



**Forschungsberichte aus dem
Institut für Thermische Strömungsmaschinen**
Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer

Bastian Werdelmann

Ein Verfahren zur Kopplung der Smoothed-Particle-Hydrodynamics- und der Finite-Volumen-Methode

Ein Verfahren zur Kopplung der Smoothed-Particle-Hydrodynamics- und der Finite-Volumen-Methode

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

angenommene

Dissertation

von

Bastian Werdelmann, M. Eng.
aus Herne

Tag der mündlichen Prüfung:

20. Februar 2023

Hauptreferent:
Korreferent:

Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer
Prof. Dr.-Ing. Matthias Teschner

Forschungsberichte aus dem Institut für Thermische Strömungsmaschinen

herausgegeben von:

Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer,
Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Kaiserstr. 12
D-76131 Karlsruhe

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind
im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.



Dieses Werk ist lizenziert unter der Creative Commons Attribution 4.0 Lizenz CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). Die Bedingungen der Creative-Commons-Lizenz gelten nur für Originalmaterial. Die Wiederverwendung von Material aus anderen Quellen (gekennzeichnet mit Quellenangabe) wie z. B. Schaubilder, Abbildungen, Fotos und Textauszüge erfordert ggf. weitere Nutzungsgenehmigungen durch den jeweiligen Rechteinhaber.
©Copyright Logos Verlag Berlin GmbH 2023

Alle Rechte vorbehalten.

ISSN 1615-4983
ISBN 978-3-8325-5689-1

Logos Verlag Berlin GmbH
Georg-Knorr-Str. 4, Geb. 10,
12681 Berlin
Tel.: +49 030 42 85 10 90
Fax: +49 030 42 85 10 92
INTERNET: <http://www.logos-verlag.de>

Ein Verfahren zur Kopplung der Smoothed-Particle-Hydrodynamics- und der Finite-Volumen-Methode

von

Bastian Werdelmann, M. Eng.

Karlsruhe 2023

Vorwort des Herausgebers

Der schnelle technische Fortschritt im Turbomaschinenbau, der durch extreme technische Forderungen und starken internationalen Wettbewerb geprägt ist, verlangt einen effizienten Austausch und die Diskussion von Fachwissen und Erfahrung zwischen Universitäten und industriellen Partnern. Mit der vorliegenden Reihe haben wir versucht, ein Forum zu schaffen, das neben unseren Publikationen in Fachzeitschriften die aktuellen Forschungsergebnisse des Instituts für Thermische Strömungsmaschinen am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) einem möglichst großen Kreis von Fachkollegen aus der Wissenschaft und vor allem auch der Praxis zugänglich macht und den Wissenstransfer intensiviert und beschleunigt.

Flugtriebwerke, stationäre Gasturbinen, Turbolader und Verdichter sind im Verbund mit den zugehörigen Anlagen faszinierende Anwendungsbereiche. Es ist nur natürlich, dass die methodischen Lösungsansätze, die neuen Messtechniken, die Laboranlagen auch zur Lösung von Problemstellungen in anderen Gebieten - hier denke ich an Otto- und Dieselmotoren, elektrische Antriebe und zahlreiche weitere Anwendungen - genutzt werden. Die effiziente, umweltfreundliche und zuverlässige Umsetzung von Energie führt zu Fragen der ein- und mehrphasigen Strömung, der Verbrennung und der Schadstoffbildung, des Wärmeübergangs sowie des Verhaltens metallischer und keramischer Materialien und Verbundwerkstoffe. Sie stehen im Mittelpunkt ausgedehnter theoretischer und experimenteller Arbeiten, die im Rahmen nationaler und internationaler Forschungsprogramme in Kooperation mit Partnern aus Industrie, Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen durchgeführt werden.

Es sollte nicht unerwähnt bleiben, dass alle Arbeiten durch enge Kooperation innerhalb des Instituts geprägt sind. Nicht ohne Grund ist der Beitrag der Werkstätten, der Technik-, der Rechner- und Verwaltungsabteilungen besonders hervorzuheben. Diplomanden und Hilfsassistenten tragen mit ihren Ideen Wesentliches bei, und natürlich ist es der stets freundschaftlich fordernde wissenschaftliche Austausch zwischen den Forschergruppen des Instituts, der zur gleichbleibend hohen Qualität der Arbeiten entscheidend beiträgt. Dabei sind wir für die Unterstützung unserer Förderer außerordentlich dankbar.

Die detaillierte numerische Berechnung der Zerstäubung von Öl oder Kerosin in gasturbinentypischen Brennstoffdüsen im Rahmen der Berechnung des gesamten Verbrennungsvorgangs ist mit derzeitigen CFD-Verfahren aufgrund des immensen numerischen Aufwands noch nicht möglich. Der Zerstäubungsvorgang und die gesamte Gemischbildung stellen jedoch den Schlüssel zu einer stabilen schadstoffarmen Verbrennung dar. Momentan werden die Flüssigphase und die Gasphase in einer Euler-Lagrange-Methode separat berechnet und über den Austausch von Quelltermen miteinander gekoppelt. Die Startbedingungen der Tropfen werden entweder durch aus Experimenten abgeleitete Korrelationen oder durch hochaufgelöste numerische Verfahren, z.B. der relativ jungen Smoothed-Particle-Hydrodynamics (SPH), bestimmt und dann dem Lagrange-Teil der Berechnung übergeben. Diese Methode hat sich zwar bewährt, ist aber bezüglich der Genauigkeit und des Detaillierungsgrads der Randbedingungen der Flüssigphase begrenzt. Es wäre deshalb vorteilhaft, eine direktere Kopplung der Berechnung des Zerstäubungsprozesses und der Berechnung der reagierenden Zweiphasenströmung herzustellen. In diesen Kontext ist der vorliegende Band der Schriftenreihe einzuordnen. Der Autor befasst sich mit der Methodik

der Einbettung einer hochaufgelösten SPH-Rechnung in die Strömungsrechnung mit Hilfe eines klassischen Finite-Volumen (FV) CFD-Verfahrens. Die physikalisch-mathematische Verknüpfung dieser beiden sehr unterschiedlichen numerischen Verfahren ist extrem anspruchsvoll. Es ist deshalb notwendig, sich in einem ersten Schritt auf laminare einphasige Anwendungen zu beschränken. Die Ansätze lassen sich anschließend auf turbulente und mehrphasige Strömungsfälle erweitern. Ein Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt darin, eine hohe Qualität der Methode sicherzustellen und gleichzeitig ihre numerische Effizienz und ihre Robustheit zu demonstrieren. Der erarbeitete Kopplungsansatz ermöglicht große Freiheiten bei der Wahl der Position der Schnittstelle zwischen SPH- und FV-Verfahren. Gleichzeitiges Ein- bzw. Ausströmen an ein und derselben Schnittstelle ist möglich, auch für zeitlich stark schwankende Strömungsfelder. Mit Hilfe von ausgewählten Validierungsfällen unterschiedlicher Komplexität wird der Nachweis der Anwendbarkeit der Methode für brennkammertypische stationäre und instationäre Strömungen geführt. Somit ist es dem Autor gelungen, wesentliche Voraussetzungen für eine vollständig gekoppelte Berechnung der Gemischaufbereitung und der Verbrennung flüssiger Brennstoffe in realen Gasturbinen- und Flugtriebwerksbrennkammern zu schaffen.

Karlsruhe, im Februar 2023

Hans-Jörg Bauer

Vorwort des Autors

Der Grundstein für die vorliegende Arbeit wurde durch meine Tätigkeit als Industriedoktorand in der Technologieabteilung für Gasturbinenverbrennungssysteme der Power Generation Division der Siemens AG (heute: Teil der Siemens Energy Global GmbH & Co. KG) gelegt. Die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit wurde von dem Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) geleistet. Das ITS betreute mich auch, als ich den Großteil des vorliegenden Werks neben meiner Vollzeitbeschäftigung als Entwicklungsingenieur bei Siemens Energy erarbeitete. Ich möchte mich herzlich bei allen Wegbegleitern bedanken, die mich dabei unterstützt haben, die vorliegende Arbeit trotz der langjährigen Doppelbelastung aus Job und Promotionsvorhaben erfolgreich abzuschließen.

Mein Dank gilt an erster Stelle dem Institutsleiter des ITS, Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer, der mir als institutsexternem Doktoranden die Möglichkeit zur Durchführung und Veröffentlichung meiner Arbeit unter Nutzung der exzellenten Infrastruktur des Instituts ermöglichte. Ich fühlte mich während meiner Aufenthalte am ITS immer willkommen und konnte jederzeit wertvolle Denkanstöße mitnehmen. Ich danke ihm außerdem für sein Interesse an meiner Arbeit sowie für die Übernahme des Hauptreferats. Ebenso bedanke ich mich bei Prof. Dr.-Ing. Matthias Teschner für die Übernahme des Korreferats sowie für die anregenden Diskussionen über meine Arbeit und die SPH-Methode am Prüfungstag.

Mein besonderer Dank geht an den Leiter der Abteilung für Brennkammerentwicklung des ITS, Dr.-Ing. Rainer Koch, für die exzellente Betreuung während meiner gesamten Zeit als Doktorand. Ich konnte jederzeit von gemeinsamen Diskussionen meiner Ergebnisse und Ideen sowie von seinen wertvollen Ratschlägen profitieren. Er half mir auch, mich – bei aller Komplexität des Themas – auf den Fokus zu konzentrieren. Ich hoffe, dass wir auch in Zukunft in Projekten rund um das Thema Gasturbine zusammenarbeiten können.

Dr.-Ing. Werner Krebs, Experte für Verbrennungssysteme bei Siemens Energy, danke ich im Besonderen dafür, mir mein Promotionsvorhaben seitens der Siemens AG ermöglicht zu haben. Es freut mich, dass wir heute zusammen bei Siemens Energy weiter an vielen interessanten Themen arbeiten. Ihm und Dr. Juan Enrique Portillo Bilbao bin ich für die Betreuung während meiner ersten Jahre als Doktorand überaus dankbar. Ich danke außerdem meinem ehemaligen Gruppenleiter Dr.-Ing. Bertram Janus und meinem Abteilungsleiter Dr.-Ing. Christoph Kortschik für die firmenseitige Unterstützung meines Promotionsvorhabens während meiner Vollzeitbeschäftigung bei Siemens Energy. Die mir zeitweise geschaffenen Freiräume waren für mich von großem Wert, um diese Arbeit erfolgreich abschließen zu können.

Während der Durchführung der Arbeit konnte ich sowohl am ITS als auch bei Siemens Energy viele Kolleginnen und Kollegen kennenlernen. Für die motivierenden Worte, das wertvolle Feedback, die frischen Denkanstöße sowie die spannenden und horizonterweiternden Diskussionen bedanke ich mich im Besonderen bei Dr.-Ing. Christian Beck, Dr.-Ing. Samuel Braun, Dr. Geoffroy Chaussonnet, Dr.-Ing. Thilo Dauch, Dr.-Ing. Stefan Dederichs, Patrick Flohr, Dr.-Ing. Matthias Hase, Arnold Herrgen, Dr.-Ing. Michael Huth, Dr.-Ing. Marc Keller, Dr.-Ing. Jürgen Meisl, Dr.-Ing. Bernd Prade, Dr.-Ing. Corina Schwitzke, Isolde Siebelist, Dr. Günther Walz, Dr.-Ing. Lars Wieth und Dr.-Ing. Benjamin Witzel.

Nicht minder wichtig als die fachliche Unterstützung waren der Rückhalt und die Geduld meiner lieben Familie und Freunde. Besonders möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, die zum einen das Korrektorat der vorliegenden Arbeit übernommen haben. Zum anderen haben sie mir durch ihre hingebungsvolle Unterstützung und ihre wertvollen Ratschläge während meiner schulischen und studentischen Laufbahn erst mein Promotionsvorhaben ermöglicht. Tausend Dank dafür, dass ihr mir stets den Rücken freigehalten habt. Mein Dank an meine Verlobte, Niyoucha, ist in gleicherweise nicht in Worte zu fassen: Bis zum Bestehen meiner Promotionsprüfung kannte sie mich nur im „Doppelpack“ mit meinem Promotionsvorhaben. Obwohl sie daher über lange Zeit viel Mut, Geduld und Kraft aufbringen musste, schaffte sie es jederzeit, für die nötige Entlastung und emotionale Unterstützung zu sorgen und mich in weniger produktiven Phasen wieder zu ermutigen. Du hast einen großartigen Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit geleistet.

Recklinghausen, im Juni 2023

Bastian Werdelmann

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	v
1 Einleitung	1
2 Wissenschaftlicher Kenntnisstand	5
2.1 Verfahren für Randbedingungen an festen Wänden	9
2.2 Verfahren für Randbedingungen an offenen Rändern	14
2.3 Verfahren für gekoppelte Randbedingungen	22
2.4 Zielsetzung	36
3 Mathematische Beschreibung der Strömung	39
3.1 Allgemeine Transportgleichung	40
3.2 Kontinuitätsgleichung	42
3.3 Impulsgleichung	43
3.4 Zustandsgleichung und Schallgeschwindigkeit	44
4 Smoothed Particle Hydrodynamics	47
4.1 Kernel-Approximation	48
4.2 Glättungsfunktion (Kernel)	50
4.3 Partikel-Approximation	51
4.4 Numerische Unzulänglichkeiten der SPH-Methode	53
4.4.1 Korrektur des Kernel-Gradienten	55
4.4.2 Dichteberechnung über die diskrete Approximation	56
4.4.3 Diffusive Terme in der Kontinuitätsgleichung	59
4.4.4 Partikelverschiebung	63
4.5 Erhaltungsgleichungen der Partikel-Approximation	67
4.6 Räumliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen	74
4.7 Zeitliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen	76
5 Entwicklung eines neuen Verfahrens für offene und gekoppelte Randbedingungen	79
5.1 Diskussion des Kopplungsansatzes	80
5.2 Zustandsbeschreibung der Randsegmente	84
5.2.1 Geometrische Beschreibung des Randsegments	85
5.2.2 Abgrenzung zwischen offenen und gekoppelten Rändern	86
5.2.3 Die NSCBC-Methode	88
5.2.4 Definition von Randbedingungen an offenen Rändern	90
5.2.5 Übertragung auf gekoppelte Ränder	92
5.2.6 Anwendung der NSCBC-Methode in der SPH-Methode	92
5.3 Zustandsbeschreibung der Geisterpartikel	94
5.3.1 Zustandsbeschreibung für offene Ränder	95
5.3.2 Übertragung auf gekoppelte Ränder	98

5.4	Massenänderung randnaher Partikel	100
5.4.1	Vorbereitungsschritt	102
5.4.2	Prädiktor-Schritt	103
5.4.3	Korrektor-Schritt	107
5.4.4	Nachbereitungsschritt	110
5.4.5	Beschreibung grundlegender Partikel-Rand-Interaktionen	111
5.4.6	Sonderfälle der Partikel-Rand-Interaktion und Identifizierungsschritt	114
5.5	Zwischenfazit und Anmerkungen zur Implementierung sowie zum Programmablauf	118
6	Analyse und Optimierung des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern	123
6.1	Beschreibung der Testfälle und Bewertung der Referenzkonfiguration	125
6.1.1	Testfall mit Impulsquellterm (Testfall A)	127
6.1.2	Testfall ohne Impulsquellterm (Testfall B)	138
6.2	Zusammenfassung der Analyse verschiedener Variationen des SPH-Verfahrens	141
6.3	Auswahl und Bewertung der optimierten Konfiguration	143
7	Anwendung des SPH-Verfahrens auf zweidimensionale Testfälle	147
7.1	Poiseuille-Strömung	147
7.1.1	Beschreibung des Testfalls	148
7.1.2	Auswertung	151
7.2	Kavitätenströmung	164
7.2.1	Beschreibung des Testfalls	165
7.2.2	Auswertung	167
7.3	Instationäre Umströmung eines Zylinders	172
7.3.1	Beschreibung des Testfalls	172
7.3.2	Auswertung	175
8	Zusammenfassung und Ausblick	185
	Literaturverzeichnis	187
	Anhang	197
A.1	Herleitung der NSCBC-Gleichung	197
A.2	Konsistenz der Kernel-Approximation im randnahen Bereich	201
A.3	Relaxation eines Gradienten am Gebietsrand	204
A.4	Massenstrombilanz des Rechengebiets	206
A.5	Analyse verschiedener Variationen des SPH-Verfahrens	211
A.5.1	Aspekte des Verfahrens für offene Randbedingungen	211
A.5.2	Korrektur des Kernel-Gradienten	217
A.5.3	Dichteberechnung über die diskrete Approximation	222
A.5.4	Dichtediffusion	227
A.5.5	Partikelverschiebung	233
A.5.6	Aspekte der Erhaltungsgleichungen	239

A.6 Anwendung nichtreflektierender Randbedingungen	245
--	-----

Symbolverzeichnis

Formelzeichen	Einheit	Beschreibung
<i>Lateinische Symbole</i>		
A	m^2	Fläche
D	m	Durchmesser
G		Komponente des Gradienten $\mathbf{G}$
H	m	Höhe
K	$1/\text{s}$	Vorfaktor der Druckrelaxation
L	m	Länge
$\mathcal{L}$		Variation der Wellenamplitude
$\dot{M}$	–	Normierter und zeitlich gemittelter Massenstrom
R		Globales kartesisches Koordinatensystem
R	–	Reflexionskoeffizient
S	m^2	Oberfläche
T	s	Physikalisches Zeitintervall
V	m^3	Volumen
$\dot{V}^{\mathcal{B}}$	m^3/s	Volumenquellterm der Partikel durch Randinteraktion
X		Komponente des Zustandsvektors $\mathbf{X}$
Y		Komponente des Zustandsvektors $\mathbf{Y}$
b_{as}	–	Wichtungsfaktor zur Bestimmung des Anteils des Randsegments s an der Massenänderung des Partikels a
b_t	–	Wichtungsfaktor bei der Interpolation von Funktionswerten innerhalb des Tetraeders t
c	m/s	Schallgeschwindigkeit
const		Konstant
d	m	Abstand
d_p	$\text{m}^3 \text{ s}/\text{kg}$	Diffusionskoeffizient des Fluiddrucks p
d_ρ	m^2/s	Diffusionskoeffizient der Fluidichte ρ
d_ψ	m^2/s	Diffusionskoeffizient des Skalarfelds ψ
$d\Psi$	m^2/s	Diffusionskoeffizient des Vektorfelds Ψ
dm	kg	Totales Differential der Masse m
ds	m^2	Infinitesimal kleines Oberflächenelement
dv	m^3	Infinitesimal kleines Volumenelement

$d_{\delta w}$	$1/\text{m}^3$	Totales Differential des Kernels durch Partikelverschiebung
f	–	Funktion zur Berechnung des Kernels
f'	–	Ableitung der Funktion f nach dem dimensionslosen Abstand q
f	$1/\text{s}$	Frequenz
f_0	$1/\text{s}$	Minimale Frequenz
f_c	$1/\text{s}$	Grenzfrequenz passierender Wellen
h	m	Glättungslänge
l	m	Länge
m	kg	Masse
$\dot{m}$	kg/s	Massenquellterm
$\dot{m}$	kg/s	Massenstrom
$\dot{m}_{f,c}$	kg/s	Konvektiver Massenstrom der Randflächen
$\dot{m}_p$	kg/s	Partikelmassenstrom
$\dot{m}_{p,c}$	kg/s	Konvektiver Massenstrom der Partikel
$\dot{m}_{p,d}$	kg/s	Partikelmassenstrom durch Dichtediffusion
$\dot{m}_{p,dc}$	kg/s	Partikelmassenstrom durch Dichtekorrektur
$\dot{m}_{s,c}$	kg/s	Konvektiver Massenstrom der Randsegmente
$\dot{m}^{\mathcal{B}}$	kg/s	Massenquellterm der Partikel durch Randinteraktion
n	–	Anzahl räumlicher Dimensionen
p	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Fluiddruck
p_{∞}	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Zielwert des Fluiddrucks am Rand
$p_{a,0}$	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Hintergrunddruck des Partikels a
p_{ab}	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Kombinierter Pseudodruck der Partikel a und b
q	–	Mit Glättungslänge h normierter Abstand r
q_m	–	Mit Glättungslänge h normierter Radius r_m
r	m	Betrag des Ortsvektors $\mathbf{r}$
r	m	Abstand
r	m	Radius
r_m	m	Radius des Einflussgebiets des Kernels
s	$\text{m}^2/(\text{s}^2 \text{ K})$	Spezifische Entropie
t	s	Physikalische Zeit
u	m/s	Betrag der Fluidgeschwindigkeit
u	m/s	Komponente der Fluidgeschwindigkeit
$\bar{u}$	m/s	Räumlich gemittelte Komponente u der Fluidgeschwindigkeit
v		Zeitpunkt

w	$1/\text{m}^3$	Kernel
$\tilde{w}$	$1/\text{m}^3$	Korrigierter Kernel (Shepard-Filter)
x, y	m	Kartesische Koordinaten des globalen Koordinatensystems R
x_1, x_2, x_3	m	Kartesische Koordinaten

Vektoren aus lateinischen Symbolen

$\mathbf{F}_\phi$		Flussvektor des Skalars ϕ
$\mathbf{F}_c$		Konvektiver Teil des Flussvektors
$\mathbf{F}_d$		Diffusiver Teil des Flussvektors
$\mathbf{G}$		Gradient der Komponente X
$\hat{\mathbf{G}}$		Gradient zur linearen Extrapolation
$\mathcal{L}$		Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}$
$\mathbf{S}$	kg m/s^2	Impulsquellterm
$\mathbf{S}^*$	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{s}^2)$	Anteil des Impulsquellterms $\mathbf{S}$
$\mathbf{X}$		Zustandsvektor primitiver Variablen
$\mathbf{Y}$		Zustandsvektor charakteristischer Variablen
$\mathbf{Z}$		Zustandsvektor konservativer Variablen
$\hat{\mathbf{a}}^S$	m/s^2	Partikelbeschleunigung durch Partikelverschiebung
$\mathbf{e}$	–	Basisvektor
$\mathbf{l}$		Linker Eigenvektor
$\mathbf{n}$	–	Normaleneinheitsvektor
$\mathbf{u}$	m/s	Fluidgeschwindigkeit
$\hat{\mathbf{u}}$	m/s	Partikelgeschwindigkeit
$\hat{\mathbf{u}}$	m/s	Transportgeschwindigkeit
$\mathbf{r}$	m	Abstandsvektor
$\mathbf{r}$	m	Ortsvektor
$\mathbf{r}$		Rechter Eigenvektor
$\tilde{\mathbf{r}}$	m	Spezieller Ortsvektor
$\mathbf{r}'$	m	Spezieller Ortsvektor
$\bar{\mathbf{r}}_a$	m	Mittlerer Partikelabstandsvektor am Partikel a

Matrizen aus lateinischen Symbolen

$\mathbf{A}$	Jacobi-Matrix
$\mathbf{D}'_\xi$	Sonstige Matrix
$\tilde{\mathbf{D}}'_\xi$	Teil der Matrix $\mathbf{D}'_\xi$

