den gleichen Kontaktwinkel $\theta \approx 64^\circ$ müssen unterschiedliche $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ verwendet werden. Links: $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ mit $\rho_k^{\text{Wand}} = 0$, $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}} = 0.36$. Rechts: Optimiertes Verfahren $\mathbf{F}_k^{\text{Wand,*}}$ mit $\mathbf{F}_k^{\text{SC,*}}$, $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}} \approx 0.1249$; es prägen sich keine Scheintröpfchen aus.

derung der Fluid-Festkörper-Interaktionen $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ (obere Grafik), $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ (mittlere Grafik) und der optimierten Interaktionskräfte $\mathbf{F}_k^{\text{Wand,*}}$, $\mathbf{F}_k^{\text{SC,*}}$ (untere Grafik) für verschiedene Werte \mathcal{G} . Simulationen, bei denen sich Scheintröpfchen ausprägten oder Instabilitäten auftraten, wurden in der Darstellung vernachlässigt. Dabei ist deutlich erkennbar, dass $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ lediglich einen geringfügig größeren Stabilitäts- beziehungsweise scheintröpfchenfreien Bereich aufweist als $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$. Insgesamt sind jedoch beide bei Verwendung dieses Kräfteschemas nur für geringe Werte \mathcal{G} nutzbar. Im Gegensatz dazu kann mit dem optimierten Verfahren eine große Bandbreite abgedeckt werden. Solange die Simulationen stabil sind, sind sie frei von Scheintröpfchen. Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass die optimierte Randbehandlung das Auftreten von Scheintröpfchen verhindert und den Stabilitätsbereich in Simulationen mit Festkörperändern deutlich erhöht. An dieser Stelle ist anzumerken, dass dieses Phänomen unter Verwendung des Shan-Kräftechemas zwar ebenfalls auftritt, jedoch bedeutend weniger ausgeprägt ist. Die optimierten Fluid-Fluid- und Fluid-Festkörper-Interaktionen können jedoch unabhängig vom Kräfteschema angewendet werden und führen, wie gezeigt, zu einer deutlichen Verbesserung von Simulationen dieser Art.

3.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde das PP-Modell für Mehrphasenströmungen vorgestellt, welches auf der Einbringung einer pseudopotentialbasierten Interaktionskraft basiert. Ausgehend von der allgemeinen Formulierung dieser Volumenkraft, wurden Spezialisierungen für SCMP- und MCMP-Strömungen präsentiert und auf Besonderheiten in der Kraftberechnung (Finite-Differenzen-Approximationen mit verbesserter Isotropie) sowie auf deren Einbringung in die Evolutionsgleichung (Kräfteschemata) einge-

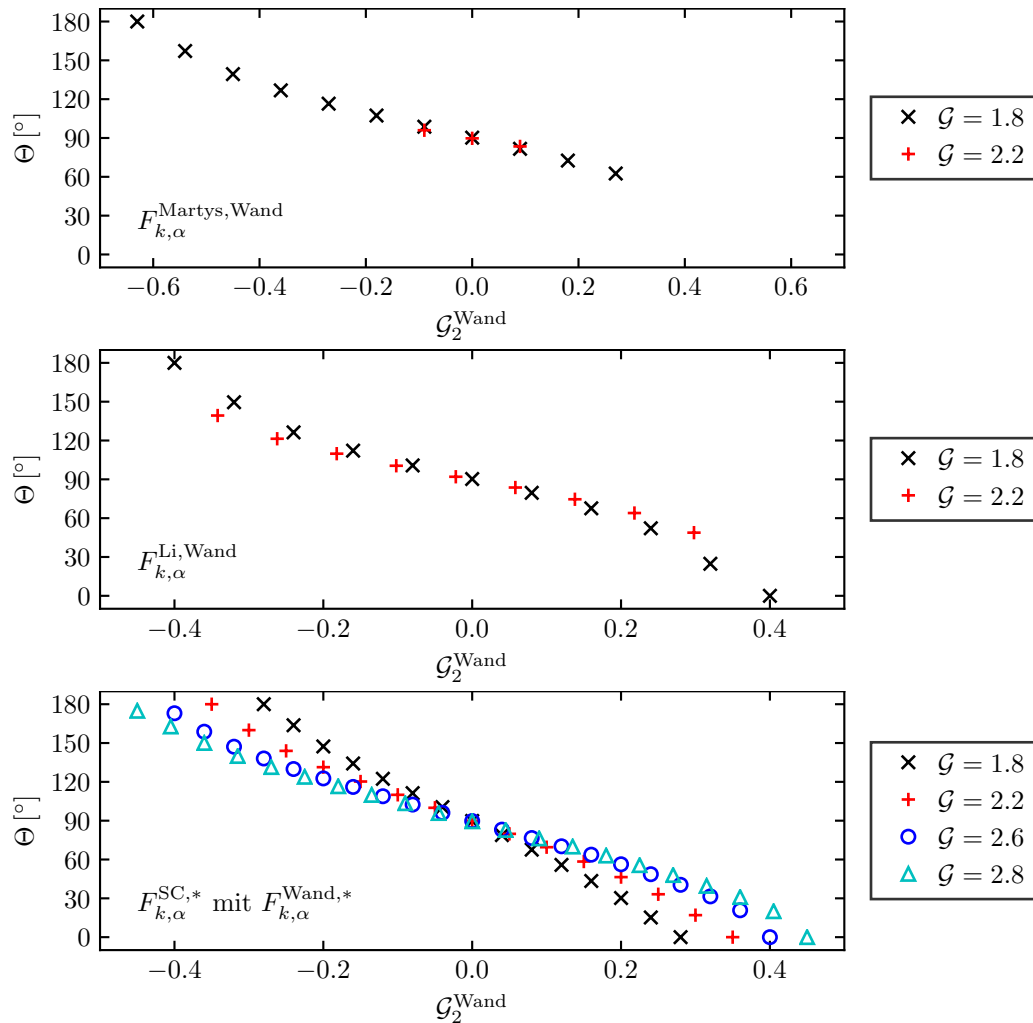


Abbildung 3.14: Stabilitätsbereich verschiedener Fluid-Festkörper-Interaktionen unter Verwendung des He-Kräftechemas. Bereits für geringe Werte \mathcal{G} prägen sich bei Verwendung von $\mathbf{F}_k^{\text{Martys,Wand}}$ (oben) Scheintropfchen aus, wobei eine weitere Steigerung der Fluid-Fluid-Interaktion (\mathcal{G}) zu Instabilitäten führt. Der Stabilitätsbereich ist für $\mathbf{F}_k^{\text{Li,Wand}}$ (Mitte) nur geringfügig größer. Bei Verwendung der optimierten Randbehandlung ($\mathbf{F}_k^{\text{SC},*}$ mit $\mathbf{F}_k^{\text{Wand},*}$) ist es möglich, über eine große Bandbreite an Fluid-Fluid-Interaktionen stabile Simulationen durchzuführen (unten). Dabei ist anzumerken, dass für dieses Kräftechema mit dieser Potentialfunktion Simulationen in voll periodischen Gebieten, in denen nur die Fluid-Fluid-Interaktion wirkt, bis $\mathcal{G} \approx 3$ stabil sind. Der Stabilitätsbereich bleibt also bei Verwendung des optimierten Verfahrens nahezu unverändert.

gangen.

Die Problematik unphysikalischer Scheingeschwindigkeiten an Phasengrenzen wurde ausführlich dargestellt, wobei sowohl die Ursachen für ihr Auftreten als auch für ihre Struktur präsentiert wurden. Die für ihre Entstehung zuständigen Mechanismen wurden dabei in einen globalen Zusammenhang gesetzt, in welchem die Wirkung verschiedener bestehender Methoden zur Reduktion von Scheingeschwindigkeiten erklärt werden können.

Abschließend wurde anhand bestehender Ansätze gezeigt, wie unterschiedliche Benetzungseigenschaften von Festkörpern modelliert werden können. Die bei diesen Verfahren entstehenden, zusätzlichen Fluid-Festkörper-Grenzflächen sowie die unphysikalischen Scheintröpfchen konnten durch eine *neuartige Methode* auf Basis einer optimierten Randbehandlung vollständig eliminiert werden. Für fortgeschrittene Kräfteschemata konnte so das Auftreten von Scheintröpfchen unterdrückt und der Stabilitätsbereich bei der Simulation wandgebundener Strömungen erheblich gesteigert werden.

4 Numerische Optimierung

„Mistakes are the portals to discovery.“

– James Joyce

In diesem Kapitel wird eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte *neuartige Methode* zur numerischen Optimierung des PP-Modells vorgestellt, mit der unphysikalische Scheingeschwindigkeiten (siehe Abschnitt 3.2) erheblich reduziert und damit sowohl die Genauigkeit als auch die Stabilität des Modells verbessert werden können. Für diese Optimierung wird die Finite-Differenzen-Approximation der Interaktionskraft (3.1) um zusätzliche Freiheitsgrade erweitert, welche anhand eines Testfalls numerisch angepasst werden. Diese optimierten Diskretisierungen benötigen im Vergleich zu den in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten Approximationen höherer Isotropie weniger Gitterpunkte und führen zu einer deutlich stärkeren Reduktion unphysikalischer Scheingeschwindigkeiten. Die Optimierung wird am Beispiel eines SCMP-Systems durchgeführt; sie lässt sich jedoch auch auf MCMP- oder kombinierte Systeme übertragen (siehe Kategorien ii) und iii) in der Einführung von Kapitel 3).

Es ist anzumerken, dass Teile der Ergebnisse dieses Kapitels bereits in Referenz [90] veröffentlicht sind. Grafiken und Texte wurden daher für den Kontext dieser Arbeit aufbereitet, angepasst und ergänzt.

4.1 Ansatz

Die Finite-Differenzen-Approximation (3.5) für die Berechnung der Interaktionskraft in einem SCMP-System (3.6) beinhaltet Gittertensoren (2.13) beliebig hoher Ordnung. Für Isotropie vom Grad n müssen diese

$$\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)} = \begin{cases} c_s^{(n)} \Gamma_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)} & \text{für gerade } n, \\ 0 & \text{für ungerade } n \end{cases}$$

erfüllen, wobei $\Gamma^{(n)}$ der Summe aller möglichen paarweisen Produkte von Kronecker Delta mit paarweisen Indizes entspricht [185]. Für Isotropie vierter Ordnung gilt für die Gewichte \mathcal{W}_i und Verschiebungsvektoren \mathcal{C}_i (siehe Abschnitt 3.1.1) also

$$\begin{aligned}\sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,\alpha} \mathcal{C}_{i,\beta} &= \delta_{\alpha\beta} c_s^2, \\ \sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,\alpha} \mathcal{C}_{i,\beta} \mathcal{C}_{i,\gamma} \mathcal{C}_{i,\delta} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}).\end{aligned}$$

Ungerade Ordnungen sind für die hier betrachteten *punktsymmetrischen* Diskretisierungen automatisch erfüllt und werden deshalb an dieser Stelle vernachlässigt. Bei Beschränkung auf zwei Dimensionen erhält man die Bedingungen [151]

$$\sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^2 = c_s^2, \quad \sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^4 = 3c_s^4, \quad \sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^2 \mathcal{C}_{i,y}^2 = c_s^4.$$

Diese Ausdrücke können darüber hinaus zu

$$\sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^2 = c_s^2, \quad \frac{\sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^4}{\sum_i \mathcal{W}_i \mathcal{C}_{i,x}^2 \mathcal{C}_{i,y}^2} = 3$$

beziehungsweise mit normierten Gewichten (3.4) zu

$$\sum_i \mathcal{W}_i^* \mathcal{C}_{i,x}^2 = 1, \quad \frac{\sum_i \mathcal{W}_i^* \mathcal{C}_{i,x}^4}{\sum_i \mathcal{W}_i^* \mathcal{C}_{i,x}^2 \mathcal{C}_{i,y}^2} = 3 \quad (4.1)$$

vereinfacht werden. Unter Verwendung der acht unmittelbaren Nachbarpunkte mit den Gewichten \mathcal{W}_1^* und \mathcal{W}_2^* (Punkte gleichen Abstands werden identisch gewichtet) ist dieses Gleichungssystem eindeutig lösbar (führt zur Diskretisierung $\mathcal{E}^{(4)}$, siehe Tabelle 3.1).

Es wird nun ein weiterer Freiheitsgrad $\mathcal{W}_4^* = \mathcal{W}^* (|\mathcal{C}_4|^2)$ eingeführt, welcher jedoch nicht der Maximierung der Isotropie dient, sondern im Bezug auf Scheingeschwindigkeiten numerisch optimiert wird. Der entsprechende Vektorsatz ist in Abbildung 4.1 und Tabelle 4.1 dargestellt. In diesem Fall lassen sich die Isotropiebedingungen vierter Ordnung (4.1) durch

$$\begin{cases} 2\mathcal{W}_1^* + 4\mathcal{W}_2^* + 8\mathcal{W}_4^* = 1, \\ \mathcal{W}_1^* - 4\mathcal{W}_2^* + 16\mathcal{W}_4^* = 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

ausdrücken, sodass nach Variation von \mathcal{W}_4^* die Gewichte \mathcal{W}_1^* und \mathcal{W}_2^* entsprechend angepasst werden können.

Im Folgenden wird ein Testfall für die numerische Optimierung von \mathcal{W}_4^* definiert.

4.2 Definition des Testfalls

Als Testfall dient ein statischer, gravitationsfreier, flüssiger Tropfen der Dichte $\rho_{\text{flüssig}}$ im Zentrum eines doppelt-periodischen, quadratischen Rechengebiets mit 201×201

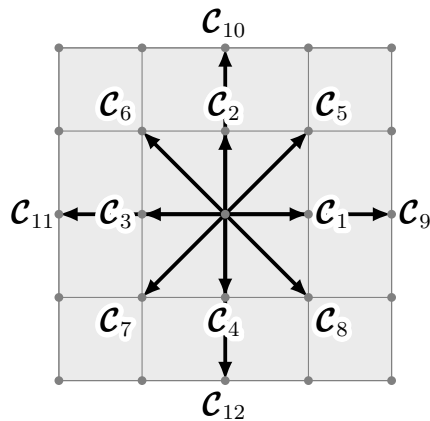


Abbildung 4.1: Finite-Differenzen für numerische Optimierung in 2D.

Tabelle 4.1: Vektorsatz für numerisch optimierte Finite-Differenzen. Um mit der Nummerierung des Geschwindigkeitssatzes konsistent zu bleiben, beginnt der Index bei eins (Nullvektor entfällt).

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$C_{i,x}$	1	0	-1	0	1	-1	-1	1	2	0	-2	0
$C_{i,y}$	0	1	0	-1	1	1	-1	-1	0	2	0	-2

Gitterpunkten, wo er umgeben von einer Dampfphase der Dichte ρ_{Dampf} ist. Die initiale Dichteverteilung wird mit

$$\rho(x, y) = \frac{\rho_{\text{flüssig}} + \rho_{\text{Dampf}}}{2} - \frac{\rho_{\text{flüssig}} - \rho_{\text{Dampf}}}{2} \tanh\left(\frac{2\left(\sqrt{(x - x_z)^2 + (y - y_z)^2} - r\right)}{\mathcal{B}}\right)$$

angenommen, wobei $r = 32$ dem Radius beziehungsweise x_z, y_z dem Mittelpunkt des Tropfens entsprechen und $\mathcal{B} = 10$ die initiale Breite der Grenzfläche angibt. Ein Schema der Anfangsbedingungen ist in Abbildung 4.2 dargestellt.

Die Verwendung einer über mehrere Gitterpunkte gestreckten Grenzfläche reduziert

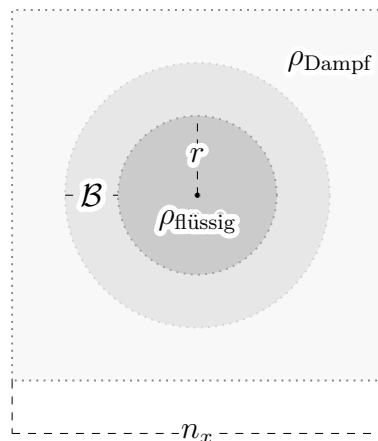


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des statischen Tropfens in zwei Dimensionen.

dabei das Risiko von Instabilitäten [82]. Als Anfangsdichten ρ_{Dampf} und $\rho_{\text{flüssig}}$ werden die Gleichgewichtswerte verwendet, welche bei gegebener Temperatur $\sim 1/\mathcal{G}$ und Potentialfunktion $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$ (also gegebener Zustandsgleichung) aus dem Drucktensor (3.10) ermittelt werden können [72, 157]. Die Herleitung der entsprechenden Gleichungen sowie ein mögliches Vorgehen zu deren Lösung ist ausführlich in Anhang G dargestellt.

Als Konvergenzkriterium wird Gleichung (3.18), also $\mathcal{V}(\mathbf{u}^p) < 10^{-7}$, verwendet [70], wobei \mathbf{u}^p der physikalischen Geschwindigkeit entspricht (abhängig vom Kräfteschema, siehe Tabelle 3.2). Schließlich wird die Optimierung der Einfachheit halber unter Verwendung des Shan-Kräfteschemas durchgeführt. Der Einfluss des Kräfteschemas auf die Optimierung und eine mögliche Generalisierung wird in der Zusammenfassung dieses Kapitels diskutiert.

4.3 Optimierung

Für die numerische Optimierung wurde die frei verfügbare Software *Dakota* [1] verwendet. Als erste Schätzung wurden die Gewichte so gewählt, dass die Diskretisierung die Isotropiebedingungen bis zur sechsten Ordnung erfüllt, also $\mathcal{W}_1^* = 4/15$, $\mathcal{W}_2^* = 1/10$ und $\mathcal{W}_4^* = 1/120$ (siehe Tabelle 3.1). Im Folgenden wurde die Simulation durchgeführt und jeweils die maximale Scheingeschwindigkeit $\max|\mathbf{u}^p|$ aufgenommen, der freie Parameter angepasst und die Simulation erneut durchgeführt, solange bis ein Minimum gefunden ist. Dabei ist anzumerken, dass das Abtasten des gesamten Parameterraums ergab, dass er (a) aus Stabilitätsgründen klein ist, es (b) nur ein globales Minimum gibt und (c) sich $\max|\mathbf{u}^p(\mathcal{W}_4^*)|$ nicht sprunghaft ändert (siehe Abbildung 4.3). Da

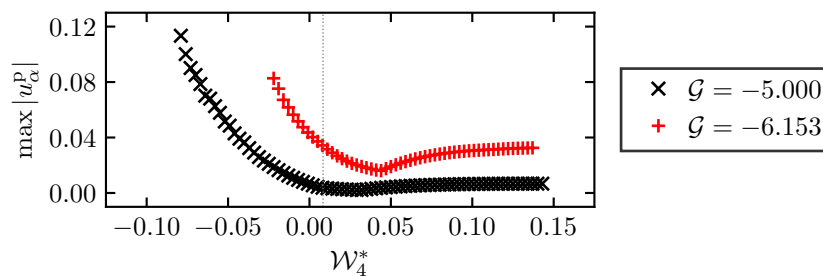


Abbildung 4.3: Parameterraum für eindimensionale numerische Optimierung bei $\mathcal{G} = -5, -6.153$ und $\tau = 1$. Für $\mathcal{W}_4^* = 1/120$ (angedeutet durch gepunktete Linie) ist die Ordnung der Isotropie maximal, hier $\mathcal{E}^{(6)}$. Dargestellt ist der gesamte Stabilitätsbereich – größere oder kleinere Werte für \mathcal{W}_4^* führen zu Instabilitäten. Mit sinkender Temperatur $\sim 1/\mathcal{G}$ steigt der Dichteunterschied zwischen Flüssig- und Dampfphase, was zu steileren Dichtegradierten und einem eingeschränkten Stabilitätsbereich führt.

in diesem Fall ein lokales Optimierungsverfahren ausreicht, wurde im Folgenden die Conjugate-Gradient-Methode verwendet [37].

Die Optimierung erfolgte dann für verschiedene Kombinationen von Temperaturen $T_{\text{red}} \in [0.6, 0.9]$ und Relaxationszeiten $\tau \in [0.8, 1.1]$, wobei $T_{\text{red}} = T/T_{\text{krit}} = \mathcal{G}_{\text{krit}}/\mathcal{G}$ der *reduzierten Temperatur* entspricht (für die verwendete Potentialfunktion ist $\mathcal{G}_{\text{krit}} = -4$).

Abbildung 4.4 zeigt das Ergebnis der Optimierung inklusive eines Regressionspolynoms zur Bestimmung des optimalen Koeffizienten in Abhängigkeit von \mathcal{G} und τ . Dieses ist gegeben durch

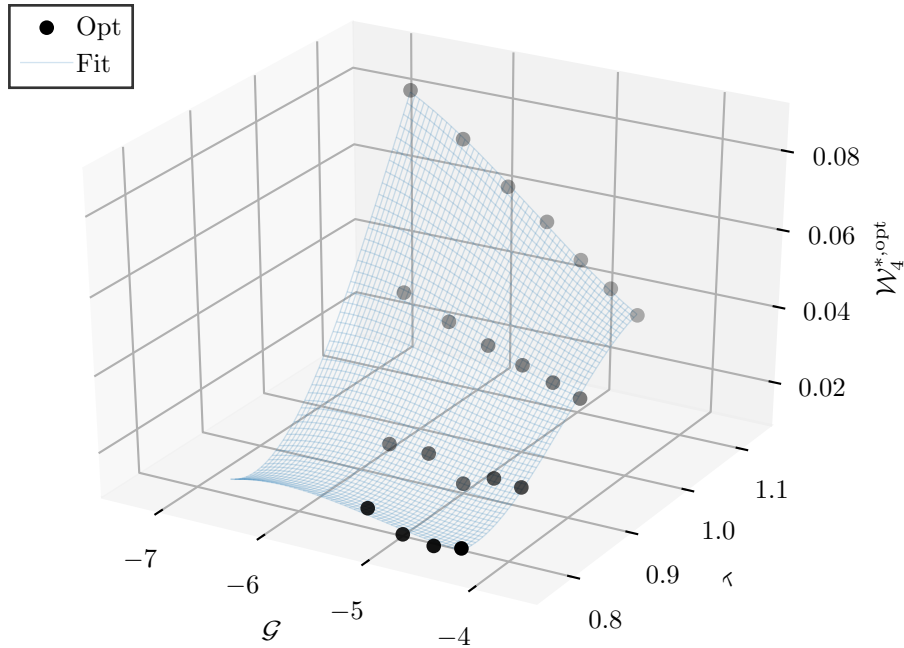


Abbildung 4.4: Ergebnis der numerischen Optimierung des Gewichts \mathcal{W}_4^* für verschiedene Temperaturen $\sim 1/\mathcal{G}$ und Relaxationszeiten τ .

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_4^{*,\text{opt}}(\mathcal{G}, \tau) = & 0.00208807\mathcal{G}^3 - 2.36216\tau^3 + 0.00468336\mathcal{G}^2\tau - 0.319342\mathcal{G}\tau^2 \\ & + 5.47843\tau^2 + 0.0291151\mathcal{G}^2 + 0.596891\mathcal{G}\tau - 0.105849\mathcal{G} \\ & - 3.99755\tau + 1.18719. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Zusammen mit den Isotropiebedingungen (4.2) ist die numerisch optimierte Finite-Differenzen-Formel dann durch die Gewichte $\mathcal{W}_4^{*,\text{opt}}(\mathcal{G}, \tau)$, $\mathcal{W}_2^{*,\text{opt}}$ beziehungsweise $\mathcal{W}_1^{*,\text{opt}}$ und dem Vektorsatz aus Tabelle 4.1 vollständig definiert.

4.4 Validierung

Im Folgenden wird die numerisch optimierte Diskretisierung mittels Simulationen statischer und dynamischer, anfänglich elliptischer, oszillierender Tropfen analysiert. Da-

für wird der Einfluss der Diskretisierung auf die Gleichgewichtseigenschaften (Dampfdichte ρ_{Dampf} , Flüssigdichte $\rho_{\text{flüssig}}$ und Oberflächenspannung σ), sowie auf die natürlichen Schwingungsfrequenzen ω untersucht. Zum Vergleich werden Diskretisierungen höherer Ordnung in der Isotropie verwendet, im Detail $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$ und $\mathcal{E}^{(8)}$. Da die optimierte Diskretisierung ebenfalls vierter Ordnung in der Isotropie ist, wird sie im Folgenden als $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ bezeichnet.

4.4.1 Statischer Tropfen: Gleichgewichtsdichten

Die Initialisierung und das Konvergenzkriterium der Simulationen zur Analyse der Gleichgewichtseigenschaften wurden wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Abbildung 4.5 zeigt die mit $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ simulierten *reduzierten* Dichten $\rho_{\text{red}} = \rho/\rho_{\text{krit}}$ (für die verwendete Potentialfunktion ist $\rho_{\text{krit}} = \log(2)$) für Flüssig- und Dampfphase bei verschiedenen Relaxationszeiten.

Auf der einen Seite stimmen die Flüssigdichten für alle Relaxationszeiten gut mit de-

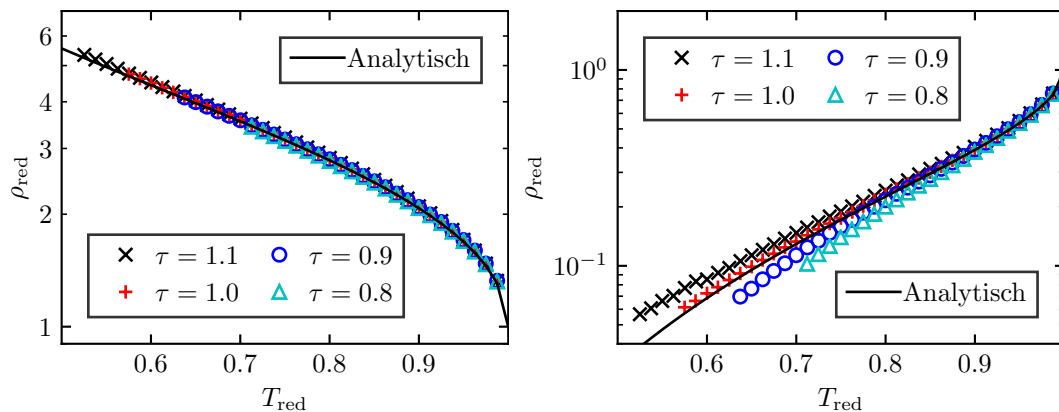


Abbildung 4.5: Simulierte, *reduzierte* Gleichgewichtsdichten mit $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ für verschiedene τ für die Flüssigphase links und die Dampfphase rechts. Die Dampfdichten weisen eine starke Abhängigkeit von der Relaxationszeit (und damit von der Viskosität) auf, wobei sich der Stabilitätsbereich mit τ verkleinert. Die analytischen Dichten wurden auf Basis der mechanischen Stabilitätsbedingung ermittelt, siehe Anhang G.

nen der analytischen Lösung überein. Auffällig ist dabei, dass der Stabilitätsbereich mit sinkender Relaxationszeit schrumpft, also die geringst mögliche Temperatur erhöht wird. Dies ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Referenz [172], wo derselbe Effekt für die Diskretisierung $\mathcal{E}^{(4)}$ beobachtet wurde. Andererseits wurden die Dampfdichten für hohe Relaxationszeiten zunehmend über- beziehungsweise für geringe Relaxationszeiten unterschätzt. Dies ist in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Referenz [70], welche das gleiche Verhalten für die Carnahan-Starling Zustandsgleichung aufzeigen. Diese Abhängigkeit der Gleichgewichtsdichten vom Parameter τ und damit von der Viskosität ist auf durch das Kräf-

Tabelle 4.2: Laufzeitvergleich unterschiedlicher Diskretisierungen. Es wurden jeweils 10 000 Iterationen auf einem 201×201 Rechengebiet durchgeführt (ein Prozess auf Intel Xeon Gold 6130, Skylake EP).

Diskretisierung	Gitterpunkte	Laufzeit [s]
$\mathcal{E}^{(4)}$	8	69.165
$\mathcal{E}^{(6)}, \mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$	12	91.105
$\mathcal{E}^{(8)}$	24	145.853

teschema bedingte Fehlerterme \mathcal{R}_S in den makroskopischen Gleichungen zurückzuführen, welche bei Verwendung eines alternativen Kräfteschemas reduziert werden können [123, 141, 191].

Um die Qualität der simulierten Gleichgewichtsdichten beurteilen zu können, wird im Folgenden der relative Fehler $\mathcal{I}_{\text{rel}} = |\rho_{\text{numerisch}} - \rho_{\text{analytisch}}| / \rho_{\text{analytisch}}$ verwendet. Dieser ist in Abbildung 4.6 für alle verwendeten Diskretisierungen dargestellt. Zunächst ist dabei erkennbar, dass, obwohl der Verlauf der Fehlerkurven stark variiert, die Fehler für die jeweilige Phase beziehungsweise die jeweilige Relaxationszeit von derselben Größenordnung sind. Für $\tau = 1.1$ sind die Fehler der $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ -Diskretisierung bei niedrigen Temperaturen signifikant kleiner als bei Verwendung der alternativen Diskretisierungen. Dies ist besonders mit Blick auf die Dampfdichten von Vorteil, da diese Fehler etwa zwei Größenordnungen größer sind als die der Flüssigphase. Im Fall $\tau = 1.0$ ist die Verbesserung für die Dampfphase noch erheblich, während der Fehler in der Flüssigphase oberhalb derer der $\mathcal{E}^{(4)}$ - und $\mathcal{E}^{(6)}$ Diskretisierungen liegt. Der positive Effekte verringert sich zunehmend bei Verwendung geringerer Relaxationszeiten. So sind die Fehler beim optimierten Verfahren für $\tau = 0.9$ in der *Dampfphase* zwar noch geringer als bei den Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$ und $\mathcal{E}^{(6)}$, sie sind jedoch größer als bei Nutzung der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung.

Die optimierte Diskretisierung $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ (12 Gitterpunkte) führt also zu ähnlichen Fehlern in den Gleichgewichtsdichten (Größenordnung) wie die bestehenden Diskretisierungen, kann diese jedoch gegenüber $\mathcal{E}^{(4)}$ und sogar $\mathcal{E}^{(6)}$ deutlich reduzieren. Im Bezug auf die Dampfdichte können diese Fehler in Abhängigkeit der Relaxationszeit sogar bedeutend kleiner sein als beispielsweise die der aufwändigeren Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung (24 Gitterpunkte). So ist es möglich bei erheblich reduziertem Rechenaufwand genauere Dampfdichten zu erhalten. Um dies zu verdeutlichen wurde ein Laufzeitvergleich der Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$ beziehungsweise $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ (unterscheiden sich nur in den Koeffizienten) und $\mathcal{E}^{(8)}$ durchgeführt. Tabelle 4.2 zeigt die Ergebnisse. So kann bei Verwendung von $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ die Rechenzeit im Vergleich zu $\mathcal{E}^{(8)}$ um 37% gesenkt werden. Da die Anzahl verwendeter Gitterpunkte mit dem Grad der Isotropie in drei Dimensionen drastischer ansteigt (siehe Tabelle 3.1), ist das Einsparpotential dort deutlich größer.