$\mathbf{D}'_\eta$		Sonstige Matrix
$\tilde{\mathbf{D}}'_{\eta,l}, \tilde{\mathbf{D}}'_{\eta,r}$		Teile der Matrix $\mathbf{D}'_\eta$
$\mathbf{F}_\Phi$		Matrix der Flussvektoren des Vektors Φ
$\mathbf{F}_Z$		Matrix der Flussvektoren des Vektors Z
$\mathbf{F}_c$		Konvektiver Teil der Matrix der Flussvektoren
$\mathbf{F}_d$		Diffusiver Teil der Matrix der Flussvektoren
$\mathbf{I}$	–	Einheitsmatrix
$\mathbf{L}$	–	Korrekturmatrix des Kernel-Gradienten
$\mathbf{L}$		Spaltenvektor der linken Eigenvektoren $\mathbf{l}$
$\tilde{\mathbf{L}}$		Teil der Matrix $\mathbf{L}$
$\mathbf{R}$		Zeilenvektor der rechten Eigenvektoren $\mathbf{r}$
$\tilde{\mathbf{R}}$		Teil der Matrix $\mathbf{R}$
$\mathfrak{R}$	–	Rotationsmatrix
$\mathbf{T}$	–	Transformationsmatrix

Griechische Symbole

Δ_a	m	Ausdehnung des Partikels a in Normalenrichtung des Rands
Δm	kg	Differenz zwischen Masseninkrementen
$\Delta \dot{m}$	kg/s	Massenstromdifferenz
$\Delta \dot{m}_c$	kg/s	Konvektive Massenstromdifferenz
Δp	kg/(m s ²)	Fluiddruckdifferenz
Δt	s	Zeitlicher Versatz
Ω		Gebiet
α_n	–	Vorfaktor zur Berechnung des Kernels
γ	–	Konstante der Zustandsgleichung
δ	–	Dirac-Funktion
δm	kg	Masseninkrement
δt	s	Zeitschrittweite
ε	–	Normalisierter Fehler
η_1, η_2	m	Kartesische Koordinaten des lokalen Koordinatensystems R' (tangential zum Rand)
λ	m/s	Ausbreitungsgeschwindigkeit bzw. Eigenwert
μ	kg/(m s)	Dynamische Viskosität
ξ	m	Kartesische Koordinate des lokalen Koordinatensystems R' (orthogonal zum Rand)

ξ_1, ξ_2	–	Regelparameter bei der Partikelverschiebung
ρ	kg/m^3	Fluidichte
$\bar{\rho}$	kg/m^3	Fluidichte über diskrete Approximation
σ	–	Regelparameter für die Reflexion eines Rands
ϕ		Allgemeine Transportgröße
ϕ		Strömungsvariable
$\bar{\phi}$		Zeitlicher Mittelwert der Variable ϕ
ψ		Beliebiges Skalarfeld
ω	$1/\text{s}$	Kreisfrequenz
ω	$1/\text{s}$	Wirbelstärke

Vektoren aus griechischen Symbolen

Φ	Strömungsvariable
Ψ	Beliebiges Vektorfeld

$\delta \mathbf{r}$	m	Verschiebungsvektor
$\delta \hat{\mathbf{u}}$	m/s	Differenz aus Partikel- und Fluidgeschwindigkeit
$\delta \hat{\mathbf{u}}^{\mathcal{B}}$	m/s	Anteil der Differenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ durch Randinteraktion
$\delta \hat{\mathbf{u}}^{\mathcal{S}}$	m/s	Anteil der Differenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ durch Partikelverschiebung

Matrizen/Tensoren aus griechischen Symbolen

Λ	m/s	Diagonalmatrix der Eigenwerte λ
$\tilde{\Lambda}$	m/s	Teil der Matrix Λ
σ	$\text{kg}/(\text{m s}^2)$	Spannungstensor

Sonstige Symbole

$\mathbb{R}^n$	n -dimensionaler Vektorraum
$\mathbb{R}^{n \times n}$	$(n \times n)$ -dimensionaler Matrizenraum
$\partial \Omega$	Gebietsrand
$\mathcal{O}$	Fehlerterm

Vektoren aus sonstigen Symbolen

$\mathbf{0}$		Nullvektor
∇	1/m	Nabla-Operator im Koordinatensystem R
∇'	1/m	Nabla-Operator im Koordinatensystem R'

$\tilde{\nabla}\tilde{w}$	$1/\text{m}^4$	Korrigierter Kernel-Gradient
---------------------------	----------------	------------------------------

Matrizen aus sonstigen Symbolen

$\mathbf{0}$	Nullmatrix
--------------	------------

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	–	Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl, $\text{CFL} = \frac{(u+c)\delta t}{h}$
Eu	–	Euler-Zahl, $\text{Eu} = \frac{\Delta p}{\rho u^2}$
Ma	–	Mach-Zahl, $\text{Ma} = \frac{u}{c}$
Re	–	Reynolds-Zahl, $\text{Re} = \frac{\rho u D}{\eta}$
St	–	Strouhal-Zahl, $\text{St} = \frac{f D}{u}$

Mengensymbole

$\emptyset$	Nullmenge
C	Partikel des Rechengebiets
C	Zellen
$\mathcal{D}$	Statische Stützstellen
$\mathcal{G}$	Geisterpartikel
$\mathcal{K}$	Randsegmente
$\mathcal{N}$	Zeitpunkte
$\mathcal{P}$	Partikel des Rechengebiets
$\mathcal{P}$	Für die Massenänderung identifizierte Partikel
$\mathcal{P}_a$	Nachbarpartikel des Partikels a
$\mathcal{P}_t$	Zelleckpunkte des Tetraeders t
$\mathcal{R}$	Ränder
$\mathcal{Z}$	Rechengebiete

Tiefgestellte Indizes für Stützstellen

a	Zentralpartikel
b	Nachbarpartikel
c	Zelle
g	Geisterpartikel
i	Beliebige Stützstelle
k	Randsegment
p	Eckpunkt (Verbindungspunkt zwischen Zellen)
p	Partikel

s	Randsegment
t	Tetraeder
$ab, as, ba, bs, gk, gs, pc$	Kombinierter Term zweier Stützstellen
<i>Sonstige tiefgestellte Indizes</i>	
$\mathcal{A}$	Analytische Lösung
A, B	Spezielle Position im Rechengebiet
A, B	Rechengebiet
AB	Kopplung der Rechengebiete A und B
D	Auf Zylinder bezogen
ACC	Beschleunigungskriterium
CFL	CFL-Kriterium
FV	FV-Rechengebiet
SPH	SPH-Rechengebiet
VIS	Viskositätskriterium
c	Korrektur
c	Nichtdiffusiv, konvektiv
d	Diffusiv, Dichtediffusion
dc	Dichtekorrektur
g	Geistergebiet
i	Laufindex der Komponente des Zustandsvektors
i	Laufindex des Rands
j, k	Laufindex des Rechengebiets
j, k, l	Beliebiger Laufindex
k	Laufindex der Komponente des lokalen Koordinatensystems R'
l	Laufindex der tangentialen Komponente des lokalen Koordinatensystems R'
l	Linker Rand
max	Maximalwert
n	Anzahl räumlicher Dimensionen gleich n
r	Rechter Rand
ref	Referenzwert

s	Randsegmente
x, y, ξ, η	Koordinatenrichtung
$\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}', \mathbf{r}_a$	Bezogen auf Ortsvektor
δ	Partikelverschiebung
$\cap$	Überlappung
$+$	Normiert
0	Anfangswert
0	Referenzwert
$\partial\Omega$	Gebietsrand
Ω	Gebiet
<i>Hochgestellte Indizes</i>	
$*, **, ***$	Zwischenschritte
$'$	Lokales Koordinatensystem R'
$'$	Variable am Ortsvektor $\mathbf{r}'$
$\mathcal{B}$	Algorithmus zur Massenänderung randnaher Partikel
$\mathcal{D}$	Dichtediffusionsansatz
$\mathcal{S}$	Partikelverschiebungsansatz
ν	Zeitpunkt
<i>Operatoren</i>	
$ \phi $	Betrag des Skalars ϕ
$\mathcal{F}(\phi)$	Fourier-Transformation des Skalars ϕ
$A \subset B$	A ist echte Teilmenge von B
$A \subseteq B$	A ist Teilmenge von B
$A \cap B$	Durchschnitt der Mengen A und B
$A \cup B$	Vereinigung der Mengen A und B
$ A $	Mächtigkeit der Menge A
Φ^T	Transponierung des Vektors / der Matrix Φ

$\ \Phi\ $	2-Norm bzw. Betrag des Vektors Φ
$\Phi_1 \cdot \Phi_2$	Inneres Produkt der Vektoren / Matrizen Φ_1 und Φ_2
$\Phi_1 \otimes \Phi_2$	Dyadisches Produkt der Vektoren Φ_1 und Φ_2
$\nabla \cdot \Phi$	Divergenz des Vektors / der Matrix Φ
$\nabla \phi$	Gradient des Skalars ϕ
$(\nabla \otimes \Phi)^\top$	Gradient des Vektors Φ
$\langle \phi \rangle, \langle \Phi \rangle$	Kernel-Approximation des Skalars ϕ bzw. des Vektors / der Matrix Φ
$[\phi], [\Phi]$	Partikel-Approximation des Skalars ϕ bzw. des Vektors / der Matrix Φ
$\text{diag}(\dots)$	Diagonalmatrix mit den Elementen der Hauptdiagonalen in der Klammer
$\max(\dots),$ $\min(\dots)$	Maximalwert bzw. Minimalwert der Elemente in der Klammer
$\max_a, \min_a$	Maximalwert bzw. Minimalwert über der Menge der Elemente a
$\mathbf{err}_i(\phi)$	Normierte Abweichung des Skalars ϕ an der Stützstelle i
$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(\phi)$	Wurzel über der Quadratsumme der Operatoren $\mathbf{err}_i(\phi)$ für die Stützstellen $i \in \mathcal{D}$
$\mathbf{err}_{t,i}(\phi)$	Normierte Wurzel der Quadratsumme instantaner Abweichungen des Skalars ϕ vom Mittelwert $\bar{\phi}$ an der Stützstelle i
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(\phi)$	Mittelung der Operatoren $\mathbf{err}_{t,i}(\phi)$ für die Stützstellen $i \in \mathcal{D}$
<i>Abkürzungen</i>	
ALE	Arbitrary Lagrangian Eulerian
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DDM	Domain Decomposition Methods
DNS	Direkte Numerische Simulation
Embedded-SPH	Eingebettete SPH-Simulation
FV	Finite Volumen
FVM	Finite Volume Method

HLL	Harten-Lax-van Leer
ISPH	Incompressible-SPH
LES	Large Eddy Simulation
LODI	Local One Dimensional Inviscid
LS	Level Set
MPI	Message Passing Interface
MUSCL	Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws
NSCBC	Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions
OG	Overlapping Grid
OpenFOAM	Open Field Operation And Manipulation
PANORMUS	PArallel Numerical Open-souRce Model for Unsteady flow Simulations
PANORMUS-FVM	FV-Methode in der PANORMUS-Simulationssoftware
PANORMUS-SPH	SPH-Methode in der PANORMUS-Simulationssoftware
PG	Patched Grid
PIMPLE	Kombination der PISO- und PIMPLE-Verfahren
PISO	Pressure-Implicit with Splitting of Operators
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
SPH	Smoothed Particle Hydrodynamics
SPH-ALE	ALE-Ansatz im SPH-Verfahren
TVD	Total Variation Diminishing
VoF	Volume of Fluid
Voronoi-FVM	Voronoi-Zellen im FV-Verfahren
Voronoi-SPH	Voronoi-Zellen im SPH-Verfahren
WCSPH	Weakly Compressible-SPH
XSPH	Korrektur im SPH-Verfahren
ZG	Zonal Grid
 sim_fvm	 Simulation mit FV-Methode
sim_mod	Simulation mit finaler Konfiguration der SPH-Methode
sim_ref	Simulation mit Referenzkonfiguration der SPH-Methode
 δ -SPH	 Stabiles SPH-Verfahren durch künstliche diffusive Terme

1 Einleitung

Gasturbinen werden heutzutage zur Stromerzeugung sowie als Antriebe in der Luftfahrt und verschiedenen Industriebereichen eingesetzt. Auch zukünftig wird der Gasturbine eine hohe Bedeutung beigemessen. Unter anderem wird sie im Zuge der Energiewende zum einen als Übergangstechnologie bis zum Erreichen einer klimaneutralen Stromerzeugung benötigt. Zum anderen müssen auch zukünftig wetterunabhängige Stromquellen als Alternative zu den erneuerbaren Energien vorgehalten werden. Insbesondere im Zusammenhang mit nachhaltig produziertem Wasserstoff rückt die Gasturbine immer mehr in den Fokus der Klimapolitik. Zudem wird die Gasturbine als Antriebstechnologie in der Luftfahrt auf unbestimmte Zeit konkurrenzlos bleiben.

Aus klimapolitischen und wirtschaftlichen Gründen ist die Verbesserung des Wirkungsgrads eines der bedeutendsten Ziele bei der Entwicklung von Gasturbinen. Eine wesentliche Erhöhung des thermischen Wirkungsgrads kann durch eine Anhebung des Gesamtdruckverhältnisses und der Turbineneintrittstemperatur realisiert werden. Hierbei stellen unter anderem die strengen Auflagen zur Einhaltung von Grenzwerten der Stickoxidemissionen eine enorme Herausforderung dar. Die Bildung der Stickoxide wird besonders durch lokale Temperaturspitzen bei der Verbrennung begünstigt. Insbesondere in der Luftfahrt stellt eine Abgasnachbehandlung keine Option dar. Somit kann die Einhaltung der Stickoxidemissionsgrenzwerte einzig durch eine Optimierung der Brennstoff/Luft-Gemischbildung realisiert werden.

Sowohl in Strahltriebwerken als auch zum Teil in stationären Gasturbinen werden Flüssigbrennstoffe eingesetzt.¹ Bei der Anwendung von Flüssigbrennstoffen sind der Gemischbildung äußerst komplexe physikalische Prozesse überlagert. In diesem Zusammenhang ist insbesondere die Primärzerstäubung des Brennstoffs zu nennen. Als Beispiel eines luftgestützten Zerstäubers ist die Eindüsung von Flüssigstrahlen in eine Luftquerströmung zu nennen. Dieses Prinzip ist anhand eines Ausschnitts einer Vormischpassage eines Verbrennungssystems in Abb. 1.1 skizziert. Der Brennstoff wird über eine Brennstofflanze in die Vormischpassage geführt und an mehreren Stellen quer zur Luftströmung eingedüst. Durch die auf den Strahl einwirkenden aerodynamischen Kräfte zerfällt dieser in Ligamente und winzige Tröpfchen. Durch eine verstärkte Zerstäubung wird die Vorverdunstung und damit die Brennstoff/Luft-Gemischbildung verbessert. Eine Optimierung eines solchen Zerstäubers ist daher ausschlaggebend, um die strengen Emissionsziele zu erreichen. Durch ständige Verschärfungen dieser Ziele werden zukünftig immer genauere Auslegungsmethoden sowie ein tieferes Verständnis über den Zerstäubungsprozess benötigt.

Bei der Entwicklung von Brennstoffzerstäubern werden zum heutigen Stand vornehmlich semiempirische Korrelationen und Berechnungsansätze sowie experimentelle Methoden angewendet. Die Korrelationen und Berechnungsansätze sind insbesondere für die Primärzerstäubung ungenau und nur für eingeschränkte Betriebs- und Geometriebereiche gültig. Zerstäubungsexperimente sind mit einem signifikanten Zeit- und Kostenaufwand verbunden. Zudem ist die Durchführung der Experimente bei den in der Gasturbine vorherrschenden Drücken und Temperaturen nahezu unmöglich. Darüber hinaus erfordert die optische Zugänglichkeit des Zerstäubungsbereichs meist eine beträchtliche Vereinfachung der Geometrie des technischen Systems.

¹In stationären Gasturbinen werden Flüssigbrennstoffe meist als Ersatzbrennstoff vorgehalten.

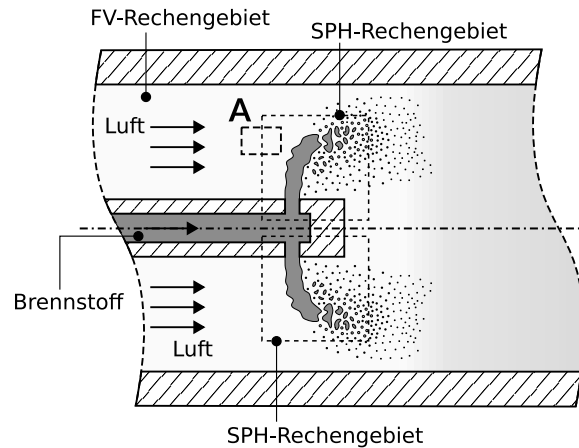


Abbildung 1.1: Ausschnitt einer Vormischpassage, in der Brennstoffstrahlen durch die Einwirkung einer Luftquerströmung in winzige Tröpfchen zerstäubt werden

Detaillierte Messungen im Düsennahbereich sind außerdem aufgrund der hohen Tröpfchendichte nicht möglich. Aus den genannten Gründen sind die durch Experimente gewonnenen Erkenntnisse sowie deren Übertragbarkeit auf technische Systeme somit eingeschränkt. Die tatsächliche Leistungsfähigkeit der Zerstäuber wird daher erst spät im Entwicklungsprozess festgestellt. Die Umsetzung potenziell notwendiger Modifikationen der Zerstäuber wird hierdurch erschwert. Die auf Experimenten basierende Auslegung der Zerstäuber wird daher zukünftig zum Erreichen der strengen Emissionsziele nicht mehr ausreichen.

Die Direkte Numerische Simulation (DNS) kann hier Abhilfe leisten. Durch die direkte räumliche Auflösung der Phasengrenzen zwischen der Luft und dem Flüssigbrennstoff ist dieser Simulationsansatz allgemeingültig und genau. Darüber hinaus können die Unzulänglichkeiten der experimentellen Auslegungsmethodik vermieden werden: Prinzipiell können mit der DNS beliebige Zerstäubergeometrien bei realistischen thermodynamischen Randbedingungen und in einer enormen Detailtiefe untersucht werden. Aufgrund enormer Anforderungen an die Rechenkapazitäten zur Durchführung dieser Simulationen wird die DNS bei der Entwicklung von Flüssigbrennstoffsystemen heutzutage allerdings noch kaum angewendet. Im Hinblick auf eine stetig anwachsende Verfügbarkeit von Rechenressourcen wird eine breitere Anwendbarkeit der direkten Simulation des Zerstäubungsprozesses aber immer greifbarer. Es ist demnach erstrebenswert, die Genauigkeit, Effizienz und Skalierbarkeit dieser Methoden weiter zu verbessern.

Im Bereich der Zerstäubungssimulation sind die gitterbasierten Methoden Volume of Fluid (VoF) nach Hirt und Nichols (1981) und Level Set (LS) nach Osher und Sethian (1988) etabliert.² Jedoch sind gitterbasierte Methoden zur Berechnung von Zerstäubungsvorgängen per se nicht optimal geeignet. Als wesentlicher Nachteil ist die Grenzflächendiffusion zu nennen. Aufgrund dieses Problems müssen die Phasengrenzflächen zu jedem Zeitschritt durch aufwändige und fehleranfällige Verfahren rekonstruiert werden. Bei der partikelbasierten Smoothed-Particle-Hydrodynamics (SPH)-Methode (Gingold und Monaghan, 1977; Lucy, 1977) tritt dieses

²Anwendungen der Methoden auf die Simulation der Primärzerstäubung können z. B. in den Arbeiten von Ménard et al. (2007), Herrmann (2010) und Desjardins et al. (2013) gefunden werden.

Problem nicht auf, da die Phasengrenzen auf eine natürliche Weise durch die Bewegung von Partikeln advektiert werden. Höfler (2013) legt dar, dass die SPH-Methode bei der Simulation der Primärzerstäubung wesentliche Vorteile bietet. Zudem zeigt Braun (2018), dass die SPH-Methode hinsichtlich der Rechenzeit effizienter und skalierbarer ist als die bisher genutzten Methoden. Demnach sollte die SPH-Methode bei der Berechnung der Primärzerstäubung zukünftig angewendet werden.

Dennoch ist die Rechenzeit bei der direkten Simulation der Primärzerstäubung immens. Aus diesem Grund konnten die Rechengebiete auch bei der SPH-Simulation bisher nur auf den Bereich der Primärzerstäubung begrenzt werden. Eine isolierte Betrachtung des Primärzerstäubungsbereichs ist allerdings nicht zielführend. Technisch relevante und mit der Primärzerstäubung gekoppelte Strömungsprozesse bleiben dadurch unberücksichtigt. Hierzu zählen z. B. die Strömungsführung innerhalb des Verbrennungssystems, die Dynamik kleiner Tröpfchen und die Verbrennung. Darüber hinaus ist das Strömungsfeld unmittelbar im räumlichen Bereich der Primärzerstäubung hochgradig instationär und komplex. Die Aufprägung realistischer Randbedingungen an einem isolierten Primärzerstäubungsgebiet erweist sich daher als schwierig, wenn nicht als unmöglich. Aus diesen Gründen ist es wichtig, das Rechengebiet über die Grenzen des Zerstäubungsgebiets hinaus zu erweitern. Zur Simulation der Strömung in Verbrennungssystemen außerhalb des Primärzerstäubungsgebiets erweist sich die Finite-Volumen(FV)-Methode als besonders geeignet. Effiziente numerische Ansätze zur Modellierung komplexer Strömungsprozesse wurden über Jahrzehnte für die FV-Methode entwickelt. Hierzu zählen unter anderem die Turbulenzmodellierung mit der Large Eddy Simulation (LES), der statistische Euler-Lagrange-Ansatz zur Modellierung der Dynamik kleiner Tröpfchen, Verbrennungsmodelle sowie adaptive und flexible Gitterverfeinerungsmethoden. Eine Implementierung dieser Ansätze in der SPH-Methode erscheint hingegen als nicht sinnvoll. Insbesondere das Fehlen geeigneter Ansätze zur Anpassung der lokalen Partikeldichte verbietet die Anwendung der SPH-Methode außerhalb des Primärzerstäubungsbereichs.³ Demnach muss die FV-Methode bei der Berechnung der (quasi)einphasigen Strömung außerhalb des Primärzerstäubungsbereichs angewendet werden.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass genaue und skalierbare Simulationsmethoden verstärkt im Entwicklungsprozess von Flüssigbrennstoffsystemen angewendet werden müssen, um zukünftig die strengen Ziele bei der Entwicklung von Verbrennungssystemen zu erfüllen. Eine weitere Verbesserung dieser Simulationsmethoden ist hierfür notwendig. Die Vor- und Nachteile der SPH- und der FV-Methode bei der Simulation von Verbrennungssystemen können eindeutig abgegrenzt werden. Die SPH-Methode ist für den Bereich der Primärzerstäubung am besten geeignet. Zur Simulation der Strömung außerhalb dieses Bereichs ist die FV-Methode besonders vorteilhaft. Folglich ist eine hybride Methode erstrebenswert, bei der die Vorteile beider Verfahren gezielt eingesetzt werden. In Abb. 1.1 ist ein solcher hybrider Ansatz an dem Beispiel der Vormischpassage veranschaulicht. Demnach können mehrere SPH-Rechengebiete (die gestrichelten Bereiche in Abb. 1.1) zur Simulation der Primärzerstäubung definiert werden.

³Die Flexibilität bei der lokalen Anpassung der Partikelabstände ist bei bekannten Verfahren in der SPH-Methode (Barcarolo et al., 2014; Chiron et al., 2018b; Ulrich, 2013; Vacondio, 2010) weitaus schlechter als bei gitterbasierten Verfahren. Z. B. erscheint im Moment die kontinuierliche Verfeinerung von Strömungsgrenzschichten entlang der Normalenrichtung von Wänden als unmöglich. Darüber hinaus wurden diese Methoden bis heute nicht im Bereich der Flüssigbrennstoffzerstäubung angewendet.

Diese Bereiche sind in ein äußeres Rechengebiet eingebettet, das mit der FV-Methode berechnet wird. Dieser Ansatz wird in dieser Arbeit als Embedded-SPH-Ansatz bezeichnet. Er könnte zukünftig die Anwendung genauer und skalierbarer Simulationen im Entwicklungsprozess von Flüssigbrennstoffsystemen ermöglichen.

Die Kernaufgabe bei der Entwicklung eines Embedded-SPH-Verfahrens ist die Definition von Randbedingungen zur Kopplung der beiden numerischen Verfahren. Das Ziel dieser Arbeit ist, diese Randbedingungen zu entwickeln und zu validieren. Eine elementare und gleichzeitig anspruchsvolle Anforderung an die Randbedingungen ist deren Anwendbarkeit auf beliebig komplexe Strömungsfelder. Zudem wird die Aufprägung dieser Randbedingungen insbesondere durch die grundlegenden Unterschiede zwischen der partikelbasierten SPH-Methode und der gitterbasierten FV-Methode erschwert. Darüber hinaus ist ein wesentlicher Aspekt bei dieser Entwicklung, dass in beiden numerischen Verfahren jeweils einheitliche Ansätze zum Aufprägen von offenen und gekoppelten Randbedingungen genutzt werden. Folglich sind bestehende Ansätze der FV-Methode zum Aufprägen offener Randbedingungen zu verwenden. Der Kern dieser Arbeit konzentriert sich somit auf die Entwicklung offener und gekoppelter Randbedingungen für die noch junge SPH-Methode. Der in dieser Arbeit entwickelte Ansatz soll als Grundlage für zukünftige Arbeiten dienen, in denen der Fokus auf die Anwendung der Embedded-SPH-Methode in technisch relevanten Simulationen von Verbrennungssystemen gelegt wird.

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: In Kapitel 2 werden zunächst die relevanten Merkmale eines Embedded-SPH-Verfahrens eingegrenzt. Nachfolgend wird auf den wissenschaftlichen Kenntnisstand hinsichtlich der Randbedingungen in der SPH-Methode und der Kopplung der SPH- und der FV-Methode eingegangen. Darauf basierend werden die Zielsetzung und die Vorgehensweise der vorliegenden Arbeit formuliert. In Kapitel 3 werden in Kürze die Gleichungen eingeführt, mit denen die für diese Arbeit relevanten Strömungen beschrieben werden können. In Kapitel 4 wird neben den Grundlagen der SPH-Methode außerdem auf die für diese Arbeit relevanten „numerischen“ Unzulänglichkeiten der SPH-Methode eingegangen. Anschließend wird eine geeignete Formulierung der Erhaltungsgleichungen diskutiert, deren räumliche und zeitliche Diskretisierung daran anknüpfend dargelegt wird. In Kapitel 5 wird das Verfahren für offene und gekoppelte Randbedingungen entwickelt. Zunächst wird der grundsätzliche Ansatz skizziert. Nachfolgend werden die für diesen Ansatz benötigten Verfahren detailliert dargestellt. In Kapitel 6 wird das SPH-Verfahren anhand von eindimensionalen Testfällen mit offenen Randbedingungen untersucht. Das Ziel dieser Untersuchung wird sein, unterschiedliche Ansätze mittels grundlegender Kriterien zu bewerten und ein optimales SPH-Verfahren auszuwählen. In Kapitel 7 wird das ausgewählte SPH-Verfahren an zweidimensionalen akademischen Testfällen sowohl mit offenen als auch gekoppelten Randbedingungen appliziert. Mit diesen Testfällen soll insbesondere demonstriert werden, dass das Verfahren für komplexe Strömungsarten am Kopplungsrand, wie Rückströmungen und instationäre Strömungen, geeignet ist. In Kapitel 8 folgt schließlich eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit und ein Ausblick auf zukünftige Arbeiten.

2 Wissenschaftlicher Kenntnisstand

Um zukünftig Verbesserungen des Wirkungsgrads von Gasturbinen unter Einhaltung strenger Emissionsgrenzwerte zu realisieren, muss die Direkte Numerische Simulation (DNS) des Zerstäubungsvorgangs stärker in den Entwicklungsprozess des Flüssigbrennstoffsystems eingebunden werden. Die DNS eines isolierten Zerstäubungsgebiets ist hierbei nicht ausreichend, da Kopplungseffekte zwischen der Primärzerstäubung und der umgebenden Strömung einschließlich der Verbrennung unberücksichtigt bleiben. Außerdem ist die Definition realistischer Randbedingungen an einem isolierten Zerstäubungsgebiet aufgrund der Komplexität des Strömungsfelds nahezu unmöglich. Daher muss die DNS der Primärzerstäubung in bestehende Ansätze zur Simulation der Brennkammer integriert werden.

Die partikelbasierte Smoothed-Particle-Hydrodynamics (SPH)-Methode (Gingold und Monaghan, 1977; Lucy, 1977) weist bei der DNS der Primärzerstäubung deutliche Vorteile gegenüber der gitterbasierten Finite-Volumen (FV)-Methode⁴ auf. Zum einen besteht das Problem der Grenzflächendiffusion nicht (Höfler, 2013). Bei der SPH-Methode müssen daher keine aufwendigen und fehleranfälligen Ansätze zur Rekonstruktion der Phasengrenzen angewendet werden. Zum anderen zeigt Braun (2018), dass bei der Anwendung des Weakly-Compressible-SPH (WCSPH)-Ansatzes (Monaghan, 1994) mit explizitem Zeitschrittverfahren eine bessere Skalierbarkeit der Simulationen hinsichtlich der Rechenleistung als bei der FV-Methode besteht. Im Gegensatz zu dem Incompressible-SPH (ISPH)-Ansatz (Cummins und Rudman, 1999) ist bei dem WCSPH-Ansatz keine Lösung eines linearen Gleichungssystems und somit keine Invertierung einer Koeffizientenmatrix notwendig, die insbesondere bei einer großen Partikelanzahl rechenaufwendig ist. Es sollte daher angestrebt werden, bei der DNS des Zerstäubungsvorgangs einen WCSPH-Ansatz mit explizitem Zeitschrittverfahren zu verwenden. Bei der Berechnung der Strömung stromauf und stromab des Zerstäubungsgebiets ist die FV-Methode als Computational-Fluid-Dynamics (CFD)-Ansatz allerdings deutlich effizienter als die SPH-Methode. Außerdem existieren für die FV-Methode bereits alle notwendigen Modellansätze (z. B. Turbulenz- und Verbrennungsmodelle), die zur Simulation von Verbrennungssystemen benötigt werden, sowie flexible und adaptive Methoden zur lokalen Gitterverfeinerung. Aus diesen Gründen soll die FV-Methode außerhalb des Zerstäubungsgebiets angewendet werden. Um zukünftig effiziente Simulationen von Verbrennungssystemen unter Einbeziehung der DNS der Primärzerstäubung zu realisieren, bedarf es daher eines hybriden Ansatzes, bei dem SPH-Rechengebiete (zur Simulation der Primärzerstäubung) in FV-Rechengebiete (zur Simulation der umgebenden Strömung) eingebettet werden können. In dieser Arbeit wird ein Verfahren zur Kopplung der WCSPH- und der FV-Methode entwickelt, um diese Simulationen zukünftig zu ermöglichen.⁵

Diese Kopplung ist problematisch, da die SPH- und die FV-Methode grundsätzlich verschieden sind. In Abb. 2.1 sind mögliche Stromlinien an einem kleinen Ausschnitt um einen Kopplungsrand zwischen dem SPH- und dem FV-Rechengebiet (vgl. Bereich A in Abb. 1.1) dargestellt. Die Volumenelemente bei der FV-Methode sind als statische Zellen definiert, während die Partikel

⁴Die FV-Methode wird unter anderem von Ferziger und Perić (2002), LeVeque (2002) und Patankar (1980) beschrieben.

⁵Im Folgenden wird, wenn es nicht explizit anders erläutert wird, der WCSPH-Ansatz unter dem Begriff SPH-Ansatz verstanden.

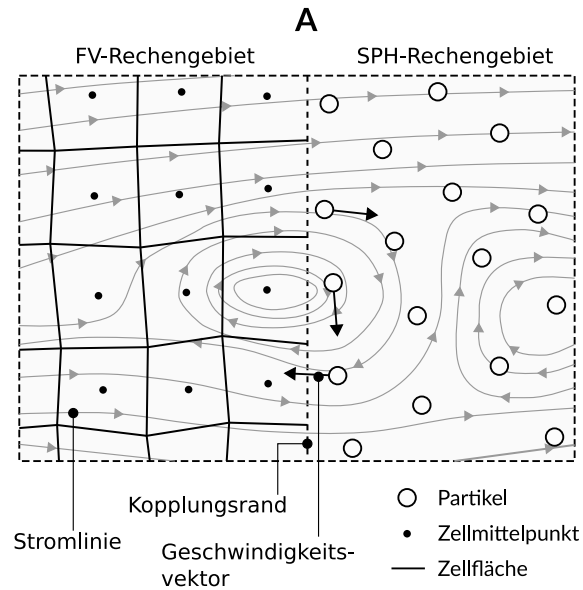


Abbildung 2.1: Diskretisierung eines möglichen Strömungsfelds an dem Kopplungsrand der Rechengebiete einer Embedded-SPH-Simulation

bei der SPH-Methode mit der Strömung advektiert werden. Außerdem sind die Ansätze zur Diskretisierung der räumlichen Ableitungen in den Erhaltungsgleichungen bei den beiden Methoden grundverschieden. Bei der FV-Methode besteht eine geometrische Topologie zwischen den Zellen. Auf Basis dieser Topologie ergeben sich lediglich zwischen direkt benachbarten Zellen Interaktionsterme bei der Diskretisierung räumlicher Ableitungen. Bei der SPH-Methode hingegen gibt es diese Topologie nicht. Die Interaktionsterme werden stattdessen über eine Glättungsfunktion, die auch Kernel genannt wird, realisiert. Das Einflussgebiet dieser Funktion umfasst weitaus mehr benachbarte Volumenelemente als bei der FV-Methode. Darüber hinaus sind die Diskretisierungsabstände in den gekoppelten Rechengebieten nicht zwingend identisch.

Außerdem müssen bei der Anwendung numerischer Methoden in der Strömungsmechanik unter anderem die nachfolgenden Eigenschaften beachtet werden: Hierzu zählt zum einen die Erhaltung konservativer Strömungsgrößen (insbesondere der Masse). Zum anderen muss das numerische Verfahren stabil sein. Es dürfen keine signifikanten unphysikalischen Schwankungen der Strömungsvariablen auftreten. Aufgrund der Unterschiede zwischen der SPH- und der FV-Methode wird die Erfüllung dieser grundlegenden Anforderungen bei der Anwendung eines Embedded-SPH-Verfahrens enorm erschwert. Darüber hinaus können grundsätzlich beliebig komplizierte Strömungsfelder an den Schnittstellen zwischen den gekoppelten Rechengebieten der SPH- und der FV-Methode vorliegen. Wie in Abb. 2.1 gezeigt ist, kann z. B. ein Strömungswirbel den Kopplungsrand durchdringen. Hierdurch ist die Bewegung der Partikel in der Nähe des Rands sehr inhomogen. Während sich ein Partikel vom Rand weg bewegt, bewegt sich ein anderes benachbartes Partikel zum Rand hin. Ein weiteres Partikel bewegt sich tangential zum Rand. Am selben Rand müssen demnach auch neue Partikel generiert und andere wiederum gelöscht werden. Eine weitere komplexe Anforderung an ein Embedded-SPH-Verfahren ist folglich die Kompatibilität der Kopplungsränder mit solchen beliebig komplexen Strömungsfeldern.

Weitere wichtige Anforderungen an eine Embedded-SPH-Methode sind eine minimale Komplexität, eine hohe Robustheit und eine hohe numerische Effizienz. Diese Anforderungen sind eng miteinander verknüpft. Durch eine geringe Komplexität des Verfahrens können kompakte Datenstrukturen verwendet werden. Außerdem kann die Berechnung der Kopplung auf möglichst wenige und gleichzeitig robuste Schritte reduziert werden. In diesem Zusammenhang wäre die Übertragung verfügbarer Methoden zur Aufprägung von Randbedingungen, die die genannten Anforderungen bereits erfüllen, auf die Aufprägung von Kopplungsbedingungen optimal. Durch die Übertragung dieser Methoden würde sich darüber hinaus der Entwicklungsumfang eines Embedded-SPH-Verfahrens auf den Ansatz zur Berechnung der Kopplungsbedingungen reduzieren, während die Aufprägung dieser Kopplungsbedingungen über bestehende Ansätze realisiert werden könnte. Dies hätte außerdem den Vorteil, dass die Integration verfügbarer Software zur Strömungssimulation, wie z. B. die Open-Source-CFD-Software OpenFOAM (Weller et al., 1998),⁶ mit einem minimalen Aufwand ermöglicht würde. CFD-Software bietet in der Regel Schnittstellen, über die beliebige Randbedingungen aufgeprägt werden können.

In Abb. 2.2a ist ein durch einen Rand $\partial\Omega$ begrenztes Kontinuum Ω in einem zweidimensionalen Raum mit dem Koordinatensystem (x_1, x_2) dargestellt. Der in Abb. 2.2a durch die gestrichelte Linie gekennzeichnete Bereich A ist in Abb. 2.2b als mögliche räumliche Diskretisierung bei Anwendung der FV-Methode gezeigt. Bei der FV-Methode sind Ränder explizit durch einseitige Stützstellen bzw. Zellflächen definiert. Wie in Abb. 2.2b dargestellt ist, ist bei der FV-Methode jeder Randzelle explizit ein Teil des Gebietsrands $\partial\Omega$ in Form eines Flächenelements zugeordnet. Über diese Flächenelemente können die Randbedingungen auf eine natürliche Weise aufgeprägt werden. Dieser Ansatz ist konsistent, robust und effizient. Aus den zuvor genannten Gründen wird angestrebt, die in Abb. 2.2b dargestellte räumliche Diskretisierung des Rands zur Aufprägung von Randbedingungen bei der FV-Methode anzuwenden. Unter dieser Voraussetzung bedarf es in dieser Arbeit keiner Entwicklung neuer Methoden für die FV-Methode. Auf diese Weise kann derselbe Ansatz zur Aufprägung von Rand- und Kopplungsbedingungen bei der FV-Methode angewendet werden.

Bei der SPH-Methode gibt es zum heutigen Stand, anders als bei der FV-Methode, keinen standardmäßigen Ansatz zur Aufprägung von Randbedingungen. Dies liegt insbesondere daran, dass die Aufprägung von räumlich festen Randbedingungen in einer auf der Lagrange'schen Betrachtungsweise beruhenden Methode generell deutlich schwieriger ist als bei der auf der Euler'schen Betrachtungsweise beruhenden FV-Methode. Die SPH-Methode hat ihren Ursprung in der Astrophysik, in der insbesondere der Vorteil der natürlichen Behandlung räumlich unbegrenzter Rechengebiete entscheidend für ihre Anwendung ist. Die Applizierung der SPH-Methode auf durch feste Wände und/oder offene Ränder begrenzte Rechengebiete ist eine Problemstellung, die immer noch Schwerpunkt der Forschung ist. Der in Abb. 2.2a durch die gestrichelte Linie gekennzeichnete Bereich A ist in Abb. 2.2c als mögliche räumliche Diskretisierung bei Anwendung der SPH-Methode vergrößert dargestellt. Bei der SPH-Methode gibt es, anders als bei der FV-Methode, keine explizite Verbindung zwischen dem Gebietsrand $\partial\Omega$ und den Partikeln (vgl. Abb. 2.2c). Außerdem besteht bei der SPH-Methode das Problem, dass das Einflussgebiet des Kernels eines Partikels ausreichend mit benachbarten Partikeln besetzt sein muss. Für den in

⁶OpenFOAM steht für Open Field Operation And Manipulation.

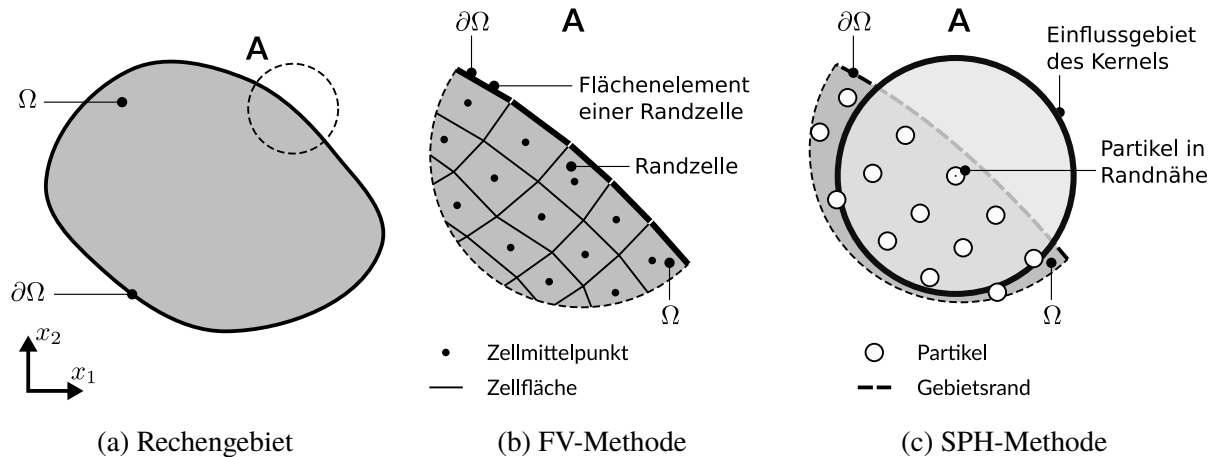


Abbildung 2.2: Räumliche Diskretisierung des Rechengebiets nahe eines Rands unter Anwendung der FV- und der SPH-Methode

Abb. 2.2c dargestellten Fall eines am Rand positionierten Partikels ist diese Bedingung nicht erfüllt, da das Einflussgebiet den Rand überlappt. Die Schwierigkeit bei den Randbedingungen der SPH-Methode liegt demnach sowohl in der Definition von Elementen zur Aufprägung dieser Randbedingungen als auch in der Erfüllung der Anforderungen des Kernels der Partikel. Auch für die SPH-Methode ist es, wie für die FV-Methode, erstrebenswert, einen einheitlichen Ansatz zur Aufprägung von nichtgekoppelten und gekoppelten Bedingungen am Rand zu entwickeln. Insbesondere sollte die Komplexität der SPH-Methode durch die Einführung von Kopplungsrändern nicht erhöht werden.

Basierend auf den vorausgegangenen Ausführungen beschränkt sich die Entwicklung eines Embedded-SPH-Verfahrens demnach auf die Entwicklung geeigneter Randbedingungen für die SPH-Methode und deren Adaptierung auf Kopplungsbedingungen zum Informationstransfer zwischen den Rechengebieten der SPH- und der FV-Methode. In den folgenden Abschnitten wird daher neben den bisher bekannten Embedded-SPH-Verfahren ebenso auf existierende Arbeiten zu nichtgekoppelten Randbedingungen eingegangen. Relevant sind im Kontext von Randbedingungen in der SPH-Methode insbesondere Verfahren zur Behandlung offener Ränder, da die Kopplungsränder einer Embedded-SPH-Methode ebenfalls für die Strömung durchlässig sind. Auf diese Verfahren wird in Abschnitt 2.2 eingegangen. Die grundsätzlichen Methoden zur Aufprägung von Randbedingungen sowie zur Erfüllung der Anforderungen des Kernels an festen Wänden sind der Ausgangspunkt zur Entwicklung von Ansätzen für offene Ränder. Daher werden in Abschnitt 2.1 zuvor Verfahren zur Behandlung von festen Wänden erläutert. In Abschnitt 2.3 werden schließlich die bereits bekannten Embedded-SPH-Verfahren vorgestellt und auf die Anforderungen hin geprüft, die in diesem Abschnitt erläutert wurden. Auf Basis der in den nächsten Abschnitten identifizierten Lücken wird in Abschnitt 2.4 abschließend der wissenschaftliche Beitrag der vorliegenden Arbeit zur Entwicklung einer Embedded-SPH-Methode definiert. Darüber hinaus wird die Vorgehensweise erläutert, um die identifizierten Lücken zu schließen.

2.1 Verfahren für Randbedingungen an festen Wänden

Wie einleitend erläutert wurde, besteht bei der SPH-Methode das Problem, dass das Einflussgebiet des Kernels eines Partikels ausreichend voll besetzt sein muss. Es ist daher problematisch, wenn ein Partikel nah an einem Rand positioniert ist und das Einflussgebiet den Rand überlappt (vgl. Abb. 2.2c). Werden keine geeigneten Maßnahmen implementiert, sind zum einen die Approximationen der räumlichen Ableitungen ungenau, und zum anderen können Partikel den Rand durchdringen. Für den Fall, dass der Rand eine Wand repräsentiert, muss diese Durchdringung verhindert werden.

Zu Beginn der Anwendung der SPH-Methode in der Strömungsmechanik wurde das Problem der Durchdringung von Monaghan (1994) sowie Monaghan und Kocharyan (1995) durch das Platzieren von Randpartikeln an dem Gebietsrand gelöst. In Abb. 2.3a ist die räumliche Diskretisierung eines Rands mit Randpartikeln dargestellt. Die Randpartikel prägen eine abstoßende Kraft basierend auf dem Lennard-Jones-Potential, das im Bereich der Molekulardynamik definiert wurde, auf ein randnahes Partikel aus, um einen gewissen Abstand zwischen diesem Partikel und dem Rand zu gewährleisten. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, dass die abstoßende Kraft bei einem konstanten Abstand in Randnormalenrichtung zwischen dem Partikel und dem Rand entlang der tangentialen Richtung des Rands variiert (Violeau und Rogers, 2016). Außerdem werden unphysikalische tangentiale Kräfte auf die Partikel ausgeübt (Monaghan und Kajtar, 2009). Monaghan und Kajtar (2009) schlagen daher eine verbesserte Formulierung der abstoßenden Kraft der Randpartikel vor. Es kann gezeigt werden, dass mit dem verbesserten Verfahren die durch den Rand integral auf das Partikel ausgeübte Kraft in Normalenrichtung zum Rand mit hoher Genauigkeit approximiert werden kann. Außerdem können die unphysikalischen tangentialen Kräfte auf ein vernachlässigbares Niveau gesenkt werden. Je höher der Rand durch die Randpartikel aufgelöst wird, desto besser ist die Übereinstimmung der Summation der Kräfte der Randpartikel mit der gewünschten integralen Kraft des Rands auf das Partikel. Durch dieses Verfahren wird das Problem des am Rand nicht voll besetzten Einflussgebiets des Kernels nicht adressiert. Hierdurch können große Ungenauigkeiten bei der Anwendung der SPH-Operatoren auftreten (Violeau und Rogers, 2016). Es ist außerdem nicht klar, wie dieses Verfahren auf offene Randbedingungen bzw. Kopplungsbedingungen übertragen werden kann. Daher ist das Verfahren für eine Embedded-SPH-Methode nicht geeignet.