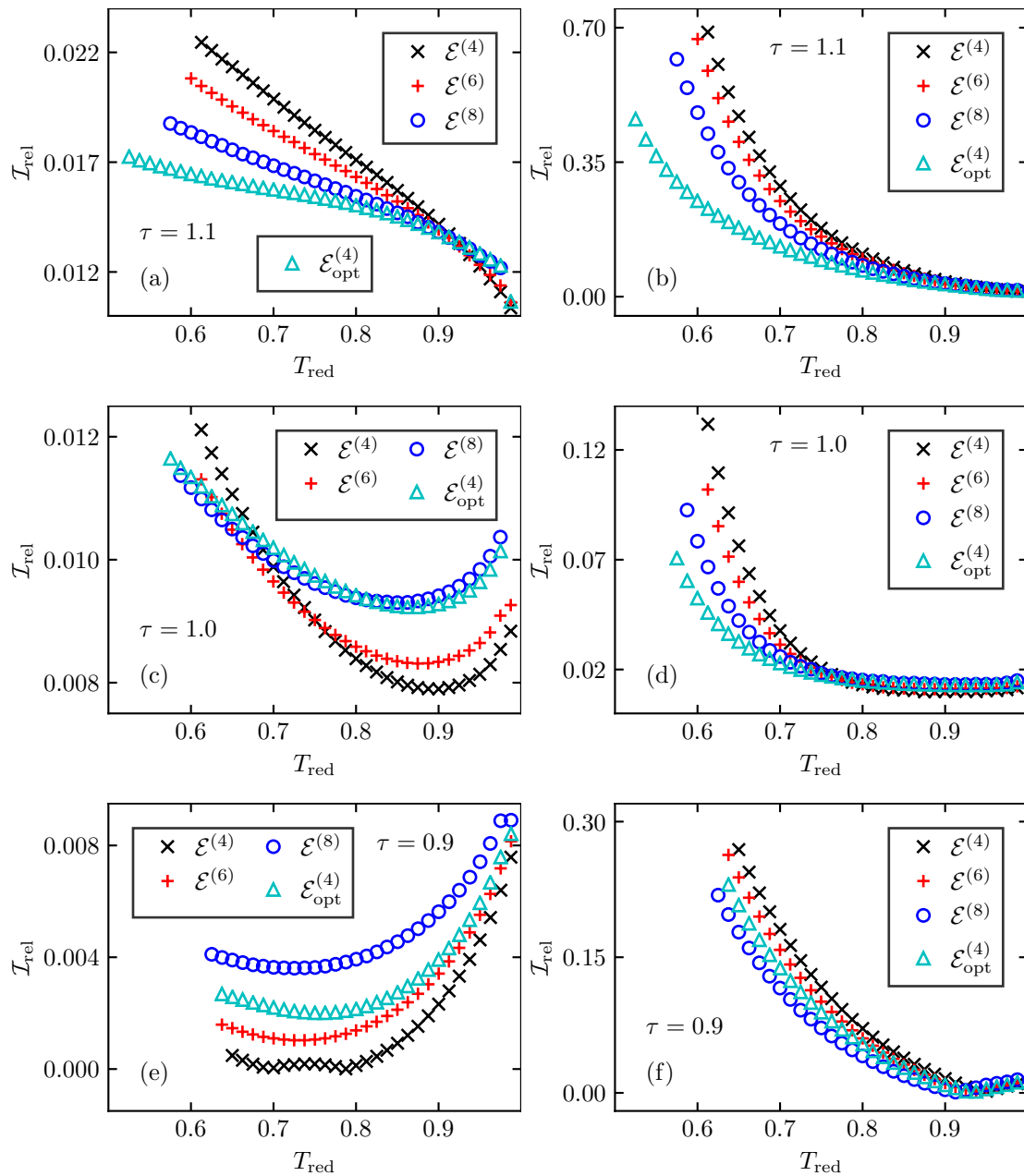


Abbildung 4.6: Relative Fehler \mathcal{I}_{rel} der Gleichgewichtsdichten $\rho_{\text{flüssig}}$ und ρ_{Dampf} für die Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$. Zu sehen sind die Fehler für die Flüssigphase *links* für (a) $\tau = 1.1$, (c) $\tau = 1$ und (e) $\tau = 0.9$, sowie für die Dampfphase *rechts* für (b) $\tau = 1.1$, (d) $\tau = 1$ und (f) $\tau = 0.9$. Für große Relaxationszeiten sind die Fehler für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ geringer, besonders in der Dampfphase. Für kleine Relaxationszeiten ($\tau = 0.9$) sinkt der Stabilitätsbereich und die relativen Fehler gleichen sich zunehmend an. Generell sind die Fehler für alle getesteten Fälle von ähnlicher Größenordnung.

4.4.2 Statischer Tropfen: Scheingeschwindigkeiten

In diesem Abschnitt werden die Scheingeschwindigkeiten der unterschiedlichen Diskretisierungen für die Simulationen der statischen Tropfen verglichen. Diese sind in Abbildung 4.7 in Abhängigkeit des Dichteverhältnisses $\rho_{\text{flüssig}}/\rho_{\text{Dampf}}$ dargestellt. Für $\tau = 1.1$ führt $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ im Vergleich zu den anderen Schemata zu deutlich geringeren Scheingeschwindigkeiten. So betragen diese beispielsweise bei einem Dichteverhältnis von ≈ 25 für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ gerade 0.0106 und damit nur 28 % des Wertes für $\mathcal{E}^{(4)}$ mit 0.0378. Infolgedessen wird der Bereich der zugänglichen Dichteverhältnisse vergrößert beziehungsweise die kleinst mögliche Temperatur reduziert ($\rho_{\text{flüssig}}/\rho_{\text{Dampf}} \sim 1/T$). Dies gilt gleichermaßen für $\tau = 1$, allerdings ist die Verbesserung gegenüber der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung weniger ausgeprägt. Bei weiterer Reduktion der Relaxationszeit wird dieser Effekt weiter vermindert, sodass bei $\tau = 0.9$ die parasitären Geschwindigkeiten für alle möglichen Dichteverhältnisse nur noch geringfügig unterhalb der des $\mathcal{E}^{(6)}$ -Schemas liegen, welches – wie $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ – 12 Gitterpunkte benötigt. Zusammenfassend lässt sich jedoch sagen, dass die Scheingeschwindigkeiten bei entsprechender Skalierung eines Problems erheblich gesenkt werden können, was zu genaueren Geschwindigkeitsverteilungen und stabileren Simulationen führt.

4.4.3 Statischer Tropfen: Oberflächenspannung

Für die Analyse der Oberflächenspannung wurden zusätzliche Simulationen statischer Tropfen durchgeführt, bei welchen (im Unterschied zu denen der beiden vorigen Abschnitte) der initiale Radius $r \in [10, 50]$ variiert und nur $\tau = 1$ verwendet wird. Nach der Äquilibration kann der Druck innerhalb und außerhalb des Tropfens jeweils mittels Gleichung (3.11) bestimmt und der Radius gemessen werden. Für Letzteren wird das Dichteprofil durch die Gebietsmitte erfasst und angenommen, dass die Grenzfläche an den Punkten ist, an denen die Dichte dem Mittelwert aus minimaler und maximaler Dichte *dieses Profils* entspricht. Gemäß des Young-Laplace-Gesetzes [171] besteht eine lineare Abhängigkeit zwischen Druckdifferenz Δp (gemessen innerhalb und außerhalb des Tropfens) und Krümmung $1/r$

$$\sigma \frac{1}{r} = \Delta p, \quad (4.4)$$

wobei die Oberflächenspannung σ den Proportionalitätsfaktor bildet.

Die numerischen Ergebnisse mit $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ sind für unterschiedliche Temperaturen in Abbildung 4.8 dargestellt (Temperatur und Oberflächenspannung sind über \mathcal{G} gekoppelt, siehe Abschnitt 3.1.2.2). Abbildung 4.8 (a) zeigt, dass die Druckdifferenz für alle \mathcal{G} linear mit der Krümmung steigt, das Young-Laplace-Gesetz also erfüllt ist und die Oberflächenspannung als Steigung der jeweiligen Regressionsgeraden approximiert werden kann.

Die so erhaltenen numerischen Oberflächenspannungen können mit den analytischen

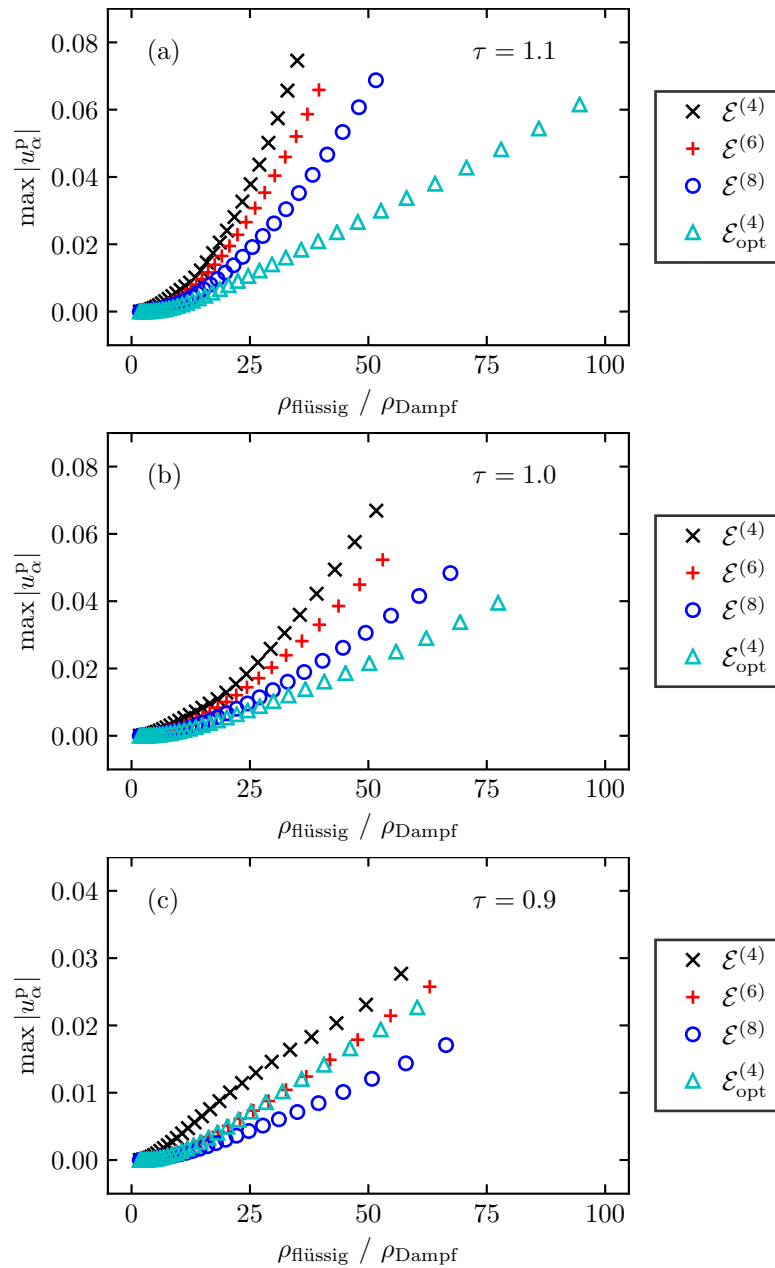


Abbildung 4.7: Vergleich von Scheingeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ für (a) $\tau = 1.1$, (b) $\tau = 1$ und (c) $\tau = 0.9$. Besonders für große Relaxationszeiten führt die Verwendung der optimierten Diskretisierung zu einer signifikanten Reduktion von Scheingeschwindigkeiten und damit zu einer Steigerung der Stabilität, was die Simulation größerer Dichteverhältnisse ermöglicht.

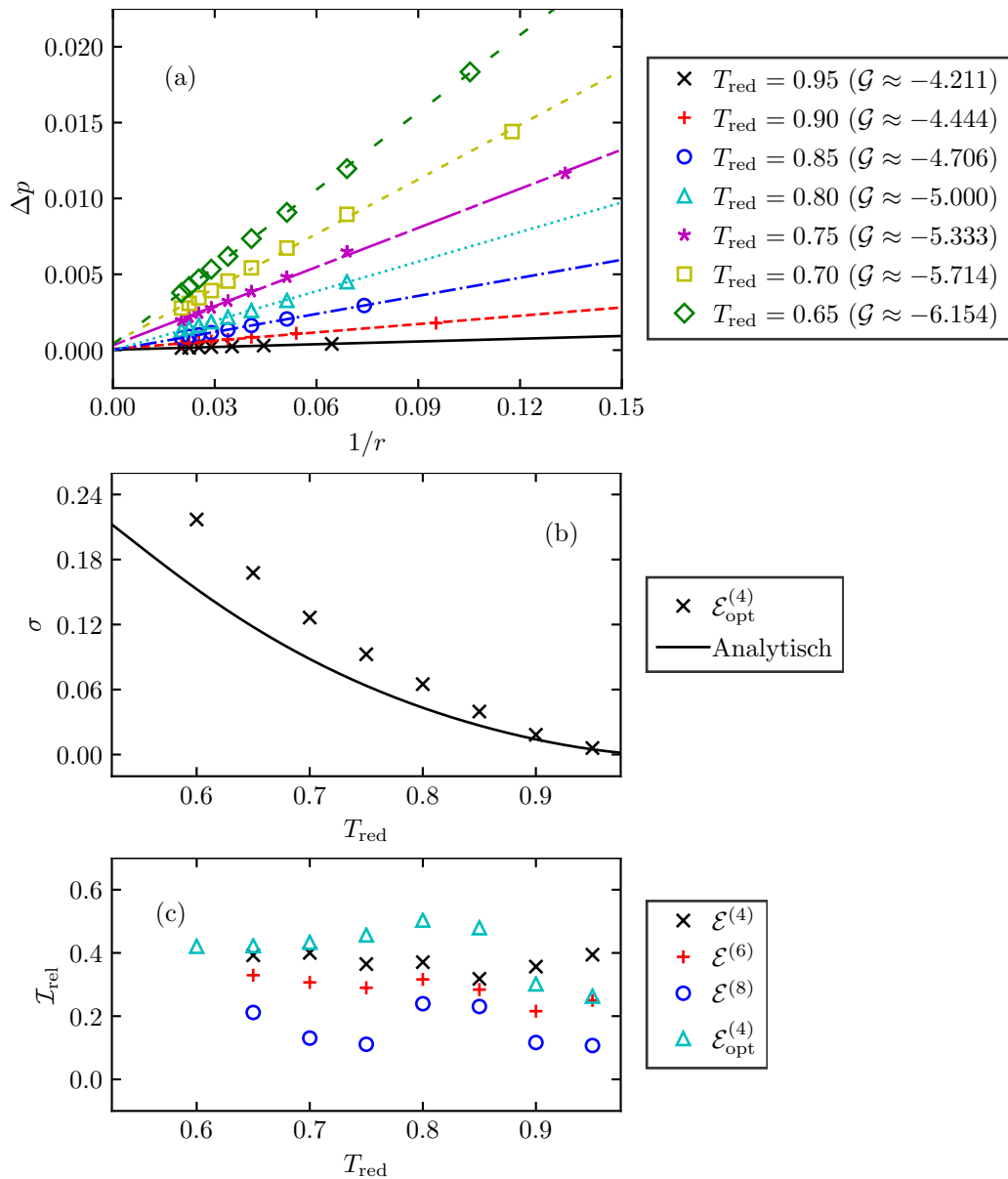


Abbildung 4.8: Oberflächenspannungen in Abhängigkeit der Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ für $\tau = 1$. (a) zeigt die Messung der Oberflächenspannung σ bei verschiedenen Temperaturen T_{red} für die optimierte Diskretisierung $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$. Dabei besteht ein linearer Zusammenhang zwischen Krümmung und Druckdifferenz. (b) zeigt die gemittelten Oberflächenspannungen im Vergleich zur analytischen Lösung der mechanischen Stabilitätsbedingung (siehe Anhang G). Bei sinkender Temperatur werden die Oberflächenspannungen zunehmend überschätzt. (c) zeigt die relativen Fehler der unterschiedlichen Oberflächenspannungen in Abhängigkeit der Temperatur. Die Abweichungen sind für die optimierte Diskretisierung von ähnlicher Größenordnung wie die der $\mathcal{E}^{(4)}$ -Diskretisierung.

Werten (bestimmt mittels mechanischer Stabilitätsbedingung, siehe Anhang G) verglichen werden. Dabei ist hervorzuheben, dass der Oberflächenspannungskoeffizient (und damit die Oberflächenspannung) von den Termen dritter Ordnung in der Interaktionskraft abhängt (siehe Gleichung (3.12)). Da dieser mit der Verwendung unterschiedlicher Gewichte (also Diskretisierungen) variiert (siehe Anhang G), ist er für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ für jede Kombination von \mathcal{G} und τ unterschiedlich und muss neu bestimmt werden.

Abbildung 4.8 (b) zeigt, dass die Oberflächenspannungen unzureichend getroffen werden und der Fehler mit sinkender Temperatur steigt. Dieses Verhalten ist in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Referenz [70], in der die gleiche Untersuchung für die Carnahan-Starling Zustandsgleichung unter Verwendung der $\mathcal{E}^{(4)}$ -Diskretisierung durchgeführt wurde. Diese Abweichungen sind auf das Kräfte-schemata und die dadurch entstehenden Fehlerterme dritter Ordnung in \mathcal{R}_S zurückzuführen.

In Abbildung 4.8 (c) sind die relativen Fehler für unterschiedliche Diskretisierungen dargestellt. Im Vergleich zur $\mathcal{E}^{(4)}$ -Diskretisierung führt das optimierte Schema bei moderaten reduzierten Temperaturen zu größeren Fehlern. Lediglich bei sehr kleinen Temperaturen T_{red} sind die Fehler ähnlich groß und bei sehr hohen Temperaturen sogar etwas geringer, wobei die Oberflächenspannung bis nahezu 50 % überschätzt wird. Im Gegensatz dazu wird der Fehler bei Verwendung von Diskretisierungen höherer Isotropie reduziert, sodass er beispielsweise bei Verwendung der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung mit Werten von maximal 24 % ungefähr halb so groß ist.

Dieser Abschnitt zeigt, dass eine Optimierung zur Reduzierung von Scheingeschwindigkeiten die Vorhersage der Oberflächenspannung nicht in gleicher Weise verbessert. Vielmehr können je nach reduzierter Temperatur T_{red} die Abweichungen von der analytischen Vorhersage sogar kleiner oder größer sein. Um für eine Simulation eine genaue Abschätzung der Oberflächenspannung zu erhalten, ist es daher nötig, $\sigma(\mathcal{G})$ in zusätzlichen Simulationen (vorab) zu bestimmen. Da die Oberflächenspannung direkt von der Diskretisierung der Interaktionskraft abhängt, ist anzunehmen, dass das Modell auch bezüglich der Oberflächenspannung numerisch optimiert werden kann, um diesen zusätzlichen Modellierungsaufwand zu reduzieren.

4.4.4 Oszillierender Tropfen

Da das optimierte Verfahren bis zu diesem Punkt nur für stationäre Probleme analysiert wurde, wird es im Folgenden anhand eines dynamischen Testfalls untersucht. Dabei wird ein zunächst elliptischer Tropfen betrachtet, welcher sich aufgrund der Oberflächenspannungskräfte zusammenzieht und beginnt mit einer konstanten Frequenz ω zu oszillieren [96]. Infolge viskoser Dämpfung nimmt die Amplitude dieser Schwingung kontinuierlich ab bis ein stationärer, kreisförmiger Tropfen mit Radius r_{eq} zurückbleibt.

Für diesen Fall wurde ein elliptischer, flüssiger Tropfen der Dichte $\rho_{\text{flüssig}} =$

1.928677506 mit *scharfer Grenzfläche* im Zentrum eines zweidimensionalen, doppelt-periodischen 301×301 Rechengebiets platziert und $\mathcal{G} = -5$ gesetzt. Der Tropfen ist umgeben von einer Dampfphase mit Dichte $\rho_{\text{Dampf}} = 0.152895263$ und wurde mittels

$$\rho(x, y) = \begin{cases} \rho_{\text{flüssig}} & \text{für } \frac{(x-x_z)^2}{R_a^2} + \frac{(y-y_z)^2}{R_b^2} \leq 1, \\ \rho_{\text{Dampf}} & \text{für } \frac{(x-x_z)^2}{R_a^2} + \frac{(y-y_z)^2}{R_b^2} > 1 \end{cases}$$

initialisiert, wobei $R_a = 2R_b$ dem horizontalen und R_b dem vertikalen Radius der Ellipse entsprechen. Der Abklingprozess ist beispielhaft in Abbildung 4.9 dargestellt. Nach Referenz [111] kann die natürliche Schwingungsfrequenz dieses Tropfens mittels

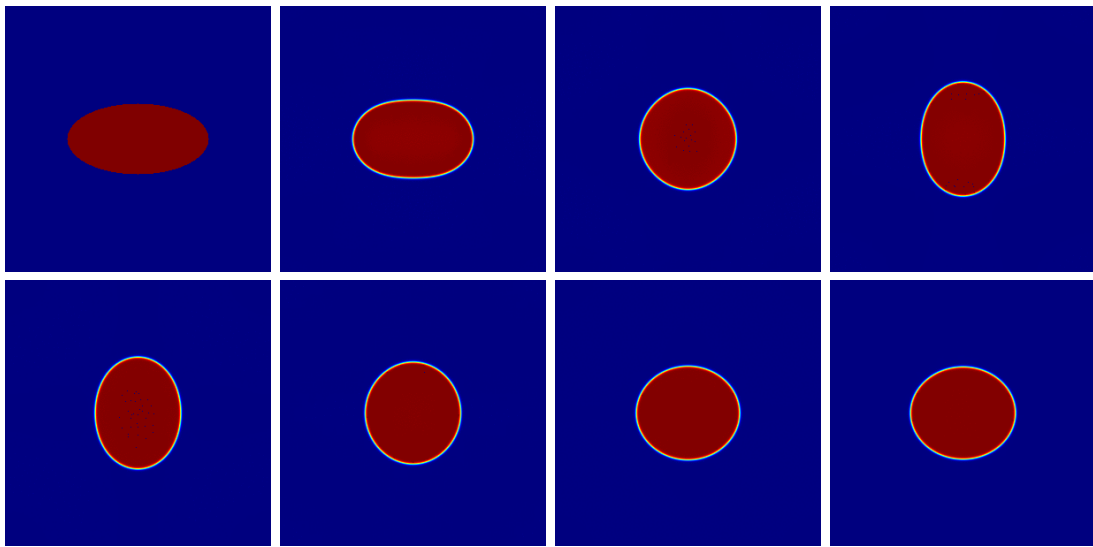


Abbildung 4.9: Oszillation eines elliptischen Tropfens. Von links nach rechts sind die Zeitschritte $t = 0, 1000, 2000, 3000$ (oben) und $t = 4000, 5000, 6000, 7000$ (unten) dargestellt. Die Simulationsparameter lauten $R_a = 80$, $\mathcal{G} = 5$, $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$, $\rho_{\text{Dampf}} = 0.152895263$, $\rho_{\text{flüssig}} = 1.928677506$. Es wurde die $\mathcal{E}^{(4)}$ -Diskretisierung verwendet.

$$\omega = \sqrt{\frac{2\sigma}{\rho_{\text{flüssig}} r_{\text{eq}}^3}} \quad (4.5)$$

analytisch berechnet werden. Da die simulierten Gleichgewichtseigenschaften (ρ_{Dampf} , $\rho_{\text{flüssig}}$ und σ) – wie in den vorigen Abschnitten gezeigt – von den analytischen Vorhersagen auf Basis des Drucktensors (siehe Anhang G) abweichen, wurden $\rho_{\text{flüssig}}$, σ und r_{eq} jeweils nach Erreichen des stationären Zustands bei $\mathcal{V}(\mathbf{u}^p) < 10^{-7}$ gemessen (Oszillation vollständig abgeklungen), siehe Gleichung (3.18). Diese Größen wurden dann für die Berechnung der analytischen Schwingungsfrequenz (4.5) verwendet.

Zur Messung der Frequenz wurde in jeder Iteration der horizontale Radius gemessen.

Dafür wurde das Dichteprofil durch die Gebietsmitte verwendet und angenommen, dass sich die Grenzfläche in der Mitte zwischen maximaler und minimaler Dichte dieses Profils befindet. Zur Bestimmung der Schwingungsfrequenz wurden schließlich alle Werte bis $\mathcal{V}(\mathbf{u}^p) < 10^{-2}$ verwendet und – ähnlich dem Vorgehen in den Referenzen [144, 165] – eine Funktion zur Beschreibung einer abklingenden, harmonischen Oszillation

$$r(t) = r_{\text{eq}} + a^{\text{osz}} \exp(-b^{\text{osz}}t) \cos(c^{\text{osz}}t) \quad (4.6)$$

durch die Messdaten gelegt. Dabei entspricht t der Anzahl Iterationen, a^{osz} der Amplitude, b^{osz} dem Dämpfungskoeffizienten und c^{osz} der gesuchten Frequenz der Oszillation. Diese Prozedur wurde bei $T_{\text{red}} = 0.65$ und $\tau = 1$ für verschiedene Anfangsradien $R_a = 100, 80, 60, 40$ durchgeführt.

Abbildung 4.10 (a) zeigt – ähnlich der Darstellung in Referenz [165] – sowohl die numerisch ermittelten Schwingungsfrequenzen als auch die entsprechenden analytischen Werte in Abhängigkeit von den Gleichgewichtsradien r_{eq} für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$. Wie in Abbildung

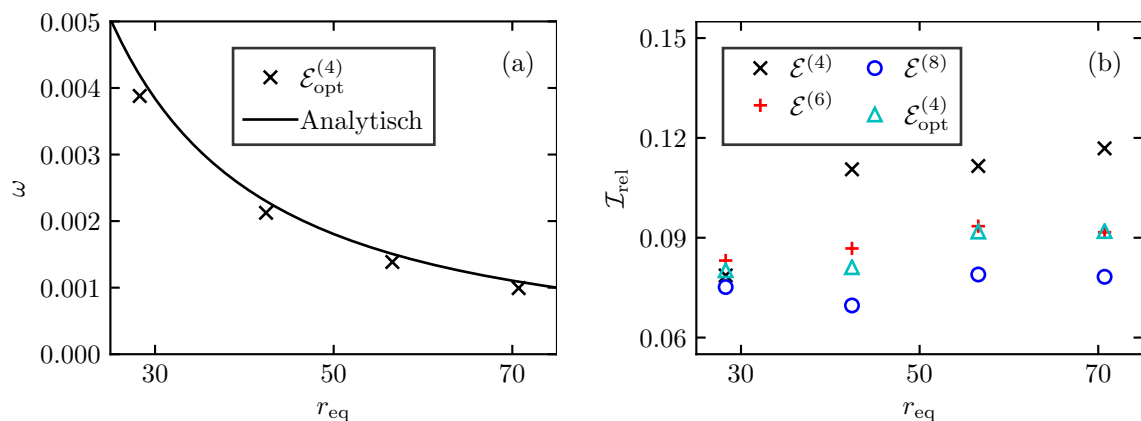


Abbildung 4.10: Natürliche Schwingungsfrequenzen für Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ und $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$. (a) zeigt die gemessenen Frequenzen für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ im Vergleich zur analytischen Lösung bei verschiedenen Radien r_{eq} . Die Frequenzen werden stets leicht unterschätzt. (b) zeigt die relativen Fehler \mathcal{I}_{rel} für alle betrachteten Diskretisierungen. Die Fehler des optimierten Schemas liegen zwischen denen der $\mathcal{E}^{(6)}$ - und $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung.

4.10 (b) zu sehen ist, konnten dabei die Frequenzen mit relativen Fehlern zwischen 8 – 9 % (für $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$) gut erfasst werden. Dabei ist anzumerken, dass Fehler in diesem Größenordnungsbereich auch beispielsweise in den Referenzen [142, 144] gemessen wurden. Im Vergleich liegen die relativen Fehler zwischen denen der Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(6)}$ und $\mathcal{E}^{(8)}$ und sind damit sogar etwas geringer als die der $\mathcal{E}^{(6)}$ -Diskretisierung (ebenfalls 12 Gitterpunkte). Somit hat die Optimierung der Gewichte bezüglich der Scheingeschwindigkeiten *zusätzlich* einen positiven Einfluss auf die Genauigkeit bei der Vorhersage der natürlichen Schwingungsfrequenzen und eignet sich somit auch für die Durchführung dynamischer Simulationen.

4.5 Diskussion und Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde eine neuartige Methode zur numerischen Optimierung des PP-Modells vorgestellt und am Beispiel eines SCMP-Systems umgesetzt. Dabei wurde das Finite-Differenzen-Schema zur Berechnung des Potentialgradienten in der Interaktionskraft durch einen zusätzlichen Freiheitsgrad erweitert, welcher anhand eines stationären Testfalls bezüglich Scheingeschwindigkeiten numerisch optimiert wurde. Diese Optimierung wurde für verschiedene Relaxationszeiten (also Viskositäten, siehe Gleichung (2.20)) und subkritische Temperaturen ($\sim 1/\mathcal{G}$) durchgeführt ($\tau \in [0.8, 1.1]$ und $T_{\text{red}} \in [0.6, 0.9]$), sodass das optimale Gewicht $\mathcal{W}_4^{*,\text{opt}}(\mathcal{G}, \tau)$ in diesem Gültigkeitsbereich näherungsweise mit Gleichung (4.3) ermittelt werden kann. Durch Bestimmung der zugehörigen Gewichte $\mathcal{W}_1^{*,\text{opt}}$ und $\mathcal{W}_2^{*,\text{opt}}$ mittels Gleichung (4.2) ergab dies eine *scheingeschwindigkeitsoptimierte* Diskretisierung $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$, welche 12 Gitterpunkte benötigt und vierter Ordnung in der Isotropie ist.

Diese Diskretisierung wurde in Simulationen statischer und oszillierender Tropfen mit Diskretisierungen höherer Isotropie verglichen (mit $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$ und $\mathcal{E}^{(8)}$). In den stationären Fällen konnte gezeigt werden, dass das optimierte Verfahren sowohl die Flüssigkeits- als auch die Dampfdichte gut abbildet und den anderen Schemata vor allem für $\tau = 1.1$ deutlich überlegen ist. Bezüglich der Dampfphase gilt dies sogar für alle getesteten Relaxationszeiten.

Am bedeutsamsten ist jedoch, dass Scheingeschwindigkeiten durch die numerische Optimierung erfolgreich reduziert werden konnten – am deutlichsten bei $\tau = 1.1$. Für die Relaxationszeiten $\tau = 1$ und $\tau = 1.1$ liegen die Maximalwerte dieser parasitären Geschwindigkeiten weit unterhalb der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung, welche doppelt so viele Nachbarpunkte benötigt.

Um die Funktionsweise der numerischen Optimierung erklären zu können, müssen die Fehlerterme in den makroskopischen Gleichungen in ihrer Gesamtheit betrachtet werden (siehe Gleichung (3.15)). In Abschnitt 3.2 wurden die unterschiedlichen Fehlerterme bereits in einen gemeinsamen Kontext gesetzt und anhand verschiedener Referenzen belegt, dass es das Zusammenspiel dieser Fehler ist, welches die Scheingeschwindigkeiten antreibt. Es wird angenommen, dass die Veränderung der Gewichte die Terme dritter und höherer Ordnung im Fehlerterm \mathcal{R}_F (und damit auch in Teilen von \mathcal{R}_S) so beeinflusst, dass die Summe *aller Fehlerterme* (dritter und höherer Ordnung) minimal wird, die Terme also ausbalanciert werden. Dabei handelt es sich um eine Hypothese, deren weitere Untersuchung über den Rahmen dieser Arbeit hinaus geht und vorerst unbelegt bleibt. Die Funktionsweise auf das Zusammenspiel der unterschiedlichen Fehlerterme zurückzuführen, ist jedoch aufgrund der Ausführungen aus Abschnitt 3.2.2 naheliegend.

Nachteilig ist, dass die analytische Vorhersage für die Oberflächenspannung zunehmend an Gültigkeit verliert. Dies lässt sich mit den Termen höherer Ordnung in der Interaktionskraft erklären, welche sich mit den Gewichten verändern und damit die Oberflächenspannung zunehmend beeinflussen. Für kleine Temperaturen und Werte

nahe T_{krit} lassen sich diesbezüglich jedoch mit der $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ -Diskretisierung kleinere Fehler erzielen als mit der $\mathcal{E}^{(4)}$ -Diskretisierung (Gewichte sind temperaturabhängig). Da die analytische Vorhersage aufgrund kräfteschemabedingter Fehler bei sinkender Temperatur unzureichend getroffen wird [70], wird diese in der Regel jedoch ohnehin in zusätzlichen Simulationen vorab gemessen [24, 25].

Für den dynamischen Testfall (oszillierender, elliptischer Tropfen) konnte gezeigt werden, dass die relativen Fehler der simulierten Schwingungsfrequenzen leicht unterhalb derer der $\mathcal{E}^{(6)}$ -Diskretisierung liegen. Die Größe der Fehler im Bereich von 7 – 12 % (über alle Diskretisierungen) lässt sich auf Ungenauigkeiten bei der Messung der Oberflächenspannung σ und der zeitabhängigen, horizontalen Radien $r(t)$, sowie auf Fehler bei der Regression (4.6) zurückführen.

Damit führt die numerisch optimierte Diskretisierung in den untersuchten Fällen bezüglich der *nicht optimierten* Eigenschaften ($\rho_{\text{flüssig}}$, ρ_{Dampf} , σ , ω) zu Fehlern gleicher Größenordnung wie bei Verwendung der vergleichbaren Diskretisierungen; teilweise sind die Fehler sogar geringer. Im Falle der Oberflächenspannung sind die Fehler zwar größer, jedoch generell von der gleichen Größenordnung. Obwohl sich das optimierte Schema damit in sowohl statischen als auch dynamischen Simulationen bewährt hat, sind für die Zukunft zusätzliche Simulationen bei Ausnutzung des gesamten Spektrums an Relaxationszeiten und Verwendung anspruchsvollerer Randbedingungen nötig.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das PP-Modell erfolgreich bezüglich Scheingeschwindigkeiten numerisch optimiert werden konnte. Der vorgestellte Ansatz lässt sich direkt auf Diskretisierungen in 3D, alternative Zustandsgleichungen (beziehungsweise Potentialfunktionen) und MCMP-Systeme erweitern. Es ist jedoch zu betonen, dass eine derartig optimierte Diskretisierung wiederum nicht generalisierbar ist, die Optimierung also bei Veränderung beispielsweise der Zustandsgleichung (oder Veränderung einer Größe, die die Fehlerterme in Gleichung (3.15) beeinflusst, beispielsweise das Kräfteschema) erneut durchgeführt werden muss. Der gesamte *Optimierungsansatz* inklusive des Testfalls lässt sich jedoch ohne Weiteres verallgemeinern und bei Variation verschiedener Größen einfach und schnell erneut durchführen.