Im Folgenden wird auf Verfahren eingegangen, bei denen nicht explizit eine abstoßende Kraft zwischen den Partikeln und dem Rand definiert wird. Durch die Platzierung von fiktiven Partikeln außerhalb des Rechengebiets, die in den nachfolgenden Ausführungen sowie im weiteren Verlauf dieser Arbeit Geisterpartikel genannt werden, wird bewirkt, dass das Einflussgebiet des Kernels selbst bei einer Überlappung des Rands voll mit Partikeln besetzt ist. Dies ist in Abb. 2.3b dargestellt. Die Undurchlässigkeit der Partikel am Rand muss durch die Randbedingungen sichergestellt werden. Die Undurchlässigkeit ist dadurch charakterisiert, dass keine relative Geschwindigkeit zwischen der Wand und den Partikeln in Randnormalenrichtung vorliegt (Adami et al., 2012). Dieser Zustand kann an einem ebenen Rand hergestellt werden, indem die Geschwindigkeitskomponente im Rechengebiet normal zur Wand über den Rand auf die Geisterpartikel gespiegelt wird. Die an den Geisterpartikeln aufzuprägenden Geschwindig-

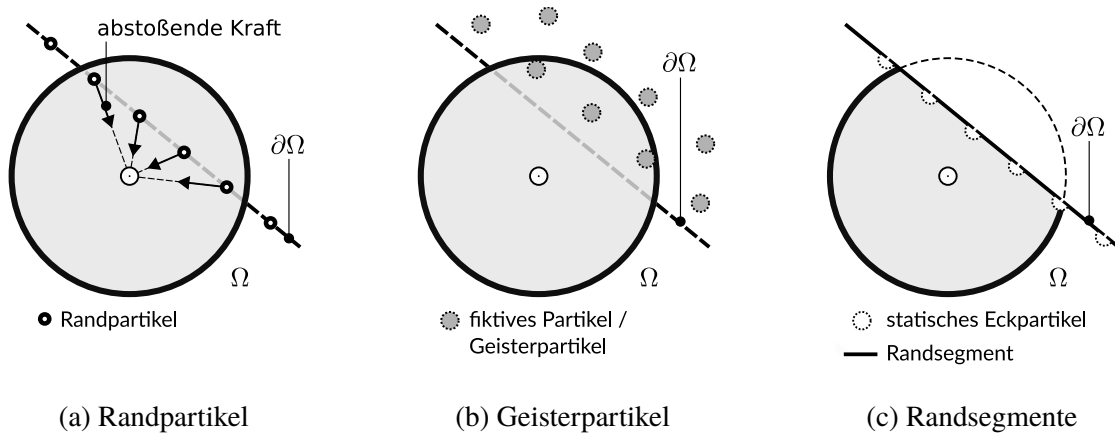


Abbildung 2.3: Verfahren zur Aufprägung von Randbedingungen an Wänden

keitsvektoren in Normalenrichtung des Rands sind in Abb. 2.4a für den Fall einer Staupunktströmung dargestellt. Eine Haftbedingung für das Fluid an der Wand kann durch umkehren der Geschwindigkeitskomponente des Geisterpartikels tangential zur Wand erfüllt werden. Die hierfür an den Geisterpartikeln aufzuprägenden Geschwindigkeitsvektoren in Tangentialrichtung des Rands sind in Abb. 2.4b für den Fall einer Staupunktströmung dargestellt. Partikel, die sich auf die Wand zubewegen bzw. von der Wand wegbewegen, erfahren eine Druckerhöhung bzw. -verringerung. Daher müssen die Geisterpartikel eine entsprechende Druckänderung erfahren, damit eine Beschleunigung der randnahen Partikel in Wandrichtung verhindert wird. Für den Fall statischer Wände und unter Vernachlässigung von Gravitation, muss der Druckgradient am Rand daher gleich null sein (Adami et al., 2012). Ein Druckgradient von null kann ebenfalls über eine Spiegelung des Druckfelds über den Rand an den Geisterpartikeln approximiert werden.

Da zur Aufprägung der zuvor erläuterten Randbedingungen Strömungsvariablen über den Rand gespiegelt werden, ist es intuitiv, die Positionen der Geisterpartikel ebenfalls über eine Spiegelung der Partikel des inneren Rechengebiets zu definieren. Entsprechende Verfahren werden von Colagrossi und Landrini (2003), Hirschler et al. (2016) und Yildiz et al. (2009) beschrieben. In Abb. 2.5a ist dieses Prinzip für einen ebenen Rand dargestellt. Jedem randnahen Partikel des

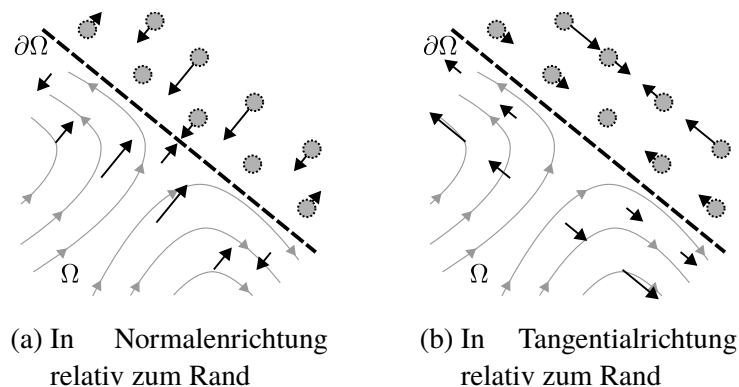


Abbildung 2.4: Aufprägung der Geschwindigkeitsvektoren an den Geisterpartikeln einer Wand

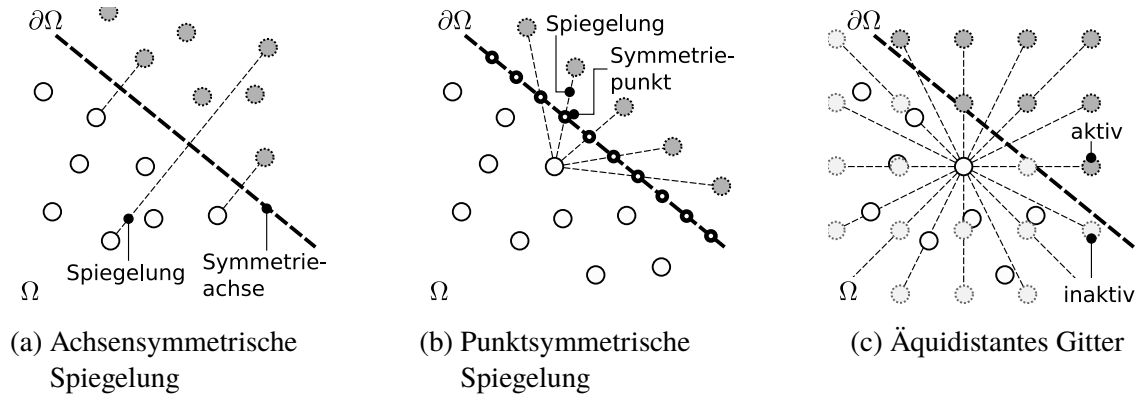


Abbildung 2.5: Verfahren zur dynamischen Generierung der Geisterpartikel auf Basis von Partikeln des inneren Rechengebiets

inneren Rechengebiets wird ein gespiegeltes Geisterpartikel zugeordnet. Aus dieser Zuordnung können die Strömungsvariablen der Geisterpartikel auf natürliche Weise bestimmt werden. Für nicht ebene Ränder schlagen Yildiz et al. (2009) vor, den Gebietsrand durch lokal am Rand anliegende Tangenten zu diskretisieren, die als Symmetrieachsen für die Spiegelung der Partikel genutzt werden. Ist ein Partikel in der Nähe eines Berührungspunkts zwischen einer dieser Tangenten und dem Rand, werden alle über diese Tangente gespiegelten Geisterpartikel als Interaktionspartner dieses Partikels behandelt. Colagrossi und Landrini (2003) beschreiben ein ähnliches Verfahren. Sie weisen allerdings darauf hin, dass es durch diese Spiegelung, je nach Komplexität der Geometrie, zu einer ungleichmäßigen Verteilung der Masse der Geisterpartikel kommen kann. Violeau und Rogers (2016) sehen diese Eigenschaft ebenfalls als nachteilig an.

Bei der im Folgenden erläuterten Gruppe von Methoden wird ebenfalls die Position der Partikel des internen Rechengebiets als Basis für die Positionierung der Geisterpartikel genutzt. Ferrari et al. (2009) schlagen vor, die Rechengebietsränder mit Randpartikeln zu versehen. Diese Methode ist in Abb. 2.5b veranschaulicht. Die Randpartikel dienen dabei lediglich als geometrische Beschreibung des Gebietsrands und zur Generierung von Geisterpartikeln. Für jedes Partikel des internen Rechengebiets, dessen Abstand zum Rand geringer als die Glättungslänge, die charakteristische Länge des Kernels, ist, werden über eine punktsymmetrische Projektion an umliegenden Randpartikeln Geisterpartikel generiert (vgl. Abb. 2.5b). Im Unterschied zu den im letzten Absatz erläuterten Geisterpartikeln wird durch diese Geisterpartikel nur die Randbedingung für das jeweils für die Projektion verwendete Partikel des internen Rechengebiets bestimmt. Da allerdings nur eine Reihe von Geisterpartikeln generiert wird, ist das Einflussgebiet des Kernels nicht voll mit Partikeln besetzt. Vacondio et al. (2012) erweitern diesen Ansatz um eine zweite Reihe von Geisterpartikeln und eine in diesem Zusammenhang stehende Behandlung von Unstetigkeiten des Rechengebietsrands. Hierbei kann allerdings keine homogene Partikeldichte entlang der Normalenrichtung des Rands sichergestellt werden. Fourtakas (2014) und Fourtakas et al. (2015) schlagen daher vor, statt einer punktsymmetrischen Spiegelung eine Extrusion der Geisterpartikel entlang der Richtung des Verbindungsvektors zwischen dem Partikel und dem Randpartikel anzuwenden. Fourtakas (2014) und Fourtakas et al. (2019) stellen fest, dass der erläuterte Ansatz für dreidimensionale Geometrien nicht robust ist. Sie schla-

gen daher vor, die Geisterpartikel in einem äquidistanten Gitter um jedes Partikel des internen Rechengebiets zu behandeln. Dieses Prinzip ist in Abb. 2.5c dargestellt. Die Geisterpartikel, die außerhalb des Rechengebiets liegen, werden als Nachbarpartikel des Partikels behandelt, auf Basis dessen sie generiert wurden. Dadurch wird sichergestellt, dass das Einflussgebiet des Kernels auch am Rand voll mit Partikeln besetzt ist und die entsprechende Verteilung der Geisterpartikel homogen ist. Der Nachteil dieser Methode ist, dass die plötzliche Berücksichtigung eines dieser Geisterpartikel bei einer Annäherung eines Partikels an den Gebietsrand zu unphysikalischen Oszillationen der Strömungsvariablen führen kann. Diese Oszillationen müssen durch Dämpfungsterme reduziert werden (Fourtakas, 2014).

Eine weitere Möglichkeit der Randdiskretisierung besteht in der Generierung von Geisterpartikeln vor der Simulation. In diesem Fall haben die Geisterpartikel keinen geometrischen Bezug zu Partikeln des internen Rechengebiets. Marrone et al. (2011) schlagen vor, die Geisterpartikel durch mehrfaches Extrudieren des Gebietsrands zu erzeugen. Bei dieser Prozedur wird sichergestellt, dass der Abstand der Geisterpartikel untereinander homogen ist. Morris et al. (1997) generieren diese Geisterpartikel auf Basis eines äquidistanten Gitters von Partikeln, das das gesamte Rechengebiet umspannt. Als Geisterpartikel werden dann solche Partikel ausgewählt, die innerhalb der Festkörpergeometrien liegen. Es wird angemerkt, dass die äquidistante Anordnung zu einer unzulänglichen Abbildung der Ränder führen kann. Dauch et al. (2017) nutzen ein automatisiertes Verfahren zum Initialisieren der Geisterpartikel an beliebigen Geometrien. Hierfür wird der Algorithmus nach Colagrossi et al. (2012) angewendet, bei dem Partikel in Richtung geringer Partikeldichte bewegt werden. Durch Anwendung des weiter unten erläuterten Verfahrens nach Eitzlmayr et al. (2014) wird vermieden, dass die Geisterpartikel während dieser Homogenisierung in das interne Rechengebiet eindringen können. Mit dem Algorithmus wird eine ursprünglich äquidistante Partikelanordnung in eine Partikelverteilung überführt, die homogen ist und den Gebietsrand gleichmäßig abbildet. Da der geometrische Bezug zwischen Geisterpartikeln und Partikeln des internen Rechengebiets fehlt, können Strömungsvariablen an den Geisterpartikeln nicht auf direktem Wege auf Basis der Werte der Partikel des internen Rechengebiets berechnet werden. Bei dem Verfahren nach Marrone et al. (2011) wird daher die Bestimmung der Strömungsvariablen an den Geisterpartikeln durch eine Interpolation der Strömungsvariablen im Rechengebiet realisiert. Dieses Prinzip ist in Abb. 2.6a veranschaulicht. Hierzu wird das Geisterpartikel über den Rand in das Rechengebiet gespiegelt. An der gespiegelten Stelle wird für eine möglichst genaue Interpolation der Strömungsvariable ein korrigierter Kernel nach Fries und Matthies (2004) verwendet. Adami et al. (2012) nutzen einen Shepard-Filter (Shepard, 1968), um die Strömungsvariablen der Partikel des Rechengebiets direkt an der Position des Geisterpartikels zu interpolieren. Dieses Prinzip ist in Abb. 2.6b veranschaulicht. Sowohl bei dem Verfahren nach Marrone et al. (2011) als auch bei dem Verfahren nach Adami et al. (2012) werden die an den Geisterpartikeln definierten Strömungsvariablen für alle Partikel des Rechengebiets einheitlich als Randbedingung bereitgestellt. Bei dem Ansatz nach Morris et al. (1997) wird die Fluidichte der Geisterpartikel, so wie die der Partikel des inneren Rechengebiets, entsprechend der Kontinuitätsgleichung berechnet. Die Geschwindigkeitsvektoren der Geisterpartikel werden für jedes Partikel des inneren Rechengebiets individuell bestimmt, um eine Haftbedingung an der Wand zu approximieren. Dabei wird ein linearer Geschwindig-

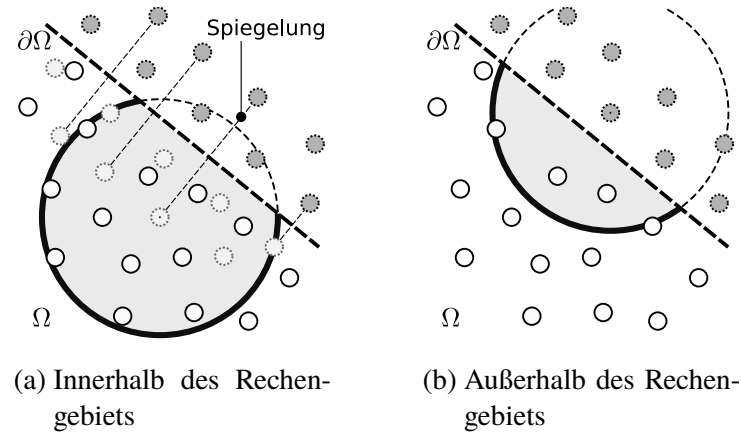


Abbildung 2.6: Verfahren zur Interpolation von Strömungsvariablen an statischen Geisterpartikeln

keitsverlauf, der zwischen Partikeln des Rechengebiets und dem Rand angenommen wird, an die Position des Geisterpartikels extrapoliert.

Bei der Methode nach Eitzlmayr et al. (2014) wird für jeden Term der Erhaltungsgleichungen, der mit der SPH-Methode diskretisiert werden muss, eine Approximation des Wandeinflusses eingeführt. Die Approximationen werden für ebene Wände und anhand einer äquidistanten Anordnung der Geisterpartikel außerhalb des Rechengebiets für ein Partikel mit variablem Abstand zum Rand entwickelt. Die Beiträge des Rands zu den Diskretisierungen der räumlichen Ableitungen lassen sich über ein Produkt aus den Eigenschaften des entsprechenden Partikels des Rechengebiets und der Summe über die Gradienten des Kernels an der Stelle der Geisterpartikel beschreiben. Die zuletzt genannte Summe wird von Eitzlmayr et al. (2014) als Polynom vierter Ordnung in Abhängigkeit des Abstands zwischen dem Partikel und dem Rand approximiert. Der Vorteil des Verfahrens ist, dass über diese angepassten Polynome Simulationen ohne Geisterpartikel möglich sind. Lediglich der Abstand des Partikels zum Rand sowie Eigenschaften des Partikels werden benötigt, um den Randeinfluss zu berücksichtigen. Nachteilig ist allerdings, dass die Polynome nur für eine ebene Wand gültig sind und somit die Allgemeingültigkeit des Ansatzes in Frage gestellt werden muss.

Bei einer weiteren Gruppe von Methoden wird ebenfalls auf die Verwendung von Geisterpartikeln sowie Randpartikeln verzichtet. Stattdessen wird eine Korrektur der SPH-Operatoren für die Überlappung zwischen dem Einflussgebiet des Kernels und der Region außerhalb des Rechengebiets vorgeschlagen (de Lefte et al., 2009; Ferrand et al., 2012; Kulasegaram et al., 2004). Kulasegaram et al. (2004) definieren für die Beschreibung randnaher Partikel eine korrigierte Berechnung der Fluidichte, die auf der Summation der Produkte aus der Masse und dem Wert des Kernels der benachbarten Partikel beruht. Die Korrektur wird über einen Normierungsparameter erreicht, der im randnahen Bereich kleiner eins und sonst gleich eins ist. Es werden weitere Operatoren für die Berechnung von Gradienten und Divergenzen hergeleitet, die im Vergleich zu den standardmäßigen SPH-Operatoren zusätzliche Terme enthalten, die die Randbedingungen definieren und von dem Gradienten des Normierungsparameters abhängig sind. Ferrand et al. (2012) leiten verbesserte Definitionen dieser Operatoren sowie ein effizientes und genaues Verfahren

zur Berechnung des Normierungsparameters her. Zuvor wurde der Normierungsparameter über eine aufwendige analytische Berechnung (Feldman und Bonet, 2007) oder über ungenauere und auf Polynomen basierende Näherungsfunktionen (de Leffe et al., 2009; Kulasegaram et al., 2004) berechnet. Bei der Methode nach Ferrand et al. (2012) wird der Normierungsparameter über eine zeitliche Integration in Abhängigkeit des Gradienten des Normierungsparameters berechnet. Die Berechnung dieses Gradienten über Randintegrale des Kernels ist ein wesentlicher Bestandteil dieser Methode. Für den Fall von nur zwei räumlichen Dimensionen wird der Rand durch Liniensegmente approximiert, wie in Abb. 2.3c gezeigt ist. Im Falle von drei räumlichen Dimensionen wird der Rand trianguliert. Dadurch reduziert sich der Berechnungsaufwand auf die Bestimmung der Randintegrale einfacher geometrischer Formen (Liniensegmente oder dreieckige Flächenelemente). An den Verbindungspunkten der Randsegmente werden Eckpartikel definiert, die statisch sind, aber ansonsten wie Partikel des Rechengebiets behandelt werden (vgl. Abb. 2.3c). Über die Eckpartikel sowie auch über die Randsegmente werden die Randbedingungen aufgeprägt. Der Vorteil dieser Methode im Vergleich zu den Methoden mit Randpartikeln oder Geisterpartikeln ist, dass die mathematische Definition von Randbedingungen konsistent und genauer ist, da der Einfluss des Rands eben über Integrale formuliert und nicht über Interaktionen zwischen Partikeln approximiert wird. Adami et al. (2012) weisen auf den Nachteil hin, dass durch die zeitliche Integration des Normierungsparameters ein zusätzlicher Rechenaufwand entsteht. Insbesondere im Falle von dreidimensionalen Rechengebieten entsteht ein signifikanter Berechnungsaufwand zur Bestimmung von Schnittflächen zwischen den diskretisierten Rändern und den Einflussgebieten der Kernel der Partikel.

In diesem Abschnitt wurden relevante Methoden zur Applizierung von Randbedingungen an festen Wänden bei der SPH-Methode erläutert. Relevante Ansätze zur Implementierung von Randbedingungen bei der SPH-Methode basieren entweder auf der Nutzung von Geisterpartikeln oder der Interaktion der Partikel und des Rands über Randintegrale. Ansätze basierend auf Randintegralen sind insbesondere bei dreidimensionalen Rechengebieten mit einem erhöhten Berechnungsaufwand verbunden, da eine Schnittfläche zwischen dem Einflussgebiet des Kernels jedes Partikels und des Rands berechnet werden muss. Im Hinblick auf die hohe Partikelanzahl bei der DNS der Primärzerstäubung soll daher der Ansatz basierend auf Geisterpartikeln bevorzugt werden. Hierbei erscheint ein Ansatz mit räumlich festen bzw. statischen Geisterpartikeln am robustesten. Bei den übrigen Ansätzen wird die Position der Geisterpartikel auf Basis der Positionen der Partikel des inneren Rechengebiets und deren relativer Position zum Rand bestimmt. Dies kann insbesondere bei nichtebenen Rändern zu numerisch ungünstigen räumlichen Anordnungen der Geisterpartikel führen. Daher wird der Ansatz basierend auf statischen Geisterpartikeln bevorzugt. Im nächsten Abschnitt werden Verfahren zur Behandlung offener Ränder vorgestellt.

2.2 Verfahren für Randbedingungen an offenen Rändern

Die Modellierung offener Ränder im Zusammenhang mit der SPH-Methode wurde bisher deutlich weniger erforscht als die fester Wände. Für eine Lagrange'sche Partikelmethode ist diese Art von Randbedingung problematisch (Violeau und Rogers, 2016). Eine wesentliche Anforderung,

die bereits im Zusammenhang mit festen Wänden erläutert wurde, besteht auch bei der Modellierung offener Ränder: Das Einflussgebiet des Kerns eines Partikels muss auch im Falle einer Überlappung des Rands ausreichend mit Partikeln besetzt sein. Alternativ kann eine Korrektur der SPH-Operatoren durchgeführt werden.