Durch die Verwendung zusätzlicher Freiheitsgrade können Scheingeschwindigkeiten voraussichtlich weiter reduziert werden, allerdings erschwert die Hinzunahme weiterer Nachbarschaftspunkte die Formulierung von Randbedingungen. Des Weiteren ist es mit dem präsentierten Ansatz auch möglich, das PP-Modell im Bezug auf andere Größen zu optimieren, welche direkt von der Diskretisierung der Interaktionskraft abhängen (beispielsweise die Oberflächenspannung), um so anwendungsspezifische Koeffizientensätze zu erhalten. Da es jedoch das Ziel war Scheingeschwindigkeiten zu reduzieren, wird dies an dieser Stelle nicht weiter verfolgt und für zukünftige Studien offen gelassen.

5 Diffusion in Mehrstoffsystemen

„Das Ergebnis habe ich schon, jetzt brauche ich nur noch den Weg, der zu ihm führt.“

– Carl Friedrich Gauß

In diesem Kapitel werden die Diffusionseigenschaften des PP-Modells für MCMP-Strömungen (siehe Abschnitt 3.1.3) mithilfe der Chapman-Enskog-Analyse untersucht. Dabei wird nach bestem Wissen des Autoren *erstmalig* gezeigt, welchen Einfluss das Kräfteschema auf die Diffusionseigenschaften hat, und wie der Transitionspunkt zur Charakterisierung des Überganges vom mischbaren zum nicht mischbaren Regime in *potentialfunktionsabhängiger* Form bestimmt werden kann. Auf Basis dieser Theorie können sowohl unterschiedliche Kräfteschemata als auch Potentialfunktionen innerhalb einer Formulierung erstmalig korrekt miteinander verglichen werden. Sie bildet somit auch die Grundlage für künftige Entwicklungen neuartiger Potentialfunktionen, welche mangels physikalischer Grundlage (in diesem Kontext) [110] meist aus Gründen der Einfachheit oder der numerischen Stabilität gewählt werden.

Zuletzt kann durch die Kenntnis des Transitionspunktes der durch den phänomenologischen Charakter des Modells bedingte Modellierungsaufwand reduziert werden. Denn mithilfe der in dieser Arbeit eingeführten reduzierten Variablen, welche vom Transitionspunkt abgeleitet werden, kann bei gegebener Potentialfunktion näherungsweise die Reinheit eines Stoffes direkt vorgegeben werden.

Im Folgenden wird zunächst die Chapman-Enskog-Analyse verwendet, um eine allgemeingültige Advektions-Diffusions-Gleichung herzuleiten, auf deren Grundlage der Transitionspunkt am Beispiel eines binären Gemisches bestimmt wird. Im Anschluss wird die Theorie durch Simulationen abklingender, sinusoidaler Konzentrationswellen und stationärer Tropfen sowie statischen Kontaktwinkeln validiert.

Es ist anzumerken, dass Teile der Ergebnisse dieses Kapitels bereits in Referenz [89] veröffentlicht sind. Grafiken und Texte wurden daher für den Kontext dieser Arbeit aufbereitet, angepasst und ergänzt.

5.1 Herleitung der Diffusionskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass die dimensionslose LBGK-Gleichung mit zusätzlichem Quellterm (3.2) für ein System mit $k = 1, \dots, N$ Fluiden für jede Komponente eine Lösung der makroskopischen Advektions-Diffusions-Gleichung

$$\partial_t \rho_k + \partial_\alpha (\rho_k u_\alpha^m) = -\partial_\alpha \sum_{l=1}^N \mathcal{D}_{kl} \partial_\alpha \rho_l = -\partial_\alpha j_{k,\alpha} \quad (5.1)$$

approximiert. Diese Rechnung wurde für das Shan-Kräftechema (das ursprüngliche Kräftechema des PP-Modells) in Referenz [160] für ein binäres Gemisch und in Referenz [161] für ein Gemisch beliebig vieler Komponenten durchgeführt. Die Herleitung der zugehörigen NS-Gleichungen zur Beschreibung des *Gemisches* ist in Anhang F zu finden.

Im Folgenden wird die Rechnung für das He-Kräftechema (siehe Tabellen 3.2 und 3.4 für Definitionen des Quellterms $S_{i,k}$, der Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^m , der Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}^{eq} und der Komponentengeschwindigkeit \mathbf{u}_k^c) durchgeführt – aus zwei Gründen: Zum Einen ist es wegen der in Abschnitt 3.1.4 aufgeführten Eigenschaften erstrebenswert, das He- statt dem Shan-Kräftechema (aus der Standardformulierung) zu verwenden. Zum Anderen haben Simulationen mit dem He-Kräftechema gezeigt, dass sich bei dessen Einsatz grundlegende physikalische Eigenschaften des PP-Modells für MCMP-Systeme verändern. Diese konnten jedoch noch nicht erklärt werden, da die zugehörige makroskopische Advektions-Diffusions-Gleichung (mit den entsprechenden Diffusionskoeffizienten) nach bestem Wissen des Autors für dieses Kräftechema noch nicht bestimmt wurde. Für die Herleitung dieser werden im Folgenden zunächst die makroskopischen Momente der Gleichgewichtsverteilung und die des Quellterms bestimmt, bevor die Chapman-Enskog-Analyse verwendet wird, um die Advektions-Diffusions-Gleichung (5.1) zu rekonstruieren. Im Anschluss werden die unterschiedlichen Ansätze miteinander verglichen und gezeigt, wie trotz der Unterschiede vergleichbare Simulationen durchgeführt werden können.

5.1.1 Makroskopische Momente

Für das He-Kräftechema vereinfachen sich Gleichgewichts- und Mischgeschwindigkeit bei Beschränkung auf $\tau_k = \tau$ zum gleichen Ausdruck

$$u_\alpha^{\text{eq}} = u_\alpha^m = \frac{\sum_k \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha} \right)}{\rho^m}.$$

Im Folgenden werden die Momente daher durch die Mischgeschwindigkeit ausgedrückt (willkürlich gewählt). Somit entsprechen die ersten drei Momente der Gleichgewichts-

verteilung

$$\begin{aligned} \sum_i f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k, \\ \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k u_\alpha^{\text{m}}, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k u_\alpha^{\text{m}} u_\beta^{\text{m}} + c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \rho_k \end{aligned} \quad (5.2)$$

und die ersten beiden Momente des Quellterms

$$\sum_i S_{i,k} = 0, \quad \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k} = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha}. \quad (5.3)$$

Im Gegensatz zur Herleitung der NS-Gleichungen, bei der die ersten *vier* Momente der Gleichgewichtsverteilung und die ersten *drei* des Quellterms benötigt werden (siehe Anhang F), sind hier die niederen drei beziehungsweise zwei Momente ausreichend.

5.1.2 Chapman-Enskog-Analyse

Ausgangspunkt der Chapman-Enskog-Analyse ist eine Taylorentwicklung zweiter Ordnung der dimensionslosen LBGK-Gleichung (3.2) mit zusätzlichem Quellterm

$$D_i f_{i,k} + \frac{1}{2} D_i^2 f_{i,k} = -\frac{1}{\tau} (f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}) + S_{i,k}, \quad (5.4)$$

wobei $D_i = \partial_t + e_{i,\alpha} \partial_\alpha$ der materiellen Ableitung entspricht. Im Folgenden wird – wie in Anhang C beschrieben (siehe auch Anhang F) – die Multiskalenanalyse durchgeführt, wobei unter Verwendung des Größenordnungsparameters ε Ableitungen, Quellterm und Kräfte substituiert

$$\begin{aligned} \partial_t &= \varepsilon \partial_t^{(1)} + \varepsilon^2 \partial_t^{(2)}, \\ \partial_\alpha &= \varepsilon \partial_\alpha^{(1)}, \\ S_{i,k} &= \varepsilon S_{i,k}^{(1)}, \\ F_{k,\alpha} &= \varepsilon F_{k,\alpha}^{(1)} \end{aligned}$$

und die Verteilungen in eine asymptotische Reihe

$$f_{i,k} = f_{i,k}^{(0)} + \varepsilon f_{i,k}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{i,k}^{(2)} \quad (5.5)$$

entwickelt werden. Werden diese in Gleichung (5.4) eingesetzt und die resultierende Gleichung nach Termen unterschiedlicher Größenordnung in ε sortiert, ergibt dies

$$\varepsilon^0 : \quad 0 = -\frac{1}{\tau} (f_{i,k}^{(0)} - f_{i,k}^{\text{eq}}), \quad (5.6)$$

$$\varepsilon^1 : \quad D_i^{(1)} f_{i,k}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{i,k}^{(1)} + S_{i,k}^{(1)}, \quad (5.7)$$

$$\varepsilon^2 : \quad \partial_t^{(2)} f_{i,k}^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_i^{(1)} f_{i,k}^{(1)} + \frac{1}{2} D_i^{(1)} S_{i,k}^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_{i,k}^{(2)}, \quad (5.8)$$

wobei Gleichung (5.8) mittels Gleichung (5.7) vereinfacht wurde [51]. An diesem Punkt ist anzumerken, dass eine Analyse zweiter Ordnung ausreichend ist, da die makroskopische Advektions-Diffusions-Gleichung nur Terme zweiter Ordnung enthält (im Gegensatz zum makroskopischen Drucktensor in SCMP-Systemen). Aus Gleichung (5.6) folgt zusammen mit Gleichung (5.5)

$$\begin{aligned} \sum_i f_{i,k}^{(z)} &= 0 \quad \forall z > 0, \\ \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} &= -\frac{1}{2} \sum_k F_{k,\alpha}^{(1)}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Im Folgenden wird das Verhalten der Momente (5.2) und (5.3) auf den Skalen ε^1 und ε^2 separat untersucht. Nach einigen algebraischen Umformungen und Vereinfachungen kann die gesuchte makroskopische Gleichung bestimmt werden. Die nullten Momente der Gleichungen (5.7) und (5.8) liefern

$$\partial_t^{(1)} \rho_k + \partial_\alpha^{(1)} (\rho_k u_\alpha^m) = 0, \quad (5.10)$$

$$\partial_t^{(2)} \rho_k = -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\alpha^{(1)} \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha}^{(1)} \right). \quad (5.11)$$

Nach Rekombination dieser beiden Ausdrücke (Multiplikation mit der entsprechenden Potenz von ε , anschließender Addition der beiden Gleichungen und Resubstitution der Ableitungsoperatoren) würde man bereits die gesuchte Advektions-Diffusions-Gleichung erhalten, jedoch ist das Moment $\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)}$ unbekannt (und im Gegensatz zur Chapman-Enskog-Analyse für die kräftefreien NS-Gleichungen aus Anhang C *nicht Null*). Im Folgenden wird dieses ausführlich aufgelöst.

Auflösung $\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)}$: Im ersten Schritt wird durch Summation der Gleichungen (5.10) und (5.11) über alle Komponenten k die Kontinuitätsgleichung für das Gemisch hergeleitet, was unter Verwendung von Gleichung (5.9) zunächst zu

$$\partial_t^{(1)} \rho^m + \partial_\alpha^{(1)} (\rho^m u_\alpha^m) = 0, \quad (5.12)$$

$$\partial_t^{(2)} \rho^m = 0 \quad (5.13)$$

führt und nach anschließender Rekombination die gesuchte Kontinuitätsgleichung

$$\boxed{\partial_t \rho^m + \partial_\alpha (\rho^m u_\alpha^m) = 0}$$

ergibt.

Im nächsten Schritt wird das erste Moment von Gleichung (5.7) gebildet

$$\partial_t^{(1)} (\rho_k u_\alpha^m) + \partial_\beta^{(1)} (\rho_k u_\alpha^m u_\beta^m) + \partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho_k) = -\frac{1}{\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha}^{(1)} \quad (5.14)$$

und unter Verwendung von Gleichung (5.5) über alle Komponenten k summiert

$$\partial_t^{(1)} (\rho^m u_\alpha^m) + \partial_\beta^{(1)} (\rho^m u_\alpha^m u_\beta^m) = -\partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho^m) + \sum_k F_{k,\alpha}^{(1)}. \quad (5.15)$$

Die rechte Seite dieses Ausdrucks kann durch Einsetzen der Interaktionskraft (3.13), welche bei Verwendung skaliertes Gewichte (3.4) im kontinuierlichen Grenzbereich

$$F_{k,\alpha}^{(1)} = -\Psi_k \sum_{\bar{k}} \mathcal{G}_{k\bar{k}} c_s^2 \partial_\alpha^{(1)} \Psi_{\bar{k}} \quad (5.16)$$

approximiert, zum thermodynamischen Druck p zusammengefasst werden

$$\begin{aligned} -\partial_\alpha^{(1)} p &= -\partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho^m) - c_s^2 \sum_k \sum_{\bar{k}} \mathcal{G}_{k\bar{k}} \Psi_k \partial_\alpha^{(1)} \Psi_{\bar{k}} \\ &= -\partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho^m) - c_s^2 \sum_{k\bar{k}} \frac{\mathcal{G}_{k\bar{k}}}{2} \partial_\alpha^{(1)} (\Psi_k \Psi_{\bar{k}}) \\ &= -\partial_\alpha^{(1)} \left(\underbrace{c_s^2 \rho^m + c_s^2 \sum_{k\bar{k}} \frac{\mathcal{G}_{k\bar{k}}}{2} \Psi_k \Psi_{\bar{k}}}_{=p} \right), \end{aligned} \quad (5.17)$$

wobei die Summe $\sum_{k\bar{k}}$ alle paarweisen Kombinationen von k und \bar{k} mit $k \neq \bar{k}$ berücksichtigt und der Faktor $1/2$ das doppelte Einbeziehen von Paaren (beispielsweise $\Psi_1 \Psi_2$ und $\Psi_2 \Psi_1$) verhindert¹. Damit vereinfacht sich Gleichung (5.15) zu

$$\partial_t^{(1)} (\rho^m u_\alpha^m) + \partial_\beta^{(1)} (\rho^m u_\alpha^m u_\beta^m) = -\partial_\alpha^{(1)} p,$$

was durch Anwendung der Produktregel zu

$$\rho^m \partial_t^{(1)} u_\alpha^m + u_\alpha^m \partial_t^{(1)} \rho^m + u_\alpha^m \partial_\beta^{(1)} (\rho^m u_\beta^m) + \rho^m u_\beta^m \partial_\beta^{(1)} u_\alpha^m = -\partial_\alpha^{(1)} p$$

umformuliert und nach Ausnutzung von Gleichung (5.12) sowie anschließender Multiplikation mit der Konzentration $c_k = \rho_k / \rho^m$ zu

$$\boxed{\rho_k \partial_t^{(1)} u_\alpha^m + \rho_k u_\beta^m \partial_\beta^{(1)} u_\alpha^m = -c_k \partial_\alpha^{(1)} p} \quad (5.18)$$

vereinfacht werden kann.

Im letzten Schritt wird der Term auf der linken Seite noch einmal berechnet. Dabei wird – ähnlich der vorangegangenen Rechnung – Gleichung (5.14) mit der Produktregel umformuliert und diesmal unter Ausnutzung von Gleichung (5.10) zu

$$\rho_k \partial_t^{(1)} u_\alpha^m + \rho_k u_\beta^m \partial_\beta^{(1)} u_\alpha^m = -\frac{1}{\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha}^{(1)} - \partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho_k)$$

¹Da der Fokus auf der Advektions-Diffusions-Gleichung liegt, werden Terme dritter und höherer Ordnung in der Interaktionskraft an dieser Stelle nicht berücksichtigt.

vereinfacht. Dieser Ausdruck kann nun verwendet werden, um die linke Seite in Gleichung (5.18) zu ersetzen

$$-c_k \partial_\alpha^{(1)} p = -\frac{1}{\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha}^{(1)} - \partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho_k),$$

sodass der resultierende Ausdruck nach dem unbekanntem Moment

$$\boxed{\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} = \tau \left[c_k \partial_\alpha^{(1)} p - \partial_\alpha^{(1)} (c_s^2 \rho_k) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha}^{(1)} \right]}$$

aufgelöst werden kann.

Rekombination der Skalen: Dieser Ausdruck kann nun in Gleichung (5.11) eingesetzt werden, sodass diese mit Gleichung (5.10) rekombiniert werden kann. Dies führt zu

$$\partial_t \rho_k + \partial_\alpha (\rho_k u_\alpha^m) = -\partial_\alpha \left\{ \left(\tau - \frac{1}{2} \right) [c_k \partial_\alpha p - \partial_\alpha (c_s^2 \rho_k) + F_{k,\alpha}] \right\}, \quad (5.19)$$

und dient im Folgenden als Grundlage zur Bestimmung der Diffusionskoeffizienten in einem binären Gemisch.

5.1.3 Diffusion in binärem Gemisch

In einem binären Gemisch mit $k = 1, 2$ und $\mathcal{G}_{12} = \mathcal{G}_{21} = \mathcal{G}$ lässt sich die Interaktionskraft (3.13) in Gleichung (5.19) für jede Komponente als

$$\begin{aligned} F_{1,\alpha} &= -\mathcal{G} c_s^2 \Psi_1 \partial_\alpha \Psi_2 = -\mathcal{G} c_s^2 \Psi_1 \Psi_2' \partial_\alpha \rho_2, \\ F_{2,\alpha} &= -\mathcal{G} c_s^2 \Psi_2 \Psi_1' \partial_\alpha \rho_1 \end{aligned} \quad (5.20)$$

ausdrücken, wobei $\Psi' = \partial_\rho \Psi$ entspricht. Für den Druckgradienten (5.17) gilt dementsprechend

$$\begin{aligned} \partial_\alpha p &= c_s^2 \partial_\alpha (\rho_1 + \rho_2) + \mathcal{G} c_s^2 \partial_\alpha (\Psi_1 \Psi_2) \\ &= c_s^2 [\partial_\alpha \rho_1 + \partial_\alpha \rho_2 + \mathcal{G} (\Psi_1 \Psi_2' \partial_\alpha \rho_2 + \Psi_2 \Psi_1' \partial_\alpha \rho_1)]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Werden die Terme (5.20) und (5.21) in Gleichung (5.19) eingesetzt und der resultierende Ausdruck nach $\partial_\alpha \rho_1$ und $\partial_\alpha \rho_2$ sortiert, führt dies zu

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \partial_\alpha (\rho_1 u_\alpha^m) &= -\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \partial_\alpha \{ (c_1 - 1 + c_1 \mathcal{G} \Psi_2 \Psi_1') \partial_\alpha \rho_1 + [c_1 + (c_1 - 1) \mathcal{G} \Psi_1 \Psi_2'] \partial_\alpha \rho_2 \}, \\ \partial_t \rho_2 + \partial_\alpha (\rho_2 u_\alpha^m) &= -\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \partial_\alpha \{ [c_2 + (c_2 - 1) \mathcal{G} \Psi_2 \Psi_1'] \partial_\alpha \rho_1 + (c_2 - 1 + c_2 \mathcal{G} \Psi_1 \Psi_2') \partial_\alpha \rho_2 \}, \end{aligned}$$

was sich unter Ausnutzung von $\sum_k c_k = 1$ zu

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_1 + \partial_\alpha (\rho_1 u_\alpha^m) &= - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \partial_\alpha \left[(c_1 \mathcal{G} \Psi_2 \Psi_1' - c_2) \partial_\alpha \rho_1 + (c_1 - c_2 \mathcal{G} \Psi_1 \Psi_2') \partial_\alpha \rho_2 \right], \\ \partial_t \rho_2 + \partial_\alpha (\rho_2 u_\alpha^m) &= - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \partial_\alpha \left[(c_2 - c_1 \mathcal{G} \Psi_2 \Psi_1') \partial_\alpha \rho_1 + (c_2 \mathcal{G} \Psi_1 \Psi_2' - c_1) \partial_\alpha \rho_2 \right]\end{aligned}$$

vereinfachen lässt. Wird nun angenommen, dass $\partial_\alpha \rho_1 = -\partial_\alpha \rho_2$ ist [63, 160], lässt sich schließlich zeigen, dass beide Komponenten jeweils eine Advektions-Diffusions-Gleichung

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_1 + \partial_\alpha (\rho_1 u_\alpha^m) &= -\partial_\alpha \mathcal{D} \partial_\alpha \rho_1, \\ \partial_t \rho_2 + \partial_\alpha (\rho_2 u_\alpha^m) &= -\partial_\alpha \mathcal{D} \partial_\alpha \rho_2\end{aligned}$$

mit dem gleichen Diffusionskoeffizienten

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}^{\text{He}} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \left[\mathcal{G} (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - 1 \right]$$

befolgen. Die Diffusionseigenschaften können also über die Form der Potentialfunktion und den Modellparameter \mathcal{G} verändert werden.

Analog zur bis zu diesem Punkt durchgeführten Rechnung können die Diffusionskoeffizienten für die anderen Kräfteschemata aus Tabelle 3.2 hergeleitet werden. Für das Shan-Kräfteschema ist dieser beispielsweise in Referenz [63] zu finden; für die Kräfteschemata EDM, He und Guo wurden diese nach bestem Wissen des Autors noch nicht bestimmt. Im Vergleich sind diese

$$\boxed{\begin{aligned}\mathcal{D}^{\text{Shan}} &= c_s^2 \left[\mathcal{G} \tau (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \right], \\ \mathcal{D}^{\text{EDM}} &= c_s^2 \left[\mathcal{G} \tau (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \right], \\ \mathcal{D}^{\text{He}} &= \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \left[\mathcal{G} (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - 1 \right], \\ \mathcal{D}^{\text{Guo}} &= \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \left[\mathcal{G} (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - 1 \right].\end{aligned}} \tag{5.22}$$

Dabei ist auffällig, dass die Advektions-Diffusions-Gleichungen beziehungsweise die Diffusionskoeffizienten jeweils für das Shan- und EDM- beziehungsweise das He- und Guo-Kräfteschema gleich sind. Da dies offensichtlich auf die Krafteinbindung zurückzuführen ist, wäre eine Verallgemeinerung der präsentierten Rechnung wünschenswert, wie sie beispielsweise in den Referenzen [51, 53] für Einstoffsysteme durchgeführt wurde. Eine derartige Rechnung ist jedoch in diesem Kontext nicht möglich, da sich die einzelnen Kräfteschemata nicht durch einfache Faktoren unterscheiden. So ist beispielsweise die Gleichgewichtsgeschwindigkeit für das Shan-Kräfteschema eine komponentenspezifische Größe, während sie für das He-Kräfteschema für alle Komponenten gleich ist.

Da sich der Diffusionsterm auch über den diffusiven Massenfluss \mathbf{j}_k ausdrücken lässt, siehe Gleichung (5.1), wird dieser im folgenden Abschnitt hergeleitet.

5.1.4 Diffusiver Massenfluss

Der diffusive Massenfluss

$$j_{k,\alpha} = \rho_k (u_{k,\alpha}^c - u_\alpha^m)$$

beinhaltet die vom Kräfteschema abhängige Misch- und Komponentengeschwindigkeit (siehe Tabellen 3.2 und 3.4). Da er ohne nennenswerten Mehraufwand für beliebig viele Stoffe bestimmt werden kann, wird er in diesem Abschnitt (im Gegensatz zum Vorigen) allgemein berechnet.

Um die Advektions-Diffusions-Gleichung mit diesem Term auf der rechten Seite zu rekonstruieren, werden zunächst die Gleichungen (5.5) und (5.6) verwendet, um

$$\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right)$$

zu erhalten. Dieser Ausdruck kann nun in Gleichung (5.11) eingesetzt und der resultierende Ausdruck mit Gleichung (5.10) rekombiniert werden

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_k + \partial_\alpha (\rho_k u_\alpha^m) &= -\partial_\alpha \left[\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha} \right] \\ &= -\partial_\alpha \left[\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) F_{k,\alpha} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right] \\ &= -\partial_\alpha \left[\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha} \right) + \frac{1}{2\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right] \\ &= -\partial_\alpha (\rho_k u_{k,\alpha}^c - \rho_k u_\alpha^m) = -\partial_\alpha j_{k,\alpha} \end{aligned}$$

(siehe Tabellen 3.2 und 3.4 für die Definitionen von $\rho_k \mathbf{u}_k^c$ und $\rho_k \mathbf{u}^m$). Obwohl dieser hier nur für das He-Kräfteschema bestimmt wurde, kann er für die anderen Kräfteschemata analog hergeleitet werden.

5.1.5 Bestimmung des Transitionspunktes

In diesem Abschnitt wird der Transitionspunkt bestimmt, welcher den Übergang vom mischbaren zum nicht mischbaren Regime angibt. In Referenz [158] wurde dieser für den Spezialfall $\Psi_k = \rho_k$ und $\tau_k = \tau$ unter Beschränkung auf infinitesimale Dichteschwankungen um einen zeitlich und räumlich konstanten Wert ermittelt. Der folgende Ansatz basiert auf einer anderen Grundidee, wobei es nicht nötig ist die Amplitude der Dichteschwankungen zu beschränken.

Der Transitionspunkt ist dadurch gekennzeichnet, dass der Diffusionskoeffizient aus Gleichung (5.22) sein Vorzeichen ändert, sodass $\mathcal{D} = 0$ die gesuchten kritischen Eigenschaften liefern sollte. Der resultierende Ausdruck

$$\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 [\mathcal{G} (c_1 \Psi_1' \Psi_2 + c_2 \Psi_2' \Psi_1) - 1] = 0$$

ist jedoch über die Potentialfunktionen und Konzentrationen (also über die Dichten) raumabhängig und muss daher an einem charakteristischen Punkt ausgewertet werden, welcher im Folgenden identifiziert wird. Da Diffusion eine Folge der Interaktionskraft ist, sollte die größte Interaktionskraft an diesem Punkt gerade ausreichen, um eine Vermischung der Komponenten zu verhindern. Diese Kraft wiederum skaliert mit den Dichtegradienten, welche in der Grenzfläche maximal werden. Dort gilt

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho^{\text{GF}}, \quad c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \quad (5.23)$$

wobei ρ^{GF} der Grenzflächendichte entspricht. Es ist anzumerken, dass sich der Zusammenhang für die Konzentrationen ändert, wenn $N > 2$ Stoffe vorhanden sind. Wird nun das System aus Abbildung 5.1 betrachtet, worin beide Komponenten den

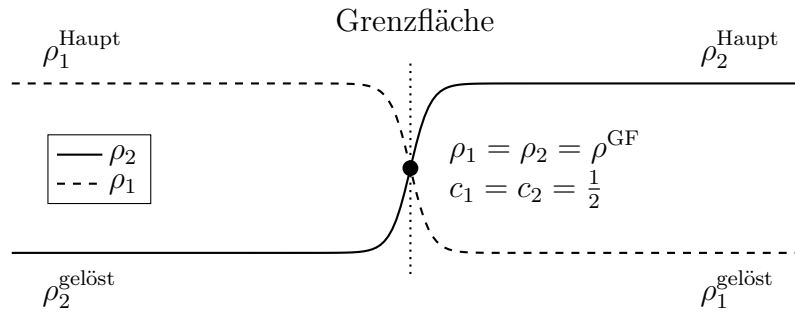


Abbildung 5.1: Schema der Dichteprofile zweier nicht mischbarer Fluide. Da die Grenzfläche über mehrere Gitterpunkte verschmiert wird, kann angenommen werden, dass sie sich bei $\rho_1 - \rho_2 = 0$ befindet [155]. Für ein Gemisch unterschiedlicher Fluide (innerhalb derer keine kohäsiven Kräfte wirken) sind die Komponentendichten $\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = \rho^{\text{Haupt}}$ und $\rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = \rho^{\text{gelöst}}$ gleich.

gleichen Raum einnehmen und die gleichen gelösten Dichten beziehungsweise Hauptdichten haben

$$\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = \rho^{\text{Haupt}}, \quad \rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = \rho^{\text{gelöst}}, \quad (5.24)$$

so kann angenommen werden, dass die Grenzflächendichte dem Mittelwert aus gelöster Dichte und Hauptdichte

$$\rho^{\text{GF}} = \frac{\rho^{\text{Haupt}} + \rho^{\text{gelöst}}}{2}$$

entspricht. Damit kann schließlich unter Verwendung der Gleichungen (5.23) und (5.24) und Realisierung, dass das Grenzflächenpotential für alle Komponenten gleich ist $\Psi(\rho^{\text{GF}}) = \Psi_1(\rho^{\text{GF}}) = \Psi_2(\rho^{\text{GF}})$, der kritische Punkt

$$\mathcal{G}_{\text{krit}} = \frac{1}{\Psi'(\rho^{\text{GF}}) \Psi(\rho^{\text{GF}})}$$

für beliebige Potentialfunktionen bestimmt werden.

Diese Rechnung kann erneut analog für alle präsentierten Kräfteschemata durchgeführt werden, sodass diese im Vergleich

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{G}_{\text{krit}}^{\text{Shan}} = \mathcal{G}_{\text{krit}}^{\text{EDM}} &= \frac{\tau - \frac{1}{2}}{\tau \Psi'(\rho^{\text{GF}}) \Psi(\rho^{\text{GF}})}, \\ \mathcal{G}_{\text{krit}}^{\text{He}} = \mathcal{G}_{\text{krit}}^{\text{Guo}} &= \frac{1}{\Psi'(\rho^{\text{GF}}) \Psi(\rho^{\text{GF}})} \end{aligned}} \quad (5.25)$$

ergeben. Da die Diffusionskoeffizienten jeweils für die Kräfteschemata Shan und EDM beziehungsweise He und Guo gleich sind, sind auch die kritischen Werte gleich. Für erstere ist er von der Relaxationszeit abhängig, sodass sich der Transitionspunkt mit der Viskosität ändert. Da die rechte Seite der Advektions-Diffusions-Gleichung (5.1) mit einem negativen Vorzeichen rekonstruiert wurde, ist das mischbare Regime durch $\mathcal{G} < \mathcal{G}_{\text{krit}}$ und das nicht mischbare durch $\mathcal{G} > \mathcal{G}_{\text{krit}}$ charakterisiert.

Für den gängigen Fall $\tau = 1$ sind die unterschiedlichen Transitionspunkte genau um den Faktor zwei verschoben. Diese Verschiebung ist auch in Abbildung 4 in Referenz [141] angedeutet, worin der Punkt, oberhalb dessen eine Grenzflächenspannung messbar ist, ebenfalls um den Faktor zwei verschoben ist. Diese Verschiebung impliziert, dass zwei Fluide bei gegebenem Wert \mathcal{G} bei Verwendung eines Kräfteschemas (zum Beispiel He) noch mischbar sein können, während sie bei Verwendung eines anderen (zum Beispiel Shan) bereits nicht mischbar sind. Das bedeutet: Bei Verwendung unterschiedlicher Kräfteschemata werden bei exakt gleicher Wahl der Modellparameter unterschiedliche Systeme simuliert; **die Kräfteschemata können in MCMP-Systemen also nicht direkt miteinander verglichen werden.** Ein spezielles Vorgehen auf Basis reduzierter Variablen – wie unten in Abschnitt 5.2.3 erläutert – ist daher notwendig.

Aufgrund der Gleichheit sowohl der Diffusionskoeffizienten (5.22) als auch der kritischen Punkte (5.25) werden im Folgenden alle Untersuchungen – falls nicht explizit anders erwähnt – am Beispiel des Shan- und des He-Kräfteschemas durchgeführt.

5.2 Validierung

Im Folgenden wird die vorherige Analyse numerisch validiert. Zuerst wird das mischbare Regime $\mathcal{G} < \mathcal{G}_{\text{krit}}$ mittels transientser Simulationen zerfallender, sinusförmiger Konzentrationswellen analysiert. Im zweiten Teil wird das nicht mischbare Regime sowie der Übergang zum mischbaren Regime untersucht, wobei die Ausdrücke für $\mathcal{G}_{\text{krit}}$ in Simulationen statischer Tropfen unter Verwendung verschiedener Potentialfunktionen sowie Relaxationszeiten untersucht werden. Im dritten Teil wird untersucht, wie die veränderten Diffusionseigenschaften die Möglichkeiten der Kontaktwinkelmodellierung beeinflussen.

5.2.1 Mischbares Regime

In diesem Abschnitt werden die analytischen Ausdrücke für die Diffusionskoeffizienten anhand eines dynamischen Testfalls – dem Zerfall einer harmonischen Konzentrationswelle – untersucht [4, 5, 17, 160]. Dafür wird der Einfachheit halber $\Psi_k = \rho_k$ verwendet und ein zweidimensionales, doppelt-periodisches Gebiet mit Länge $n_x = 257$ und Breite $n_y = 17$ betrachtet, in welchem die initiale Dichteverteilung in x -Richtung durch

$$\begin{aligned}\rho_1(x) &= \rho_{\text{Mittel}} [1 + \delta \sin(\tilde{k}x)], \\ \rho_2(x) &= \rho_{\text{Mittel}} [1 - \delta \sin(\tilde{k}x)]\end{aligned}\quad (5.26)$$

gegeben ist, wobei $\tilde{k} = 2\pi/n_x$ der Wellenzahl entspricht. Beide Komponenten haben die gleiche mittlere Dichte $\rho_{\text{Mittel}} = 1$ mit einer geringen, gegensätzlich gerichteten, sinusförmigen Störung der Amplitude $\delta = 0.001$. Der Abklingprozess dieser Konzentrationswelle ist beispielhaft in Abbildung 5.2 dargestellt.

In diesem Fall kann die zeitabhängige, analytische Lösung des zerfallenden Dichte-

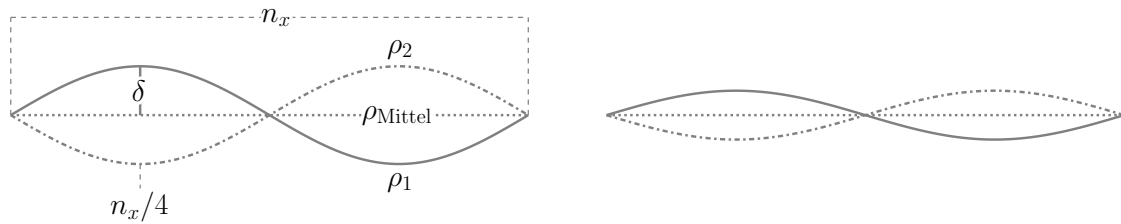


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung zweier gegensätzlich gerichteter, harmonischer Konzentrationswellen mit Amplitude δ . Im Ausgangszustand (links) variieren die Dichten beider Komponenten um den gleichen Mittelwert ρ_{Mittel} . Der diffusive Massentransport führt dazu, dass die Dichtestörungen mit der Zeit abklingen (rechts). Der Abklingprozess kann an jedem Punkt mit Gleichung (5.27) beschrieben werden.

profils mit

$$\begin{aligned}\rho_1(x, t) &= \rho_{\text{Mittel}} + \delta \sin(\tilde{k}x) \exp(-\tilde{k}^2 \mathcal{D}t), \\ \rho_2(x, t) &= \rho_{\text{Mittel}} - \delta \sin(\tilde{k}x) \exp(-\tilde{k}^2 \mathcal{D}t)\end{aligned}$$

berechnet werden [4]. Daher wird zur *Messung* des Diffusionskoeffizienten die Simulation durchgeführt bis die Amplitude der Konzentrationswelle auf die mittlere Dichte abgefallen ist, im Detail bis

$$\left| \rho_1\left(\frac{n_x}{4}, t\right) - \rho_{\text{Mittel}} \right| < \delta \times 10^{-3},$$

wobei in jedem Zeitschritt die Dichte $\rho_1\left(\frac{n_x}{4}, t\right)$ erfasst wird. Im Anschluss kann die Funktion

$$g(t) = \rho_{\text{Mittel}} + \delta \exp(-\tilde{k}^2 \mathcal{D}t) \quad (5.27)$$

durch die Daten gelegt und so der Diffusionskoeffizient ermittelt werden. Der theoretische Diffusionskoeffizient lässt sich schließlich mittels Gleichung (5.22) berechnen. Für das He-Kräftechema (mit $\Psi_k = \rho_k$) ist dieser

$$\mathcal{D} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \left[\mathcal{G} \left(\frac{2\rho_1\rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \right) - 1 \right],$$

was nach Einsetzen von Gleichung (5.26) und Auswertung bei $x = n_x/4$ zu

$$\mathcal{D} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \left(\frac{2\mathcal{G}\rho_{\text{Mittel}}^2}{\rho_{\text{Mittel}}} - 1 \right) - \underbrace{\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \frac{2\mathcal{G}\delta^2}{\rho_{\text{Mittel}}}}_{=\mathcal{O}(\delta^2)}$$

führt und für kleine Störungen $\delta \ll 1$ schließlich zu

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}^{\text{He}} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 (2\mathcal{G}\rho_{\text{Mittel}} - 1)$$

vereinfacht werden kann. Analog ergibt sich der theoretische Diffusionskoeffizient für das Shan-Kräftechema, im Vergleich also

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{D}^{\text{Shan}} &= c_s^2 \left[\mathcal{G}\tau\rho_{\text{Mittel}} - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \right], \\ \mathcal{D}^{\text{He}} &= \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 (2\mathcal{G}\rho_{\text{Mittel}} - 1). \end{aligned}} \quad (5.28)$$

Abbildung 5.3 zeigt die numerischen Ergebnisse und theoretischen Vorhersagen für beide Kräfteschemata bei verschiedenen Relaxationszeiten. Im Falle des Shan-Kräftechemas ändern sich mit der Relaxationszeit sowohl die Steigung als auch der Schnittpunkt mit der Nulllinie. Für kleinere τ sind also geringere \mathcal{G} nötig, um die gleichen Diffusionseigenschaften zu erhalten. Zudem bestätigt dies, dass sich der kritische Wert $\mathcal{G}_{\text{krit}}$ (Durchstoßpunkt Nulllinie) mit der Relaxationszeit verschiebt und dementsprechend *viskositätsabhängig* ist.

Im Gegensatz dazu ist bei Verwendung des He-Kräftechemas nur die Steigung der Diffusionskoeffizienten relaxationszeitabhängig, während der Schnittpunkt unverändert bleibt. Der kritische Wert ist in diesem Fall also *viskositätsunabhängig*.

Insgesamt stimmen die Simulationsergebnisse hervorragend mit den zuvor abgeleiteten theoretischen Werten mit relativen Fehlern $\ll 1\%$ überein.

Alternativ zur beschriebenen Vorgehensweise kann der Diffusionskoeffizient auch in jeder Iteration bestimmt und über den gesamten Zeitraum des Zerfalls der Konzentrationswelle gemittelt werden [4]. Dabei werden der diffusive Massenfluss \mathbf{j}_1 und die Dichtegradianten $\partial_\alpha \rho_1$ berechnet und die rechten Seiten von Gleichung (5.1) entlang der x -Richtung nach dem Diffusionskoeffizienten aufgelöst $\mathcal{D} = \mathbf{j}_{1,x} / \partial_x \rho_1$. Es zeigte sich jedoch kein signifikanter Unterschied zwischen den beiden Ansätzen, weshalb \mathcal{D} willkürlich unter Verwendung der Zerfallsrate bestimmt wurde.

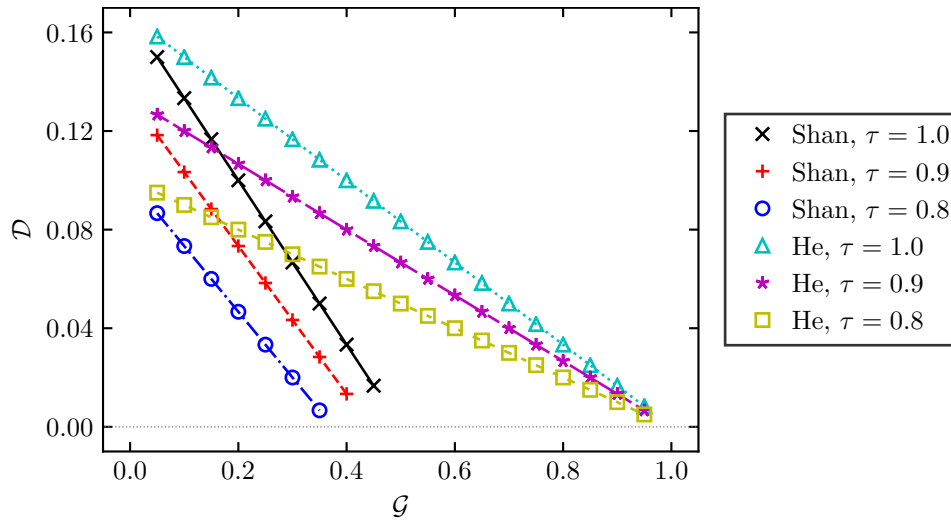


Abbildung 5.3: Diffusionskoeffizienten für Shan- und He-Kräftechema für verschiedene Relaxationszeiten $\tau = 1.0, 0.9, 0.8$. Die Simulationsergebnisse (Punkte) stimmen mit den theoretischen Vorhersagen (Linien) aus Gleichung (5.28) überein.

Die Ergebnisse dieses Abschnitts belegen, dass die analytisch bestimmten Diffusionskoeffizienten aus Gleichung (5.22) mit den simulierten übereinstimmen und die hergeleiteten Zusammenhänge zwischen Modellparameter \mathcal{G} und makroskopischem Diffusionskoeffizienten korrekt sind. Wird ein reales, diffusionsabhängiges Problem simuliert, müssen die Modellparameter so gewählt werden, dass die für dieses Problem charakteristischen, dimensionslosen Ähnlichkeitsparameter (Schmidt-Zahl, Péclet-Zahl, etc.) mit denen des realen Problems übereinstimmen. Für eine korrekte Skalierung sind daher – je nach Kräfteschema – die entsprechenden Zusammenhänge $\mathcal{D}(\mathcal{G})$ zu verwenden. Diese Zusammenhänge aus Gleichung (5.22) wurden nach bestem Wissen des Autors für die Kräfteschemata EDM, He und Guo erstmalig in dieser Arbeit vorgestellt.

5.2.2 Nicht mischbares Regime

Um den Ausdruck für $\mathcal{G}_{\text{krit}}$ zu testen, wird ein kreisrunder Tropfen von Komponente 1 – umgeben von Komponente 2 – mit scharfer Grenzfläche im Zentrum eines 100×100 doppelt-periodischen Rechengebiets platziert. Beide Komponenten haben die gleichen Relaxationszeiten, die gleichen Gesamtmassen sowie Anfangsdichten $\rho_1^{\text{Haupt}} = \rho_2^{\text{Haupt}} = \rho^{\text{Haupt}} = 1.94$ und $\rho_1^{\text{gelöst}} = \rho_2^{\text{gelöst}} = \rho^{\text{gelöst}} = 0.06$. Für verschiedene \mathcal{G} wird der Tropfen äquilibriert und ρ_1^{Haupt} beziehungsweise $\rho_2^{\text{gelöst}}$ jeweils in der Mitte beziehungsweise einer Ecke des Gebiets gemessen. Die zugehörige Grenzflächenspannung σ wird dann über die Young-Laplace-Gleichung (4.4) bestimmt, wobei der Druck inner- und außerhalb des Tropfens mittels Gleichung (5.17) berechnet wird. Als Kon-

vergenzkriterium wird Gleichung (3.18) unter Verwendung der Mischgeschwindigkeit genutzt, also $\mathcal{V}(\mathbf{u}^m) < 10^{-7}$. Dabei ist zu erwähnen, dass wenn \mathcal{G} nahe $\mathcal{G}_{\text{krit}}$ gewählt wird, sehr viele Iterationen nötig sind, um das Konvergenzkriterium zu erfüllen. In diesem Fall löst sich der *initiale* Tropfen entweder (im mischbaren Regime) aufgrund eines geringen Diffusionskoeffizienten langsam auf oder es prägt sich (im nicht mischbaren Regime) langsam eine breite Grenzfläche aus.

Um zu zeigen, dass der Transitionspunkt für beliebige Potentialfunktionen gültig ist, werden im Folgenden Simulationen unter Verwendung verschiedener Relaxationszeiten $\tau = 2.0, 1.5, 1.0, 0.9, 0.8$ und Potentialfunktionen durchgeführt. Letztere sind in Tabelle 5.1 aufgelistet.

Da es keine physikalischen Prinzipien gibt, um eine adäquate Form der Potentialfunk-

Tabelle 5.1: Potentialfunktionen für MCMP-Systeme. Während Ψ_ρ und Ψ_{exp} in der Literatur häufig verwendet werden, ist Ψ_{atan} eine neue Potentialfunktion, welche monoton steigend und – wie Ψ_{exp} – bei ρ_0 eine obere Schranke hat. Der Freiheitsgrad ρ_0 wird, wie in allen vorigen Simulationen, auf 1 gesetzt.

Potentialfunktion	Repräsentative Publikationen
$\Psi_\rho = \rho$	[43, 73, 79]
$\Psi_{\text{exp}} = \rho_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right]$	[124, 155, 160]
$\Psi_{\text{atan}} = \rho_0 \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)$	—

tion zu bestimmen [110], ist es üblich Ψ_ρ zu verwenden [43, 54, 73, 79, 112, 141, 160]. In einigen Arbeiten wird argumentiert, dass Ψ_{exp} zu einer erhöhten Stabilität führt, da es bei ρ_0 beschränkt ist [152, 170]. Da diese beiden Potentialfunktionen im Kontext von MCMP-Systemen primär eingesetzt werden (Ψ_{exp} beispielweise in [63, 124, 155, 166]), werden sie im folgenden Vergleich berücksichtigt. Um die Allgemeingültigkeit des Transitionspunktes aus Gleichung (5.25) zu zeigen, wird hier eine weitere, neue Potentialfunktion Ψ_{atan} eingeführt, welche – wie in Referenz [115] vorgeschlagen – s-förmig ist und dieselbe obere Schranke besitzt wie Ψ_{exp} . Auf Basis der Gleichungen (5.25) ist es zudem möglich für jedes Kräfteschema eine Potentialfunktion mit variablem Transitionspunkt zu definieren. Da diese den Stabilitätsbereich des Modells jedoch stark einschränken, wurden sie nicht im folgenden Vergleich berücksichtigt, sondern in Anhang H separat bestimmt und analysiert.

Ähnlich der Darstellung aus Referenz [73], zeigt Abbildung 5.4 den Zusammenhang zwischen \mathcal{G} und den gemessenen gelösten Dichten beziehungsweise Hauptdichten sowie der Grenzflächenspannungen σ für $\tau = 1$. Der jeweilige Transitionspunkt wurde mittels Gleichung (5.25) bestimmt und in der Abbildung durch eine vertikale Linie angedeutet. Einerseits löst sich der Tropfen für $\mathcal{G} < \mathcal{G}_{\text{krit}}$ auf und $\rho^{\text{gelöst}}$ sowie ρ^{Haupt} konvergieren aufgrund der Massengleichheit beider Komponenten gegen denselben Wert. Andererseits sind die Fluide für $\mathcal{G} > \mathcal{G}_{\text{krit}}$ nicht mischbar. Da die gelöste

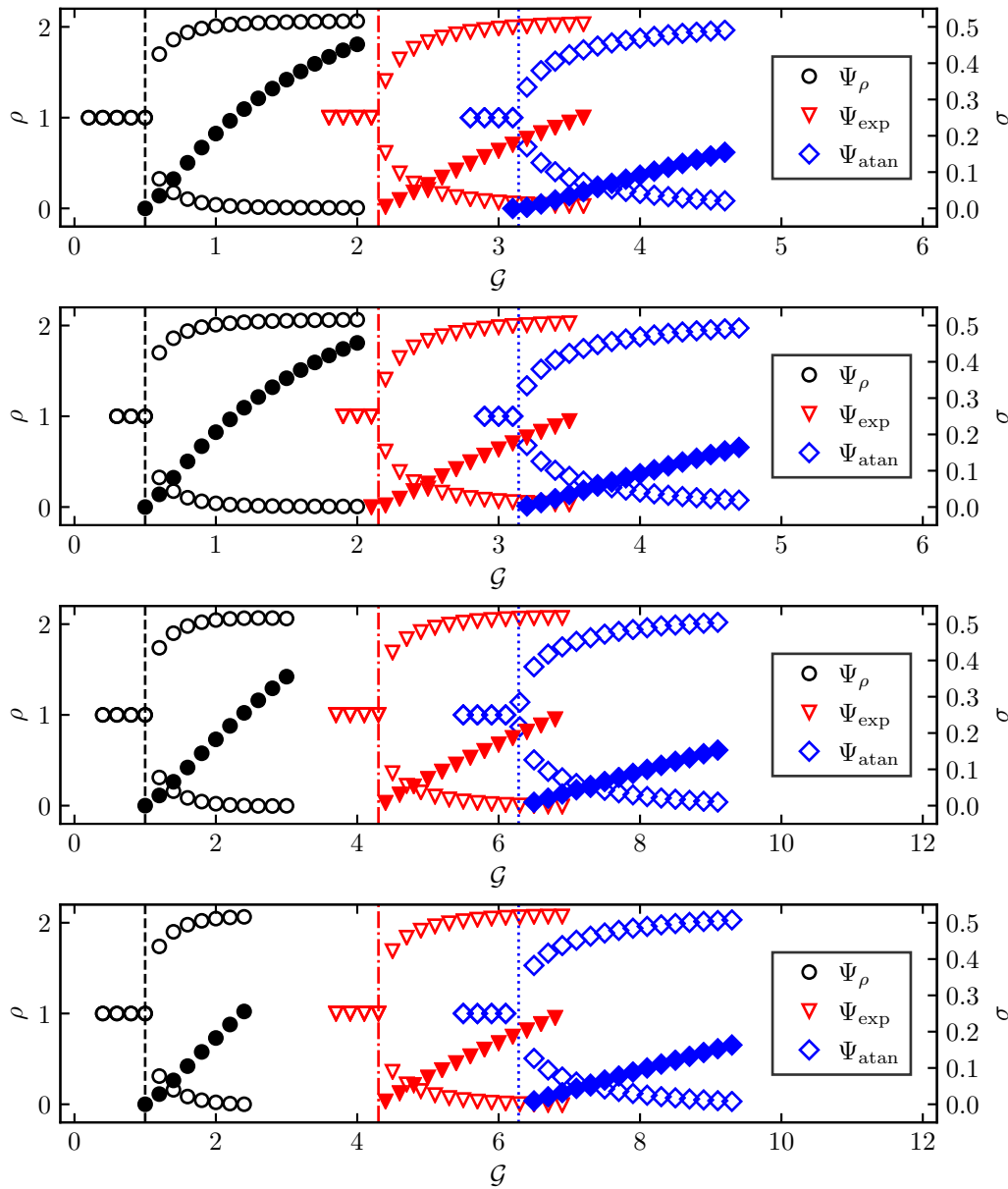


Abbildung 5.4: Simulation des Transitionspunktes für verschiedene Kräfteschemata. Dargestellt sind die Hauptdichten ρ_1^{Haupt} beziehungsweise gelösten Dichten $\rho_1^{\text{gelöst}}$ von Komponente 1 (ungefüllt) sowie die gemessenen Grenzflächenspannungen (gefüllt) für die Kräfteschemata Shan, EDM, He und Guo (von oben nach unten). Die kritischen Punkte stimmen mit den theoretischen Werten (vertikale Linien) überein. Für $\tau = 1$ sind diese $G_{\text{krit},\Psi_\rho} = 0.5$, $G_{\text{krit},\Psi_{\text{exp}}} \approx 2.150129$ und $G_{\text{krit},\Psi_{\text{atan}}} = \pi$ für das Shan- und EDM-Kräfteschema und doppelt so groß für das He- und Guo-Kräfteschema. Für $G < G_{\text{krit}}$ sind die Stoffe lösbar und es prägt sich keine Grenzfläche und dementsprechend keine Grenzflächenspannung aus (im mischbaren Regime vernachlässigt).

Dichte gegen Null konvergiert, sind die einzelnen Komponenten zunehmend reiner für steigende \mathcal{G} . Für beide Kräfteschemata entspricht der Übergangspunkt exakt den theoretischen Werten.

Die zugehörigen Grenzflächenspannungen σ skalieren unterschiedlich mit \mathcal{G} für die beiden Kräfteschemata, sowie für die verschiedenen Potentialfunktionen. Um dies zu verdeutlichen, wurden zusätzliche Simulationen für Ψ_ρ mit $\tau = 1.0, 1.5, 2.0$ durchgeführt. Ähnlich der Darstellung in Referenz [141], zeigt Abbildung 5.5 die entsprechenden Simulationsergebnisse. Zusätzlich zur Verschiebung des kritischen Punktes

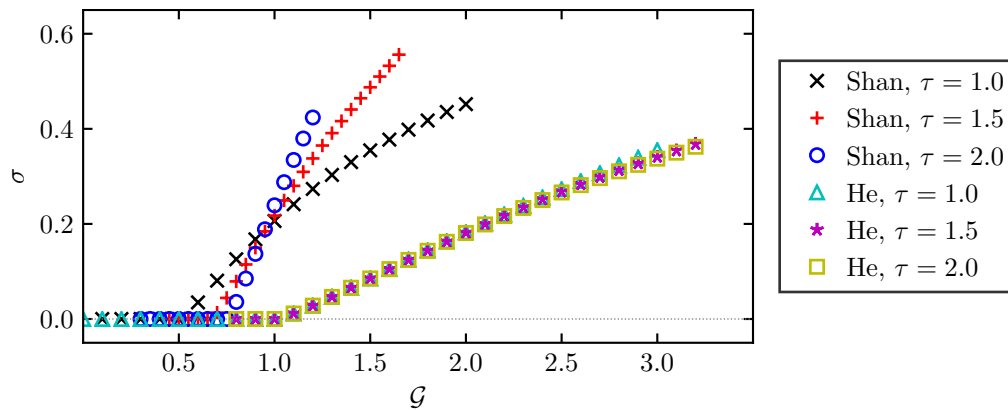


Abbildung 5.5: Grenzflächenspannungen σ in Abhängigkeit von \mathcal{G} für Ψ_ρ bei verschiedenen Relaxationszeiten $\tau = 1.0, 1.5, 2.0$. Während die Grenzflächenspannung bei Verwendung des Shan-Kräfteschemas von der Relaxationszeit (und damit von der Viskosität) abhängt, ist dies nicht der Fall für das He-Kräfteschema (in Übereinstimmung mit Referenz [141]).

ändert sich die Steigung der Grenzflächenspannung mit dem Kräfteschema. Dieser Effekt ist bekannt und auf den Einfluss des Kräfteschemas auf die Terme dritter Ordnung in der Interaktionskraft (und demzufolge im makroskopischen Drucktensor) zurückzuführen [74, 123]. Aus diesem Grund ist es bei Wechsel des Kräfteschemas nicht ausreichend \mathcal{G} zu verdoppeln, um dieselbe Grenzflächenspannung zu erzielen.

Um zu zeigen, dass der kritische Punkt für das Shan-Kräfteschema (und dementsprechend auch für das EDM-Kräfteschema) zudem relaxationszeitabhängig ist, wurden weitere Simulationen für $\tau = 1.0, 0.9, 0.8$ durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.6 dargestellt. Mit sinkender Relaxationszeit wird der Transitionspunkt in Richtung kleinerer \mathcal{G} verschoben. Der Übergangspunkt stimmt dabei wieder sehr gut mit den theoretischen Vorhersagen überein.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass die Simulationen mit dem Shan-Kräfteschema schneller äquilibrieren, als die mit dem He-Kräfteschema. Dies ist auf die Fehlerterme \mathcal{R}_S zurückzuführen, welche beim Shan-Kräfteschema in der Impulsgleichung auftauchen (siehe Anhang F), dissipativ wirken und so die Äquilibrierung beschleunigen. In diesem Abschnitt wurde gezeigt, dass der in dieser Arbeit hergeleitete, analytische, vom Kräfteschema abhängige Transitionspunkt für alle präsentierten Poten-

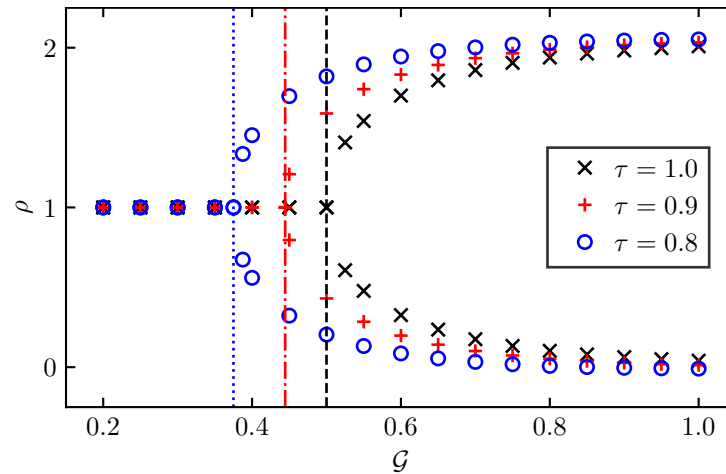


Abbildung 5.6: Simulation des Transitionspunktes für verschiedene Relaxationszeiten τ unter Verwendung des Shan-Kräftechemas. Wie durch Gleichung (5.25) vorhergesagt, skaliert dieser mit der Relaxationszeit. Die kritischen Werte (vertikale Linien) betragen $\mathcal{G}_{\text{krit},\tau=1.0} = 0.5$, $\mathcal{G}_{\text{krit},\tau=0.9} = 4/9$ und $\mathcal{G}_{\text{krit},\tau=0.8} = 0.375$.

tialfunktionen und Kräfteschemata mit den Simulationsergebnissen übereinstimmt. Es wurde zudem (in Übereinstimmung mit bestehender Literatur) gezeigt, dass sich der Zusammenhang zwischen Grenzflächenspannung σ und Modellparameter \mathcal{G} nicht nur entsprechend verschiebt, sondern dass die beiden Größen jenseits des Transitionspunktes auch unterschiedlich miteinander skalieren (Steigung jenseits des Transitionspunktes, siehe beispielsweise Abbildung 5.5). Da die Benetzungseigenschaften das Resultat unterschiedlicher Spannungen Fluid-Fluid- beziehungsweise Fluid-Festkörper-Spannungen sind, beeinflusst diese Verschiebung zudem die Modellierung unterschiedlicher Kontaktwinkel, was im Folgenden gezeigt wird.

5.2.3 Einfluss auf die Kontaktwinkelmodellierung

Für die Kontaktwinkelmodellierung wird im Folgenden die optimierte Fluid-Fluid-Interaktion aus Gleichung (3.20) in Kombination mit der Fluid-Festkörper-Interaktion aus Gleichung (3.16) mit $\mathcal{G}_1^{\text{Wand}} = -\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ verwendet. Die jeweiligen, durch die zusätzliche Fluid-Festkörper-Interaktion hervorgerufenen, Spannungen werden dabei durch eine Veränderung der Krümmung ausbalanciert, sodass sich der Kontaktwinkel θ ändert. Da diese Spannungen mit \mathcal{G} beziehungsweise $\mathcal{G}_k^{\text{Wand}}$ skalieren, sollte das Kräfteschema die Kontaktwinkelmodellierung entscheidend verändern.

Für die entsprechenden Simulationen wird ein halber, kreisrunder Tropfen von Komponente 1 mit Radius $r = 25$ in der unteren Mitte eines zweidimensionalen Rechengebiets der Größe 201×101 platziert, wo er umgeben von Komponente 2 ist (siehe Abbildung 3.6). Es werden periodische Randbedingungen entlang der x -Achse und

Festkörperländer jeweils am oberen und unteren Rand des Gebiets angewendet. Um die Systeme für verschiedene Kräfteschemata miteinander vergleichbar zu machen, also ähnliche gelöste Dichten beziehungsweise Hauptdichten zu erzielen, wird an dieser Stelle die reduzierte Größe

$$\mathcal{G}_{\text{red}} = \frac{\mathcal{G}}{\mathcal{G}_{\text{krit}}} \quad (5.29)$$

eingeführt und für alle folgenden Simulationen auf 1.8 gesetzt. Schließlich werden die simulierten Gleichgewichtsdichten aus Abbildung 5.4 für die Anfangswerte genutzt und das Konvergenzkriterium $\mathcal{V}(\mathbf{u}^m) < 10^{-7}$ verwendet (siehe Gleichung (3.18)). Der Kontaktwinkel wird wie in Abschnitt 3.3.1 beschrieben ermittelt.

Abbildung 5.7 zeigt die Ergebnisse für beide Kräfteschemata unter Verwendung der Potentialfunktionen Ψ_ρ und Ψ_{exp} . Dabei ist offensichtlich, dass für das He-

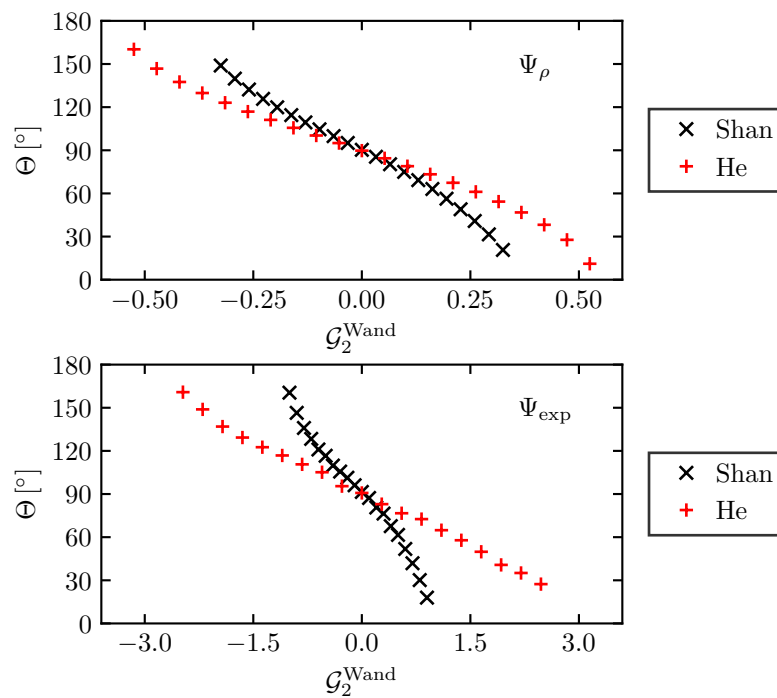


Abbildung 5.7: Kontaktwinkelmodellierung mit Shan- und He-Kräfteschema unter Verwendung der Potentialfunktionen Ψ_ρ und Ψ_{exp} für $\mathcal{G}_{\text{red}} = 1.8$ und $\tau = 1$. Aufgrund der Verschiebung in \mathcal{G} sind bei Verwendung des He-Kräfteschemas größere Werte für $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ nötig. Obwohl der kritische Wert zwischen den beiden Kräfteschemata um den Faktor zwei verschoben ist, muss $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ für den gleichen Kontaktwinkel θ nicht verdoppelt werden (zurückzuführen auf die unterschiedliche Skalierung der Grenzflächenspannung mit \mathcal{G}). Für die verwendeten Potentialfunktionen lassen sich alle Kontaktwinkel (0° bis 180°) abbilden.

Kräfteschema größere Werte für $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ nötig sind, um den gleichen Kontaktwinkel

zu erzielen. Als Folge des um den Faktor zwei verschobenen kritischen Punktes (für $\tau = 1$) wäre anzunehmen, dass die Werte genau doppelt so groß sein müssten. Da die Grenzflächenspannung jedoch zusätzlich schwächer mit \mathcal{G} skaliert (siehe Abbildung 5.5), sind die Werte nicht exakt verdoppelt. Im Bezug auf die unterschiedlichen Potentialfunktionen sind bei Verwendung von Ψ_{exp} größere Werte für $\mathcal{G}_2^{\text{Wand}}$ nötig als bei Verwendung von Ψ_{ρ} , um den gleichen Kontaktwinkel zu erzielen. Bei Wechsel vom Shan- zum He-Kräftechema muss \mathcal{G} nahezu verdoppelt werden, um ähnliche Gleichgewichtsdichten beziehungsweise *Fluid-Fluid-Grenzflächenspannungen* σ zu erhalten, siehe Abbildung 5.4. Da sich der Kontaktwinkel nach Young's Gesetz aus dem Verhältnis der unterschiedlichen Spannungen (Fluid-Festkörper und Fluid-Fluid) ergibt, müssen daher die Fluid-Festkörper-Kräfte entsprechend erhöht werden, um das gleiche Spannungsgleichgewicht beziehungsweise den gleichen Kontaktwinkel zu erzielen. Da die Näherungsformel (3.19) zur Bestimmung des Kontaktwinkels ihre Gültigkeit verliert, sobald die Berechnung der Fluid-Festkörper-Interaktion oder das Kräfteschema verändert wird, muss der Zusammenhang $\theta(\mathcal{G}_2^{\text{Wand}})$ für den verwendeten Wert \mathcal{G}_{red} in zusätzlichen Simulationen ermittelt werden – wie in Abbildung 5.7 für $\mathcal{G}_{\text{red}} = 1.8$. In Übereinstimmung mit der vorangegangenen Analyse lässt sich zusammenfassen, dass die Wahl des Kräfteschemas Auswirkungen auf die Modellierbarkeit von Kontaktwinkeln hat. Da bei Verwendung des He-Kräftechemas größere Kräfte nötig sind, um ähnliche gelöste Dichten beziehungsweise Hauptdichten zu erzielen, müssen die Fluid-Festkörper-Kräfte entsprechend erhöht werden. Demzufolge ist die gesamte, auf die Komponente k wirkende Kraft bei Verwendung des He-Kräftechemas größer.

5.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Einfluss des Kräfteschemas auf die makroskopischen Diffusionseigenschaften in PP-Modellen für MCMP-Systeme detailliert analysiert. Dafür wurde die makroskopische Advektions-Diffusions-Gleichung für die Kräfteschemata Shan, EDM, Guo und He untersucht. Auf Basis der identifizierten Diffusionseigenschaften wurde ein potentialfunktionsabhängiger Ausdruck für den Transitionspunkt zwischen mischbarem und nicht mischbarem Regime hergeleitet. Es konnte gezeigt werden, dass sich dieser generalisierte Ausdruck auf einen aus Referenz [73] bekannten Spezialfall für Ψ_{ρ} und $\tau = 1$ reduziert. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass sich dieser Übergangspunkt für $\tau = 1$ zwischen den beiden Kräfteschemata genau um den Faktor zwei verschiebt. Dies konnte bereits in Referenz [141] beobachtet werden, wurde jedoch weder thematisiert noch erklärt.