Anders als bei festen Wänden, an denen die Durchlässigkeit von Partikeln vermieden werden muss, muss an offenen Rändern ein kontrolliertes Ein- und/oder Austreten des Fluids durch geeignete Advektion von Partikeln gewährleistet werden. Abhängig von dem Ansatz, mit dem die Anforderungen des Kerns erfüllt werden, ergeben sich verschiedene Möglichkeiten für den Partikelein- und -austrag. Des Weiteren ist die Art der Randbedingung anders als bei festen Wänden, da der Bereich des Fluids hinter dem Rand über die Randbedingung beschrieben werden muss. Entsprechend muss die Randbedingung so definiert sein, dass die Wellen, die Informationen über den Zustand der Strömung transportieren, durch den Rand ein- und austreten können, ohne dass unphysikalische Reflexionen entstehen.

In Abb. 2.7 sind jeweils von oben nach unten Abläufe grundlegender Verfahren dargestellt, die im Folgenden erläutert werden. Es wird in Abb. 2.7 jeweils ein Einlassrand (links) und ein Auslassrand (rechts) betrachtet. Eine Strömung ist demnach von links nach rechts gerichtet. Lastiwka et al. (2008) schlagen im Zusammenhang mit einem WCSPH-Ansatz vor, ähnlich wie bei der Behandlung fester Wände, Geisterpartikel zu verwenden. Diese sind allerdings nicht statisch, sondern bewegen sich mit einer aufgeprägten Geschwindigkeit. Das Verfahren ist in Abb. 2.7a veranschaulicht. Der Bereich der Geisterpartikel wird im Folgenden Pufferzone genannt. Bei dem Ansatz nach Lastiwka et al. (2008) wird explizit zwischen Ein- und Auslässen unterschieden. An einem Einlass können Partikel aus der Pufferzone über den offenen Rand in das Rechengebiet eintreten (vgl. Abb. 2.7a). Der Zustand ändert sich in diesem Fall von einem Geisterpartikel zu einem Partikel des inneren Rechengebiets. Um die Anzahldichte der Partikel in der Pufferzone zu erhalten, wird an der äußeren Begrenzung der Pufferzone ein neues Geisterpartikel erzeugt, falls ein Geisterpartikel die Pufferzone verlässt, wobei der Verbindungsvektor zwischen dem neuen und dem alten Partikel in Normalenrichtung des Rands orientiert ist. An einem Auslass können Partikel des Rechengebiets über den offenen Rand treten. Diese Partikel werden in Geisterpartikel konvertiert. Wenn ein Geisterpartikel die äußere Begrenzung der Pufferzone erreicht, wird es gelöscht. Lastiwka et al. (2008) beschreiben zwei Methoden zum Aufprägen von Randbedingungen. Im Falle einer reflektierenden Randbedingung werden die Geschwindigkeit und Skalare an den Geisterpartikeln der Einlass-Pufferzone aufgeprägt. Der Druck wird von dem Rechengebiet an der Position des Geisterpartikels extrapoliert. An der Auslass-Pufferzone wird der Druck als Randbedingung an den Geisterpartikeln aufgeprägt. Die Bestimmung der Geschwindigkeit und der Skalare an den Geisterpartikeln der Auslass-Pufferzone erfolgt wie auch im Rechengebiet über die Berechnung der Erhaltungsgleichungen. In beiden Pufferzonen werden die Partikel mit der Strömungsgeschwindigkeit advektiert. Im Falle von nichtreflektierenden Randbedingungen adaptieren Lastiwka et al. (2008) die analytische Formulierung nach Giles (1990), die auf einer Linearisierung der Euler-Gleichungen basiert. Entsprechend der verwendeten Randbedingung werden gewisse Charakteristiken an den Geisterpartikeln zu null gesetzt oder von dem Rechengebiet an den Geisterpartikeln extrapoliert. Aus

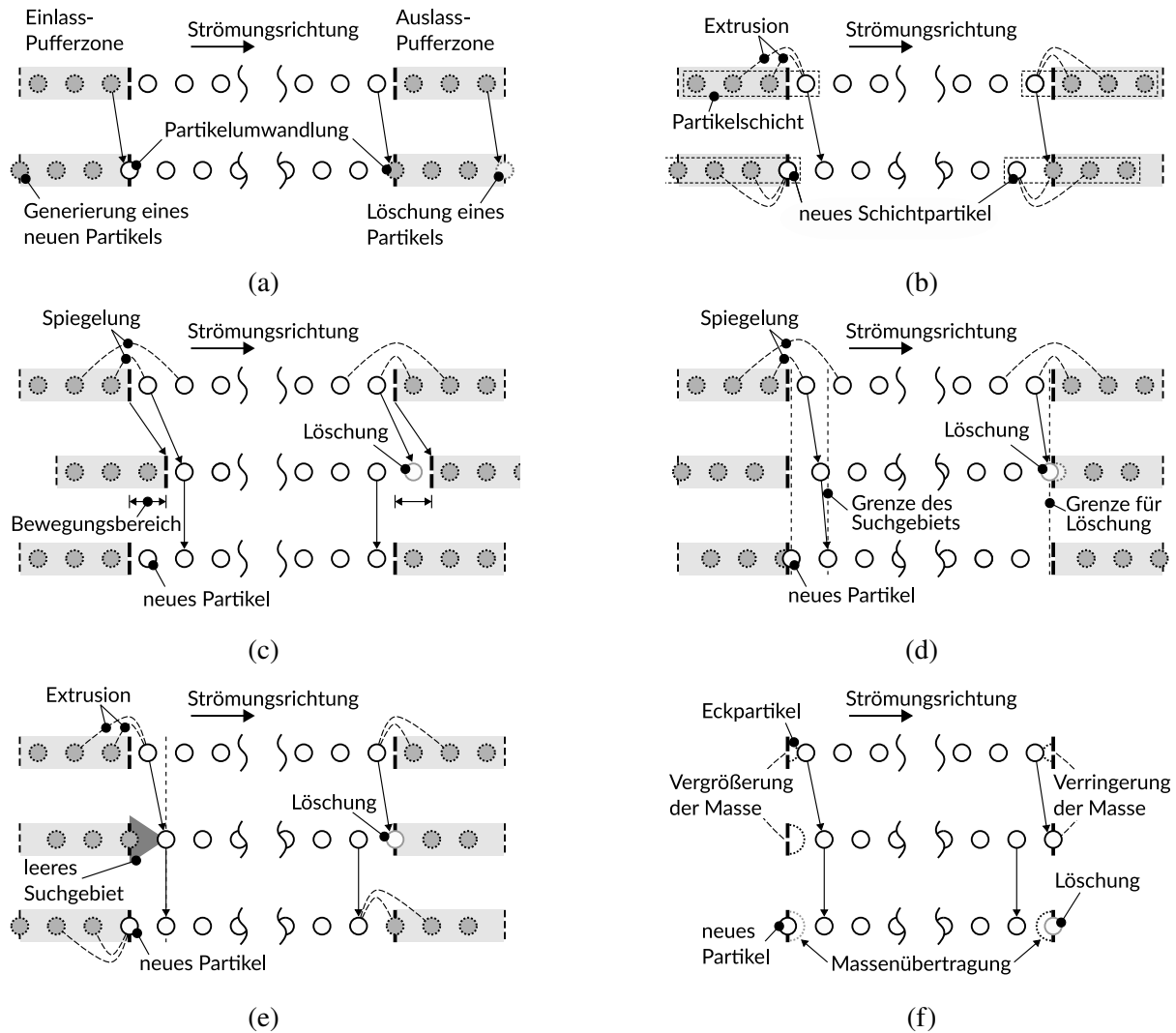


Abbildung 2.7: Verfahren zur Behandlung von Partikeln an offenen Rändern. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

den Charakteristiken lassen sich die Strömungsvariablen für das entsprechende Geisterpartikel berechnen.

Alvarado-Rodríguez et al. (2017), Braun et al. (2015), Federico et al. (2012), Hosseini und Feng (2011) und Rogers et al. (2012) schlagen Modifikationen der Ansätze nach Lastiwka et al. (2008) vor. Diese werden im Folgenden erläutert: Federico et al. (2012) modifizieren den Ansatz für reflektierende Randbedingungen nach Lastiwka et al. (2008). Am Auslass des Rechengebiets werden die Strömungsvariablen an einem Geisterpartikel nicht über die Erhaltungsgleichungen bestimmt, sondern sie werden nach dem Eintreten des Partikels in die Pufferzone nicht mehr geändert.

Hosseini und Feng (2011) teilen die Pufferzone weiter auf. Dieser Ansatz ist in Abb. 2.7b veranschaulicht. Dabei werden die Partikel, die am nächsten zum Rand positioniert sind, einer Einlass- bzw. Auslassschicht zugeordnet. Jedem dieser Schicht-Partikel werden Geisterpartikel zugeordnet. Diese Geisterpartikel werden ausgehend von dem Schicht-Partikel in Normalenrichtung zum

Rand extrudiert (vgl. Abb. 2.7b). Der Abstand sowohl zwischen dem Schicht-Partikel und dem nächstgelegenen Geisterpartikel als auch zwischen benachbarten Geisterpartikeln ist identisch mit dem mittleren Partikelabstand. Die Strömungsvariablen des Schicht-Partikels werden zu jedem Zeitpunkt auf die ihm zugeordneten Geisterpartikel kopiert. Dirichlet-Randbedingungen werden dem Schicht-Partikel (und damit den jeweiligen Geisterpartikeln) direkt aufgeprägt. Von Neumann-Randbedingungen werden realisiert, indem die Erhaltungsgleichung zur Bestimmung der jeweiligen Strömungsvariable an dem Schicht-Partikel gelöst und das Ergebnis auf die entsprechenden Geisterpartikel kopiert wird. Am Eintritt wird die Geschwindigkeit als Dirichlet-Randbedingung und der Druck als von Neumann-Randbedingung aufgeprägt. Am Austritt geschieht dies genau andersherum.

Braun et al. (2015) nutzen einen ähnlichen Ansatz wie Hosseini und Feng (2011). Dabei werden allerdings nicht Schicht-Partikel definiert, über die die jeweilige Randbedingung auf die Geisterpartikel projiziert wird. Stattdessen werden sogenannte Marker an dem offenen Rand verteilt, die anders als die Schicht-Partikel statisch sind und deren Strömungsvariablen nicht über die Erhaltungsgleichungen verändert werden. Die Marker projizieren die Strömungsvariablen, die auf ihnen gespeichert sind, auf die ihnen zugehörigen Geisterpartikel. Die Advektion der Geisterpartikel erfolgt nur in Normalenrichtung zum Rand, um eine homogene Partikelverteilung zu gewährleisten. Grundsätzlich ist die Aufprägung von Geschwindigkeitsfeldern mit transversalen Komponenten realisierbar. Aufgrund der Translation der Partikel in Normalenrichtung zum Rand entsteht in diesem Fall eine Diskrepanz zwischen Partikelgeschwindigkeit und physikalischer Strömungsgeschwindigkeit. Dirichlet-Randbedingungen werden direkt an den Markern und damit implizit an den zugehörigen Geisterpartikeln aufgeprägt. Zur Realisierung von von Neumann-Randbedingungen wird die jeweilige Strömungsvariable unter Anwendung eines Shepard-Filters (Shepard, 1968) von dem Rechengebiet an den Markern extrapoliert und entsprechend auf die zugehörigen Geisterpartikel projiziert. Eine Besonderheit des Ansatzes nach Braun et al. (2015) ist die Anpassung des Partikelabstands innerhalb der Pufferzone an den Partikelabstand im randnahen Bereich des Rechengebiets, um unphysikalische Oszillationen am Rand zu vermeiden. Zudem wird der zur Anpassung genutzte Korrekturfaktor auch zur Modifikation der Strömungsvariablen verwendet, um die Reflexion von Druck- und Geschwindigkeitswellen zu vermeiden. Auch wenn dies eher ad-hoc Korrekturen sind, haben sie sich bei den vorgestellten Simulationen als sehr wirksam erwiesen.

Alvarado-Rodríguez et al. (2017) verwenden den Ansatz nach Lastiwka et al. (2008) mit Pufferzonen. Der Unterschied besteht in der Weise, wie die Geschwindigkeit der Geisterpartikel in der Auslass-Pufferzone behandelt wird. Alvarado-Rodríguez et al. (2017) adaptieren den Ansatz nach Jin und Braza (1993), bei dem der Geschwindigkeitsvektor über die Wellengleichung beschrieben wird. Diese Wellengleichung lässt sich in Beiträge stromauf und stromab fortschreitender Wellen zerlegen. Durch Eliminieren der in das Rechengebiet eintretenden Wellen soll eine nichtreflektierende Randbedingung aufgeprägt werden. Durch gewisse Annahmen in der Herleitung der Randbedingung entwickeln Alvarado-Rodríguez et al. (2017) eine Gleichung, die die Euler'sche Form einer Differentialgleichung der Geschwindigkeit widerspiegelt, wobei Konvektion nur in Normalenrichtung und Diffusion nur in transversaler Richtung relativ zum Rand berücksichtigt wird. Die Adaption der Gleichung auf die Geschwindigkeitsänderung

eines Lagrange'schen Partikels ist dabei jedoch inkonsistent (Negi et al., 2020). Außerdem können lediglich die Informationen, die mit der Strömungsgeschwindigkeit fortschreiten, das Rechengebiet über den Auslassrand verlassen. Da ein WCSPH-Ansatz verwendet wird, gibt es Informationen, die mit der Schallgeschwindigkeit fortschreiten und somit am Auslass reflektiert werden (Negi et al., 2020).

Tafuni et al. (2016) und Tafuni et al. (2018) verwenden ebenfalls einen Ansatz mit Pufferzonen und Geisterpartikeln. Die Autoren stellen heraus, dass es bei ihrem Ansatz keine grundsätzliche Unterscheidung zwischen Ein- und Auslässen gibt. Geisterpartikel der Pufferzone werden mit der ihnen aufgeprägten Strömungsgeschwindigkeit advektiert, und die Art der Randbedingungen ist implizit entscheidend dafür, ob das Fluid durch den Rand ein- oder ausströmt. Dabei werden Dirichlet-Randbedingungen wie bei Braun et al. (2015) direkt an den Geisterpartikeln aufgeprägt. Eine weitere Art von Randbedingung wird über den für feste Wände entwickelten Ansatz nach Marrone et al. (2011) realisiert (vgl. Abb. 2.6a in Abschnitt 2.1). Dazu wird das jeweilige Geisterpartikel über den Rand in das Rechengebiet gespiegelt. Über den Wert und den Gradienten der jeweiligen Strömungsvariable an der gespiegelten Position, die durch eine Interpolation mit der Konsistenzordnung 1 ermittelt werden, wird der Wert an der Position des Geisterpartikels extrapoliert. Die Autoren stellen heraus, dass sich mit ihrem Verfahren grundsätzlich gemischte Einström- und Ausströmkustände an dem selben Rand realisieren lassen. Jedoch muss die Robustheit hier in Frage gestellt werden, da sich durch die in die Pufferzone extrapolierten Geschwindigkeitsfelder chaotische Partikelverteilungen ergeben können.

Negi et al. (2020) vergleichen die Ansätze nach Federico et al. (2012) und Tafuni et al. (2018) sowie den nichtreflektierenden Ansatz nach Lastiwka et al. (2008) für den Fall eines Ausströmrandes. Außerdem wird eine modifizierte Variante des Ansatzes nach Federico et al. (2012) vorgeschlagen, bei dem die Geisterpartikel in der Pufferzone mit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit des randnahen Bereichs des Rechengebiets advektiert werden. Darüber hinaus wird ein hybrides Verfahren bestehend aus den Ansätzen nach Lastiwka et al. (2008) und Federico et al. (2012) vorgestellt. Dabei werden die Referenzwerte der Strömungsvariablen, die in den Definitionen der Charakteristiken notwendig sind, anders als bei dem Verfahren nach Lastiwka et al. (2008) nicht als Konstanten, sondern auf Basis einer zeitlichen Mittelung der instantanen Partikelwerte bestimmt. An Zeitpunkten, an denen die akustische Intensität einen Maximalwert überschreitet, wird die Mittelung ausgesetzt, damit der Mittelwert nicht durch die akustische Komponente verfälscht wird. Durch diesen Ansatz werden die zeitlich gemittelten und akustischen Komponenten voneinander getrennt. Nachdem ein Partikel den Auslassrand übertritt, wird die zeitlich gemittelte Komponente nicht mehr geändert. Dieser Schritt ist ähnlich wie bei dem Verfahren nach Federico et al. (2012). Die akustische Komponente wird hingegen über die extrapolierten Charakteristiken (gemäß dem Ansatz nach Lastiwka et al. (2008)) an dem Geisterpartikel aufgeprägt. Basierend auf verschiedenen numerischen Tests wird das vorgestellte hybride Verfahren unter den verglichenen Ansätzen als das geeignetste Verfahren für Strömungen mit hoher akustischer Intensität und mit großen Strömungsgradienten in Randnähe identifiziert.

Die bisher vorgestellten Verfahren für offene Randbedingungen basieren auf dem Prinzip der Pufferzonen. Der Vorteil dieses Ansatzes ist, dass eine homogene Partikelanordnung durch den

direkten Austausch von Partikeln zwischen der Pufferzone und dem Rechengebiet gewährleistet wird. Durch dieses Vorgehen können unphysikalische Oszillationen der Strömung in Randnähe vermieden werden. Die Applizierung dieser Ansätze auf beliebige Strömungszustände, wie sie bei einer Embedded-SPH-Methode auftreten können, ist allerdings schwierig. Wie bereits erläutert wurde, werden Partikel im Falle eines Einlassrands in parallel angeordneten Reihen normal zum Rand durch die Pufferzone advektiert. Wenn ein Partikel durch den Rand tritt, wird ein neues Partikel am äußeren Rand der Pufferzone eingefügt, wobei der Verbindungsvektor zwischen dem neuen und dem alten Partikel in Normalenrichtung des Rands orientiert ist. Würden Partikel auch in transversaler Richtung des Rands bewegt werden, würde die parallele Anordnung der Partikel gestört werden. Es wäre in diesem Fall deutlich komplizierter, die Position zum Einfügen eines neuen Partikels zu definieren, um Defizite oder Überschüsse der Partikeldichte innerhalb der Pufferzone zu vermeiden. Daher sind die Verfahren mit Pufferzonen nur auf einfache Strömungsprofile ohne zum Rand transversale Geschwindigkeitskomponenten beschränkt. Wie eingangs erläutert wurde, müssen bei einer Embedded-SPH-Methode allerdings beliebig komplizierte Strömungsfelder mit signifikanten zum Rand transversalen Komponenten der Fluidgeschwindigkeit advektiert werden. Im Folgenden werden daher Verfahren für offene Randbedingungen erläutert, bei denen das zuvor genannte Problem nicht auftritt. Dabei sind mehrere Ansätze möglich.

Hirschler et al. (2016) adaptieren den Ansatz für feste Wände, bei dem Geisterpartikel über eine Spiegelung der Rechengebietspartikel am Rand generiert werden (vgl. Abb. 2.5a in Abschnitt 2.1). Dieses Prinzip ist in Abb. 2.7c veranschaulicht. Da sich im Falle eines Einlassrands Partikel des Rechengebiets vom Rand entfernen, würden an diesen Stellen Partikeldefizite entstehen. Daher müssen neue Partikel im Rechengebiet erzeugt werden. Hirschler et al. (2016) schlagen daher vor, den Rand in Segmente zu unterteilen, die jeweils der Größe eines Partikeldurchmessers entsprechen. Diese Segmente werden mit der gleichen Geschwindigkeit bewegt wie das randnahe Partikel. Dadurch ergibt sich aus den Partikeln im randnahen Bereich des Rechengebiets und den zugehörigen gespiegelten Geisterpartikeln zu jedem Zeitpunkt eine homogene Partikeldichte normal zum Rand. Die Segmente können sich dabei um die Länge eines Partikeldurchmessers von der initialen Position des Rands fortbewegen. Wird die maximale Distanz erreicht, wird das Segment an die initiale Position zurückgesetzt, und ein neues Partikel wird im Rechengebiet neben dem Segment eingefügt. Auslassränder werden auf ähnliche Weise behandelt. Wenn das Segment an einem Auslassrand an seine ursprüngliche Position zurückgesetzt wird, wird das benachbarte Partikel gelöscht (vgl. Abb. 2.7c). Dirichlet-Randbedingungen werden an den Segmenten definiert. Die Strömungsvariablen an den Geisterpartikeln werden in diesem Fall durch eine lineare Extrapolation basierend auf den Werten des Randsegments, also der Randbedingung, und des Partikels des Rechengebiets, das zur Spiegelung des Geisterpartikels verwendet wurde, definiert. Eine von Neumann-Randbedingung wird realisiert, indem die jeweilige Strömungsvariable an einem Geisterpartikel gleich der des Partikels des Rechengebiets, von dem das Geisterpartikel gespiegelt wurde, gesetzt wird.

Kunz et al. (2016) wandeln den Ansatz nach Hirschler et al. (2016) zur Partikelgenerierung und Partikellöschung ab. Das Verfahren ist in Abb. 2.7d veranschaulicht. Die Segmente sind bei diesem Verfahren statisch. Partikel, die sich auf den Rand zu bewegen und deren Abstand zum

Rand weniger als 10 % des mittleren Partikelabstands beträgt, werden gelöscht. Um neue Partikel zu generieren, wird ein Suchgebiet für jedes Segment verwendet. Dieses erstreckt sich über den 1,5fachen mittleren Partikelabstand in das Rechengebiet. Ist das zum Segment nächstgelegene Partikel mehr als den 1,1fachen mittleren Partikelabstand vom Rand entfernt, wird ein neues Partikel in einem Abstand zum Rand von 10 % des mittleren Partikelabstands generiert. Der Vorteil dieses Verfahrens gegenüber der Methode nach Hirschler et al. (2016) ist eine erhöhte Robustheit, wodurch auch gemischte Ein- und Ausströmzustände am selben Rand möglich sind. Nachteilig ist, dass die Partikeldichte in Normalenrichtung zum Rand zeitlich erheblich variiert. Um dennoch eine ausreichend hohe Genauigkeit der SPH-Operatoren zu ermöglichen, wird der Ansatz nach Bonet und Lok (1999) zur Korrektur des Gradienten des Kernels genutzt. Die Tatsache, dass ein ISPH-Verfahren genutzt wird, begünstigt die Verwendung dieses Ansatzes zur Partikelerzeugung. Im Falle eines WCSPH-Ansatzes würde dieses Verfahren vermutlich zu unphysikalischen Oszillationen am Rand führen.