Das Ergebnis dieser theoretischen Analyse wurde in Simulationen zerfallender, sinusförmiger Konzentrationswellen (mischbar), stationärer Tropfen und statischer Kontaktwinkel (jeweils nicht mischbar) unter Verwendung zweier gängiger und einer weiteren, neu eingeführten Potentialfunktion validiert. In diesen sowohl transienten als auch stationären Testfällen waren die Simulationsergebnisse für den Transitionspunkt

und die Diffusionskoeffizienten in exzellenter Übereinstimmung mit der in dieser Arbeit hergeleiteten Theorie. Dabei wurde gezeigt, dass der Transitionspunkt bei Verwendung des Shan-Kräftechemas (und des EDM-Kräftechemas) von der Relaxationszeit (und damit von der Viskosität) abhängt, während diese Abhängigkeit für das He-Kräftechema (und des Guo-Kräftechema) nicht besteht. Zudem verschiebt sich bei Wechsel des Kräftechemas die Grenzflächenspannung, was die Kontaktwinkelmodellierung erheblich beeinflusst, da auch die Fluid-Festkörper-Interaktionen angepasst werden müssen.

Die Tatsache, dass sich die Diffusionseigenschaften mit dem Kräftechema ändern, hat einige weitreichende Implikationen, welche im Folgenden kurz aufgelistet werden.

- i) Es ist allgemein bekannt, dass die Skalierung der Grenzflächenspannung mit dem Parameter \mathcal{G} direkt mit den Termen dritter Ordnung in der Interaktionskraft zusammenhängt [74,123] (siehe Abschnitt 3.1.2 und Anhang G). Dementsprechend ist diese Skalierung für verschiedene Kräftechemata unterschiedlich [70]. Wie jedoch für MCMP-Systeme gezeigt werden konnte, ändern sich nicht nur Terme dritter Ordnung mit dem Kräftechema (Skalierung), sondern auch die Diffusionseigenschaften und der zugehörige Transitionspunkt. Somit skaliert σ anders und ist zudem durch den kritischen Punkt verschoben. Dies ist ein zusätzliches Argument dafür, dass bekannte Abschätzungen für die Grenzflächenspannung ihre Gültigkeit verlieren, wenn das Kräftechema gewechselt wird.
- ii) Damit Untersuchungen unter Nutzung unterschiedlicher Kräftechemata vergleichbar sind und Sinn machen, müssen einige Punkte beachtet werden. Ein Grund liegt darin, dass bei gegebener Interaktionskraft die unterschiedlichen Fluide bei Verwendung des Shan-Kräftechemas (beziehungsweise des EDM-Kräftechemas) bereits nicht mischbar sein können, während sie für das He-Kräftechema (beziehungsweise für das Guo-Kräftechema) noch mischbar sind. In diesem Fall weist Ersteres bereits Scheingeschwindigkeiten auf, während dies für Letzteres nicht der Fall ist, da keine Grenzflächen und demzufolge keine Dichtegradienten vorhanden sind. Daher ist es notwendig, Vergleiche von Scheingeschwindigkeiten oder beliebiger anderer grenzflächenabhängiger Eigenschaften auf Basis der eingeführten reduzierten, diffusionsabhängigen Variablen $\mathcal{G}_{\text{red}} = \mathcal{G}/\mathcal{G}_{\text{krit}}$ (siehe Gleichung (5.29)) durchzuführen statt bei identischem \mathcal{G} , wie beispielsweise in Referenz [141]. Ein ähnliches Vorgehen ist in SCMP-Systemen bereits üblich, wo \mathcal{G} mit der Temperatur identifiziert werden kann und Vergleiche auf Basis reduzierter Temperaturen vollzogen werden [189]. Dasselbe gilt für Gegenüberstellungen verschiedener Potentialfunktionen unter Verwendung desselben Kräftechemas.
- iii) Da der kritische Punkt in direktem Zusammenhang mit \mathcal{G} steht, müssen die Interaktionskräfte bei Verwendung des He-Kräftechemas (und auch Guo) größer sein als bei Verwendung des Shan-Kräftechemas (und auch EDM), um die

gleiche Reinheit einer einzelnen Komponente zu erzielen. Demzufolge müssen die für die Kontaktwinkelmodellierung benötigten Kräfte ebenfalls bedeutend größer gewählt werden, da der Kontaktwinkel das Ergebnis von Spannungen (Kräften) ist, die in der Nähe der Wand durch eine Veränderung der Krümmung der Fluid-Fluid-Grenzfläche ausgeglichen werden. Trotz alledem ist das He- dem Shan-Kräftechema vorzuziehen, da es zu weniger Fehlertermen in den makroskopischen Gleichungen führt [51] und bei Einsatz für MCMP-Systeme stabile Simulationen bei großen Viskositätsunterschieden ermöglicht [107, 141].

Es lässt sich zusammenfassen, dass die Wahl des Kräfteschemas in der Regel darauf abzielt, Fehlerterme in den makroskopischen Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls zu reduzieren. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass im Falle von MCMP-Systemen die tatsächliche Physik – die Diffusionseigenschaften – grundlegend verändert wird. Dies ist vor allem beim Vergleichen aber auch beim Wechseln des Kräfteschemas zu beachten. Um in diesen Fällen ähnliche Systeme zu erhalten, ist es nötig die reduzierten Modellparameter aus Punkt ii) dieser Zusammenfassung (eingeführt in Abschnitt 5.2.3) zu verwenden. Darüber hinaus ist es für die Kontaktwinkelmodellierung nötig, zusätzliche Simulationen durchzuführen, um einen entsprechenden Zusammenhang $\theta(\mathcal{G}_k^{\text{Wand}}, \mathcal{G})$ zu ermitteln, da – wie bereits in Abschnitt 3.3.1 und Abschnitt 3.3.2.3 gezeigt werden konnte – die einzig existierende Näherungsformel zur Bestimmung des Kontaktwinkels bei Variation des Kräfteschemas (oder der Fluid-Festkörper-Interaktion) ihre Gültigkeit verliert (nur gültig für Shan-Kräftechema mit $\mathbf{F}_k^{\text{Martys, Wand}}$ und $\rho^{\text{Wand}} = 0$).

6 Zusammenfassung

„Indes sie forschten, röntgten, filmten, funkten, entstand von selbst die köstlichste Erfindung: der Umweg als die kürzeste Verbindung zwischen zwei Punkten.“

– Erich Kästner

Ziel dieser Arbeit war es Genauigkeit und Stabilität von PP-Modellen zu verbessern und den Modellierungsaufwand durch ein tieferes Verständnis des Modells zu reduzieren. Dazu wurde das PP-Modell um drei neue Aspekte erweitert.

Zunächst wurde die LBM in Kapitel zwei in ihrer Grundform vorgestellt. Drei vereinfachende Schritte (Approximation des Kollisionstermes, Diskretisierung von Geschwindigkeitsraum und Zeit) überführten dabei die kontinuierliche Boltzmann-Gleichung in die LBGK-Gleichung – die zentrale Evolutionsgleichung der LBM. Zum besseren Verständnis der in dieser Arbeit vorgestellten Neuerungen wurde eine Chapman-Enskog-Analyse durchgeführt (siehe Anhang C) – eine gängige Methode zur Bestimmung der approximierten, makroskopischen Gleichungen [20, 31]. Diese zeigte, dass die Momente der diskreten Verteilungen die NS-Gleichungen approximieren, die LBM sich also für die Simulation makroskopischer Strömungen eignet. Mit derselben Analyse lassen sich Lattice-Boltzmann-Methoden zur Lösung beliebiger makroskopischer Gleichungen konstruieren [163], wobei lediglich die Momente und die Gleichgewichtsverteilung undefiniert werden müssen (beispielhaft in Anhang D für die Diffusionsgleichung durchgeführt, siehe auch Referenz [195]). Den Abschluss dieses Kapitels bildete eine kurze Zusammenfassung der grundlegenden Vor- und Nachteile der LBM, wie sie aus der Chapman-Enskog-Analyse sowie der Formulierung des Lösungsalgorithmus und der Randbedingungen hervorgehen.

Im dritten Kapitel wurde das PP-Modell zur Simulation von Mehrphasenströmungen vorgestellt. Ausgehend von einer allgemeinen Formulierung konnte es für die Simulation von SCMP- und MCMP-Systemen vereinfacht und auf die Verwendung höherisotroper Diskretisierungen für die Interaktionskräfte sowie auf verschiedene Ansätze für deren Einbindung in die Evolutionsgleichung (Kräfteschemata) eingegangen werden. Eine Simulation eines stationären Tropfens in einem SCMP-System demonstrierte die Entstehung von Scheingeschwindigkeiten an Phasenübergängen (Dichtegradi-

enten). Durch eine Analyse der unterschiedlichen Fehler (\mathcal{R}_C , \mathcal{R}_S , \mathcal{R}_t und \mathcal{R}_F) konnte die Funktionsweise bestehender Methoden für die Reduktion dieser numerischen Artefakte (Zeitintegrationsverfahren, Geschwindigkeitssätze, Kräfteschemata) in einen Zusammenhang gesetzt und erklärt werden.

Anschließend wurden verschiedene Möglichkeiten zur Modellierung der Benetzungseigenschaften von Festkörperoberflächen vorgestellt und gezeigt, dass diese Methoden in Kombination mit verbesserten Kräfteschemata zur Entstehung von Scheintropfen führen. Diese wiederum konnten durch eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelten neuartigen Methode eliminiert werden. In einem Vergleich mit bestehenden Ansätzen war zu sehen, dass diese Methode zusätzlich den Stabilitätsbereich in wandgebundenen Strömungen stark erhöht (in vergleichbarer Größenordnung mit voll periodischen Simulationen). Dies ermöglicht die Simulation wandgebundener Strömungen mit variabler Benetzbarkeit unter Verwendung verbesserter Kräfteschemata, sodass nun auch in diesen Szenarien deren Vorteile ausgenutzt werden können (für das He-Kräfteschema beispielsweise: viskositätsunabhängige Gleichgewichtsdichten beziehungsweise Grenzflächenspannungen und hohe Viskositätsverhältnisse, siehe auch Abschnitt 3.1.4).

Steigerung von Stabilität und Genauigkeit durch numerische Optimierung

Im vierten Kapitel wurde eine neuartige Methode zur Reduktion von Scheingeschwindigkeiten vorgestellt. Eine Vergrößerung der Finite-Differenzen-Approximation für die Berechnung der Interaktionskräfte führte dabei zu zusätzlichen Freiheitsgraden in Form von freien Wichtungskoeffizienten \mathcal{W}_i , welche anhand eines Testfalls numerisch optimiert werden konnten. Das Ergebnis war eine zweidimensionale optimierte Diskretisierung vierter Ordnung in der Isotropie $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$.

Ein Vergleich mit den gängigen höher-isotropen Diskretisierungen $\mathcal{E}^{(4)}$, $\mathcal{E}^{(6)}$, $\mathcal{E}^{(8)}$ in Simulationen des Flüssig-Dampf-Gleichgewichtes eines stationären Tropfens zeigte eine Verbesserung der simulierten Gleichgewichtsdichten, wenn $\mathcal{E}_{\text{opt}}^{(4)}$ verwendet wurde, obwohl dies nicht Ziel der Optimierung war. Für $\tau = 1$ lagen die numerischen Fehler unterhalb derer der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung, welche doppelt so viele Gitterpunkte benötigt. Dabei war ebenfalls zu sehen, dass Scheingeschwindigkeiten erheblich reduziert und der Stabilitätsbereich des Modells erhöht werden konnten, wobei im Gegensatz zur Standardformulierung nur vier zusätzliche Punkte nötig waren.

Schließlich wurde die optimierte Diskretisierung in dynamischen Simulationen von oszillierenden Tropfen angewandt, deren natürliche Schwingungsfrequenz analytisch berechnet werden kann. Die dabei entstehenden Fehler waren von ähnlicher Größenordnung wie diejenigen vergleichbarer Diskretisierungen. Für die getesteten Fälle lagen diese zwischen 8 – 9 % und damit leicht unterhalb derer der $\mathcal{E}^{(6)}$ - beziehungsweise leicht oberhalb derer der $\mathcal{E}^{(8)}$ -Diskretisierung.

Es lässt sich schlussfolgern, dass das Modell bezüglich Scheingeschwindigkeiten numerisch optimiert werden kann. Aufgrund der Analyse aus Abschnitt 3.2.2 ist anzunehmen, dass dabei die unterschiedlichen numerischen Fehler in der Impulsgleichung (modellbedingter Fehler \mathcal{R}_C , durch das Kräfteschema bedingte Fehler \mathcal{R}_S , zeitliche Fehler \mathcal{R}_t , Terme höherer Ordnung in der Interaktionskraft \mathcal{R}_F) so weit wie möglich ausbalanciert werden. Das präsentierte Verfahren lässt sich ohne Weiteres auf größere Diskretisierungen, auf weitere, von der Diskretisierung der Interaktionskraft abhängige Größen oder MCMP-Systeme erweitern.

Neue Erkenntnisse durch Analyse der Diffusionseigenschaften

Im fünften Kapitel wurden die Diffusionseigenschaften in MCMP-Systemen mithilfe der Chapman-Enskog-Analyse detailliert untersucht. Dabei konnte gezeigt werden, dass sich diese je nach verwendetem Kräfteschema (Shan, EDM, He, Guo) ändern. Kräfteschemata wiederum werden in der Regel so gewählt, dass die Fehlerterme \mathcal{R}_S in den makroskopischen Gleichungen (siehe Anhang F) minimiert werden. Es wurde jedoch aufgedeckt, dass die Variation des Kräfteschemas bei der Simulation von MCMP-Systemen dazu führt, dass sich die Zusammenhänge zwischen Modell- und physikalischen Parametern (in diesem Fall, den makroskopischen Diffusionskoeffizienten) ändern.

Darauf aufbauend wurde der Transitionspunkt, der den Übergang vom mischbaren zum nicht mischbaren Regime charakterisiert, in *potentialfunktionsabhängiger* Form hergeleitet und gezeigt, dass er für die unterschiedlichen Kräfteschemata verschoben ist. Dieser Punkt wurde für die Kräfteschemata Shan, EDM, He und Guo hergeleitet und in Simulationen stationärer Tropfen validiert. Die Simulationsergebnisse waren dabei in exzellenter Übereinstimmung mit der hergeleiteten Theorie. Auf Basis dieses kritischen Punktes konnten schließlich reduzierte Variablen eingeführt werden, mittels welcher sowohl unterschiedliche Potentialfunktionen als auch unterschiedliche Kräfteschemata miteinander verglichen werden können. Zudem ermöglichen diese es bei Variation der Potentialfunktion, der makroskopischen Referenzdichten oder des Kräfteschemas den Modellparameter \mathcal{G} so zu wählen, dass *näherungsweise* die gleichen gelösten Dichten beziehungsweise Hauptdichten vorhanden sind; dieser analytische Zusammenhang erlaubt also eine rigorose Wahl des Modellparameters. Während vor dieser Arbeit zusätzliche Hilfssimulationen durchgeführt werden mussten, um einen geeigneten Wert für \mathcal{G} zu ermitteln, kann dieser nun durch die hier entwickelte Theorie vorab gewählt werden. Da es zudem für die Potentialfunktion in MCMP-Systemen keine physikalische Grundlage gibt [110] und sie auf Basis der eingeführten reduzierten Variablen Potentialfunktionen miteinander verglichen werden können, ist es nun möglich gezielt neue Potentialfunktionen zu entwickeln. So könnte die Stabilität gesteigert werden oder Potentialfunktionen mit zusätzlichen Freiheitsgraden

beispielsweise zur Regulierung der Grenzflächenspannung bestimmt werden – wie in den Referenzen [111, 151] für SCMP-Systeme demonstriert. Im Rahmen dieser Arbeit konnten bereits – auf Basis der ermittelten Diffusionskoeffizienten – kräfteschemaspezifische Potentialfunktionen mit variablem Transitionspunkt entwickelt werden (siehe Anhang H), wodurch Ψ_k in diesem Kontext erstmalig eine physikalische Bedeutung erhält. Diese führten jedoch zu einem stark eingeschränkten Stabilitätsbereich und bedürfen weiterer Untersuchungen, welche jedoch über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen.

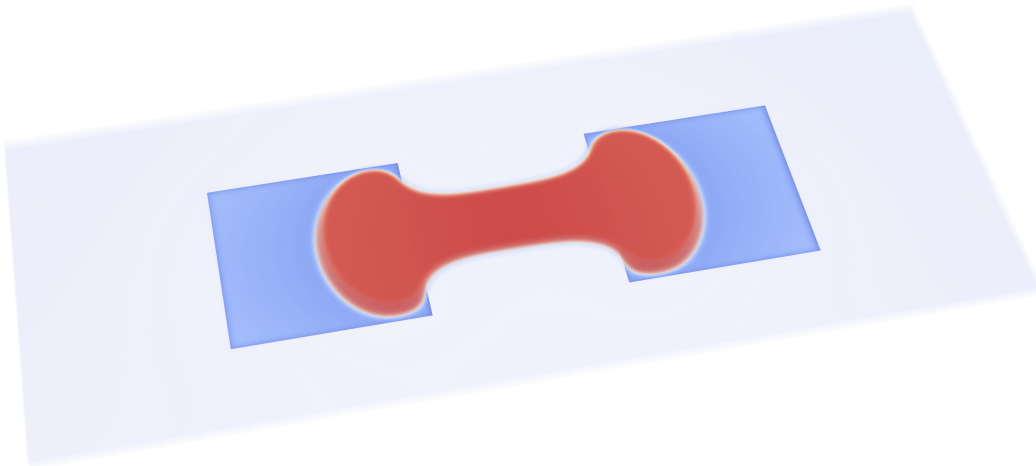


Abbildung 6.1: Dreidimensionale Simulation Electrowetting. Dargestellt ist der Spaltungsprozess eines anfänglich mittig zwischen zwei Elektroden positionierten Tropfens einer leitfähigen Flüssigkeit (rot), umgeben von einer apolaren Flüssigkeit. An Boden und Deckplatte befinden sich Festkörperwände. Die Kanalhöhe ist im Vergleich zum Tropfenradius klein, sodass der Tropfen Kontakt zu Deck- und Bodenplatte hat und näherungsweise als zylinderförmig angenommen werden kann [6, 91, 136]. Die Aktivierung der am Boden befindlichen Elektroden führt zu einer Reduktion des Kontaktwinkels und damit zu einem Druckgradienten, welcher den Tropfen in Richtung der jeweiligen Elektroden beschleunigt und auseinanderzieht. In Referenz [22] wurde ein kritisches Verhältnis von Kanalhöhe zu Elektrodenkantenlänge bestimmt, oberhalb dessen sich ein Tropfen nicht mehr in zwei separate, kleinere Tropfen spalten lässt, sondern nur noch gedehnt wird. Dieses Verhältnis wurde experimentell belegt und kann als Validierung für dynamische Kontaktwinkeländerungen herangezogen werden.

Ausblick

Aus den präsentierten Weiterentwicklungen des PP-Modells ergeben sich eine Vielzahl weiterer Forschungsthemen.

Die Verwendung optimierter Randbedingungen in Kombination mit kräftebasierten Ansätzen zur Modellierung der Benetzungseigenschaften muss in Testfällen mit dynamischen Kontaktwinkeln weiter untersucht werden. Dazu kann beispielsweise die Washburn-Gleichung [21] als analytischer Testfall herangezogen werden, oder aber Electrowetting-Vorgänge simuliert werden [24, 25, 104, 105], siehe Abbildung 6.1.

Die numerische Optimierung in SCMP-Systemen kann auf Finite-Differenzen-Approximationen mit weiteren Freiheitsgraden erweitert werden, um so Scheingeschwindigkeiten weiter zu reduzieren. Da die Nachbarschaft dabei vergrößert wird, ist zudem zu analysieren, welchen Einfluss die optimierten Diskretisierungen in wandgebundenen Strömungen haben. Obwohl die optimierten Koeffizienten sich nicht auf alle Methoden verallgemeinern lassen, welche die Fehlerterme in den makroskopischen Gleichungen verändern, ist zu untersuchen, inwiefern ihr Effekt bei Wechsel beispielsweise des Kräfteschemas oder des Geschwindigkeitssatzes eingeschränkt wird. Des Weiteren ist zu analysieren, inwieweit Koeffizienten, die für SCMP-Systeme optimiert wurden, in MCMP-Systemen anwendbar sind.

Die Analyse der Diffusionseigenschaften in MCMP-Systemen wurde in dieser Arbeit für binäre Gemische durchgeführt und ist künftig auf Systeme beliebig vieler Komponenten zu erweitern. Zudem ist eine Verallgemeinerung auf Systeme anzustreben, in denen *sowohl* Kräfte innerhalb einer Komponente *als auch* Kräfte zwischen verschiedenen Komponenten wirken (siehe Kategorie iii) in der Einführung von Kapitel 3). Auf Basis des potentialfunktionsabhängigen Transitionspunktes und den davon abgeleiteten reduzierten Variablen können schließlich neue Potentialfunktionen entwickelt und verglichen werden.

Fazit

Es kann festgehalten werden, dass die Ziele dieser Arbeit erreicht wurden. Scheingeschwindigkeiten an Grenzflächen konnten durch Verwendung einer numerisch optimierten Diskretisierung erheblich reduziert werden. Dies führte ebenfalls zu einer Verbesserung der Stabilitätseigenschaften des Modells.

Der Modellierungsaufwand bei der Simulation von MCMP-Systemen konnte durch eine detaillierte Analyse der Diffusionseigenschaften reduziert werden. Zudem bildet die vorgestellte Analyse die Grundlage für die Vergleichbarkeit unterschiedlicher Kräfteschemata und Potentialfunktionen und dient daher auch als Basis für die Entwicklung neuer Potentialfunktionen (*für MCMP-Systeme*).

Zusätzlich wurde die kräftebasierte Modellierung von Kontaktwinkeln in MCMP-Systemen so erweitert, dass bei Verwendung verbesserter Kräfteschemata die Entstehung von Scheintröpfchen unterdrückt und der Stabilitätsbereich in Simulationen wandgebundener Strömungen erhöht werden konnte.

A Kollisionsoperator mit multiplen Relaxationszeiten

Im Folgenden wird der sogenannte MRT (engl. *Multiple-Relaxation-Time*)-Kollisionsoperator mit multiplen Relaxationszeiten vorgestellt. Der Konsistenz halber ist dieser Anhang mit Abschnitt 2.1.1 verknüpft, es werden jedoch zusätzlich die Inhalte der Abschnitte 2.1.2, 2.1.5 und 2.2 vorausgesetzt.

MRT-Modelle sind eine Verallgemeinerung des SRT-Modells, wobei der Kollisionsschritt für den Verteilungsvektor $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_{q-1})^T$ als

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{temp}} = \mathbf{f}_\alpha - \mathcal{M}_{\alpha\beta}^{-1} \mathcal{S}_{\beta\gamma} \mathcal{M}_{\gamma\delta} (\mathbf{f}_\delta - \mathbf{f}_\delta^{\text{eq}}) \quad (\text{A.1})$$

formuliert wird. Beim Lösen werden die Verteilungen \mathbf{f} und \mathbf{f}^{eq} mittels der Transformationsmatrix $\mathcal{M}_{\alpha\beta}$ zunächst vom Geschwindigkeitsraum (häufig auch Verteilungsraum) in den sogenannten Momentenraum transformiert

$$\mathbf{m}_\alpha^{\text{eq}} = \mathcal{M}_{\alpha\beta} \mathbf{f}_\beta^{\text{eq}}, \quad \mathbf{m}_\alpha = \mathcal{M}_{\alpha\beta} \mathbf{f}_\beta,$$

sodass sich Gleichung (A.1) zu

$$\mathbf{f}_\alpha^{\text{temp}} = \mathbf{f}_\alpha - \mathcal{M}_{\alpha\beta}^{-1} \mathcal{S}_{\beta\gamma} (\mathbf{m}_\gamma - \mathbf{m}_\gamma^{\text{eq}})$$

vereinfacht. Der Vektor \mathbf{m} enthält dann alle Momente, die mit dem verwendeten Geschwindigkeitssatz berechenbar sind (für die $D2Q9$ -Diskretisierung beispielsweise neun Momente). Diese werden im Folgenden über die Kollisionsmatrix

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta} = [\text{diag}(\tau_0^*, \tau_1^*, \dots)]_{\alpha\beta}$$

unabhängig voneinander mit individuellen Relaxationszeiten $\tau_0^*, \tau_1^*, \dots$ relaxiert, bevor mittels $\mathcal{M}_{\alpha\beta}^{-1}$ die Rücktransformation in den Verteilungsraum erfolgt. Schließlich kann der Strömungsschritt

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{\text{temp}}$$

ausgeführt werden. Werden alle Relaxationszeiten gleich gewählt, reduziert sich das MRT- auf das zuvor präsentierte SRT-Modell.

Die Form der Transformationsmatrizen und die Bedeutung der einzelnen Relaxationszeiten hängen dabei vom Geschwindigkeitssatz ab (siehe beispielsweise Referenz [51]). Ein Vorteil dieser Herangehensweise besteht darin, dass Volumen- und Scherviskosität voneinander entkoppelt und über unterschiedliche Relaxationszeiten reguliert werden können, wohingegen diese in SRT-Modellen gleichermaßen von der Relaxationszeit abhängen (siehe Anhang C).

Des Weiteren lassen sich mit den geschwindigkeitsdiskreten Verteilungen grundsätzlich q Momente berechnen, wovon jedoch nicht alle in den makroskopischen Gleichungen (2.19) auftauchen. Neben den niederen physikalischen Momenten (Dichte, Impulsdichte, etc.) lassen sich höhere Momente berechnen, welche keine physikalische Gleichung befolgen und sich demzufolge unphysikalisch verhalten. Diese verändern sich bei Auswertung des Kollisionstermes mit und können bei Verwendung kleiner Relaxationszeiten (beispielsweise in turbulenten Strömungen) zu Instabilitäten führen [29]. MRT-Modelle erlauben es, die Relaxationszeiten dieser Momente individuell anzupassen, um die Stabilität in derartigen Simulationen zu erhöhen. Die entsprechenden Relaxationszeiten können dabei entweder frei gewählt [30] oder aber auf Basis physikalischer Überlegungen dynamisch angepasst werden – beispielsweise entropiegestützt im Karlin-Bösch-Chikatamarla (KBC, nach Entwicklern)-Modell [80] oder bei pseudoentropisch stabilisierten Verfahren [84].

B Approximation der Maxwell-Boltzmann-Verteilung

In diesem Anhang wird die Approximation der Maxwell-Boltzmann-Verteilung hergeleitet, wie sie in der LBM verwendet wird (siehe Gleichung (2.10) aus Abschnitt 2.1.2); das heißt mit skalierten mikroskopischen Geschwindigkeiten aus Gleichung (2.9) (der Einfachheit halber für eine räumliche Dimension). Die wichtigsten Gleichungen werden dabei wiederholt und durch die skalierten Geschwindigkeiten

$$e = c_s \xi$$

ausgedrückt. Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung ist dann

$$f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) = \frac{\rho}{c_s \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{e}{c_s^2} - \frac{u}{c_s}\right)^2\right] \quad (\text{B.1})$$

und wird in eine Basis von Hermiteschen Funktionen

$$f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) = w\left(\frac{e}{c_s}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^{(n)} \mathcal{H}^{(n)}\left(\frac{e}{c_s}\right)$$

mit den Koeffizienten

$$a^{(n)} = \int f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) \mathcal{H}^{(n)}\left(\frac{e}{c_s}\right) d\frac{e}{c_s} \quad (\text{B.2})$$

entwickelt. Die Hermite-Polynome sind

$$\mathcal{H}^{(n)}\left(\frac{e}{c_s}\right) = (-1)^n \frac{1}{w\left(\frac{e}{c_s}\right)} \frac{d^n}{de^n} w\left(\frac{e}{c_s}\right) \quad \text{mit} \quad w\left(\frac{e}{c_s}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{e^2}{2c_s^2}\right).$$

Bis zur zweiten Ordnung sind diese also

$$\boxed{\mathcal{H}^{(0)}\left(\frac{e}{c_s}\right) = 1, \quad \mathcal{H}^{(1)}\left(\frac{e}{c_s}\right) = \frac{e}{c_s^2}, \quad \mathcal{H}^{(2)}\left(\frac{e}{c_s}\right) = \frac{e^2}{c_s^4} - \frac{1}{c_s^2}.} \quad (\text{B.3})$$

Im Folgenden wird die Maxwell-Boltzmann-Verteilung (B.1) umformuliert und die Koeffizienten $a^{(n)}$ berechnet.

B.1 Bestimmung der Koeffizienten

Unter Verwendung der Gewichtsfunktion lässt sich die Maxwell-Boltzmann-Verteilung (B.1) als

$$f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) = \frac{\rho}{c_s} w\left(\frac{e}{c_s^2} - \frac{u}{c_s}\right) = \frac{\rho}{c_s} w(\mathcal{L})$$

ausdrücken, wobei

$$\mathcal{L} = \frac{e}{c_s^2} - \frac{u}{c_s} \quad \Leftrightarrow \quad e = \mathcal{L}c_s^2 + uc_s$$

ist. Mit

$$\frac{de}{d\mathcal{L}} = c_s^2 \quad \Leftrightarrow \quad de = c_s^2 d\mathcal{L}$$

lassen sich die Koeffizienten (B.2) zu

$$\begin{aligned} a^{(n)} &= \int f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) \mathcal{H}^{(n)}\left(\frac{e}{c_s}\right) d\frac{e}{c_s} \\ &= \frac{\rho}{c_s} \int w(\mathcal{L}) \mathcal{H}^{(n)}\left(\frac{e}{c_s}\right) d\frac{e}{c_s} \\ &= \rho \int w(\mathcal{L}) \mathcal{H}^{(n)}(\mathcal{L}c_s + u) d\mathcal{L} \end{aligned}$$

umformulieren und berechnen

$$a^{(0)} = \rho \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\mathcal{L}^2}{2}\right) \cdot 1 d\mathcal{L} = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int \exp\left(-\frac{\mathcal{L}^2}{2}\right) d\mathcal{L}}_{=\sqrt{2\pi}} = \rho,$$

$$a^{(1)} = \dots = \rho u,$$

$$a^{(2)} = \dots = \rho u^2 + \rho c_s^2.$$

Unter Verwendung dieser Koeffizienten und der Hermite-Polynome (B.3) lässt sich die Approximation zweiter Ordnung der Gleichgewichtsverteilung als

$$\begin{aligned} f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) &= w\left(\frac{e}{c_s}\right) \left[\rho + \frac{\rho u e}{c_s^2} + \frac{1}{2} (\rho c_s^2 + \rho u^2) \left(\frac{e^2}{c_s^4} - \frac{1}{c_s^2} \right) \right] \\ &= w\left(\frac{e}{c_s}\right) \rho \left[1 + \frac{ue}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{e^2 u^2}{c_s^4} - \frac{u^2}{c_s^2} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{c_s^2} - 1 \right) \right] \end{aligned}$$

ausdrücken, wobei der letzte Term aufgrund der Skalierung entfällt [87,93,162]. Damit ergibt sich die bekannte Form der Gleichgewichtsverteilung mit skalierten Geschwindigkeiten

$$\boxed{f^{\text{eq}}\left(\frac{e}{c_s}\right) = w\left(\frac{e}{c_s}\right) \rho \left(1 + \frac{ue}{c_s^2} + \frac{e^2 u^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right)}$$

in einer Dimension, beziehungsweise in dimensionsunabhängiger Form (2.10).

C Rekonstruktion der Navier-Stokes-Gleichungen

Im Folgenden wird durch Anwendung der Chapman-Enskog-Analyse [18] gezeigt, dass die Lösung der LBGK-Gleichung

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i - \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{\text{eq}})$$

dazu führt, dass die Momente der Verteilungen die makroskopischen NS-Gleichungen approximieren, die Methode sich also für die Simulation von Strömungen eignet. Als Vorbereitung werden zunächst die ersten vier Momente der Gleichgewichtsverteilung (2.10) berechnet

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{\text{eq}} &= \rho, \\ \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{\text{eq}} &= \rho u_\alpha, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{\text{eq}} &= \rho u_\alpha u_\beta + c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{\text{eq}} &= \rho c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha). \end{aligned} \tag{C.1}$$

Da f_i^{eq} die Gewichte w_i und quadratische Terme in \mathbf{e}_i enthält, müssen dabei alle Isotropiebedingungen (2.14) bis zur fünften Ordnung erfüllt sein.

C.1 Chapman-Enskog-Analyse

Den Ausgangspunkt für die Anwendung der Chapman-Enskog-Analyse bildet eine Taylorentwicklung zweiter Ordnung der LBGK-Gleichung (2.18)

$$D_i f_i + \frac{\delta_t}{2} D_i^2 f_i + \mathcal{O}(\delta_t^2) = -\frac{1}{\tau \delta_t} (f_i - f_i^{\text{eq}}), \tag{C.2}$$

wobei $D_i = \partial_t + e_{i,\alpha} \partial_\alpha$ der materiellen Ableitung entspricht. Als Folge der Kopplung von Zeitschritt und Maschenweite über Gleichung (2.15) kann der führende Fehlerterm sowohl durch δ_x als auch durch δ_t ausgedrückt werden, sodass dies einen Fehler zweiter Ordnung in Raum und Zeit impliziert.

Nun kann die Multiskalenanalyse durchgeführt werden, wobei zunächst die Ableitungsoperatoren durch

$$\begin{aligned} \partial_\alpha &= \varepsilon \partial_\alpha^{(1)}, \\ \partial_t &= \varepsilon \partial_t^{(1)} + \varepsilon^2 \partial_t^{(2)} \end{aligned} \tag{C.3}$$

mit dem dimensionslosen Skalierungsfaktor $\varepsilon \ll 1$ ersetzt werden. Für die materielle Ableitung gilt dann

$$D_i = \varepsilon D_i^{(1)} = \varepsilon \partial_t^{(1)} + e_{i,\alpha} \varepsilon \partial_\alpha^{(1)}.$$

Die Idee dahinter ist, dass zeitliche Änderungen als Superposition verschiedener Phänomene auf unterschiedlichen Skalen interpretiert werden können, welche sich in ihrer Größenordnung erheblich unterscheiden. Da makroskopische Strömungen durch die Überlagerung schneller Konvektions- und langsam ablaufender Diffusionsprozesse charakterisiert werden, wird die Zeitableitung in große beziehungsweise schnelle Änderungen $\partial_t^{(1)}$ und kleine beziehungsweise langsame Änderungen $\partial_t^{(2)}$ aufgespalten [31]. Der Skalierungsfaktor stellt dabei sicher, dass die Terme von unterschiedlicher Größenordnung sind.

Im nächsten Schritt wird die Verteilungsfunktion in eine asymptotische Reihe

$$f_i = f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \tag{C.4}$$

entwickelt, wobei – wie sich zeigen wird – Terme höherer Ordnung in ε Abweichungen vom Gleichgewicht repräsentieren. Setzt man diese Reihenentwicklung zusammen mit den Ableitungsoperatoren (C.3) in Gleichung (C.2) ein und separiert die Terme unterschiedlicher Größenordnungen in ε , führt dies zu

$$\varepsilon^0 : \quad 0 = -\frac{1}{\delta_t \tau} \left(f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}} \right), \tag{C.5}$$

$$\varepsilon^1 : \quad D_i^{(1)} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} f_i^{(1)}, \tag{C.6}$$

$$\varepsilon^2 : \quad \partial_t^{(2)} f_i^{(0)} + D_i^{(1)} f_i^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} D_i^{(1)} D_i^{(1)} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} f_i^{(2)}. \tag{C.7}$$

Unter Verwendung der materiellen Ableitung von Gleichung (C.6) kann Gleichung (C.7) zu

$$\varepsilon^2 : \quad \partial_t^{(2)} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) D_i^{(1)} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} f_i^{(2)} \tag{C.8}$$

vereinfacht werden [51, 53], wodurch sich die gesamte folgende Rechnung erheblich verkürzt.

Nun kann das Verhalten der Momente für unterschiedliche Größenordnungen separat untersucht werden, wobei die jeweilige Gleichung mit der entsprechenden Potenz von e_i multipliziert und anschließend über i summiert wird.

Aus Gleichung (C.5) folgt bereits unmittelbar, dass die Verteilungsfunktion nullter Ordnung der Gleichgewichtsverteilung entspricht und damit alle Terme höherer Ordnung Nichtgleichgewichtsanteile repräsentieren. Zusammen mit der Reihenentwicklung (C.4) und den Momenten der Verteilungsfunktion (2.11) folgt

$$\begin{aligned}\sum_i f_i^{(z)} &= 0 \quad \forall z > 0, \\ \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(z)} &= 0 \quad \forall z > 0,\end{aligned}\tag{C.9}$$

sodass die Momente der Nichtgleichgewichtsanteile verschwinden (in Einklang mit der Erhaltung der Momente durch den Kollisionsoperator, siehe Abschnitt 2.1.1).

C.1.1 Rekonstruktion der Kontinuitätsgleichung

Da das nullte Moment der Verteilungen der Dichte entspricht, zeigen die nullten Momente der Gleichungen (C.6) und (C.8) wie sich diese mit der Zeit ändert. So ergibt das nullte Moment der ε^1 -Gleichung (C.6)

$$\partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{(0)} + \partial_\alpha^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i f_i^{(1)}$$

was unter Verwendung der Gleichgewichtsmomente (C.1) und Gleichung (C.9) zu

$$\partial_t^{(1)} \rho + \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\alpha) = 0\tag{C.10}$$

vereinfacht werden kann.

Analog wird das nullte Moment der ε^2 -Gleichung (C.8)

$$\partial_t^{(2)} \sum_i f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{(1)} + \partial_\alpha^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i f_i^{(2)}$$

gebildet und zu

$$\partial_t^{(2)} \rho = 0\tag{C.11}$$

vereinfacht.

Rekombination der Skalen: Durch Multiplikation der Gleichungen (C.10) und (C.11) mit ε beziehungsweise ε^2 und anschließendem addieren der beiden kann die *kompresible Kontinuitätsgleichung*

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$$

rekonstruiert werden, wobei die ursprünglichen Ableitungen wieder eingesetzt wurden. Das nullte Moment erfüllt also die Massenerhaltungsgleichung der kompressiblen NS-Gleichungen.

C.1.2 Rekonstruktion der Impulsgleichung

Da das erste Moment der Impulsdichte entspricht, kann die Impulsgleichung analog zur Kontinuitätsgleichung aus den ersten Momenten der Gleichungen (C.6) und (C.8) gewonnen werden. Das erste Moment der ε^1 -Gleichung (C.6) ergibt

$$\partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(0)} + \partial_\beta \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)}$$

und damit

$$\partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta) + c_s^2 \partial_\alpha^{(1)} \rho = 0. \quad (\text{C.12})$$

Das der ε^2 -Gleichung (C.8) ergibt

$$\partial_t^{(2)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} + \partial_\beta \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(2)}$$

und dementsprechend

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_\alpha) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = 0, \quad (\text{C.13})$$

mit dem unbekanntem zweiten Moment $\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)}$, welches im Folgenden bestimmt werden muss.

Auflösung $\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)}$: Um das Auftreten höherer Nichtgleichgewichtsmomente zu vermeiden, wird für diesen Schritt die ε^1 -Gleichung (C.6) verwendet. Das zweite Moment liefert

$$\partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(0)} + \partial_\gamma^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)}$$

und damit

$$-\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = \partial_\gamma^{(1)} [c_s^2 \rho (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha)] + \partial_t^{(1)} (c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta).$$

Daraus folgt

$$-\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = c_s^2 \left[\partial_\gamma^{(1)} (\rho u_\gamma) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\beta) + \partial_\beta^{(1)} (\rho u_\alpha) \right] \\ + c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_t^{(1)} \rho + \partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta)$$

was durch Anwendung der Produktregel zu

$$-\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = c_s^2 \left[\partial_t^{(1)} \rho + \partial_\gamma^{(1)} (\rho u_\gamma) \right] \delta_{\alpha\beta} + u_\beta \left[c_s^2 \partial_\alpha^{(1)} \rho + \partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha) \right] \\ + u_\alpha \left(c_s^2 \partial_\beta^{(1)} \rho + \rho \partial_t^{(1)} u_\beta \right) + c_s^2 \rho \left(\partial_\alpha^{(1)} u_\beta + \partial_\beta^{(1)} u_\alpha \right)$$

vereinfacht werden kann [51]. Im Folgenden werden unter Verwendung der Gleichungen (C.10) und (C.12) die Zeitableitungen eliminiert, was zu

$$\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = \delta_t \tau \partial_\gamma^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) - \delta_t \tau c_s^2 \rho \left(\partial_\alpha^{(1)} u_\beta + \partial_\beta^{(1)} u_\alpha \right)$$

führt (siehe Referenz [51]). Dieser Ausdruck kann nun in Gleichung (C.13) eingesetzt werden

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_\alpha) = \partial_\beta^{(1)} \left[\delta_t c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \rho \left(\partial_\beta^{(1)} u_\alpha + \partial_\alpha^{(1)} u_\beta \right) \right] \\ - \partial_\beta^{(1)} \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \partial_\gamma^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \right], \quad (\text{C.14})$$

sodass die ersten Momente der Gleichungen (C.6) und (C.8) vollständig aufgelöst sind und rekombiniert werden können.

Rekombination der Skalen: Analog zur Rekonstruktion der Kontinuitätsgleichung werden die Gleichungen (C.12) und (C.14) rekombiniert, was zur *kompressiblen Impulsgleichung*

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -c_s^2 \partial_\alpha \rho + \partial_\beta \left[\delta_t c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \rho \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta \right) \right] \\ - \underbrace{\partial_\beta \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \right]}_{=\mathcal{O}(u_\alpha u_\beta u_\gamma)} \quad (\text{C.15})$$

mit dem Druck

$$p = c_s^2 \rho$$

und der kinematischen Viskosität

$$\nu = c_s^2 \delta_t \left(\tau - \frac{1}{2} \right)$$

führt. Unter Verwendung der dynamischen Viskosität (auch Scherviskosität)

$$\mu = \rho\nu$$

lässt sich der viskose Spannungstensor als

$$\mathcal{T}_{\alpha\beta} = \mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) \quad (\text{C.16})$$

formulieren.

Der letzte Term auf der rechten Seite (C.15) ist ein Fehlerterm, der die LBM in zweierlei Hinsicht beschränkt. Zum Einen verschwindet er nur für kleine Geschwindigkeiten, sodass die Impulsgleichung auch nur für $|\mathbf{u}| \ll 1$ tatsächlich gelöst wird. Zum Anderen konvergiert die LBM nur für kleine Mach-Zahlen $Ma \ll 1$ gegen die NS-Gleichungen, da die Schallgeschwindigkeit c_s konstant ist. Die Mach-Zahl wiederum ist ein Maß für die Kompressibilität einer Strömung, sodass die Methode zusätzlich auf schwach kompressible Medien beschränkt ist, obwohl die kompressiblen NS-Gleichungen gelöst werden. Beim Term

$$\mathcal{R}_{C,\alpha} = \partial_\beta \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \right]$$

handelt es sich um einen Modellfehler, der auf die Approximation des Gleichgewichtes zurückzuführen ist [87].

C.1.3 Allgemeine Formulierung des viskosen Spannungstensors

Die allgemeine Formulierung des viskosen Spannungstensors für kompressible Fluide

$$\mathcal{T}_{\alpha\beta} = \mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) + \left(\eta - \frac{2\mu}{3} \right) \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta}$$

beinhaltet zwei Konstanten zur Charakterisierung von Reibungseinflüssen [28]: Die dynamische Viskosität μ und die Volumenviskosität η (oder auch Druckzähigkeit, engl. *bulk viscosity*). Während Erstere die Auswirkung scherungsbedingter Reibung erfasst, beschreibt Letztere Effekte, die nicht direkt auf Scherung zurückzuführen sind (beispielsweise gleichmäßige, isotrope Volumenänderungen).

Damit der durch die LBGK-Gleichung (2.18) approximierten Spannungstensor (C.16) dieser allgemeinen Formulierung entspricht, muss

$$\eta - \frac{2\mu}{3} = 0$$

gelten, woraus sich die Volumenviskosität

$$\eta = \frac{2\mu}{3} = \frac{2}{3} \rho c_s^2 \delta_t \left(\tau - \frac{1}{2} \right)$$

ergibt. Dynamische- und Volumenviskosität hängen somit gleichermaßen von der Relaxationszeit τ ab.

Unter Berücksichtigung dieser Umformulierung können die kompressible Kontinuitäts- beziehungsweise Impulsgleichung rekonstruiert werden, wie sie beispielsweise in den Referenzen [87, 88] zu finden sind.

C.2 Zusammenfassung

Durch die Chapman-Enskog-Analyse konnte gezeigt werden, dass die nullten Momente der Verteilungen die kompressible Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$$

und die ersten Momente die kompressible Impulsgleichung

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta [\nu \rho (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)]$$

befolgen. Die Taylorentwicklung der LBGK-Gleichung (C.2) in Kombination mit der Kopplung von Maschenweite und Zeitschrittweite (2.15) führt zu einem Fehler zweiter Ordnung in Raum und Zeit. Zusätzlich entsteht ein Fehlerterm dritter Ordnung in der Geschwindigkeit, der die LBM auf kleine Geschwindigkeiten und Mach-Zahlen beschränkt. Es werden also die kompressiblen NS-Gleichungen im schwach kompressiblen Grenzbereich gelöst. Unter Berücksichtigung dieser Einschränkungen kann die LBM für die Lösung der NS-Gleichungen und damit für die Durchführung von Strömungssimulationen verwendet werden.

D Rekonstruktion der Diffusionsgleichung

Im Folgenden wird gezeigt, dass die LBGK-Gleichung (2.18) durch geeignete Anpassungen für die Lösung der Diffusionsgleichung

$$\partial_\alpha (\zeta \partial_\alpha \Lambda) = 0 \tag{D.1}$$

mit variablem Koeffizienten $\zeta = \zeta(\mathbf{x})$ verwendet werden kann (am Beispiel einer zwei-dimensionalen Diskretisierung). Der Vollständigkeit halber wird die gesamte in diesem Anhang präsentierte Analyse mit nicht normierter Zeitschritt- beziehungsweise Maschenweite durchgeführt. Eine physikalische Verbindung zwischen den Verteilungen f_i (beziehungsweise deren Momenten) und der durch Gleichung (D.1) vorgegebenen makroskopischen Dynamik besteht dann nicht mehr, sodass die Methode als rein mathematisches Lösungsverfahren genutzt wird. Für diesen Fall wird das nullte Moment der Verteilungen als der gesuchte Skalar Λ (um)definiert

$$\sum_i f_i := \Lambda.$$

Da nur dieses Moment von Interesse ist (und keine höheren Momente auftauchen) genügt der erste Term der Reihenentwicklung (2.6), um die entsprechende Gleichgewichtsverteilung

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \Lambda$$

zu approximieren, sodass

$$\sum_i f_i = \sum_i f_i^{\text{eq}} = \Lambda$$

gilt. Da nur das nullte Moment rekonstruiert werden muss und die Dynamik des Problems verglichen mit der der NS-Gleichungen vergleichsweise einfach ist, ist eine $D2Q5$ Diskretisierung für den Geschwindigkeitsraum ausreichend. Diese erfüllt

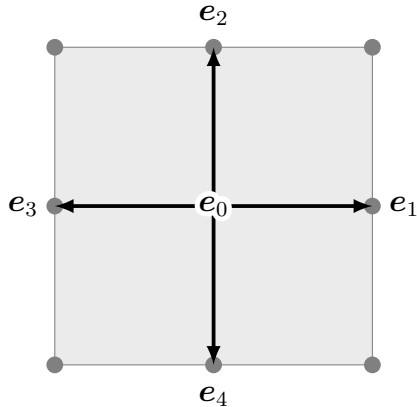


Abbildung D.1: $D2Q5$ Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes.

Tabelle D.1: Geschwindigkeiten e_i und zugehörige Gewichte w_i für die $D2Q5$ Diskretisierung. Für das reguläre Gitter mit ganzzahliger Maschenweite sind die mikroskopischen Geschwindigkeiten mit der Gitterkonstanten $c_s = 1/\sqrt{3}$ skaliert.

i	0	1	2	3	4
$e_{i,x}$	0	1	0	-1	0
$e_{i,y}$	0	0	1	0	-1
w_i	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$

die Isotropiebedingungen (2.14) bis zur Ordnung drei und ist in Abbildung D.1 mit dem zugehörigen Geschwindigkeitssatz in Tabelle D.1 dargestellt. Wie bei der Rekonstruktion der NS-Gleichungen werden vorbereitend zur Chapman-Enskog-Analyse die Gleichgewichtsmomente

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{\text{eq}} &= \Lambda, \\ \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{\text{eq}} &= 0, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{\text{eq}} &= \delta_{\alpha\beta} c_s^2 \Lambda, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{\text{eq}} &= 0 \end{aligned}$$

berechnet.

D.1 Chapman-Enskog-Analyse

Analog zur Chapman-Enskog-Analyse für die Rekonstruktion der NS-Gleichungen wird eine Taylorentwicklung der LBGK-Gleichung (2.18) durchgeführt, die Ableitungsoperatoren ersetzt, die Verteilungsfunktion in eine asymptotische Reihe entwickelt und die so entstehende Gleichung in Terme unterschiedlicher Größenordnungen im Größenordnungsparameter ε aufgeteilt (siehe Anhang C für eine detaillierte Be-

schreibung dieser Schritte)

$$\varepsilon^0 : \quad 0 = -\frac{1}{\delta_t \tau} \left(f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}} \right), \quad (\text{D.2})$$

$$\varepsilon^1 : \quad D_i^{(1)} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} f_i^{(1)}, \quad (\text{D.3})$$

$$\varepsilon^2 : \quad \partial_t^{(2)} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) D_i^{(1)} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\delta_t \tau} f_i^{(2)}. \quad (\text{D.4})$$

Aus Gleichung (D.2) und der Reihenentwicklung der Verteilungen folgt, dass $\sum_i f_i^{(z)} = 0 \forall z > 0$.

Die nullten Momente der Gleichungen (D.3) und (D.4) liefern dann

$$\partial_t^{(1)} \Lambda = 0, \quad (\text{D.5})$$

beziehungsweise

$$\partial_t^{(2)} \Lambda + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\partial_\alpha^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} \right) = 0 \quad (\text{D.6})$$

mit dem unbekanntem Moment $\sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)}$. Dieses kann über das erste Moment der ε^1 -Gleichung (D.3) aufgelöst werden, welches

$$\partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(0)} + \partial_\beta^{(1)} (c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \Lambda) = -\frac{1}{\delta_t \tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)}$$

und damit

$$\sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} = -\tau \delta_t c_s^2 \partial_\alpha^{(1)} \Lambda \quad (\text{D.7})$$

ergibt.

Rekombination der Skalen: Unter Verwendung des ersten Nichtgleichgewichtsmoments (D.7) können nun die Gleichungen (D.5) und (D.6) zur Beschreibung des nullten Moments rekombiniert und so die makroskopische Gleichung

$$\partial_t \Lambda - \partial_\alpha \left[\delta_t c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \partial_\alpha \Lambda \right] = 0$$

rekonstruiert werden. Diese lässt sich für *stationäre* Probleme nach Einführung des relaxationszeitabhängigen, variablen Koeffizienten

$$\zeta(\mathbf{x}) = \delta_t c_s^2 \left[\tau(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \right]$$

zur gesuchten Diffusionsgleichung vereinfachen.

D.2 Zusammenfassung

Es konnte gezeigt werden, dass die Lösung der LBGK-Gleichung (2.18) nach einer Umdefinition des nullten Moments der Verteilungen und Einführung einer vereinfachten Gleichgewichtsverteilung eine Lösung der Diffusionsgleichung (D.1) approximiert. Wie bei der LBM für die Lösung der NS-Gleichungen führt die vorausgehende Taylorentwicklung zusammen mit der Kopplung von Zeitschritt und Maschenweite über die mikroskopischen Geschwindigkeiten (2.15) zu einem Fehler zweiter Ordnung im Raum. Hinzu kommt, dass aufgrund des Transportterms in der LBGK-Gleichung grundsätzlich eine zeitliche Ableitung der betrachteten Erhaltungsgröße in den makroskopischen Gleichungen auftaucht. Diese ist auf die LBGK-Gleichung zurückzuführen, welche in festen Zeitschritten berechnet wird. Da die LBM für derartige Probleme nur langsam konvergiert, ist es nötig Präkonditionierungsverfahren zu benutzen [52, 76]. Nichtsdestotrotz approximiert das in diesem Anhang vorgestellte Verfahren die gesuchte Zielgleichung und kann damit beispielsweise für die Berechnung der Verteilung des elektrischen Potentials und damit als Teil elektrohydrodynamischer Simulationen eingesetzt werden [43, 195].

E Misch- und Komponentengeschwindigkeit

In diesem Anhang werden Misch- und Komponentengeschwindigkeit \mathbf{u}^m beziehungsweise \mathbf{u}_k^c für MCMP-Systeme in allgemeiner Form hergeleitet (siehe Abschnitt 3.1.4). Diese ergeben sich aus der durchschnittlichen Impulsdichte vor und nach der Anwendung der rechten Seite der Evolutionsgleichung (3.2) [160]. Für Komponente k ergibt sich somit

$$\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}$$

vor und

$$\left(1 - \frac{1}{\tau_k}\right) \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} + \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k}$$

nach Anwendung der rechten Seite und dementsprechend die Komponentenimpulsdichte

$$\rho_k u_{k,\alpha}^c = \left(1 - \frac{1}{2\tau_k}\right) \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} + \frac{1}{2} \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k}.$$

Zur Berechnung der mittleren Impulsdichte des Gemisches kann entweder die Komponentenimpulsdichte über alle Komponenten summiert oder die Mittelwertbildung für das Gemisch durchgeführt werden, was gleichermaßen zu

$$\rho^m u_\alpha^m = \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} - \sum_k \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \sum_k \frac{1}{2\tau_k} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} + \frac{1}{2} \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k}.$$

führt. Unter Verwendung der Gleichgewichtsgeschwindigkeiten und Quellterme des Shan-Kräftechemas aus Tabelle 3.2 ergeben sich die zugehörigen Komponenten- und Mischgeschwindigkeiten wie sie beispielsweise in den Referenzen [161] beziehungsweise [160] zu finden sind.

E.1 Weitere Bedingungen

An diesem Punkt stellt sich trotzdem die Frage, warum die einzelnen Geschwindigkeiten gerade die Formen aus den Tabellen 3.4 und 3.2 annehmen müssen. Dafür gibt es mehrere Gründe (anhand derer sich die Form der Geschwindigkeiten auch kontrollieren lässt).

Offensichtlich müssen Quellterm $S_{i,k}(\mathbf{F}_k)$ und Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}_k^{eq} so gewählt werden, dass \mathbf{F}_k nach Anwendung der Chapman-Enskog-Analyse als Volumenkraft in den makroskopischen Gleichungen auftaucht. In MCMP-Systemen muss zusätzlich *in einem kräftefreien System* die Impulsdichte des Gemisches ($\sum_k \sum_i e_{i,\alpha}$) durch Anwendung von Kollisionsoperator $\Omega(f_{i,k})$ und Quellterm $S_{i,k}(\mathbf{F}_k)$ erhalten bleiben [160], siehe Gleichung (3.2). Das bedeutet

$$-\sum_k \frac{1}{\tau_k} \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right) + \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k} \stackrel{!}{=} 0.$$

Andererseits muss sie sich um den Betrag $\sum_k F_{k,\alpha}$ ändern, falls Kräfte wirken [160]. Das wiederum bedeutet

$$-\sum_k \frac{1}{\tau_k} \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} - \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} \right) + \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} S_{i,k} \stackrel{!}{=} \sum_k F_{k,\alpha}.$$

Diese Bedingungen sind bei Verwendung der entsprechenden Ausdrücke aus den Tabellen 3.2 und 3.4 für die jeweiligen Kräfteschemata erfüllt.

Die Definition der Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^m kann entweder über die in diesem Anhang beschriebene Mittelung erfolgen oder aber bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung (siehe Anhang F oder Referenz [123]). Diese wird dabei so gewählt, dass ein Minimum an Fehlertermen in den makroskopischen Gleichungen auftritt.

F Rekonstruktion der Navier-Stokes-Gleichungen für Gemische

In diesem Anhang wird die Chapman-Enskog-Analyse auf das PP-Modell für MCMP-Systeme (siehe Abschnitt 3.1.3) angewendet, um die Kontinuitäts- und die Impulsgleichung für ein Gemisch aus N Fluiden zu rekonstruieren. Der Einfachheit halber wird die Rechnung auf Komponenten gleicher kinematischer Viskosität beschränkt, es gilt also $\tau_k = \tau$. Es wird beispielhaft das Shan-Kräftechema (siehe Tabelle 3.2) mit der Gleichgewichtsgeschwindigkeit

$$u_{k,\alpha}^{\text{eq}} = \frac{\sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}}{\sum_k \sum_i f_{i,k}} + \frac{\tau F_{k,\alpha}}{\rho_k} = u'_\alpha + \frac{\tau F_{k,\alpha}}{\rho_k}$$

verwendet. Um lange Ausdrücke kurz zu halten, wird an dieser Stelle die gemeinsame oder auch Kompositgeschwindigkeit \mathbf{u}' eingeführt [73, 160, 171]. Da für dieses Kräftechema kein zusätzlicher Quellterm nötig ist, vereinfacht sich die Evolutionsgleichung (3.2) zu

$$f_{i,k}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_{i,k} - \frac{1}{\tau} [f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}(u_{k,\alpha}^{\text{eq}})].$$

Wie in den Anhängen C und D werden zunächst die Momente der Gleichgewichtsverteilung

$$\begin{aligned} \sum_i f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k, \\ \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}}, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} + c_s^2 \rho_k \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_{i,k}^{\text{eq}} &= \rho_k c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_{k,\gamma}^{\text{eq}} + \delta_{\alpha\gamma} u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \delta_{\beta\gamma} u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) \end{aligned} \tag{F.1}$$

berechnet.

F.1 Chapman-Enskog-Analyse

Der einzige Unterschied zur Durchführung der Chapman-Enskog-Analysen in den Anhängen C und D ist, dass die Kraft auf der Skala ε^1 eingebracht werden muss

$$F_{k,\alpha} = \varepsilon F_{k,\alpha}^{(1)},$$

um die Gleichgewichtsmomente nicht zu verändern [14, 41]. Somit ergeben sich nach Aufspaltung der Skalen folgende Gleichungen

$$\varepsilon^0 : \quad 0 = -\frac{1}{\tau} \left(f_{i,k}^{(0)} - f_{i,k}^{\text{eq}} \right), \quad (\text{F.2})$$

$$\varepsilon^1 : \quad D_i^{(1)} f_{i,k}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{i,k}^{(1)}, \quad (\text{F.3})$$

$$\varepsilon^2 : \quad \partial_t^{(2)} f_{i,k}^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) D_i^{(1)} f_{i,k}^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_{i,k}^{(2)}. \quad (\text{F.4})$$

Aus der Reihenentwicklung der Verteilungen

$$f_{i,k} = f_{i,k}^{(0)} + \varepsilon f_{i,k}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{i,k}^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$$

und Gleichung (F.2) folgt direkt, dass $\sum_i f_{i,k}^{(z)} = 0 \quad \forall z > 0$ und aufgrund der Kraft

$$\sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} = -\tau \sum_k F_{k,\alpha}^{(1)}, \quad (\text{F.5})$$

sodass auch das erste Nichtgleichgewichtsmoment $\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \neq 0$ ist.

F.1.1 Rekonstruktion der Kontinuitätsgleichung

Die nullten Momente der Gleichungen (F.3) und (F.4) liefern

$$\partial_t^{(1)} \rho_k + \partial_\alpha^{(1)} \left(\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} \right) = 0$$

beziehungsweise

$$\partial_t^{(2)} \rho_k + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \partial_\alpha^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} = 0.$$

Rekombination der Skalen: Die Rekombination der beiden Gleichungen ergibt

$$\partial_t \rho_k + \partial_\alpha \left[\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \varepsilon \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \right] = 0.$$

Wird dieser Term über alle Komponenten summiert, ergibt sich die Kontinuitätsgleichung für das Gemisch

$$\partial_t \rho^m + \partial_\alpha \left[\sum_k \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} + \varepsilon \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} - \frac{1}{2\tau} \varepsilon \sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \right] = 0,$$

mit der Mischdichte $\rho^m = \sum_k \rho_k$. Durch einsetzen der Gleichgewichtsgeschwindigkeit und Gleichung (F.5) kann dieser Ausdruck zu

$$\partial_t \rho^m + \partial_\alpha \left(\sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} \sum_k F_{k,\alpha} \right) = 0$$

vereinfacht werden. An diesem Punkt ist es nötig, die physikalische Geschwindigkeit des Gemisches beziehungsweise dessen Impulsdichte so zu definieren, dass der Fehlerterm mit der Kraft \mathbf{F}_k verschwindet, also

$$\rho^m u_\alpha^m := \sum_k \left(\sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \frac{1}{2} F_{k,\alpha} \right).$$

Die Gesamtimpulsdichte $\rho^m \mathbf{u}^m$ entspricht dabei der über einen Zeitschritt gemittelten Impulsdichte des Gemisches [160, 161]. Unter Verwendung dieser ergibt sich die Kontinuitätsgleichung

$$\boxed{\partial_t \rho^m + \partial_\alpha (\rho^m u_\alpha^m) = 0}$$

des Gemisches.

F.1.2 Rekonstruktion der Impulsgleichung

Die ersten Momente der Gleichungen (F.3) und (F.4) liefern

$$\partial_t^{(1)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) + \partial_\beta^{(1)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}}) + c_s^2 \partial_\alpha^{(1)} \rho_k = -\frac{1}{\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \quad (\text{F.6})$$

beziehungsweise

$$\partial_t^{(2)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} + \partial_\beta^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_{i,k}^{(1)} \right) = 0 \quad (\text{F.7})$$

mit dem unbekanntem Moment $\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_{i,k}^{(1)}$, dessen Auflösung genau wie in Anhang C erfolgt und an dieser Stelle nicht wiederholt wird. Es ergibt sich

$$\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_{i,k}^{(1)} = -\tau c_s^2 \rho_k \left(\partial_\alpha^{(1)} u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \partial_\beta^{(1)} u_{k,\alpha}^{\text{eq}} \right) + \tau \partial_\gamma^{(1)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} u_{k,\gamma}^{\text{eq}}),$$

sodass Gleichung (F.7) unter Vernachlässigung des Terms $\tau \partial_\gamma^{(1)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} u_{k,\gamma}^{\text{eq}})$ zu

$$\begin{aligned} \partial_t^{(2)} (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) = & \partial_\beta^{(1)} \left[\rho_k c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) (\partial_\alpha^{(1)} u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \partial_\beta^{(1)} u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) \right] \\ & - \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \partial_t^{(1)} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

umformuliert werden kann.

Rekombination der Skalen: Nun können die Gleichungen (F.6) und (F.8) zu

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) + \partial_\beta (\rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}}) = & - \varepsilon \frac{1}{\tau} \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} - \partial_\alpha (\rho_k c_s^2) \\ & + \partial_\beta \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \rho_k c_s^2 (\partial_\alpha u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \partial_\beta u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) \right] \\ & - \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \varepsilon \partial_t^{(1)} \varepsilon \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k}^{(1)} \end{aligned}$$

rekombiniert werden. Dieser Ausdruck ergibt nach Summierung über alle Komponenten sowie einsetzen der Gleichgewichtsgeschwindigkeit und Ausnutzung von Gleichung (F.5)

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\sum_k \sum_i e_{i,\alpha} f_{i,k} + \tau \sum_k F_{k,\alpha} \right) + \partial_\beta \sum_k \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} \\ = \sum_k F_{k,\alpha} - \partial_\alpha (\rho^{\text{m}} c_s^2) + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \varepsilon \partial_t^{(1)} \tau \sum_k F_{k,\alpha} \\ + \partial_\beta \left[\sum_k \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \rho_k c_s^2 (\partial_\alpha u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \partial_\beta u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) \right]. \end{aligned}$$

Unter der Annahme $\varepsilon \partial_t^{(1)} F_{k,\alpha} \approx \partial_t F_{k,\alpha}$, also $\partial_t^{(2)} F_{k,\alpha} = 0$ [51] kürzen sich die relaxationszeitabhängigen Kraftterme heraus, sodass die Zeitableitung durch die Mischgeschwindigkeit ausgedrückt werden kann:

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho^{\text{m}} u_\alpha^{\text{m}}) + \partial_\beta \sum_k \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} = \sum_k F_{k,\alpha} - \partial_\alpha (\rho^{\text{m}} c_s^2) \\ + \partial_\beta \left[\sum_k \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \rho_k c_s^2 (\partial_\alpha u_{k,\beta}^{\text{eq}} + \partial_\beta u_{k,\alpha}^{\text{eq}}) \right]. \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck entspricht bereits nahezu der Impulsgleichung der NS-Gleichungen. Im letzten Schritt müssen einerseits der Kraftterm und der ideale Druck $\rho^{\text{m}} c_s^2$ zu einer nicht-idealen Zustandsgleichung zusammengefasst werden und andererseits alle Terme, die \mathbf{u}_k^{eq} enthalten, durch die Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^{m} ausgedrückt werden.