Monteleone et al. (2017) schlagen einen ähnlichen Algorithmus wie Kunz et al. (2016) vor. Allerdings werden die Geisterpartikel nicht über den Rand gespiegelt. Stattdessen werden sie, ähnlich wie bei dem Ansatz nach Hosseini und Feng (2011), ausgehend von randnahen Partikeln des Rechengebiets in Normalenrichtung zum Rand in festen Abständen, identisch zum mittleren Partikelabstand, extrudiert. Dieses Verfahren ist in Abb. 2.7e veranschaulicht. Der Rand wird in Segmente unterteilt, wobei jeweils das nächstgelegene Partikel jedes Segments identifiziert wird. Nur wenn der Abstand des nächstgelegenen Partikels zu dem jeweiligen Segment geringer als der mittlere Partikelabstand ist, wird es für eine Extrusion der Geisterpartikel berücksichtigt. Ist der Abstand größer und entfernt sich das Partikel weiter vom Rand, wird überprüft, ob ein neues Partikel generiert werden muss. Dafür wird ein kegeliges Suchgebiet aufgespannt (vgl. Abb. 2.7e), wobei die Kegelspitze am zuvor genannten Partikel positioniert wird und die Kegelachse in Richtung des größten Partikeldefizits in der Nähe des Partikels zeigt. Befindet sich keines der Nachbarpartikel innerhalb des Suchgebiets, wird ein neues Partikel auf der Achse des Kegels in einem Abstand zu der Kegelspitze gleich dem mittleren Partikelabstand generiert. Der Öffnungswinkel des kegelförmigen Suchgebiets wird dynamisch während der Simulation verändert, um die Anzahl der Partikel im Rechengebiet zu kontrollieren. Partikel, die einen offenen Rand durchqueren, werden gelöscht. Monteleone et al. (2017) stellen heraus, dass das Verfahren für gemischte Ein- und Ausströmzustände am selben offenen Rand funktioniert. Im Falle von Dirichlet-Randbedingungen für den Druck wird dieser ähnlich wie bei dem Verfahren nach Kunz et al. (2016) an den extrudierten Geisterpartikeln basierend auf den Werten des Rands und des Partikels des Rechengebiets, von dem das Geisterpartikel extrudiert wurde, extrapoliert.

Leroy et al. (2016) und Ferrand et al. (2017) schlagen die Verwendung von Randintegralen vor, um Randbedingungen an offenen Rändern zu definieren. Das Verfahren ist in Abb. 2.7f veranschaulicht. Der von Kassiotis et al. (2013) erstmals vorgestellte Algorithmus wird genutzt, um Partikel direkt im Rechengebiet zu generieren und zu löschen. Leroy et al. (2016) stellen heraus, dass der Ein- und Auslass von Partikelmasse an den offenen Rändern zeitlich gleichmäßig vollzogen werden muss, um Störungen der Strömungsvariablen zu vermeiden. Darüber hinaus führen Ferrand et al. (2017) an, dass bei der instantanen Umwandlung eines Geisterpartikels zu einem Partikel des Rechengebiets, wie es bei den Ansätzen mit Pufferzonen der

Fall ist, zu Stößen kommen kann. Daher wird vorgeschlagen, die Partikelgenerierung und die Partikellöschung nicht durch instantane Ereignisse (wie bei allen zuvor vorgestellten Verfahren) zu realisieren, sondern die Masse randnaher Partikel zeitlich kontinuierlich zu variieren. Es wird außerdem vorgeschlagen, diese zeitliche Variation als Funktion des Massenstroms, der an den Randsegmenten definiert ist, zu beschreiben. Dadurch ergibt sich der Vorteil, dass die Massenvariation der Partikel im Rechengebiet zu jedem Zeitpunkt im Gleichgewicht mit den direkt am Rand spezifizierten ein- und austretenden Massenströmen steht. Die Topologie des Rands setzt sich bei diesem Verfahren, wie in Abschnitt 2.1 bereits im Zusammenhang mit festen Wänden erläutert wurde, aus Randsegmenten und Eckpartikeln zusammen, wobei die Eckpartikel die Verbindungspunkte zwischen den Randsegmenten darstellen und im Gegensatz zu den Partikeln des Rechengebiets statisch sind. Da die Geschwindigkeit und die Dichte an den Randsegmenten definiert sind, kann an jedem Randsegment ein Massenstrom berechnet werden. Die Massenströme der an einem Eckpartikel verbundenen Segmente werden in eine Massenänderung des Eckpartikels umgesetzt (vgl. Abb. 2.7f). Erreicht die Masse des Eckpartikels die mittlere Partikelmasse, wird ein neues Partikel an der Stelle des Eckpartikels generiert. In diesem Fall wird die Masse des Eckpartikels entsprechend der Masse des generierten Partikels reduziert. Durchquert ein Partikel ein Randsegment, wird die Masse dieses Partikels an die mit dem Randsegment verbundenen Eckpartikel gemäß einer Abstandswichtung verteilt. Je kleiner der Abstand zwischen einem Eckpartikel und dem zu löschenden Partikel ist, desto mehr Masse wird an dieses Eckpartikel übertragen. Durch die Abstandswichtung wird die instantane räumliche Umverteilung der Masse möglichst begrenzt. Ferrand et al. (2017) führen außerdem an, dass das Verfahren auch für gemischte Ein- und Ausströmbedingungen am selben Rand funktioniert. Für einen WCSPH-Ansatz leiten Ferrand et al. (2017) Randbedingungen basierend auf der Lösung eines an jedem Randsegment definierten Riemann-Problems ab. Dabei wird das Randsegment gemäß dieses Riemann-Problems als Diskontinuität zwischen den Zuständen außerhalb und innerhalb des Rechengebiets angesehen. Bei dem erläuterten Verfahren liegen drei charakteristische Wellen vor, über die die Strömungszustände über das Randsegment transportiert werden. Auf Basis der Ausbreitungsrichtungen und Ausbreitungsgeschwindigkeiten dieser Wellen ergeben sich verschiedene Zustandszonen als Funktion der Zeit und des Abstands zum Randsegment. Zur Lösung des entsprechenden Riemann-Problems werden die Informationen der Strömungsvariablen außerhalb und innerhalb des Rechengebiets benötigt. Die Informationen außerhalb des Rechengebiets werden über die Randbedingungen bestimmt. Die Informationen innerhalb des Rechengebiets werden unter Anwendung eines Shepard-Filters (Shepard, 1968) an dem Randsegment von dem inneren Rechengebiet interpoliert. Über Riemann-Invarianten sowie Rankine-Hugoniot-Beziehungen lassen sich die zeitlichen Änderungen der Strömungsvariablen in den verschiedenen Zustandszonen beschreiben. Die Strömungsvariablen des Randsegments zum neuen Zeitpunkt ergeben sich entsprechend den Strömungsvariablen der Zustandszone, die das Randsegment zu diesem neuen Zeitpunkt überlappt.

Ein offener Rand ist ein wesentlicher Bestandteil einer Kopplungsschnittstelle eines Embedded-SPH-Verfahrens. Wie eingangs erläutert wurde, müssen beliebig komplizierte Strömungsfelder zwischen den Rechengebieten advektiert werden. Es ist wichtig, dass die Behandlung dieser Strömungsfelder durch das Verfahren für offene Ränder bei der SPH-Methode realisierbar ist.

Wie bereits erläutert wurde, sind die bisher vorgestellten Verfahren, die auf dem Prinzip der Pufferzonen basieren, daher für eine Embedded-SPH-Methode ungeeignet. Bei den Verfahren, die zwar auf der Verwendung von Geisterpartikeln, aber nicht auf dem Prinzip der Pufferzonen basieren, wurden bisher Ansätze gewählt, bei denen die Geisterpartikel während der Simulation basierend auf der relativen Position zwischen randnahen Partikeln und dem Rand generiert werden. Wie zum Ende von Abschnitt 2.1 erläutert wurde, ist diese Art der Definition der Geisterpartikel allerdings mit Nachteilen behaftet. Der in Abschnitt 2.1 identifizierte und bevorzugte Ansatz auf Basis von statischen Geisterpartikeln wurde bisher für offene Ränder nicht in Betracht gezogen. Darüber hinaus ist die Art der Massenänderung der Partikel und der damit einhergehenden Generierung und Löschung von Partikeln an offenen Rändern kritisch im Hinblick auf unphysikalische Oszillationen der Strömungsvariablen. Bei den meisten Verfahren werden zeitlich instantane Ereignisse definiert, zu denen ein Partikel, und damit die gesamte mittlere Partikelmasse eines Partikels, am Rand hinzugefügt oder gelöscht wird. Zur Vermeidung der unphysikalischen Oszillationen der Strömungsvariablen ist es allerdings vorteilhaft, die Partikelmasse kontinuierlich über der physikalischen Zeit zu ändern. Dieser Ansatz wurde bisher nur von Ferrand et al. (2017) im Zusammenhang mit einem Verfahren basierend auf Randintegralen verfolgt. Eine Kombination aus dem Ansatz zur zeitlich kontinuierlichen Massenänderung der Partikel an einem offenen Rand und der Verwendung von statischen Geisterpartikeln wurde bisher noch nicht in Betracht gezogen. Im folgenden Abschnitt werden Verfahren für gekoppelte Randbedingungen vorgestellt.

2.3 Verfahren für gekoppelte Randbedingungen

Im Folgenden werden Verfahren zur Kopplung der SPH- und der FV-Methode erläutert. Dazu wird erneut das Rechengebiet Ω aus Abb. 2.2a betrachtet. Dieses wird nun, wie in Abb. 2.8a dargestellt ist, in zwei Rechengebiete Ω_A und Ω_B zerlegt, die miteinander gekoppelt werden sollen. Wie in den nächsten Absätzen erläutert wird, gibt es dabei verschiedene Möglichkeiten, die Rechengebiete zueinander anzuordnen.

Im Bereich der gitterbasierten Methoden ist eine Kopplung verschiedener Rechengebiete unter dem Begriff Domain Decomposition Method (DDM) bekannt. Tang et al. (2021) diskutieren verschiedene Ansätze im Bereich der DDM-Methode. Es wird zwischen zwei grundsätzlichen Arten der Zerlegung unterschieden. Der erste Ansatz, der Patched-Grid(PG)-Ansatz (Rai, 1986), bezieht sich auf die Verwendung eines Rands $\partial\Omega_{AB}$, über den die beiden Gebiete Ω_A und Ω_B voneinander abgegrenzt werden. In Abb. 2.8b ist der Ansatz anhand der vergrößerten Darstellung des in Abb. 2.8a markierten Bereichs A veranschaulicht. Es liegt ein gemeinsamer Rand $\partial\Omega_{AB} = \partial\Omega_A = \partial\Omega_B$ vor, der gleich den Rändern $\partial\Omega_A$ und $\partial\Omega_B$ ist, die die Gebiete Ω_A und Ω_B im Kopplungsbereich begrenzen. Bei dem zweiten Ansatz, dem Overlapping-Grid(OG)-Ansatz (Benek et al., 1985, 1983), wird eine Überlappung der beiden Rechengebiete realisiert. Dieser Ansatz wird auch Chimera-Methode genannt. In Abb. 2.8c ist der Ansatz anhand der vergrößerten Darstellung des in Abb. 2.8a markierten Bereichs A veranschaulicht. In diesem Fall liegt kein gemeinsamer Rand $\partial\Omega_{AB}$ vor ($\partial\Omega_{AB} = \emptyset$) und die beiden Ränder $\partial\Omega_A \subset \Omega_B$ und $\partial\Omega_B \subset \Omega_A$ sind vollständig in dem jeweils gekoppelten Gebiet enthalten. Durch diese beiden

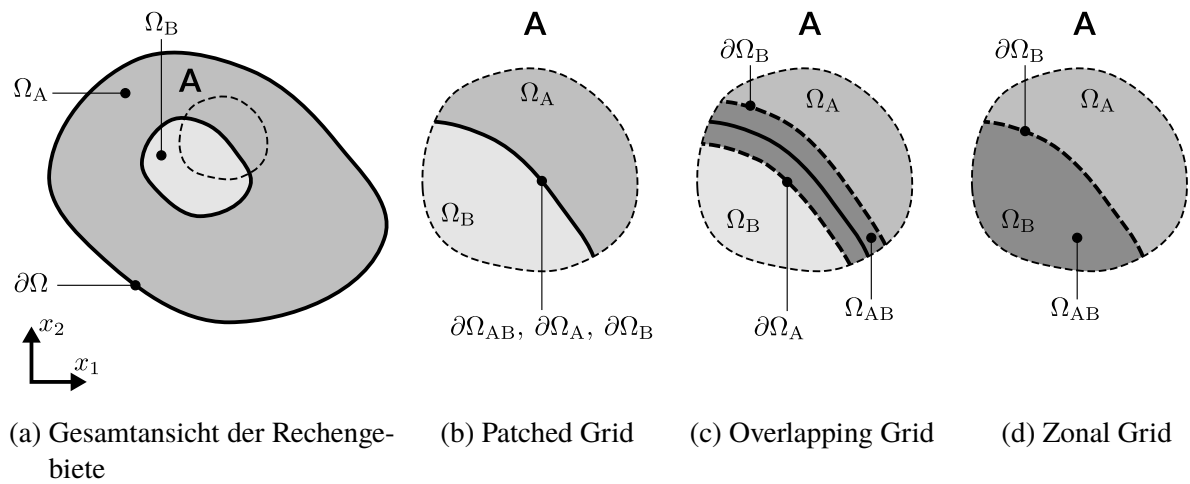


Abbildung 2.8: Grundsätzliche Ansätze zur Kopplung zweier Rechengebiete

Ränder wird das Überlappungsgebiet $\Omega_{AB} = \Omega_A \cap \Omega_B$ begrenzt. Ein weiterer Ansatz, der als Spezialfall des OG-Ansatzes betrachtet werden kann, wird Zonal-Grid(ZG)-Ansatz genannt und von Dabonneville et al. (2019) beschrieben. In Abb. 2.8d ist der Ansatz anhand der vergrößerten Darstellung des in Abb. 2.8a markierten Bereichs A veranschaulicht. In diesem Fall ist das Gebiet $\Omega_B = \Omega_{AB} \subset \Omega_A$ vollständig in dem Gebiet Ω_A enthalten und damit identisch mit dem Überlappungsgebiet Ω_{AB} . Außerdem umfasst das Gebiet $\Omega_A = \Omega$ das gesamte Rechengebiet Ω . Damit existiert auch kein Rand $\partial\Omega_A$.

Bei der Kopplung zweier FV-Rechengebiete ergeben sich Vor- und Nachteile der zuvor eingeführten Ansätze. Ein Ausschnitt um die Rechengitter zweier FV-Rechengebiete Ω_A und Ω_B in dem Bereich des Kopplungsgebiets ist in Abb. 2.9 veranschaulicht. Anhand der Skizzen in Abb. 2.9 soll der Informationsfluss an der markierten Zelle des Rechengebiets Ω_B erläutert werden. In Abb. 2.9a ist der PG-Ansatz dargestellt. Die Flächenelemente der Ränder $\partial\Omega_A$ und $\partial\Omega_B$ sind dabei in einer Explosionsdarstellung gezeigt, um den Informationsfluss besser herauszustellen. Da bei dem PG-Ansatz der Rand Ω_{AB} durch beide Gebiete geteilt wird, ergibt sich auf natürliche Weise eine konservative Kopplung. Der Fluss, der aus der markierten Zelle des Gebiets Ω_A durch den Rand $\partial\Omega_A$ emittiert wird, wird durch den Rand $\partial\Omega_B$ in der markierten Zelle des Gebiets Ω_B empfangen. In dem Beispiel in Abb. 2.9a sind die räumlichen Diskretisierungen der Ränder $\partial\Omega_A$ und $\partial\Omega_B$ identisch, wodurch eine konservative Übertragung des numerischen Flusses zwischen den Gebieten trivial ist. Der Fall, bei dem die Ränder nicht die gleiche räumliche Diskretisierung aufweisen, ist in Abb. 2.9b dargestellt. In diesem Fall müssen die numerischen Flüsse, die durch die markierten Zellen des Gebiets Ω_A emittiert werden, auf die überlappenden Flächenelemente des gekoppelten Rands $\partial\Omega_B$ verteilt werden. In der dargestellten Anordnung empfängt somit die markierte Zelle des Gebiets Ω_B Flüsse von zwei Zellen des Gebiets Ω_A . Die Verteilung der Flüsse ist proportional zu den geometrischen Flächen, die sich aus den Überlappungen der Flächenelemente der gekoppelten Ränder ergeben (Aguerre et al., 2019; Farrell und Maddison, 2011). Die auf natürliche Weise zu realisierende Erhaltung konservativer Größen ist der Vorteil des PG-Ansatzes. Zudem ist die Aufprägung von Kopplungsbedingungen an dem Rand eines Rechengebiets äquivalent zu dem Ansatz zur Aufprägung von nichtgekoppelten Randbedingun-

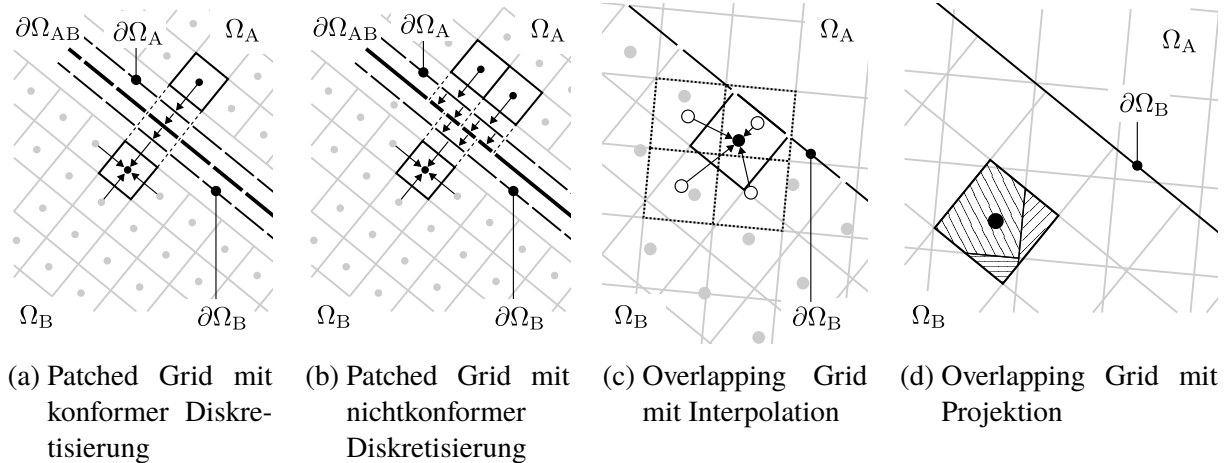


Abbildung 2.9: Informationsfluss bei verschiedenen Verfahren zur Kopplung zweier FV-Rechengebiete

gen, der üblicherweise in CFD-Software für die FV-Methode implementiert ist. Dieser Ansatz wurde eingangs dieses Kapitels als vorteilhaft herausgestellt.

Bei der Anwendung überlappender Gitter (OG-Ansatz) besteht hingegen der Vorteil, dass die Gebietsränder der zu koppelnden Gebiete nicht konform zueinander sein müssen. Dies erleichtert die Gittergenerierung im Vergleich zum PG-Ansatz erheblich. Bei dem OG-Ansatz können die Gitter unabhängig voneinander definiert sein, solange die zur Kopplung notwendigen Gitterpunkte des einen Gebiets innerhalb des anderen Gebiets liegen. Der einfachste Ansatz zur Kopplung der beiden Gebiete basierend auf dem OG-Ansatz ist in Abb. 2.9c dargestellt. Die markierte Zelle des Rechengebiets Ω_B liegt direkt an dem Rand $\partial\Omega_B$ an. Diese Randzelle wird zum Aufprägen von Randbedingungen für das Rechengebiet Ω_B verwendet. Diese Randbedingungen werden durch eine Interpolation der Werte der umliegenden Zellen des Rechengebiets Ω_A (in Abb. 2.9c die Zellen mit den weiß gefüllten Mittelpunkten) an die Randzelle übertragen. Der Nachteil dieses Ansatzes ist, dass die Interpolation die Erhaltung verletzt (Pärt-Enander und Sjögreen, 1994). Ansätze für eine konservative Kopplung über die Interpolation von numerischen Flüssen an den Flächenelementen des Rands $\partial\Omega_B$ werden z. B. von Berger (1987) entwickelt. Neuhauser (2014) diskutiert darüber hinaus verschiedene Interpolationsansätze. Für den in Abb. 2.9c dargestellten Ansatz bleibt noch herauszustellen, dass die Lösungen der beiden Gebiete Ω_A und Ω_B innerhalb des Kopplungsgebiets Ω_{AB} nicht identisch sind, da für jedes Gebiet bis auf den Bereich an den Randzellen eine separate Lösung berechnet wird. Bei allen auf dem OG-Ansatz basierenden Verfahren besteht der Nachteil, dass die Aufprägung von Kopplungsbedingungen anders als bei dem PG-Ansatz nicht äquivalent zu dem in der FV-Methode üblicherweise verwendeten Ansatz für Randbedingungen ist.

Der Kopplungsansatz nach Mancip (2003) beruht ebenfalls auf dem OG-Ansatz. Er unterscheidet sich allerdings grundlegend von dem Prinzip des im letzten Absatz vorgestellten Interpolationsverfahrens. Der Ansatz nach Mancip (2003) ist konservativ, da statt einer Punktinterpolation (vgl. Abb. 2.9c) eine Projektion der Erhaltungsgrößen im Kopplungsgebiet Ω_{AB} angewendet wird. Hierfür wird jeder der beiden Lösungen im Gebiet Ω_{AB} eine Übergangsfunktion zugeordnet.

Die Übergangsfunktion ist so definiert, dass sie die entsprechende Lösung des Rechengebiets Ω_A bzw. Ω_B mit Reduzierung des Abstands einer Gitterzelle zu dem entsprechenden Rand $\partial\Omega_A$ bzw. $\partial\Omega_B$ weniger stark gewichtet. An den Randzellen des Gebiets Ω_A bzw. Ω_B (vgl. Abb. 2.9c) wird durch die Übergangsfunktion sichergestellt, dass die Lösung gleich der Lösung des Gebiets Ω_B bzw. Ω_A ist. Zu jedem Zeitschritt wird zuerst die Lösung für jedes Rechengebiet (einschließlich des Bereichs im Überlappungsgebiet Ω_{AB}) separat berechnet. Danach wird die eingangs erwähnte Projektion angewendet. Unter Anwendung der Übergangsfunktionen wird eine Erhaltungsgröße an einer Zelle innerhalb des Überlappungsgebiets Ω_{AB} als Kombination aus der Lösung an dieser Zelle und der Lösungen an den überlappenden Zellen des gekoppelten Rechengebiets formuliert. Bei dieser Formulierung werden zudem die Erhaltungsgrößen an den überlappenden Zellen auf Basis der Volumina, die sich aus den Überlappungen ergeben, gewichtet. In Abb. 2.9d ist dies für die markierte Zelle des Gebiets Ω_B dargestellt. Drei Zellen des gekoppelten Gebiets Ω_A überlappen diese Zelle. Die schraffierten Flächen repräsentieren die Volumina, die sich aus den Überlappungen mit den jeweiligen Zellen ergeben. Eine Erhaltungsgröße an der markierten Zelle ergibt sich demnach als Kombination aus der Lösung an dieser Zelle und der volumengewichteten Lösung der drei überlappenden Zellen des gekoppelten Gebiets. Entsprechend ist die Methode auch zur Kopplung von Gittern anwendbar, die nicht konform zueinander sind. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass es auch in diesem Fall konservativ ist. Allerdings ist in diesem Fall von einer erhöhten numerischen Dissipation des Verfahrens auszugehen. Zudem ist die Berechnung der Schnittvolumina zwischen den Zellen notwendig, die abhängig von den Zellformen und der Art der Überlappungen rechenintensiv sein kann. Im Falle von statischen Gittern ist diese Berechnung nur einmal vor der Simulation erforderlich und erhöht somit bei der Kopplung zweier FV-Rechengebiete nicht die Rechenzeit während der Simulation. Bei der Kopplung mit Methoden, bei denen die numerischen Stützstellen, wie z. B. bei der SPH-Methode, nicht statisch sind, wäre die Berechnung der Schnittvolumina zu jedem Zeitpunkt notwendig. Dies hätte einen erheblichen Rechenaufwand zur Konsequenz.