Nicht-ideale Zustandsgleichung: Unter Verwendung der Finite-Differenzen-Approximation der Interaktionskraft (3.13) ergibt sich der Druckgradient

$$-\partial_\alpha p = -\partial_\alpha (\rho^m c_s^2) - \sum_k \Psi_k \sum_{\bar{k}} \mathcal{G}_{k\bar{k}} c_s^2 \partial_\alpha \Psi_{\bar{k}},$$

welcher unter Berücksichtigung von $\mathcal{G}_{k\bar{k}} = \mathcal{G}_{\bar{k}k}$ mithilfe der Produktregel zu

$$-\partial_\alpha p = -\partial_\alpha (\rho^m c_s^2) - \partial_\alpha \sum_{k\bar{k}} \frac{c_s^2 \mathcal{G}_{k\bar{k}}}{2} \Psi_k \Psi_{\bar{k}}$$

umformuliert werden kann, wobei die Summe $\sum_{k\bar{k}}$ alle paarweisen Kombinationen von k und \bar{k} mit $k \neq \bar{k}$ einbezieht. So ergibt sich der bereits präsentierte nicht-ideale Druck des Gemisches (siehe Abschnitt 3.1.3)

$$p = c_s^2 \left(\rho^m + \sum_{k\bar{k}} \frac{\mathcal{G}_{k\bar{k}}}{2} \Psi_k \Psi_{\bar{k}} \right).$$

Transformation der Geschwindigkeiten: Im Folgenden werden die Gleichgewichtsgeschwindigkeiten durch die Mischgeschwindigkeit ausgedrückt. Für die Summe im Advektionsterm gilt

$$\sum_k \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} = u'_\alpha \sum_k \sum_i e_{i,\beta} f_{i,k} + \tau \sum_k (u'_\alpha F_{k,\beta} + u'_\beta F_{k,\alpha}) + \tau^2 \sum_k \frac{F_{k,\alpha} F_{k,\beta}}{\rho_k}.$$

Sie wird durch

$$\rho^m u_\alpha^m u_\beta^m = u'_\alpha \sum_k \sum_i e_{i,\beta} f_{i,k} + \frac{1}{2} \left(u'_\alpha \sum_k F_{k,\beta} + u'_\beta \sum_k F_{k,\alpha} \right) + \frac{1}{4} \frac{\sum_k F_{k,\alpha} \sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m}$$

ausgedrückt, sodass sich die Transformation

$$\begin{aligned} \sum_k \rho_k u_{k,\alpha}^{\text{eq}} u_{k,\beta}^{\text{eq}} &= \rho^m u_\alpha^m u_\beta^m + \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left(u'_\alpha \sum_k F_{k,\beta} + u'_\beta \sum_k F_{k,\alpha} \right) \\ &\quad + \tau^2 \sum_k \frac{F_{k,\alpha} F_{k,\beta}}{\rho_k} - \frac{1}{4} \frac{\sum_k F_{k,\alpha} \sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m} \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

ergibt. Für die Terme im viskosen Spannungstensor wird analog vorgegangen. Der Term

$$\sum_k \rho_k \partial_\alpha u_{k,\beta}^{\text{eq}} = \rho^m \partial_\alpha u'_\beta + \sum_k \rho_k \partial_\alpha \frac{\tau F_{k,\beta}}{\rho_k}$$

wird durch

$$\rho^m \partial_\alpha u_\beta^m = \rho^m \partial_\alpha u'_\beta + \frac{\rho^m}{2} \partial_\alpha \frac{\sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m}$$

ausgedrückt, sodass sich die Transformation

$$\sum_k \rho_k \partial_\alpha u_{k,\beta}^{\text{eq}} = \rho^m \partial_\alpha u_\beta^m + \sum_k \rho_k \partial_\alpha \frac{\tau F_{k,\beta}}{\rho_k} - \frac{\rho^m}{2} \partial_\alpha \frac{\sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m} \quad (\text{F.10})$$

ergibt. Die Gleichungen (F.9) und (F.10) können schließlich in die Impulsgleichung eingesetzt werden, was zu

$$\partial_t (\rho^m u_\alpha^m) + \partial_\beta (\rho^m u_\alpha^m u_\beta^m) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \rho^m (\partial_\alpha u_\beta^m + \partial_\beta u_\alpha^m) \right] + \mathcal{R}_{S,\alpha}$$

mit dem durch das Kräfteschema hervorgerufenen Fehlerterm

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{S,\alpha} = & -\partial_\beta \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left(u'_\alpha \sum_k F_{k,\beta} + u'_\beta \sum_k F_{k,\alpha} \right) \right] \\ & - \tau^2 \partial_\beta \sum_k \frac{F_{k,\alpha} F_{k,\beta}}{\rho_k} \\ & + \frac{1}{4} \partial_\beta \frac{\sum_k F_{k,\alpha} \sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m} \\ & + c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \partial_\beta \left(\tau \sum_k \rho_k \partial_\alpha \frac{F_{k,\beta}}{\rho_k} - \frac{\rho^m}{2} \partial_\alpha \frac{\sum_k F_{k,\beta}}{\rho^m} \right) \\ & + c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \partial_\beta \left(\tau \sum_k \rho_k \partial_\beta \frac{F_{k,\alpha}}{\rho_k} - \frac{\rho^m}{2} \partial_\beta \frac{\sum_k F_{k,\alpha}}{\rho^m} \right) \end{aligned}$$

führt.

F.2 Zusammenfassung

In diesem Anhang wurden die NS-Gleichungen zur Beschreibung eines aus N Komponenten bestehenden Gemisches für das PP-Modell am Beispiel des Shan-Kräfteschemas hergeleitet. Es wurde gezeigt, dass eine von der Gleichgewichtsgeschwindigkeit \mathbf{u}_k^{eq} abweichende physikalische Mischgeschwindigkeit \mathbf{u}^m definiert werden muss, um Fehler in der Kontinuitätsgleichung zu eliminieren. Des Weiteren wurde der durch die Interaktionskraft modifizierte Druck hergeleitet und der durch das Kräfteschema bedingte Fehler \mathcal{R}_S in der Impulsgleichung identifiziert.

Für die Analyse anderer Kräfteschemata kann die gesamte Rechnung wiederholt werden. Der einzige Unterschied besteht dann in der Behandlung des Quellterms $S_{i,k}$, welcher zusätzlich aufgrund der Volumenkraft auf der Skala ε^1 eingebracht werden muss. Die kraftbedingte Korrektur der physikalischen Geschwindigkeit muss unabhängig vom betrachteten System bei allen Kräfteschemata vorgenommen werden.

G Gleichgewichtseigenschaften in Einstoffsystemen

In diesem Anhang wird gezeigt, wie sich die Oberflächenspannung σ und die Gleichgewichtsdichten ρ_{Dampf} und $\rho_{\text{flüssig}}$ für das PP-Modell für SCMP-Systeme (siehe Abschnitt 3.1.2) aus dem Drucktensor (3.10) ermitteln lassen. Diese Rechnung ist in stark verkürzter Form auch in den Referenzen [8, 70, 159] zu finden.

Ausgangspunkt ist ein dreidimensionales Gebiet mit einer Flüssig- und einer Dampfphase mit den Dichten $\rho_{\text{flüssig}}$ beziehungsweise ρ_{Dampf} (gravitationsfrei, ohne zusätzliche Feldterme). Wie in Abbildung G.1 dargestellt, wird angenommen, dass diese durch eine planare Grenzfläche in der x - z -Ebene voneinander getrennt sind. Entgegen der Darstellung wird zusätzlich davon ausgegangen, dass sich das Gebiet in alle Raumrichtungen unendlich ausdehnt.

Im Folgenden wird der Drucktensor zunächst anhand dieses Beispiels in zahlreichen

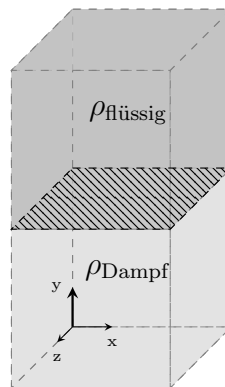


Abbildung G.1: Dichteverteilung zur Bestimmung der Gleichgewichtseigenschaften mittels des Drucktensors $\mathcal{P}_{\alpha\beta}$. Flüssig- und Dampfphase sind durch eine ebene Grenzfläche (schraffiert) voneinander getrennt. Entgegen der Darstellung wird angenommen, dass das Gebiet in keiner Raumrichtung begrenzt ist.

Schritten umformuliert und gezeigt wie sich die Gleichgewichtsdichten und der zugehörige Sättigungsdruck bestimmen lassen. Erst im Anschluss wird darauf aufbauend gezeigt, wie die Oberflächenspannung ermittelt werden kann.

G.1 Bestimmung der Gleichgewichtsdichten

Für den dargestellten Fall gilt für den Druck entlang der y -Achse

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{yy} &= \left(\rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2}\Psi\partial_y^2\Psi + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4}\partial_y\Psi\partial_y\Psi \right) \delta_{yy} - \frac{\mathcal{G}c_s^4}{2}\partial_y\Psi\partial_y\Psi \\ &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} (2\Psi\partial_y^2\Psi - \partial_y\Psi\partial_y\Psi), \end{aligned} \quad (\text{G.1})$$

da $\delta_{yy} = 1$, $\partial_x\Psi = 0$ und $\partial_z\Psi = 0$. Durch Anwendung der Kettenregel ergibt dies

$$\mathcal{P}_{yy} = \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} [2\Psi\Psi'' (\partial_y\rho)^2 + 2\Psi\Psi' \partial_y^2\rho - (\Psi' \partial_y\rho)^2]$$

mit $\partial_\rho\Psi = \Psi'$. Zur weiteren Vereinfachung dieses Terms wird die Variable $\mathcal{Z}(\rho) = (\partial_y\rho)^2$ eingeführt, für welche

$$\frac{1}{2}\partial_\rho\mathcal{Z} = \frac{1}{2}\partial_\rho(\partial_y\rho)^2 = \partial_\rho(\partial_y\rho)\partial_y\rho = \partial_y \underbrace{(\partial_\rho\rho)}_{=1} \partial_y\rho = \partial_y^2\rho$$

gilt. Eingesetzt ergibt dies

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{yy} &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} (2\Psi\Psi''\mathcal{Z} + \Psi\Psi'\partial_\rho\mathcal{Z} - \Psi'^2\mathcal{Z}) \\ &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} \frac{\Psi^2}{\Psi'} \left(\frac{2\Psi'\Psi''}{\Psi}\mathcal{Z} + \frac{\Psi'^2}{\Psi}\partial_\rho\mathcal{Z} - \frac{\Psi'^3}{\Psi^2}\mathcal{Z} \right) \\ &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} \frac{\Psi^2}{\Psi'} \left[\frac{\Psi'^2}{\Psi}\partial_\rho\mathcal{Z} + \mathcal{Z} \left(\frac{2\Psi\Psi'\Psi'' - \Psi'^3}{\Psi^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Der zweite Term innerhalb der eckigen Klammern lässt sich mithilfe von Ketten- und (rückwärtigem Anwenden der) Quotientenregel weiter zu

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{yy} &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} \frac{\Psi^2}{\Psi'} \left\{ \frac{\Psi'^2}{\Psi}\partial_\rho\mathcal{Z} + \mathcal{Z} \left[\frac{\Psi\partial_\rho(\Psi'^2) - \Psi'^2\partial_\rho\Psi}{\Psi^2} \right] \right\} \\ &= \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} \frac{\Psi^2}{\Psi'} \left[\frac{\Psi'^2}{\Psi}\partial_\rho\mathcal{Z} + \mathcal{Z}\partial_\rho \left(\frac{\Psi'^2}{\Psi} \right) \right] \end{aligned}$$

vereinfachen. Abschließend kann der gesamte Klammerterm durch rückwärtiges anwenden der Produktregel zu

$$\mathcal{P}_{yy} = \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} \frac{\Psi^2}{\Psi'} \partial_\rho \left(\mathcal{Z} \frac{\Psi'^2}{\Psi} \right)$$

umgeformt werden. Dieser Ausdruck kann nach

$$\partial_\rho \left(\mathcal{Z} \frac{\Psi'^2}{\Psi} \right) = \frac{4}{\mathcal{G}c_s^4} \frac{\Psi'}{\Psi^2} \left(\mathcal{P}_{yy} - \rho c_s^2 - \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 \right)$$

aufgelöst und ausgehend von der Gasphase (über die Grenzfläche hinweg) bis hin zu beliebigen Dichten integriert werden:

$$\mathcal{Z}(\rho) = \frac{4}{\mathcal{G}c_s^4} \frac{\Psi}{\Psi'^2} \int_{\rho_{\text{Dampf}}}^{\rho} \left(\mathcal{P}_{yy} - \rho c_s^2 - \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 \right) \frac{\Psi'}{\Psi^2} d\rho. \quad (\text{G.2})$$

Da die Dichten im Hauptteil von Dampf- und Flüssigphase konstant sind und $\mathcal{Z}(\rho) = (\partial_y \rho)^2$ ist, gilt $\mathcal{Z}(\rho_{\text{flüssig}}) = 0$ und $\mathcal{Z}(\rho_{\text{Dampf}}) = 0$. Wird also als obere Integrationsgrenze $\rho_{\text{flüssig}}$ oder ρ_{Dampf} gewählt, ist der Ausdruck null und dementsprechend

$$\int_{\rho_{\text{Dampf}}}^{\rho_{\text{flüssig}}} \left(\mathcal{P}_{yy} - \rho c_s^2 - \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 \right) \frac{\Psi'}{\Psi^2} d\rho = 0.$$

Diese Gleichung enthält die drei Unbekannten ρ_{Dampf} , $\rho_{\text{flüssig}}$ und \mathcal{P}_{yy} , sodass für ihre Lösung zusätzliche Bedingungen nötig sind. Es wird daher angenommen, dass sich das System im *mechanischen Gleichgewicht* befindet, also keine Druckgradienten vorhanden sind [8], welche die Grenzfläche bewegen könnten. Das bedeutet der thermodynamische Druck im Hauptteil beider Phasen ist gleich

$$c_s^2 \rho_{\text{flüssig}} + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2(\rho_{\text{flüssig}}) = c_s^2 \rho_{\text{Dampf}} + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2(\rho_{\text{Dampf}}).$$

Mit dieser zusätzlichen Beschränkung lässt sich ein nichtlineares Gleichungssystem aufstellen

$$\begin{cases} \int_{\rho_{\text{Dampf}}}^{\rho_{\text{flüssig}}} \left(\mathcal{P}_{yy} - \rho c_s^2 - \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2 \right) \frac{\Psi'}{\Psi^2} d\rho = 0, \\ c_s^2 \rho_{\text{flüssig}} + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2(\rho_{\text{flüssig}}) - \mathcal{P}_{yy} = 0, \\ c_s^2 \rho_{\text{Dampf}} + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2} \Psi^2(\rho_{\text{Dampf}}) - \mathcal{P}_{yy} = 0, \end{cases} \quad (\text{G.3})$$

durch dessen Lösung bei gegebener Potentialfunktion Ψ und numerischem Wert \mathcal{G} die Gleichgewichtsdichten und der zugehörige Druck simultan berechnet werden können.

G.2 Bestimmung der Oberflächenspannung

Für das System aus Abbildung G.1 gilt für die Oberflächenspannung [8]

$$\mathcal{P}_{yy} - \mathcal{P}_{xx} = \partial_y \sigma, \quad (\text{G.4})$$

wobei \mathcal{P}_{xx} analog zur Berechnung von \mathcal{P}_{yy} im vorangegangenen Abschnitt ermittelt werden kann (siehe Gleichung (G.1)). Dieser ergibt

$$\mathcal{P}_{xx} = \rho c_s^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^2}{2}\Psi^2 + \frac{\mathcal{G}c_s^4}{4} [2\Psi\partial_y^2\Psi - (\partial_y\Psi)^2].$$

Einsetzen der beiden Terme in Gleichung (G.4) führt zu

$$-\frac{\mathcal{G}c_s^4}{2}(\partial_y\Psi)^2 = \partial_y\sigma,$$

was über das gesamte Gebiet integriert werden kann und

$$\sigma = -\frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\partial_y\Psi)^2 dy = -\frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi'\partial_y\rho)^2 dy = -\frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi'^2 (\partial_y\rho)^2 dy$$

liefert. Durch erneutes Verwenden der Variablen $\mathcal{Z}(\rho) = (\partial_y\rho)^2$ und entsprechender Transformation des Differentials $dy = d\rho/\sqrt{\mathcal{Z}}$ ergibt dies

$$\sigma = -\frac{\mathcal{G}c_s^4}{2} \int_{\rho_{\text{Dampf}}}^{\rho_{\text{flüssig}}} \Psi'^2 \sqrt{\mathcal{Z}} d\rho = \mathcal{K} \int_{\rho_{\text{Dampf}}}^{\rho_{\text{flüssig}}} \Psi'^2 \sqrt{\mathcal{Z}} d\rho, \quad (\text{G.5})$$

wobei $\rho(-\infty) = \rho_{\text{Dampf}}$ und $\rho(\infty) = \rho_{\text{flüssig}}$ verwendet wurde und der Skalierungsfaktor wieder mit dem Oberflächenspannungskoeffizienten identifiziert werden kann, siehe Gleichung (3.12).

Die Lösung dieser Gleichung kann dann in fünf Schritten erfolgen [72]:

1. Bestimmung von $\rho_{\text{flüssig}}$ und ρ_{Dampf} (und \mathcal{P}_{yy} , für die Berechnung von σ jedoch nicht nötig) durch Lösung des Gleichungssystems (G.3).
2. Diskretisierung des Dichteintervalls $[\rho_{\text{Dampf}}, \rho_{\text{flüssig}}]$ mit einer begrenzten Anzahl an Werten (beispielsweise 10 000).
3. Berechnung von $\mathcal{Z}(\rho)$ für alle diskreten Dichten mittels Gleichung (G.2).
4. Berechnung von Ψ' für alle diskreten Dichten.
5. Bestimmung von σ mittels Gleichung (G.5).

Die berechneten Gleichgewichtseigenschaften sind für die Potentialfunktion $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$ in Tabelle G.1 dargestellt. Darüber hinaus ist das präsentierte Verfahren auf beliebige Potentialfunktionen und damit auch beliebige Zustandsgleichungen anwendbar.

Tabelle G.1: Gleichgewichtseigenschaften in SCMP-Systemen für die Potentialfunktion $\Psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$ mit $\rho_0 = 1$. Kleinere Werte für \mathcal{G} sind aus Stabilitätsgründen für diese Potentialfunktion nicht möglich. Die Werte sind für die Interaktionskraft mit einer Diskretisierung vierter Ordnung in der Isotropie mit skalierten Gewichten \mathcal{W}_i – siehe Gleichung (3.4) – gültig. In diesem Fall ist $\mathcal{G}_{\text{krit}} = -4$, sodass oberhalb dieses Wertes eine einzelne Phase superkritischen Fluides der Dichte $\rho_{\text{krit}} = \log(2)$ vorhanden ist. Aufgrund der Abwesenheit einer zweiten Phase entfällt in diesem Fall die Oberflächenspannung.

\mathcal{G}	$\rho_{\text{flüssig}}$	ρ_{Dampf}	σ	\mathcal{P}_{yy}
-4.050633	0.907181	0.516945	0.000542	0.062312
-4.155844	1.094142	0.407708	0.002862	0.058251
-4.266667	1.241449	0.341034	0.006261	0.054300
-4.383562	1.374644	0.291596	0.010549	0.050460
-4.507042	1.501229	0.252130	0.015650	0.046736
-4.637681	1.624752	0.219352	0.021533	0.043132
-4.776119	1.747317	0.191452	0.028189	0.039650
-4.923077	1.870373	0.167314	0.035622	0.036295
-5.079365	1.995038	0.146192	0.043852	0.033071
-5.245902	2.122259	0.127562	0.052908	0.029981
-5.423729	2.252899	0.111037	0.062827	0.027028
-5.614035	2.387796	0.096326	0.073658	0.024218
-5.818182	2.527802	0.083202	0.085461	0.021553
-6.037736	2.673818	0.071483	0.098308	0.019039
-6.274510	2.826826	0.061025	0.112283	0.016677
-6.530612	2.987921	0.051706	0.127488	0.014471
-6.808511	3.158347	0.043425	0.144045	0.012426
-7.111111	3.339541	0.036097	0.162096	0.010543
-7.441860	3.533188	0.029647	0.181815	0.008824
-7.804878	3.741289	0.024009	0.203408	0.007271
-8.205128	3.966249	0.019126	0.227128	0.005885
-8.648649	4.210994	0.014943	0.253283	0.004664
-9.142857	4.479126	0.011408	0.282251	0.003607
-9.696970	4.775146	0.008473	0.314508	0.002709

G.3 Zusammenfassung

In diesem Anhang wurde vorgestellt, wie die Gleichgewichtseigenschaften in SCMP-Systemen mithilfe des makroskopischen Drucktensors analytisch ermittelt werden können. Dabei ist anzumerken, dass sich die Terme dritter Ordnung in der Interaktionskraft (und damit des Drucktensors) bei Verwendung unterschiedlicher Diskretisierungen ändern [152]. Um in diesen Fällen Vorhersagen bezüglich der Oberflächenspannung machen zu können, muss der Oberflächenspannungskoeffizient (welcher gerade dem Vorfaktor dieser dritten Ableitungen entspricht) erneut bestimmt und die Rechnung wiederholt werden. Dieser Koeffizient lässt sich durch Anwendung einer Taylorentwicklung auf die Potentialfunktion in der Interaktionskraft (3.6) bestimmen [157]. Für die Diskretisierungen vierter-, sechster- und achter Ordnung in der Isotropie in zwei Dimensionen ergeben sich unter Verwendung der Koeffizienten aus Tabelle (3.1) mit normierten Gewichten \mathcal{W}_i^* die Oberflächenspannungskoeffizienten

$$\mathcal{E}^{(4)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{1}{6}\mathcal{G}, \quad \mathcal{E}^{(6)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{1}{5}\mathcal{G}, \quad \mathcal{E}^{(8)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{2}{7}\mathcal{G}$$

beziehungsweise mit skalierten Gewichten \mathcal{W}_i (für quadratische beziehungsweise kubische Gitter, $c_s^2 = 1/3$)

$$\mathcal{E}^{(4)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{1}{18}\mathcal{G}, \quad \mathcal{E}^{(6)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{1}{15}\mathcal{G}, \quad \mathcal{E}^{(8)} : \quad \mathcal{K} = -\frac{2}{21}\mathcal{G}.$$

Abschließend ist anzumerken, dass die Gleichgewichtseigenschaften einer Simulation Abweichungen von den analytischen Vorhersagen aufweisen [70, 172]. Diese sind auf Fehlerterme in den makroskopischen Gleichungen zurückzuführen, welche durch das Kräfteschema hervorgerufen werden [123, 193].

H Potentialfunktion mit veränderbarem Transitionspunkt

In diesem Anhang wird eine neue Potentialfunktion für die Interaktionskräfte zwischen unterschiedlichen Fluiden hergeleitet und analysiert. Als Grundlage dienen die makroskopischen Diffusionskoeffizienten aus Gleichung (5.22), siehe Abschnitt 5.1.3. Da es keine physikalische Grundlage für die Wahl der Potentialfunktion in MCMP-Systemen gibt [110], ist es nun möglich, eine Potentialfunktion mit dem Transitionspunkt als freien Parameter zu erzeugen. Das Interaktionspotential eines Stoffes sollte mit dessen Masse steigen, sodass die Potentialfunktion eine positive, monoton steigende Funktion der Dichte [78, 122] mit $\Psi(0) = 0$ sein sollte. Damit lassen sich die Differentialgleichungen (5.25) für jedes Kräfteschema lösen

$$\Psi_{\text{sqrt}}^{\text{Shan}} = \Psi_{\text{sqrt}}^{\text{EDM}} = \sqrt{\frac{(2\tau - 1)\rho}{\mathcal{G}_{\text{krit}}}}, \quad \Psi_{\text{sqrt}}^{\text{He}} = \Psi_{\text{sqrt}}^{\text{Guo}} = \sqrt{\frac{2\rho}{\mathcal{G}_{\text{krit}}}}. \quad (\text{H.1})$$

Diese Funktionen wurden für das Shan- und das He-Kräfteschema – wie in Abschnitt 5.2.2 – anhand stationärer Tropfen analysiert. Abbildung H.1 zeigt die Ergebnisse, wobei stets der *gesamte Stabilitätsbereich* dargestellt ist. Der kritische Wert entspricht exakt der Vorgabe in der Potentialfunktion, jedoch ist der Stabilitätsbereich eingeschränkt. Dieses Verhalten wird auf die starke Änderung des Interaktionspotentials bei kleinen Dichten (im Vergleich zu den anderen Potentialfunktionen) zurückgeführt (siehe Abbildung H.2). Kleine Dichteschwankungen aufgrund der Anfangsbedingungen (beispielsweise einer initial scharfen Grenzfläche) oder hervorgerufen durch Scheingeschwindigkeiten führen so bereits zu großen Potentialänderungen, welche schließlich zu Instabilitäten führen können. Bei Verwendung des He-Kräfteschemas wird der Stabilitätsbereich so weit reduziert, dass nur Simulationen im mischbaren Regime möglich sind. Jenseits des kritischen Punktes sind keine stabilen Simulationen möglich (Ergebnisse nicht dargestellt).

Es wird angenommen, dass die Fehlerterme \mathcal{R}_S des Shan-Kräfteschemas (siehe Anhang F) dissipativ wirken und so die Stabilitätseigenschaften positiv beeinflussen. Dies würde ebenfalls die schnellere Konvergenz des Shan-Kräfteschemas gegenüber

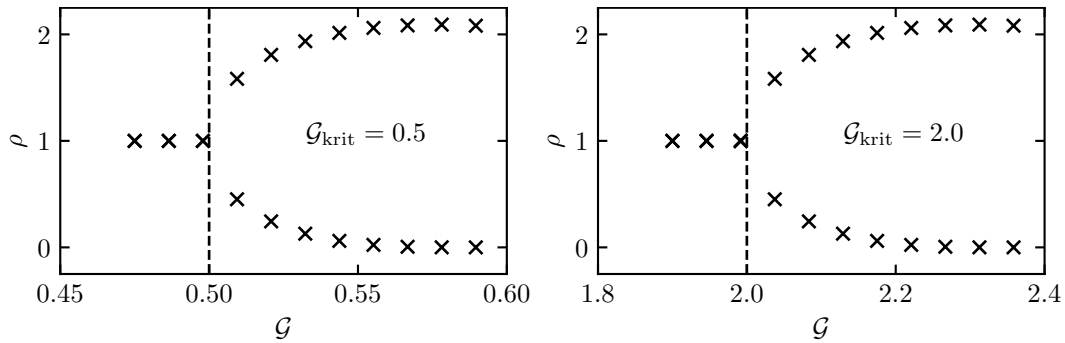


Abbildung H.1: Potentialfunktion mit veränderbarem Transitionspunkt $\Psi_{\text{sqr}}^{\text{Shan}}$ für $\tau_k = \tau = 1$. Dargestellt sind die Gleichgewichtsdichten unter Vorgabe des Transitionspunktes $\mathcal{G}_{\text{krit}} = 0.5$ links und $\mathcal{G}_{\text{krit}} = 2$ rechts. Der Stabilitätsbereich reicht in beiden Fällen nur bis $\mathcal{G}_{\text{red}} \approx 1.18$.

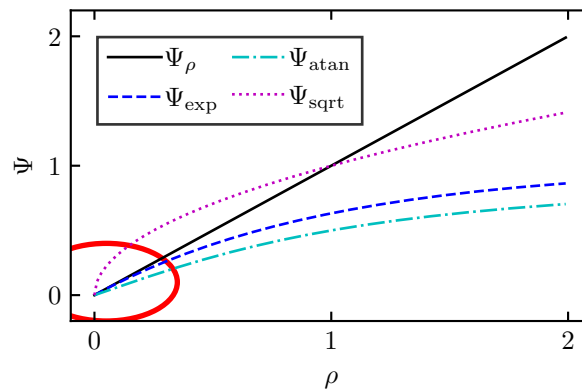


Abbildung H.2: Potentialfunktionen aus Tabelle 5.1 inklusive $\Psi_{\text{sqr}}^{\text{Shan}}$ mit $\mathcal{G}_{\text{krit}} = 1$ und $\tau_k = \tau = 1$ im Vergleich. Für $\Psi_{\text{sqr}}^{\text{Shan}}$ führen geringe Dichteschwankungen bereits zu großen Änderungen des Interaktionspotentials (roter Kreis).

dem He-Kräftechema erklären.

H.1 Zusammenfassung

Es ist möglich den Transitionspunkt durch eine geeignete Definition der Potentialfunktion festzulegen. Da geringe Dichteschwankungen beispielsweise aufgrund von Anfangs- und Randbedingungen nicht ausgeschlossen werden können, sind die Potentialfunktionen (H.1) jedoch nur bedingt einsetzbar.

Abschließend ist anzumerken, dass die Untersuchung in diesem Abschnitt nur für die Kräfteschemata Shan und He durchgeführt wurde. Da das Kräfteschema die Stabilitätseigenschaften des Modells beeinflusst [130], ist es daher für die Zukunft nötig, weitere Analysen mit alternativen Kräfteschemata durchzuführen.

Literaturverzeichnis

- [1] ADAMS, B. M., EBEIDA, M. S., ELDRED, M. S., JAKEMAN, J. D., SWILER, L. P., STEPHENS, J. A., VIGIL, D. M., WILDEY, T. M., BOHNHOFF, W. J., DALBEY, K. R., EDDY, J. P., HU, K. T., BAUMAN, L. E., AND HOUGH, P. D. Dakota, a multilevel parallel object-oriented framework for design optimization, parameter estimation, uncertainty quantification, and sensitivity analysis: Version 6.1 user's manual. *Sandia Technical Report SAND2014-4633 July 2014* (Updated November 2014).
- [2] AIDUN, C. K., AND CLAUSEN, J. R. Lattice boltzmann method for complex flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 42 (2010), 439–472.
- [3] ANDERSON, D. M., MCFADDEN, G. B., AND WHEELER, A. A. Diffuse interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics* 30 (1998), 139–165.
- [4] ASINARI, P. Semi-implicit-linearized multiple-relaxation-time formulation of lattice boltzmann schemes for mixture modeling. *Physical Review E* 73 (2006), 056705.
- [5] ASINARI, P., AND LUO, L.-S. A consistent lattice boltzmann equation with baroclinic coupling for mixtures. *Journal of Computational Physics* 227, 8 (2008), 3878–3895.
- [6] BAHADUR, V., AND GARIMELLA, S. V. An energy-based model for electrowetting-induced droplet actuation. *Journal of Micromechanics and Microengineering* 16, 8 (2006), 1494–1503.
- [7] BAO, J., AND SCHAEFER, L. Lattice boltzmann equation model for multi-component multi-phase flow with high density ratios. *Applied Mathematical Modelling* 37, 4 (2013), 1860–1871.

- [8] BENZI, R., BIFERALE, L., SBRAGAGLIA, M., SUCCI, S., AND TOSCHI, F. Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle. *Physical Review E* 74 (2006), 021509.
- [9] BENZI, R., SBRAGAGLIA, M., SUCCI, S., BERNASCHI, M., AND CHIBBARO, S. Mesoscopic lattice boltzmann modeling of soft-glassy systems: Theory and simulations. *Journal of Chemical Physics* 131 (2009), 104903.
- [10] BERTHIER, J. *Micro-Drops and Digital Microfluidics*, 2nd ed. Elsevier Inc., 2013.
- [11] BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P., AND KROOK, M. A kinetic approach to collision processes in gases. *Physical Review* 94 (1954), 511.
- [12] BRESME, F., CHACON, E., TARAZONA, P., AND TAY, K. Intrinsic structure of hydrophobic surfaces: The oil-water interface. *Physical Review Letters* 101, 5 (2008), 056102.
- [13] BRIANT, A. J., WAGNER, A. J., AND YEOMANS, J. M. Lattice boltzmann simulations of contact line motion. i. liquid-gas systems. *Physical Review E* 69 (2004), 031602.
- [14] BUICK, J. M., AND GREATED, C. A. Gravity in a lattice boltzmann model. *Physical Review E* 61 (2000), 5307.
- [15] BUNGARTZ, H.-J., ZIMMER, S., BUCHHOLZ, M., AND PFLÜGER, D. *Modellbildung und Simulation: Eine anwendungsorientierte Einführung*, 2. ed. Springer, Heidelberg, 2013.
- [16] CARAENI, D., BERGSTRÖM, C., AND FUCHS, L. Modeling of liquid fuel injection, evaporation and mixing in a gas turbine burner using large eddy simulations. *Flow, Turbulence and Combustion* 65, 2 (2000), 223–244.
- [17] CHAI, Z., AND ZHAO, T.-S. A pseudopotential-based multiple-relaxation-time lattice boltzmann model for multicomponent/multiphase flows. *Acta Mechanica Sinica* 28, 4 (2012), 983–992.
- [18] CHAPMAN, S., AND COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*, 3 ed. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [19] CHEN, L., KANG, Q., MU, Y., HE, Y.-L., AND TAO, W.-Q. A critical review of the pseudopotential multiphase lattice boltzmann model: methods and applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 76 (2014), 210–236.