Im Zusammenhang mit gitterbasierten Methoden existieren also einige vielversprechende Ansätze zur Kopplung zweier Rechengebiete. Es muss nun diskutiert werden, ob diese Ansätze zur Kopplung eines SPH-Verfahrens mit einem FV-Verfahren geeignet sind. Hierbei bestehen diverse Schwierigkeiten, da die SPH-Methode auf der Lagrange'schen und die FV-Methode auf der Euler'schen Betrachtungsweise beruhen. Daher muss in der Regel an dem Kopplungsrand oder in dem Kopplungsgebiet mit dem Ein- und Austreten von Partikeln umgegangen werden, während die Zellen der FV-Methode statisch sind. Darüber hinaus ist der numerische Fluss, den ein Partikel bei der SPH-Methode mit umgebenden Volumenelementen austauscht, aufgrund der Anwendung eines Kernels räumlich anders verteilt als bei der FV-Methode, bei der jede Zelle nur mit den geometrisch angrenzenden Nachbarzellen Flüsse austauscht. Außerdem gibt es (im Gegensatz zu den Zellen bei der FV-Methode) bei der SPH-Methode keine Information über die geometrische Form der Partikel. Lediglich das Volumen und die Position eines Partikels sind bekannt. Da bei der FV-Methode die Flüsse über die die Zellen verbindenden Flächenelemente ausgetauscht werden, stellt diese Eigenschaft der SPH-Methode ein Problem dar. Im Folgenden werden Verfahren zur Kopplung der SPH- und der FV-Methode, die auf Basis der bereits in diesem Abschnitt eingeführten Kopplungsansätze entwickelt wurden, vorgestellt und diskutiert.

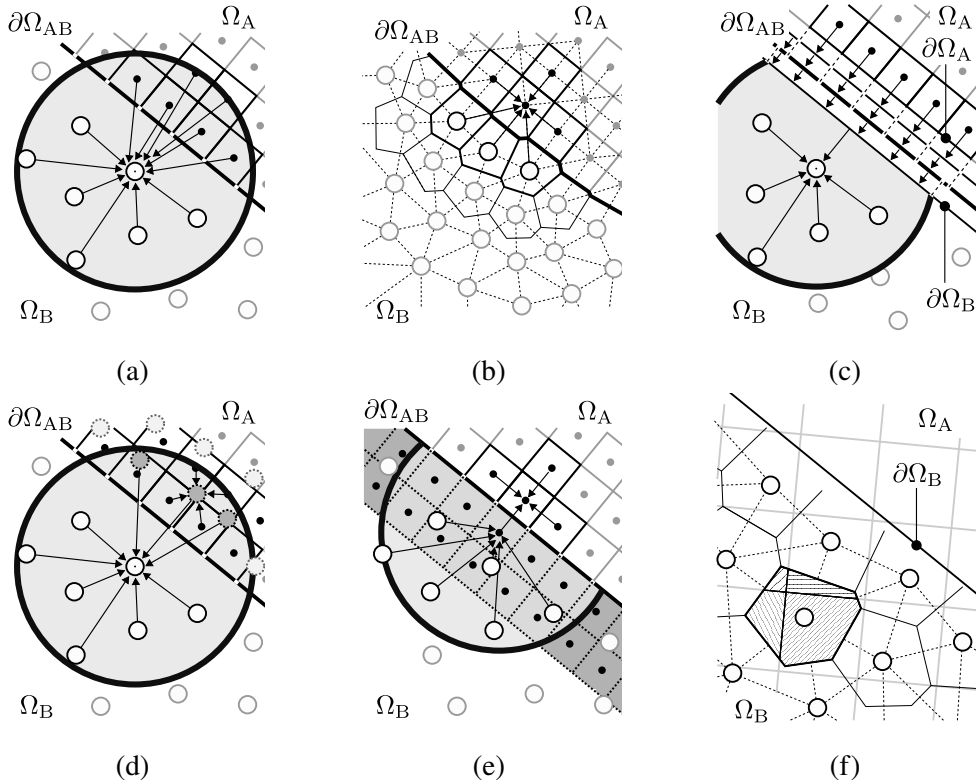


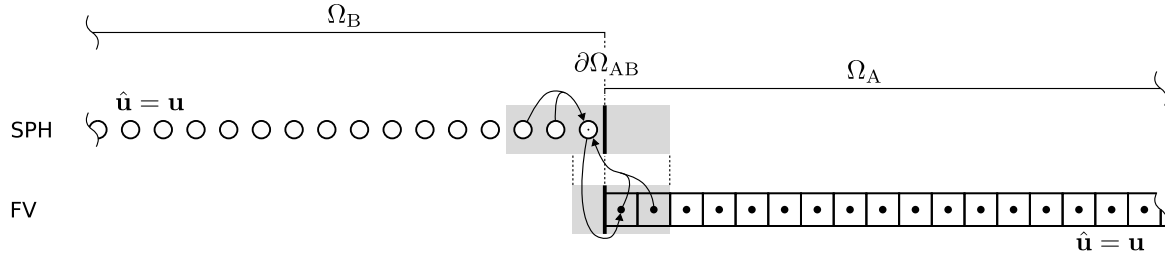
Abbildung 2.10: Informationsfluss bei verschiedenen Verfahren zur Kopplung eines SPH-Rechengebiets mit einem FV-Rechengebiet

Die verschiedenen Ansätze werden anhand von Abb. 2.10 erläutert, in der die Kopplung eines FV-Rechengebiets Ω_A mit einem SPH-Rechengebiet Ω_B dargestellt ist.

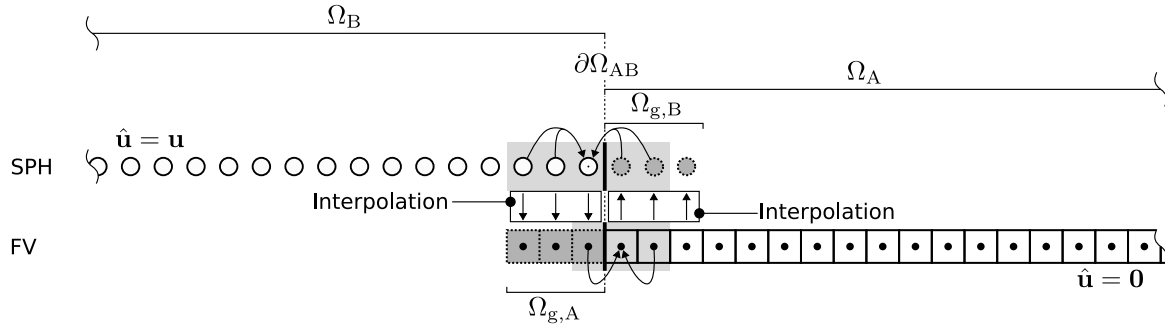
Der PG-Ansatz kann im Zusammenhang mit der Kopplung gitterbasierter Methoden als „direkte“ Kopplung angesehen werden. Dies bedeutet, dass eine Zelle des einen Rechengebiets numerische Flüsse mit der benachbarten Zelle des anderen Rechengebiets austauscht. Bei der Übertragung dieses „direkten“ Ansatzes auf die Kopplung der SPH- und der FV-Methode ergeben sich zwei mögliche Realisierungen. Der erste Ansatz ist in Abb. 2.10a und Abb. 2.10b dargestellt. Das Rechengebiet Ω_B ist durch SPH-Partikel diskretisiert und das Rechengebiet Ω_A durch FV-Zellen. Es besteht ein Rand $\partial\Omega_{AB}$, der die Gebiete voneinander trennt. In Abb. 2.10a ist der Flusstransfer eines Partikels mit den umgebenden Partikeln des Rechengebiets Ω_B und den Zellen des Rechengebiets Ω_A veranschaulicht. Die sechs markierten Zellen befinden sich innerhalb des Einflussgebiets des Kerns des Partikels. Jede dieser Zellen wird wie ein Nachbarpartikel behandelt und emittiert einen numerischen Fluss an das Partikel. Zwecks einer konservativen Kopplung müsste genau dieser Fluss bei der Lösung der entsprechenden Erhaltungsgleichung an der Zelle berücksichtigt werden. In diesem Fall wäre eine Reziprozität der Flüsse gegeben. Diese Reziprozität kann jedoch nicht realisiert werden, da sich in diesem Fall für die betroffenen Zellen eine inkonsistente Verteilung der numerischen Flüsse ergeben würde (Barcarolo, 2013). In Abb. 2.10b ist der konsistente Flusstransfer an einer Zelle des Rechengebiets Ω_A dargestellt. Wie bereits erläutert wurde, wird bei der FV-Methode an einer Zelle ein numerischer Fluss mit den Volumenelementen ausgetauscht, die sich ein Flächenelement mit der Zelle teilen.

Für die Partikel des Rechengebiets Ω_B ist keine geometrische Form definiert. Somit ist per se kein Flächenelement bekannt, über das eine Zelle einen numerischen Fluss mit einem direkt benachbarten Partikel austauschen kann. Zur Lösung dieses Problems behandelt Barcarolo (2013) daher alle Volumenelemente (Zellen und Partikel) als sogenannte Voronoi-Volumina. Die SPH- und die FV-Methode werden in der Arbeit von Barcarolo (2013) daher Voronoi-SPH und Voronoi-FVM genannt. Die Voronoi-Volumina ergeben sich aus einer Delaunay-Triangulierung der Zellmittelpunkte und der Partikelpositionen. Die Delaunay-Triangulierung ist in Abb. 2.10b anhand der gestrichelten Linien dargestellt. Das dazu duale Voronoi-Diagramm, das auch als Dirichlet-Zerlegung bezeichnet wird, ist in Randnähe anhand der durchgehenden Linien dargestellt. Über diese Zerlegung entstehen demnach sowohl im FV- als auch im SPH-Rechengebiet polygonale Volumenelemente, die über Flächenelemente verbunden sind. Der Rand $\partial\Omega_{AB}$ ist durch die Flächenelemente bestimmt, über die die Zellen und die Partikel voneinander abgrenzt werden. Über diese Flächenelemente kann der numerische Fluss zwischen einer Zelle und einem Partikel im Sinne der FV-Methode konsistent beschrieben werden. Eine Reziprozität der Flüsse zwischen der Zelle und den interagierenden Partikeln kann auch mit dieser Methode nicht realisiert werden, da sich in diesem Fall für die betroffenen Partikel eine inkonsistente Verteilung der numerischen Flüsse ergeben würde (Barcarolo, 2013).

Barcarolo (2013) kombiniert daher beide zuvor erläuterten Ansätze. Der Informationsfluss bei der Methode nach Barcarolo (2013) ist in Abb. 2.11a veranschaulicht. Das SPH-Rechengebiet ist in der oberen Zeile und das FV-Rechengebiet in der unteren Zeile angeordnet. Der an gewissen Volumenelementen zentrierte grau hinterlegte Bereich umfasst das Gebiet der Nachbarstützstellen, die zur Berechnung des numerischen Flusses an diesen Volumenelementen verwendet werden müssen. Die Verbindungspfeile zwischen den Volumenelementen stellen den numerischen Fluss dar. Für die Volumenelemente nahe dem Kopplungsrand $\partial\Omega_{AB}$ ergeben sich leere Bereiche innerhalb ihres Interaktionsbereichs. Diese Bereiche werden durch die Stützstellen des jeweils gekoppelten Gebiets kompensiert. Die Zellen im Interaktionsbereich eines randnahen Partikels werden bei der Berechnung der SPH-Operatoren verwendet, und andersherum werden die Partikel im Interaktionsbereich einer randnahen Zelle bei der Berechnung der FV-Operatoren genutzt. Das Ziel in der Arbeit von Barcarolo (2013) ist, Fluide mit freien Oberflächen zu berechnen. Die SPH-Methode (Gebiet Ω_B) wird daher in dem Bereich an freien Fluidoberflächen angewendet. Das FV-Rechengebiet umfasst den übrigen Teil des Fluids. Sowohl die SPH-Partikel als auch die FV-Zellen werden mit der Strömung advektiert. Das heißt, dass die Geschwindigkeit der numerischen Stützstellen $\hat{\mathbf{u}}$ gleich der Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ ist. Für diese Behandlung der Stützstellen wird der Arbitrary-Lagrangian-Eulerian(ALE)-Ansatz (Donea et al., 2004) verwendet. Die entsprechende Applizierung der ALE-Methode auf die SPH-Methode wird SPH-ALE genannt und von Vila (1999) eingeführt. Über das SPH-ALE-Verfahren lassen sich die Flüsse zwischen den Zellen bei der FV-Methode und zwischen den Partikeln bei der SPH-Methode basierend auf dem Godunov-Ansatz (Godunov und Bohachevsky, 1959) gleichermaßen formulieren. Dabei wird die Position zwischen zwei Zellen bzw. zwei interagierenden Partikeln als Diskontinuität der Strömungszustände der beiden Volumenelemente betrachtet. Diese Zustände werden mit dem Monotonic-Upstream-centered-Scheme-for-Conservation-Laws(MUSCL)-Ansatz (van Leer, 1979) mit minmod-Limiter bestimmt. Hierfür



(a) Verfahren nach Barcarolo (2013)



(b) Verfahren nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016)

Abbildung 2.11: Vereinfachte Darstellung zum Informationsfluss im Bereich der Kopplung bei Verfahren basierend auf dem PG-Ansatz

ist die Berechnung der Gradienten der Strömungsvariablen an den Zellen bzw. Partikeln notwendig. Die Lösung des resultierenden Riemann-Problems wird über einen approximativen Riemann-Löser erreicht. Zu jedem Zeitpunkt wird die freie Oberfläche detektiert und das SPH-Gebiet entsprechend dynamisch bestimmt. Der Rand $\partial\Omega_{AB}$ wird ebenfalls abhängig von der freien Oberfläche advektiert. Somit kann der Zustand eines Volumenelements zu jedem Zeitpunkt von einem Partikel zu einer Zelle oder umgekehrt wechseln. Das Verfahren wird an dem Fall eines generischen Dammbbruchs validiert. Durch die gleichmäßige Advektion der Zellen und Partikel kann eine homogene räumliche Verteilung der Zellen und Partikel realisiert werden. In der vorliegenden Arbeit werden die Zellen allerdings nicht mit der Strömung advektiert ($\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$). Daher sind entsprechend große relative Geschwindigkeiten zwischen den Partikeln und den statischen Zellen gegeben. Es ist zu erwarten, dass sich unter diesen Umständen bei der Dirichlet-Zerlegung numerisch ungünstige Zellformen am Rand $\partial\Omega_{AB}$ ergeben können und diese Zerlegung zeitlich stark variieren kann. Das Verfahren nach Barcarolo (2013) beruht darauf, dass die Partikel und die Zellen ein zusammenhängendes Gitter bilden. Es ist daher nicht klar, wie mit diesem Ansatz Partikel durch den Rand $\partial\Omega_{AB}$ ein- und ausgetragen werden können. Außerdem ist der Ansatz nicht konservativ, da unterschiedliche numerische Operatoren bei der FV- und der SPH-Methode verwendet werden. Ein weiterer Nachteil ist, dass zu jedem Zeitpunkt eine Dirichlet-Zerlegung durchgeführt werden muss. Hierbei müssen der Aufwand und die Robustheit dieser Methode in Frage gestellt werden.

In Abb. 2.10c ist ein weiterer Ansatz dargestellt, der von Barcarolo (2013) diskutiert wird und ebenfalls auf dem PG-Ansatz basiert. Hierbei wird die Kopplung über den Rand $\partial\Omega_{AB}$ realisiert und nicht durch einen direkten Austausch numerischer Flüsse zwischen Partikeln und Zellen.

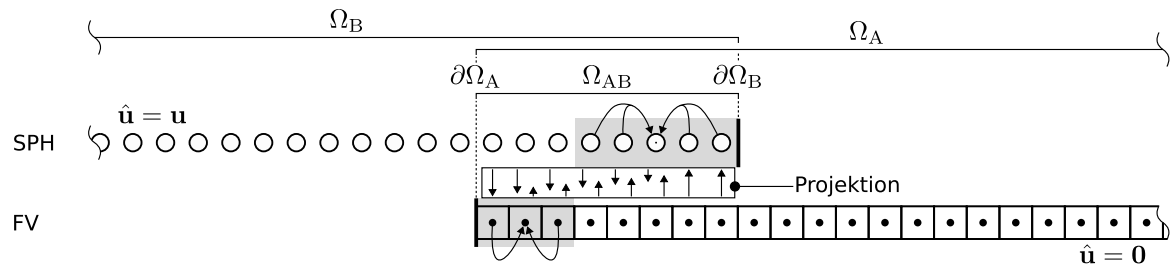
Bei der SPH-Methode muss daher der Ansatz basierend auf Randintegralen, der von de Leffe et al. (2009), Ferrand et al. (2012) und Kulasegaram et al. (2004) entwickelt und in den vorangegangenen Abschnitten erläutert wurde, genutzt werden. Zwischen einem Partikel und dem Randbereich, der sich aus der Schnittfläche des Rands $\partial\Omega_{AB}$ und des Einflussgebiets des Kerns ergibt, wird ein numerischer Fluss ausgetauscht. Dieser Fluss kann auf die Flächenelemente der Zellen, die diesen Randbereich überlappen, übertragen werden. Diese Methode wäre konservativ und hätte den zu Beginn dieses Kapitels erläuterten Vorteil, dass die Randbedingungen, wie bei der FV-Methode üblich, am Rand aufgeprägt werden. Barcarolo (2013) weist allerdings darauf hin, dass es zu Instabilitäten führen kann, wenn eine Identität zwischen dem numerischen Fluss vom Rand an die Partikel und dem numerischen Fluss von den Zellen an den Rand erzwungen wird. Außerdem müssen zu jedem Zeitpunkt die Schnittmengen zwischen dem Einflussgebiet des Kerns und dem Rand bestimmt werden, um den numerischen Fluss des Rands an das Partikel zu berechnen. Es wurde bereits erwähnt, dass dies einen zusätzlichen Berechnungsaufwand bedeutet.

Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016) entwickeln eine hybride Methode, die ebenfalls auf dem PG-Ansatz beruht. Es ist das Ziel, von der numerischen Effizienz der FV-Methode bei der Berechnung der einphasigen Strömung und den Vorteilen bei der Berechnung komplexer freier Fluidoberflächen mit der SPH-Methode zu profitieren. Dazu wird ein ISPH-Lösungsverfahren (PANORMUS-SPH) in dasselbe Softwarepaket eines FV-Lösungsverfahrens (PANORMUS-FVM) implementiert.⁷ Beide Verfahren basieren auf einem inkompressiblen Modell. Das SPH-Verfahren wird durch den XSPH-Ansatz nach Monaghan (1994) und durch einen Partikelverschiebungsansatz nach Xu et al. (2009) komplettiert. Der Informationsfluss bei dieser Methode ist in Abb. 2.11b veranschaulicht. Anders als bei dem Verfahren nach Barcarolo (2013) gibt es keinen direkten Austausch numerischer Flüsse zwischen den Rechengebieten. Stattdessen wird die Kopplung über Geistergebiete $\Omega_{g,A}$ und $\Omega_{g,B}$ realisiert, die die Gebiete Ω_A und Ω_B innerhalb der gekoppelten Gebiete erweitern. Somit wird eine indirekte Kopplung implementiert, bei der die Geisterpartikel bzw. Geisterzellen (dunkelgrau mit gestricheltem Rand in Abb. 2.11b) numerische Flüsse an die randnahen Stützstellen der jeweiligen Rechengebiete übertragen. Die Strömungsvariablen an den Geisterpartikeln bzw. Geisterzellen werden durch eine Interpolation der Werte an Stützstellen des Rechengebiets, das durch das jeweilige Geistergebiet überlappt wird, bestimmt. Dieses Prinzip ist in Abb. 2.10d und Abb. 2.10e dargestellt. Zur Interpolation der Strömungsvariablen an den Geisterzellen wird ein Shepard-Filter (Shepard, 1968) verwendet (vgl. Abb. 2.10e). Die Strömungsvariablen an den Geisterpartikeln werden unter Anwendung einer Taylor-Reihe erster Ordnung von der zum Geisterpartikel nächstgelegenen Zelle extrapoliert. Eine Dirichlet-Zerlegung ist bei diesem Verfahren nicht erforderlich. Da die FV-Zellen und der Rand $\partial\Omega_{AB}$ statisch sind ($\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$), muss der Partikelein- und -austrag durch den Rand $\partial\Omega_{AB}$ berücksichtigt werden. Hierfür wird ein Verfahren ähnlich dem von Monteleone et al. (2017) verwendet, das in Abschnitt 2.2 vorgestellt wurde (vgl. Abb. 2.7e). Über dieses Verfahren wird zudem die Generierung der Geisterpartikel realisiert. Das Verfahren wird an den Testfällen einer stehenden Welle in einem geschlossenen Rechengebiet und einer propagierenden Welle in einem offenen Kanal validiert. Mit den vorliegenden Validierungsfällen wird gezeigt, dass Strö-

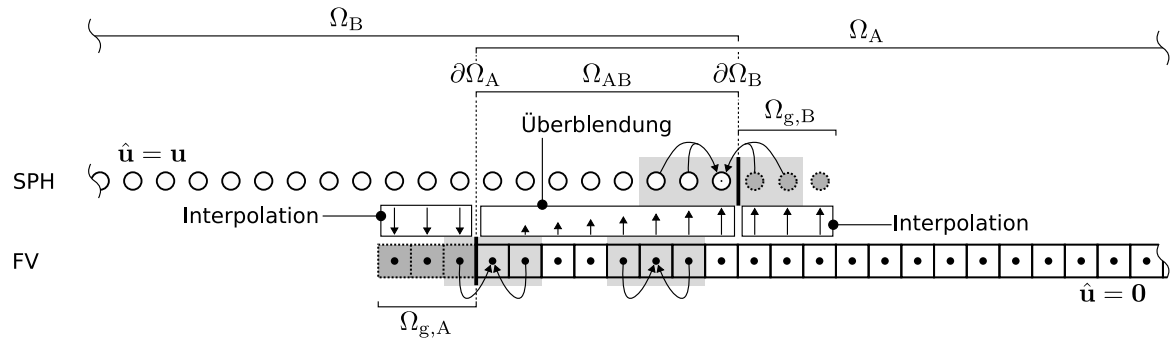
⁷PANORMUS steht für PARallel Numerical Open-souRce Model for Unsteady flow Simulations.

mungsfelder ohne sichtbare Diskontinuitäten über die Grenzfläche übertragen werden können. Da ein implizites Zeitschrittverfahren für beide Rechengebiete verwendet wird, müssen die in den Geistergebieten interpolierten Werte zu denselben Zwischenzeitschritten bereitstehen. Da bei der SPH-Interpolation an den Zellen Geisterpartikel und bei der Berechnung der räumlichen Ableitung zur Bildung der Taylor-Reihe Geisterzellen berücksichtigt werden, ist ein iterativer Kopplungsansatz nötig. Es ist davon auszugehen, dass dies die Rechenzeit erhöht. Darüber hinaus ist das Verfahren nicht konservativ. Napoli et al. (2016) zeigen, dass die Partikelanzahl, die für das inkompressible Verfahren proportional zur Masse ist, im Rechengebiet über die Zeit leicht abnimmt. Diese Abnahme ist von dem Öffnungswinkel des kegelförmigen Suchgebiets (vgl. Abb. 2.7e in Abschnitt 2.2) abhängig. In den Arbeiten von Monteleone et al. (2017) und Monteleone et al. (2018) wird eine dynamische Anpassung des Öffnungswinkels vorgeschlagen, um die Partikelanzahl im Rechengebiet im zeitlichen Mittel konstant zu halten. Über diesen „globalen“ Ansatz ist allerdings nicht sichergestellt, dass die Massenströme des SPH- und des FV-Rechengebiets am Rand $\partial\Omega_{AB}$ zu jedem Zeitpunkt und vor allem an jedem Ort identisch sind. Ein weiterer Nachteil ist, dass für das FV-Verfahren Geisterzellen verwendet werden müssen, was nicht der üblichen Weise zur Aufprägung von Randbedingungen bei der FV-Methode entspricht.