- [20] CHEN, S., AND DOOLEN, G. D. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 30 (1998), 329–364.
- [21] CHIBARRO, S., BIFERALE, L., AND SUCCI, S. Capillary filling for multicomponent fluid using the pseudo-potential lattice boltzmann method. *European Physical Journal Special Topics* 171, 1 (2009), 223–228.
- [22] CHO, S. K., MOON, H., AND KIM, C.-J. Creating, transporting, cutting, and merging liquid droplets by electrowetting-based actuation for digital microfluidic circuits. *Journal of Microelectromechanical Systems* 12, 1 (2003), 70–80.
- [23] CHOPARD, B., KONTAXAKIS, D., LAGRAVA, D., LATT, J., MALASPINAS, O., PARMIGIANI, A., RYBAK, T., AND SAGON, Y. Palabos: Cfd, complex physics, 2015.
- [24] CLIME, L., BRASSARD, D., AND VERES, T. Numerical modeling of electrowetting processes in digital microfluidic devices. *Computers & Fluids* 39, 9 (2010), 1510–1515.
- [25] CLIME, L., BRASSARD, D., AND VERES, T. Numerical modeling of electrowetting transport processes in digital microfluidics. *Microfluidics and Nanofluidics* 8, 5 (2010), 599–608.
- [26] CONNINGTON, K., AND LEE, T. A review of spurious currents in the lattice boltzmann method for multiphase flows. *Journal of Mechanical Science and Technology* 26, 12 (2012), 3857–3863.
- [27] COON, E. T., PORTER, M. L., AND KANG, Q. Taxila lbm: a parallel, modular lattice boltzmann framework for simulating pore-scale flow in porous media. *Computational Geosciences* 18, 1 (2014), 17–27.
- [28] DELLAR, P. J. Bulk and shear viscosities in lattice boltzmann equations. *Physical Review E* 64 (2001), 031203.
- [29] DELLAR, P. J. Incompressible limits of lattice boltzmann equations using multiple relaxation times. *Journal of Computational Physics* 190, 2 (2003), 351–370.
- [30] D’HUMIÈRES, D., GINZBURG, I., KRAFCZYK, M., LALLEMAND, P., AND LUO, L.-S. Multiple-relaxation-time lattice boltzmann models in three-dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A* 360 (2002), 437–451.
- [31] DÜNWEIG, B., AND LADD, ANTHONY J. C. Lattice boltzmann simulations of soft matter systems. *Advances in Polymer Science* 221 (2009), 89.

- [32] EUBANK, P. T., AND HALL, K. R. Equal area rule and algorithm for determining phase compositions. *AIChE Journal* 41 (1995), 924–927.
- [33] FALCUCCI, G., BELLA, G., CHIATTI, G., CHIBARRO, S., SBRAGAGLIA, M., AND SUCCI, S. Lattice boltzmann models with mid-range interactions. *Communications in Computational Physics* 2, 6 (2007), 1071–1084.
- [34] FALCUCCI, G., CHIBARRO, S., SUCCI, S., AND CHEN, H. Lattice boltzmann spray-like fluids. *Europhysics Letters* 82 (2008), 24005.
- [35] FENG, Y. T., HAN, K., AND OWEN, D. R. J. Coupled lattice boltzmann method and discrete element modelling of particle transport in turbulent fluid flows: Computational issues. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 72 (2007), 1111–1134.
- [36] FERZIGER, J. H., AND PERIC, M. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer, 2008.
- [37] FLETCHER, R., AND REEVES, C. M. Function minimization by conjugate gradients. *The Computer Journal* 7, 2 (1964), 149–154.
- [38] FRISCH, U., HASSLACHER, B., AND POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Physical Review Letters* 56, 14 (1986), 1505–1508.
- [39] GAO, Y., ZHANG, X., RAMA, P., CHEN, R., OSTADI, H., AND JIANG, K. Lattice boltzmann simulation of water and gas flow in porous gas diffusion layers in fuel cells reconstructed from micro-tomography. *Computers and Mathematics with Applications* 65 (2013), 891–900.
- [40] GEIER, M., AND PASQUALI, A. Fourth order galilean invariance for the lattice boltzmann method. *Computers & Fluids* 166 (2018), 139–151.
- [41] GINZBURG, I., AND ADLER, P. M. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice boltzmann model. *Journal de Physique II* 4, 2 (1994), 191–214.
- [42] GONG, B., LIU, X., AND QIN, G. A lattice boltzmann model for multi-component vapor-liquid two phase flow. *Petroleum Exploration and Development* 41, 5 (2014), 695–702.
- [43] GONG, S., CHENG, P., AND QUAN, X. Lattice boltzmann simulation of droplet formation in microchannels under an electric field. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 53 (2010), 5863–5870.
- [44] GONG, W., CHEN, S., AND YAN, Y. A thermal immiscible multiphase flow simulation by lattice boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 88, 136–138 (2017).

- [45] GONG, W., YAN, Y., AND CHEN, S. A study on the unphysical mass transfer of scmp pseudopotential lbm. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 123 (2018), 815–820.
- [46] GRAD, H. Note on n-dimensional hermite polynomials. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 2, 4 (1949), 325–330.
- [47] GREEN, B. I., AND VEDULA, P. A lattice based solution of the collisional boltzmann equation with applications to microchannel flows. *Journal of Statistical Mechanics* (2013), P07016.
- [48] GROSS, M., MORADI, N., ZIKOS, G., AND VARNIK, F. Shear stress in nonideal fluid lattice boltzmann simulations. *Physical Review E* 83 (2011), 017701.
- [49] GUANGWU, Y. A lattice boltzmann equation for waves. *Journal of Computational Physics* 161, 1 (2000), 61–69.
- [50] GUNSTENSEN, A. K., ROTHMAN, D. H., ZALESKI, S., AND ZANETTI, G. Lattice boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A* 43, 8 (1991), 4320–4327.
- [51] GUO, Z., AND SHU, C. *Lattice Boltzmann Method and its Applications in Engineering*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2013.
- [52] GUO, Z., ZHAO, T. S., AND SHI, Y. Preconditioned lattice-boltzmann method for steady flows. *Physical Review E* 70 (2004), 066706.
- [53] GUO, Z., ZHENG, C., AND SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice boltzmann method. *Physical Review E* 65 (2002), 046308.
- [54] GUPTA, A., SBRAGAGLIA, M., AND SCAGLIARINI, A. Hybrid lattice boltzmann/finite difference simulations of viscoelastic multicomponent flows in confined geometries. *Journal of Computational Physics* 291 (2015), 177–197.
- [55] HÄNEL, D. *Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden*. Springer, Berlin, 2004.
- [56] HASERT, M., MASILAMANI, K., ZIMNY, S., KLIMACH, H., QI, J., BERNSDORF, J., AND ROLLER, S. Complex fluid simulations with the parallel tree-based lattice boltzmann solver musubi. *Journal of Computational Science* 5, 5 (2014), 784–794.
- [57] HE, X., CHEN, S., AND DOOLEN, G. D. A novel thermal model for the lattice boltzmann method in incompressible limit. *Journal of Computational Physics* 146, 1 (1998), 282–300.

- [58] HE, X., CHEN, S., AND ZHANG, R. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh-taylor instability. *Journal of Computational Physics* 152, 2 (1999), 642–663.
- [59] HE, X., AND LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. *Physical Review E* 56 (1997), 6811.
- [60] HE, X., SHAN, X., AND DOOLEN, G. D. Discrete boltzmann equation model for nonideal gases. *Physical Review E* 57, R (1998), R13.
- [61] HE, X., ZOU, Q., LUO, L.-S., AND DEMBO, M. Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Journal of Statistical Physics* 87 (1997), 115–136.
- [62] HESSLING, D. *Simulation of drying suspensions on porous substrates*. PhD thesis, Eindhoven, 2017.
- [63] HESSLING, D., XIE, Q., AND HARTING, J. Diffusion dominated evaporation in multicomponent lattice boltzmann simulations. *Journal of Chemical Physics* 146 (2017), 054111.
- [64] HEUVELINE, V., KRAUSE, M., AND LATT, J. Towards a hybrid parallelization of lattice boltzmann methods. *Computers and Mathematics with Applications* 58, 5 (2009), 1071–1080.
- [65] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* 39, 1 (1981), 201–225.
- [66] HU, A., LI, J., CHEN, S., LIAO, Q., AND ZENG, J. On equations of state in pseudo-potential multiphase lattice boltzmann model with large density ratio. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 67 (2013), 159–163.
- [67] HU, A., LI, J., AND UDDIN, R. Surface tension adjustment in a pseudo-potential lattice boltzmann model. *arXiv 1412.7228* (2014).
- [68] HU, A., LI, J., AND UDDIN, R. Force method in a pseudo-potential lattice boltzmann model. *Journal of Computational Physics* 294 (2015), 78–89.
- [69] HU, A., LI, L., UDDIN, R., AND LIU, D. Contact angle adjustment in equation-of-state-based pseudopotential model. *Physical Review E* 93 (2016), 053307.
- [70] HUANG, H., KRAFCZYK, M., AND LU, X.-Y. Forcing term in single-phase and shan-chen-type multiphase lattice boltzmann models. *Physical Review E* 84 (2011), 046710.

- [71] HUANG, H., LI, Z.-T., LIU, S., AND LU, X.-Y. Shan-and-chen-type multiphase lattice boltzmann study of viscous coupling effects for two-phase flow in porous media. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 61 (2009), 341–354.
- [72] HUANG, H., SUKOP, M. C., AND LU, X.-Y. *Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application*, 1 ed. Wiley-Blackwell, 2015.
- [73] HUANG, H., THORNE, D. T., SCHAAP, M. G., AND SUKOP, M. C. Proposed approximation for contact angles in shan-and-chen-type multicomponent multiphase lattice boltzmann models. *Physical Review E* 76 (2007), 066701.
- [74] HUANG, R., AND WU, H. Third-order analysis of pseudopotential lattice boltzmann model for multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 327 (2016), 121–139.
- [75] INAMURO, T., YOSHINO, M., INOUE, H., MIZUNO, R., AND OGINO, F. A lattice boltzmann method for a binary miscible fluid mixture and its application to a heat-transfer problem. *Journal of Computational Physics* 179, 1 (2002), 201–215.
- [76] IZQUIERDO, S., AND FUEYO, N. Optimal preconditioning of lattice boltzmann methods. *Journal of Computational Physics* 228 (2009), 6479–6495.
- [77] JOENSSON, H. N., AND SVAHN, H. A. Tröpfchen-mikrofluidik für die einzellanalyse. *Angewandte Chemie* 124, 49 (2012), 12342–12359.
- [78] KAMALI, M. R., GILLISSEN, J. J. J., SUNDARESAN, S., AND VAN DEN AKKER, H. E. A. Contact line motion without slip in lattice boltzmann simulations. *Chemical Engineering Science* 66 (2011), 3452–3458.
- [79] KANG, Q., ZHANG, D., AND CHEN, S. Displacement of a two-dimensional immiscible droplet in a channel. *Physics of Fluids* 14, 9 (2002), 3203–3214.
- [80] KARLIN, I., BÖSCH, F., AND CHIKATAMARLA. SHYAM S. Gibbs’ principle for the lattice-kinetic theory of fluid dynamics. *Physical Review E* 90 (2014), 031302.
- [81] KHAJEPOR, S., CUI, J., DEWAR, M., AND CHEN, B. A study of wall boundary conditions in pseudopotential lattice boltzmann models. *Computers & Fluids* (2018).
- [82] KHAJEPOR, S., WEN, J., AND CHEN, B. Multipseudopotential interaction: A solution for thermodynamic inconsistency in pseudopotential lattice boltzmann models. *Physical Review E* 91 (2015), 023301.

- [83] KHARMIANI, S. F., AND PASSANDIDEH-FARD, M. A two-phase lattice boltzmann study on injection filling of cavities with arbitrary shapes. *International Journal of Multiphase Flow* 101 (2018), 11–23.
- [84] KRÄMER, A. *Lattice-Boltzmann-Methoden zur Simulation inkompressibler Wirbelströmungen*. PhD thesis, Universität Siegen, Siegen, 2017.
- [85] KRÄMER, A., KÜLLMER, K., REITH, D., JOPPICH, W., AND FOYSI, H. Semilagrangian off-lattice boltzmann method for weakly compressible flows. *Physical Review E* 95 (2017), 023305.
- [86] KRAUSE, M., HENN, T., MINK, A., TRUNK, R., WEISBROD, P., NATHEN, P., KLEMENS, F., AND MAIER, M. L. Openlb release 1.0: Open source lattice boltzmann code, 2016.
- [87] KRÜGER, T., KUSUMAATMAJA, H., KUZMIN, A., SHARDT, O., SILVA, G., AND VIGGEN, E. M. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and practice*, 1 ed. Springer, 2016.
- [88] KUHLMANN, H. C. *Strömungsmechanik*, 1. ed. Pearson Studium, München, 2007.
- [89] KÜLLMER, K., KRÄMER, A., JOPPICH, W., REITH, D., AND FOYSI, H. Transition point prediction in a multicomponent lattice boltzmann model: Forcing scheme dependencies. *Physical Review E* 97 (2018), 023313.
- [90] KÜLLMER, K., KRÄMER, A., REITH, D., JOPPICH, W., AND FOYSI, H. Numerical optimisation of the pseudopotential-based lattice boltzmann method. *Journal of Computational Science* 17 (2016), 384–393.
- [91] KUMARI, N., BAHADUR, V., AND GARIMELLA, S. V. Electrical actuation of dielectric droplets. *Journal of Micromechanics and Microengineering* 18, 8 (2008), 085018.
- [92] KUPERSHTOKH, A. L., MEDVEDEV, D. A., AND KARPOV, D. I. On equations of state in a lattice boltzmann method. *Computers and Mathematics with Applications* 58, 5 (2009), 965–974.
- [93] KUZMIN, A. *Multiphase Simulations with Lattice Boltzmann Scheme*. PhD thesis, University of Calgary, Calgary, 2009.
- [94] KUZMIN, A., AND MOHAMAD, A. A. Multirange multi-relaxation time shan-chen model with extended equilibrium. *Computers and Mathematics with Applications* 59 (2010), 2260–2270.

- [95] LALLEMAND, P., LUO, L.-S., AND PENG, Y. A lattice boltzmann front-tracking method for interface dynamics with surface tension in two dimensions. *Journal of Computational Physics* 226 (2007), 1367–1384.
- [96] LAMB, H. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1895.
- [97] LARRETEGUY, A. E. Modeling and simulation of multicomponent flows. *Mecánica Computacional XXI* (2002), 40–54.
- [98] LATT, J. *Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations*. PhD thesis, University Geneve, Geneve, 2007.
- [99] LAURIEN, E., AND OERTEL, H. J. *Numerische Strömungsmechanik: Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit*, 4. ed. Springer, Wiesbaden, 2011.
- [100] LECLAIRE, S. Forward and backward finite differences for isotropic gradients on a square lattice derived from a rectangular lattice formulation. *International Journal of Computer Mathematics* (2014).
- [101] LECLAIRE, S., EL-HACHEM, M., TRÉPANIÉ, J.-Y., AND REGGIO, M. High order spatial generalization of 2d and 3d isotropic discrete gradient operators with fast evaluation on gpus. *Journal of Scientific Computing* 59 (2014), 545–573.
- [102] LECLAIRE, S., REGGIO, M., AND TRÉPANIÉ, J.-Y. Isotropic color gradient for simulating very high-density ratios with a two-phase flow lattice boltzmann model. *Computers & Fluids* 48 (2011), 98–112.
- [103] LEE, T., AND FISCHER, P. F. Eliminating parasitic currents in the lattice boltzmann equation method for nonideal gases. *Physical Review E* 74 (2006), 046709.
- [104] LI, H., AND FANG, H. Lattice boltzmann simulation of electrowetting. *European Physical Journal Special Topics* 171 (2009), 129–133.
- [105] LI, H., AND FANG, H. Hysteresis and saturation of contact angle in electrowetting on a dielectric simulated by the lattice boltzmann method. *Journal of Adhesion Science and Technology* 26 (2012), 1873–1881.
- [106] LI, H., LI, J., CHEN, Y., AND FANG, H. Lattice boltzmann simulation of electrowetting-on-dielectric in a rough-wall channel. *arXiv* (2007), 0708.4182.
- [107] LI, Q., CHAI, Z., SHI, B., AND LIANG, H. Deformation and breakup of a liquid droplet past a solid circular cylinder: A lattice boltzmann study. *Physical Review E* 90 (2014), 043015.

- [108] LI, Q., AND LUO, K. H. Thermodynamic consistency of the pseudopotential lattice boltzmann model for simulating liquid-vapor flows. *Applied Thermal Engineering* 72 (2014), 56–61.
- [109] LI, Q., LUO, K. H., KANG, Q., AND CHEN, Q. Contact angles in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of wetting. *Physical Review E* 90 (2014), 053301.
- [110] LI, Q., LUO, K. H., KANG, Q., HE, Y.-L., CHEN, Q., AND LIU, Q. Lattice boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science* 52 (2016), 62–105.
- [111] LI, Q., LUO, K. H., AND LI, X. J. Lattice boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. *Physical Review E* 87, 5 (2013), 053301.
- [112] LI, Z., FAVIER, J., D'ORTONA, U., AND PONCET, S. An immersed boundary-lattice boltzmann method for single- and multi-component fluid flows. *Journal of Computational Physics* 304 (2016), 424–440.
- [113] LI, Z.-T., LI, G.-J., HUANG, H., AND LU, X.-Y. Lattice boltzmann study of electrohydrodynamic drop deformation with large density ratio. *International Journal of Modern Physics C* 22, 7 (2011), 729–744.
- [114] LIU, E. B., AND HILPERT, M. Effects of molecular mass on the diffusion coefficient in a multiphase lattice boltzmann model. *Computational Geosciences* 15 (2011), 379–384.
- [115] LIU, F.-M., WANG, A.-L., QIU, R.-F., AND JIANG, T. Improved lattice boltzmann model for multi-component diffusion flow with large pressure difference. *International Journal of Modern Physics C* 27, 11 (2016), 1650130.
- [116] LIU, H., KANG, Q., LEONARDI, C. R., JONES, B. D., SCHMIESCHEK, S., NARVÁEZ, A., WILLIAMS, J. R., VALOCCHI, A. J., AND HARTING, J. Multi-phase lattice boltzmann simulations for porous media applications. *Computational Geosciences* 20 (2016), 777–805.
- [117] LIU, M., YU, Z., WANG, T., WANG, J., AND FAN, L.-S. A modified pseudopotential for a lattice boltzmann simulation of bubbly flow. *Chemical Engineering Science* 65 (2010), 5615–5623.
- [118] LIU, S., ZOU, N., CUI, Y., AND WU, W. Accelerating the parallelization of lattice boltzmann method by exploiting the temporal locality. *IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications* (2017), 1186–1193.

- [119] LUO, G., MALKOVA, S., PINGALI, S. V., SCHULTZ, D. G., LIN, B., MERON, M., GRABER, TIMOTHY, J., GEBHARDT, J., VANYSEK, P., AND SCHLOSSMANN, M. L. The width of the water/2-heptanone liquid–liquid interface. *Electrochemistry Communications* 7, 6 (2005), 627–630.
- [120] LUO, L.-S. Unified theory of lattice boltzmann models for nonideal gases. *Physical Review Letters* 81, 8 (1998), 1618–1621.
- [121] LYCETT-BROWN, D. J. *Lattice Boltzmann Methods for High End Computing of Multiphase Flow*. PhD thesis, University of Southampton, 2013.
- [122] LYCETT-BROWN, D. J., KARLIN, I., AND LUO, K. H. Droplet collision simulation by a multi-speed lattice boltzmann method. *Communications in Computational Physics* 9, 5 (2011), 1219–1234.
- [123] LYCETT-BROWN, D. J., AND LUO, K. H. Improved forcing scheme in pseudopotential lattice boltzmann methods for multiphase flow at arbitrarily high density ratios. *Physical Review E* 91 (2015), 023305.
- [124] MARTYS, N. S., AND CHEN, H. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice boltzmann method. *Physical Review E* 53 (1996), 743–750.
- [125] MARY, I., AND SAGAUT, P. Large eddy simulation of flow around an airfoil near stall. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal* 40, 6 (2002), 1139–1145.
- [126] MATYKA, M., KOZA, Z., GOLEMBIEWSKI, J., KOSTUR, M., AND JANUSZEWSKI, M. Anisotropy of flow in stochastically generated porous media. *Physical Review E* 88 (2013), 023018.
- [127] McDONALD, P. W. The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades. *ASME* (1971), 71–GT–89.
- [128] MCNAMARA, G. R., AND ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters* 61 (1988), 2332–2335.
- [129] MENDOZA, M., AND MUNOZ, J. D. Three dimensional lattice-boltzmann model for electrostatics. *Physical Review E* 82 (2010), 056708.
- [130] MIKHEEV, S. A., AND KRIVOVICHEV, G. V. Stability analysis of the lattice boltzmann schemes with body force action. *Journal of Physics: Conference Series* 1038 (2018), 012040.
- [131] MINK, A., THÄTER, G., NIRSCHL, H., AND KRAUSE, M. A 3d lattice boltzmann method for light simulation in participating media. *Journal of Computational Science* 17, 2 (2016), 431–437.

- [132] MOHAMAD, A. A. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. Springer, London, 2011.
- [133] MONACO, E. *Multiphase Lattice Boltzmann Simulation of Microfluidics*. PhD thesis, University of Southampton, Southampton, 2009.
- [134] MUGGLI, F., CHATAGNY, L., AND LATT, J. Lattice-boltzmann method for the simulation of laminar mixers. *14th European Conference on Mixing (2012)*, 10–13.
- [135] NOURGALIEV, R. R., DINH, T. N., THEOFANOUS, T. G., AND JOSEPH, D. The lattice boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications. *International Journal of Multiphase Flow* 29, 1 (2003), 117–169.
- [136] OPRINS, H., VANDEFELDE, B., AND BAELMANS, M. Modeling and control of electrowetting induced droplet motion. *Micromachines* 3, 1 (2012), 150–167.
- [137] ORLANDINI, E., SWIFT, M. R., AND YEOMANS, J. M. A lattice boltzmann model of binary fluid mixtures. *Europhysics Letters* 32, 6 (1995), 463–468.
- [138] OSHER, S., AND SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* 79, 1 (1988), 12–49.
- [139] PARK, J., AND LI, X. Multi-phase micro-scale flow simulation in the electrodes of a pem fuel cell by lattice boltzmann method. *Journal of Power Sources* 178 (2008), 248–257.
- [140] PENG, Y., WANG, B., AND MAO, Y. Study on force schemes in pseudopotential lattice boltzmann model for two-phase flows. *Hindawi Mathematical Problems in Engineering* 2018 (2018), 6496379.
- [141] PORTER, M. L., COON, E. T., KANG, Q., MOULTON, J. D., AND CAREY, J. W. Multicomponent interparticle-potential lattice boltzmann model for fluids with large viscosity ratios. *Physical Review E* 86 (2012), 036701.
- [142] PREMNATH, K. N., AND ABRAHAM, J. Three-dimensional multi-relaxation time (mrt) lattice-boltzmann models for multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 539–559.
- [143] RAABE, D. Overview of the lattice boltzmann method for nano- and microscale fluid dynamics in materials science and engineering. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 12, 6 (2004), R13–R46.

- [144] REIJERS, S. A., GELDERBLOM, H., AND TOSCHI, F. Axisymmetric multiphase lattice boltzmann method for generic equations of state. *Journal of Computational Science* 17 (2016), 309–314.
- [145] RENARDY, Y., AND RENARDY, M. Prost: A parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of Computational Physics* 183, 2 (2002), 400–421.
- [146] RICHARDSON, L. F. IX. the approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A* (1911).
- [147] RICHARDSON, R. G. D. A new method in boundary problems for differential equations. *Transactions of the American Mathematical Society* 18, 4 (1917), 489–518.
- [148] RYU, S., AND KO, S. A comparative study of lattice boltzmann and volume of fluid method for two-dimensional multiphase flows. *Nuclear Engineering and Technology* 44, 6 (2012), 623–638.
- [149] SARKAR, A. *Quantification for micromixing using the lattice Boltzmann method*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2015.
- [150] SBRAGAGLIA, M., AND BELARDINELLI, D. Interaction pressure tensor for a class of multicomponent lattice boltzmann models. *Physical Review E* 88 (2013), 013306.
- [151] SBRAGAGLIA, M., BENZI, R., BIFERALE, L., SUCCI, S., SUGIYAMA, K., AND TOSCHI, F. Generalized lattice boltzmann method with multirange pseudopotential. *Physical Review E* 75, 2 (2007), 026702.
- [152] SBRAGAGLIA, M., AND SHAN, X. Consistent pseudopotential interactions in lattice boltzmann models. *Physical Review E* 84 (2011), 036703.
- [153] SCARBOLO, L., MOLIN, D., PERLEKAR, P., SBRAGAGLIA, M., SOLDATI, A., AND TOSCHI, F. Unified framework for a side-by-side comparison of different multicomponent algorithms: Lattice boltzmann vs. phase field model. *Journal of Computational Physics* 234 (2013), 263–279.
- [154] SCHEIDERER, S. *Parallele Lattice-Boltzmann-Simulation turbulenter Strömungen: Vergleich von OpenMP, MPI und einem Hybridansatz sowie verschiedenen Optimierungen*. VDM Verlag Dr. Müller, Saarbrücken, 2008.
- [155] SCHMIESCHEK, S., AND HARTING, J. Contact angle determination in multicomponent lattice boltzmann simulations. *Communications in Computational Physics* 9, 5 (2011), 1165–1178.

- [156] SHAN, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice boltzmann models. *Physical Review E* 73, 4 (2006), 047701.
- [157] SHAN, X. Pressure tensor calculation in a class of nonideal gas lattice boltzmann models. *Physical Review E* 77 (2008), 066702.
- [158] SHAN, X., AND CHEN, H. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E* 47, 3 (1993), 1815–1819.
- [159] SHAN, X., AND CHEN, H. Simulation of non-ideal gases and liquid-gas phase transitions by lattice boltzmann equation. *Physical Review E* 49 (1994), 2941.
- [160] SHAN, X., AND DOOLEN, G. D. Multicomponent lattice-boltzmann model with interparticle interaction. *Journal of Statistical Physics* 81, 1 (1995), 379–393.
- [161] SHAN, X., AND DOOLEN, G. D. Diffusion in a multicomponent lattice boltzmann equation model. *Physical Review E* 54 (1996), 3614.
- [162] SHAN, X., YUAN, X.-F., AND CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier–stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics* 550 (2006), 413–441.
- [163] SHI, B., HE, N., AND GUO, Z. Lattice boltzmann model for high-order non-linear partial differential equations. *arXiv 0907.1720v1* (2009).
- [164] SIEBERT, D. N., PHILIPPI, P. C., AND MATTILA, K. K. Consistent lattice boltzmann equations for phase transitions. *Physical Review E* 90 (2014), 053310.
- [165] SRIVASTAVA, S., PERLEKAR, P., BOONKKAMP, JAN H. M. TEN THIJE, VERMA, N., AND TOSCHI, F. Axisymmetric multiphase lattice boltzmann method. *Physical Review E* 88 (2013), 013309.
- [166] STILES, C. D., AND XUE, Y. High density ratio lattice boltzmann method simulations of multicomponent multiphase transport of h2o in air. *Computers & Fluids* 131 (2016), 81–90.
- [167] SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond: Numerical mathematics and scientific computation*. Oxford University Press, 2001.
- [168] SUCCI, S. Lattice boltzmann 2038. *Europhysics Letters* 109 (2015), 50001.
- [169] SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation: For Complex States of Flowing Matter*, 1 ed. Oxford University Press, Oxford, 2018.

- [170] SUKOP, M. C., AND OR, D. Lattice boltzmann method for modeling liquid-vapor interface configurations in porous media. *Water Resources Research* 40 (2004), W01509.
- [171] SUKOP, M. C., AND THORNE, D. T. *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers*. Springer, Berlin, 2006.
- [172] SUN, K., WANG, T., JIA, M., AND XIAO, G. Evaluation of force implementation in pseudopotential-based multiphase lattice boltzmann models. *Physica A* 391, 15 (2012), 3895–3907.
- [173] SWIFT, M. R., OSBORN, W. R., AND YEOMANS, J. M. Lattice boltzmann simulation of non-ideal fluids. *Physical Review Letters* 75, 5 (1995), 830–833.
- [174] THÉVENIN, D., AND JANIGA, G. *Optimization and Computational Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 2008.
- [175] TÖLKE, J., FREUDIGER, S., AND KRAFCZYK, M. An adaptive scheme using hierarchical grids for lattice boltzmann multi-phase flow simulations. *Computers & Fluids* 35 (2006), 820–830.
- [176] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 708–759.
- [177] TURNER, M. J., CLOUGH, R. J., MARTIN, H. C., AND TOPP, L. J. Stiffness and deflection analysis of complex structures. *Journal of the Aeronautical Sciences* 23, 9 (1956), 805–823.
- [178] UBERTINI, S., ASINARI, P., AND SUCCI, S. Three ways to lattice boltzmann: A unified time-marching picture. *Physical Review E* 81 (2010), 016311.
- [179] VAN DEN AKKER, H. E. A. Lattice boltzmann simulations for multi-scale chemical engineering. *Current Opinion in Chemical Engineering* 21 (2018), 67–75.
- [180] VIGGEN, E. M. *The Lattice Boltzmann Method with Applications in Acoustics*. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, 2009.
- [181] VIGGEN, E. M. *The Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and acoustics*. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, 2014.
- [182] WAGNER, A. J. The origin of spurious velocities in lattice boltzmann. *International Journal of Modern Physics B* 17 (2003), 193.

- [183] WAGNER, A. J. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice boltzmann simulations. *Physical Review E* 74 (2006), 056703.
- [184] WILDE, D., KRÄMER, A., KÜLLMER, K., FOYSI, H., AND REITH, D. Multi-step lattice boltzmann methods: Theory and application. *Submitted to Int. J. Numer. Meth. Fluids (13.06.2018)* (2018).
- [185] WOLFRAM, S. Cellular automaton fluids 1: Basic theory. *Journal of Statistical Physics* 45 (1986), 471–526.
- [186] YU, Z., AND FAN, L.-S. An interaction potential based lattice boltzmann method with adaptive mesh refinement (amr) for two-phase flow simulation. *Journal of Computational Physics* 228 (2009), 6456–6478.
- [187] YU, Z., AND FAN, L.-S. Multirelaxation-time interaction-potential-based lattice boltzmann model for two-phase flow. *Physical Review E* 82 (2010), 046708.
- [188] YU, Z., HEMMINGER, O., AND FAN, L.-S. Experiment and lattice boltzmann simulation of two-phase gas–liquid flows in microchannels. *Chemical Engineering Science* 62 (2007), 7172–7183.
- [189] YUAN, P., AND SCHAEFER, L. Equations of state in a lattice boltzmann model. *Physics of Fluids* 18 (2006), 042101.
- [190] ZAHEDI, S., KRONBILCHER, M., AND KREISS, G. Spurious currents in finite element based level set methods for two-phase flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 69 (2012), 1433–1456.
- [191] ZARGHAMI, A., LOOIJE, N., AND VAN DEN AKKER, H. E. A. Assessment of interaction potential in simulating nonisothermal multiphase systems by means of lattice boltzmann modeling. *Physical Review E* 92 (2015), 023307.
- [192] ZELKO, J., AND DÜNNEWEG, B. Consistent two-phase lattice boltzmann model for gas-liquid systems. *arXiv 1402.2920v2* (2014).
- [193] ZHAI, Q., ZHENG, L., AND ZHENG, S. Pseudopotential lattice boltzmann equation method for two-phase flow: A higher-order chapmann-enskog expansion. *Physical Review E* 95, 2 (2017), 023313.
- [194] ZHANG, C., CHENG, P., AND MINKOWYCZ, W. J. Lattice boltzmann simulation of forced condensation flow on a horizontal cold surface in the presence of a non-condensable gas. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 115 (2017), 500–512.
- [195] ZHANG, J., AND KWOK, D. Y. A 2d lattice boltzmann study on electrohydrodynamic drop deformation with the leaky dielectric theory. *Journal of Computational Physics* 206 (2005), 150–161.

-
- [196] ZHANG, J., AND YAN, G. Lattice boltzmann method for one and two-dimensional burgers equation. *Physica A* 387, 19-20 (2008), 4771–4786.
- [197] ZHONG, M., ZHONG, C., AND CUNRU, B. A high-order discrete scheme of lattice boltzmann method for cavitation simulation. *Advances in Computer Science and its Applications* 1, 1 (2012), 73–77.
- [198] ZHOU, J. G. A lattice boltzmann model for the shallow water equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 191, 32 (2002), 3527–3539.
- [199] ZIEGLER, D. P. Boundary conditions for lattice boltzmann simulations. *Journal of Statistical Physics* 71, 5-6 (1993), 1171–1177.