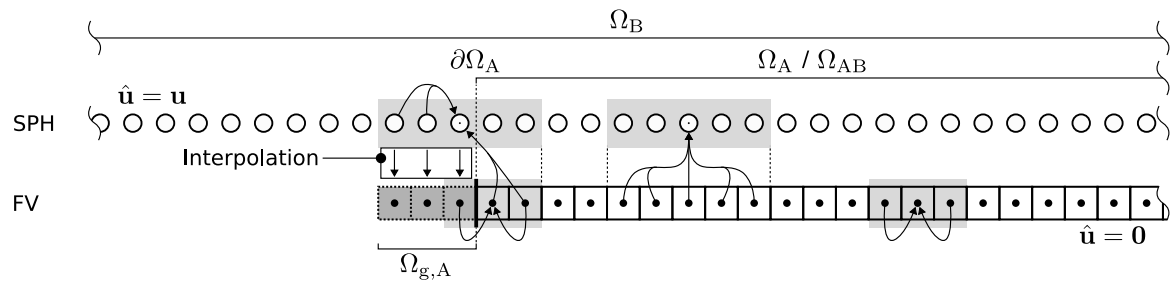
Die nachfolgend vorgestellten Verfahren basieren auf dem OG-Ansatz. Mancip (2003) wendet das bereits im Zusammenhang mit der Kopplung gitterbasierter Rechengebiete vorgestellte Verfahren nach Mancip (2003) auf die Kopplung der SPH- und der FV-Methode an. Der Informationsfluss bei diesem Verfahren ist in Abb. 2.12a veranschaulicht. In dem Überlappungsgebiet Ω_{AB} wird, wie bereits erläutert wurde, eine Kombination der Lösungen beider Rechengebiete unter Anwendung von Übergangsfunktionen und einer Projektion der Erhaltungsgrößen generiert. Erst werden separate Lösungen für die beiden Rechengebiete (auch im Überlappungsbereich Ω_{AB}) berechnet. In einem zweiten Schritt folgt die Projektion der Lösungen. Dafür müssen die Schnittmengen der Volumina der Zellen und Partikel im Überlappungsgebiet Ω_{AB} berechnet werden. Wie bereits erläutert wurde, ist den Partikeln bei der SPH-Methode keine geometrische Form zugeordnet. Daher schlägt Mancip (2003) vor, den Partikeln ein virtuelles Gitter zu überlagern. Die Partikel sind hierbei als Mittelpunkte der Zellen dieses virtuellen Gitters definiert. Die Eckpunkte dieser Zellen werden mit einer Geschwindigkeit ähnlich der Partikelgeschwindigkeit advektiert. Bei diesem Verfahren dürfen sich die Partikelabstände untereinander nicht signifikant ändern, da sich sonst das virtuelle Gitter zu stark deformiert (Neuhauser, 2014). Für hochgradig instationäre Strömungen ist der Ansatz zur Beschreibung der Partikelform somit nicht geeignet. Alternativ kann die von Barcarolo (2013) vorgeschlagene und bereits erläuterte Dirichlet-Zerlegung genutzt werden, um die Form der Partikel zu approximieren. Dieses Prinzip ist in Abb. 2.10f gezeigt. Für eines der Partikel sind die Schnittvolumina zwischen der zugehörigen Voronoi-Zelle und den überlappenden FV-Zellen in Form von schraffierten Flächen dargestellt. Zwar ist dieser Ansatz konservativ, jedoch muss die entsprechende Dirichlet-Zerlegung aufgrund der Dynamik der Partikel zu jedem Zeitpunkt neu generiert werden. Aus demselben Grund ist auch die Bestimmung der Schnittmengen der Volumenelemente zu jedem Zeitpunkt erforderlich. Neuhauser (2014) stellt heraus, dass dies die Rechenzeit erhöht. Außerdem ist die Robustheit dieses Ansatzes in Frage zu stellen.



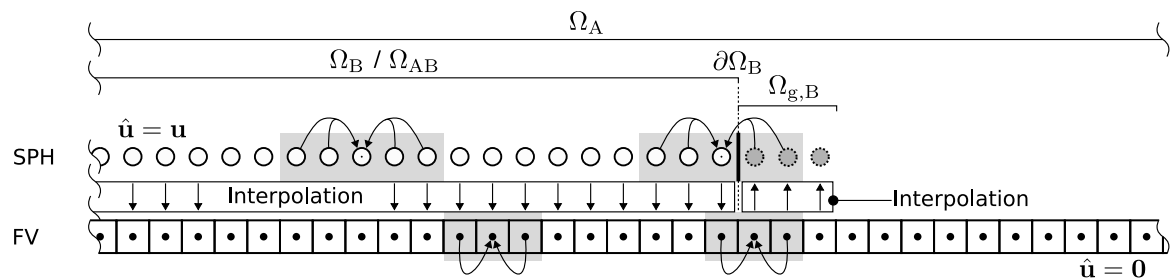
(a) Verfahren nach Mancip (2003)



(b) Verfahren nach Bouscasse et al. (2013), Marrone et al. (2016) und Chiron et al. (2018a)



(c) Verfahren nach Neuhauser (2014)



(d) Verfahren nach Dabonneville (2018)

Abbildung 2.12: Vereinfachte Darstellung zum Informationsfluss im Bereich der Kopplung bei Verfahren basierend auf dem OG- und dem ZG-Ansatz

Die im Folgenden vorgestellten Verfahren basieren ebenfalls auf der Verwendung eines Überlappungsgebiets Ω_{AB} . Jedoch wird hierbei keine Projektion der Erhaltungsgrößen durchgeführt. Aus diesem Grund sind diese Verfahren anders als das Verfahren nach Mancip (2003) nicht konservativ. Auf der anderen Seite ist bei diesen Verfahren keine aufwendige Bestimmung der Form der Partikel sowie der Schnittvolumina zwischen den überlappenden Volumenelementen innerhalb des Überlappungsgebiets notwendig.

Bouscasse et al. (2013) stellen das Fehlen einer zufriedenstellenden Möglichkeit bei der SPH-Methode zur lokalen und anisotropen Variation der räumlichen Auflösung des Rechengebiets heraus. Dies ist die Motivation für die Entwicklung einer Methode zur Einbettung eines SPH-Rechengebiets in externe Rechengebiete, die durch einen anderen Löser (wie z. B. die FV-Methode) oder eine andere räumliche Gebietsauflösung charakterisiert sind. Der Ansatz wird durch Folgearbeiten von Marrone et al. (2016) und Chiron et al. (2018a) mit einem größeren Augenmerk auf die Kopplung der SPH- und der FV-Methode weiterentwickelt. Das Ziel in der Arbeit von Marrone et al. (2016) ist, ein genaues und effizientes Verfahren zur Berechnung von Strömungen mit Wirbelbildung und -entwicklung an festen Wänden sowie der Fragmentierung und der Zerstäubung von Oberflächenwellen, die bei Schifffahrts- und Küstenanwendungen vorkommen, zu entwickeln. Wandnahe Strömungen lassen sich aufgrund der anisotropen Gitterverfeinerung deutlich besser mit der FV-Methode beschreiben. Die zeitliche Entwicklung der freien Oberfläche kann jedoch besser mit der SPH-Methode berechnet werden. Um eine mögliche Inkonsistenz der gekoppelten Methode zu vermeiden, wird für beide Verfahren derselbe schwach-kompressible Ansatz zur Lösung der isothermen Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Zur Berechnung der numerischen Flüsse wird bei der FV-Methode die Godunov-Methode höherer Ordnung eingesetzt. Bei der SPH-Methode wird der δ -SPH-Ansatz nach Antuono et al. (2010) verwendet, bei dem stabilisierende Diffusionsterme in den Kontinuitäts- und Impulsgleichungen eingeführt werden. Der Informationsfluss bei diesem Kopplungsansatz ist in Abb. 2.12b veranschaulicht. Als Grund für die Verwendung des Überlappungsgebiets Ω_{AB} wird eine verbesserte Stabilität der Kopplungsmethode genannt. In dem Überlappungsgebiet wird die Lösung sowohl mit der SPH- als auch mit der FV-Methode berechnet. Die Lösung an den Partikeln in dem Überlappungsgebiet wird jedoch durch zusätzliche Terme in den Erhaltungsgleichungen als Überlagerung der Lösungen beider numerischer Verfahren definiert. Diese Überlagerung bewirkt, dass am SPH-Rechengebiet die Lösung vom Rand $\partial\Omega_B$ zum Rand $\partial\Omega_A$ von der Lösung der FV-Methode zu der Lösung der SPH-Methode übergeblendet wird. Die Lösung des FV-Rechengebiets ist davon unbeeinflusst. Wie auch bei der Methode nach Napoli et al. (2016) gibt es keinen direkten Austausch numerischer Flüsse zwischen den Rechengebieten Ω_A und Ω_B . Die Rechengebiete werden über das Überlappungsgebiet hinaus um Geistergebiete $\Omega_{g,A}$ und $\Omega_{g,B}$ erweitert. Die Werte der Strömungsvariablen an den Geisterzellen des Gebiets $\Omega_{g,A}$ werden über eine SPH-Interpolation der Werte der Partikel des Gebiets Ω_B berechnet. Die Werte der Geisterpartikel des Gebiets $\Omega_{g,B}$ werden über eine lineare Interpolation der Werte der Zellen des Gebiets Ω_A berechnet. Zur Realisierung der Überblendung der Lösung an den Partikeln im Überlappungsgebiet Ω_{AB} wird die Lösung des FV-Rechengebiets ebenfalls über eine lineare Interpolation an diese Partikel übertragen. Bei der Methode nach Bouscasse et al. (2013) werden, anders als bei der Methode nach Napoli et al. (2016), die Geisterpartikel im Gebiet $\Omega_{g,B}$ über einen Pufferzonen-Ansatz (vgl. Abschnitt 2.2) behandelt. Diese ist hinsichtlich der Anwendung beliebig komplexer Strömungsfelder gegenüber den in Abschnitt 2.2 vorgestellten Ansätzen verbessert. Demnach werden Partikel je nach Bewegungsrichtung in Geisterpartikel oder Partikel des Rechengebiets umgewandelt, wenn sie den Rand $\partial\Omega_B$ durchqueren. Geisterpartikel, die den äußeren Rand des Gebiets $\Omega_{g,B}$ überschreiten, werden gelöscht. Da das Strömungsfeld innerhalb der Pufferzone beliebig kompliziert sein kann, muss ein robuster Ansatz entwickelt werden, um eine homogene Partikelverteilung innerhalb der Pufferzone zu gewährleisten. Es

wird angestrebt, die Partikelanzahl innerhalb der Pufferzone zeitlich konstant zu halten. Im Falle einer reduzierten Anzahl von Geisterpartikeln wird die Partikeldichte der Geisterpartikel auf einem kartesischen Gitter an der Pufferzone berechnet. An den Stellen geringster Partikeldichte wird die fehlende Anzahl an Geisterpartikeln initialisiert. Um mögliche Inhomogenitäten der räumlichen Partikelanordnung auszugleichen, wird außerdem ein iteratives Verfahren nach Colagrossi et al. (2012) angewendet, bei dem Partikel in die Richtung von Regionen mit Defiziten der Partikeldichte advektiert werden. Dieses Vorgehen erhöht signifikant die Rechenzeit. Das Kopplungsverfahren wird in den Arbeiten von Bouscasse et al. (2013) und Marrone et al. (2016) an den transienten Testfällen einer stehenden Welle und einer brechenden Welle erprobt, bei denen das SPH-Verfahren im Bereich der freien Oberfläche angewendet wird. Marrone et al. (2016) demonstrieren, dass mit dem Verfahren von den Vorteilen beider numerischer Methoden profitiert werden kann und das Ergebnis des gekoppelten Verfahrens im Vergleich zu den Ergebnissen der einzelnen Verfahren genauer ist. Akustische Wellen und Wirbel werden ohne sichtbare Diskontinuitäten zwischen den Rechengebieten advektiert. Die Erhaltung bei Anwendung des Kopplungsverfahrens wird nicht diskutiert. Da jedoch Interpolationen zwischen den Rechengebieten durchgeführt werden, ist das Verfahren nicht konservativ.

Chiron et al. (2018a) erproben das zuvor erläuterte Verfahren für wesentlich größere Massenströme an den Kopplungsschnittstellen und verbessern den Algorithmus von Bouscasse et al. (2013) zur Homogenisierung der räumlichen Anordnung der Geisterpartikel innerhalb der Pufferzone. Bei der Methode nach Chiron et al. (2018a) basiert die Berechnung der numerischen Flüsse der Partikel, anders als bei dem Ansatz nach Marrone et al. (2016), wie bei dem FV-Lösungsverfahren auf der Godunov-Methode mit MUSCL-Diskretisierung. Da relativ große Massenströme zwischen den Rechengebieten übertragen werden sollen, muss ein robustes Verfahren zur Partikelgenerierung und -löschung entwickelt werden. Dieses Verfahren basiert auf dem Ansatz nach Kassiotis et al. (2013) (vgl. Abb. 2.7f in Abschnitt 2.2). Der äußere Rand des Geistergebiets $\Omega_{g,B}$ wird dafür in Segmente unterteilt, an denen Massenströme basierend auf dem von dem FV-Rechengebiet interpolierten Strömungsfeld bestimmt werden. Die Segmente dienen dabei, wie die Eckpartikel bei der Methode nach Kassiotis et al. (2013), als Massenspuffer, die abhängig von der Strömungsrichtung relativ zum Segment an Masse zu- oder abnehmen. Wenn die Masse des Segments eine Referenzmasse überschreitet, wird ein neues Partikel im Abstand einer halben Partikelgröße zum Segment eingefügt und mit von dem FV-Rechengebiet interpolierten Werten der Strömungsvariablen initialisiert. Falls die Masse des Segments einen Wert kleiner als die negative Referenzmasse unterschreitet, wird das zum Segment nächstgelegene Partikel gelöscht. Außerdem werden Partikel gelöscht, wenn sie das Geistergebiet an einem Segment durchqueren. Bei der Generierung oder der Löschung von Partikeln, wird der Massenspuffer des Segments entsprechend der Masse dieser Partikel verringert oder vergrößert. Um Inhomogenitäten der räumlichen Partikelanordnung innerhalb des Gebiets Ω_B auszugleichen, wird ein Verfahren zur Partikelhomogenisierung basierend auf den Ansätzen nach Lind et al. (2012) und Oger et al. (2016) angewendet. Dieses Verfahren ist effizienter als der von Bouscasse et al. (2013) verwendete Algorithmus. Das Verfahren wird an verschiedenen akademischen Testfällen mit freien Fluidoberflächen erprobt. Um die Fähigkeit von relativ großen Massenströmen

über die Kopplungsgebiete zu demonstrieren, wird die Umströmung eines Zylinders in einem Kanal mit freier Oberfläche berechnet.

Neuhauser et al. (2013) und Neuhauser (2014) entwickeln eine hybride Methode zur Lösung der isothermen Euler-Gleichungen mit dem Ziel, transiente Strömungsvorgänge in Pelton-Turbinen zu simulieren. Als Gründe für die Anwendung einer hybriden Methode werden die Vorteile der SPH-Methode bei der Behandlung freier Oberflächen und bei der Interaktion des Fluids mit beweglichen Festkörpern sowie die Vorteile der FV-Methode bei der lokalen und anisotropen Gitterverfeinerung genannt. Das Verfahren wird erfolgreich an akademischen Testfällen und der Umströmung eines Tragflügels getestet. Als mathematisches Modell für die zeitliche Integration der Partikelzustände wird, wie in der Arbeit von Barcarolo (2013), die ALE-Methode angewendet. Der Informationsfluss bei diesem Verfahren ist in Abb. 2.12c veranschaulicht. Es handelt sich hierbei um einen ZG-Ansatz. Das gesamte Rechengebiet $\Omega_B = \Omega$ wird mit Partikeln diskretisiert. Nur in ausgewählten Bereichen (z. B. im wandnahen Bereich) werden dem SPH-Rechengebiet FV-Rechengebiete überlagert. In diesen Bereichen $\Omega_A = \Omega_{AB}$ erfolgt die Lösung der Erhaltungsgleichungen basierend auf der FV-Methode. Die FV-Rechengebiete werden, wie bei der Methode nach Napoli et al. (2016), mit Geistergebieten $\Omega_{g,A}$ erweitert, an denen die Strömungsvariablen von den umgebenden Partikeln mit einem Shepard-Filter (Shepard, 1968) interpoliert werden. Die Berechnung der numerischen Flüsse einer Zelle erfolgt ausschließlich unter Berücksichtigung benachbarter Zellen. Bei der Berechnung der numerischen Flüsse der Partikel werden hingegen, wie bei der Methode nach Barcarolo (2013), auch die Zellen, die im Interaktionsbereich des Partikels liegen, berücksichtigt. In dem Bereich Ω_{AB} , in dem Zellen und Partikel überlappen, werden die Zellen als Interaktionspartner für ein Partikel bevorzugt. Im Gegensatz zu der Methode nach Barcarolo (2013) können Partikel den Bereich des FV-Rechengebiets durchqueren. Daher entsteht das Problem, dass ein Partikel gleichzeitig den Bereich innerhalb und außerhalb des Überlappungsgebiets Ω_{AB} belegen kann. In diesem Fall darf dieses Partikel nur teilweise als Interaktionspartner berücksichtigt werden. Daher wird zur Berechnung der SPH-Operatoren eine Verringerung der Gewichtung bzw. des Volumens eines solchen Partikels sowie eine entsprechende Verschiebung der Partikelposition an die Position des veränderten Partikelschwerpunkts vorgeschlagen. Das Volumen einer Zelle, dessen Zellmittelpunkt einen Abstand zu dem Partikel kleiner als die Hälfte einer charakteristischen Partikelausdehnung hat, wird von dem Volumen dieses Partikels abgezogen. Die charakteristische Partikelausdehnung wird als Durchmesser des Partikels bestimmt. Hierfür wird die Form des Partikels als Kreis im Falle von zwei räumlichen Dimensionen bzw. als Kugel im Falle von drei räumlichen Dimensionen angenommen. Das zu subtrahierende Volumen einer überlappenden Zelle ist somit gleich null oder gleich dem gesamten Zellvolumen. Dadurch entstehen Ungenauigkeiten, die durch eine Verfeinerung dieser Zellen in kleinere Volumina reduziert werden. Da die Partikel im Bereich der Überlappung entweder gar nicht oder nur teilweise als Interaktionspartner berücksichtigt werden, sind numerische Flüsse unter Einbeziehung solcher Partikel nicht reziprok. Durch diesen Umstand sowie durch die Interpolation des Strömungsfelds an den Geisterzellen wird die Erhaltung einschließlich der Masse verletzt.

Der Ansatz nach Dabonneville (2018) basiert ebenfalls auf dem ZG-Ansatz. Der Informationsfluss bei diesem Verfahren ist in Abb. 2.12d veranschaulicht. Bei diesem Verfahren werden

allerdings SPH-Rechengebiete $\Omega_B = \Omega_{AB}$ in ein FV-Rechengebiet $\Omega_A = \Omega$ eingebettet. Es stellt sich heraus, dass der Informationsfluss ähnlich dem des Verfahrens von Napoli et al. (2016) ist. Das SPH-Rechengebiet Ω_B wird durch ein Gebiet $\Omega_{g,B}$ mit Geisterpartikeln, die sich durch Spiegelung der Partikelpositionen des SPH-Rechengebiets ergeben (vgl. Abschnitt 2.1), erweitert. Der numerische Fluss eines Partikels ergibt sich nur durch Interaktionen mit Nachbarpartikeln. Gleichmaßen ergibt sich der numerische Fluss einer Zelle nur durch Interaktionen mit Nachbarzellen. Der Unterschied zu dem Verfahren nach Napoli et al. (2016) ist, dass explizit kein Geistergebiet für das FV-Rechengebiet definiert wird. Zu jedem Zeitpunkt wird zuerst ein Zeitschritt des FV-Verfahrens für das gesamte Rechengebiet $\Omega_A = \Omega$ durchgeführt. Daraufhin wird der Zeitschritt für das SPH-Rechengebiet unter Berücksichtigung des an den Geisterpartikeln interpolierten Strömungsfelds durchgeführt. Zuletzt wird die Lösung des SPH-Rechengebiets durch eine Shepard-Interpolation (Shepard, 1968) an den Zellen des FV-Rechengebiets im Überlappungsbereich Ω_{AB} interpoliert. Die Lösung des Strömungsfelds an diesen Zellen wird durch den zuletzt genannten Schritt somit korrigiert. Partikel des Rechengebiets, die den Rand $\partial\Omega_B$ durchqueren, werden gelöscht. Ein Partikeleintrag in das SPH-Rechengebiet wird bei der Methode nach Dabonneville (2018) nicht ermöglicht. Dies stellt eine wesentliche Limitierung des Verfahrens dar. Außerdem ist das Verfahren aufgrund der Interpolationen nicht konservativ.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass eine Reihe verschiedener Ansätze existiert, die bereits erfolgreich zur Kopplung der SPH- und der FV-Methode angewendet wurden. Eine rein konservative Kopplung der Methoden ist nur mit der auf dem OG-Ansatz basierenden Methode nach Mancip (2003) möglich. Der Nachteil der Methode nach Mancip (2003) ist allerdings, dass eine Projektion der Erhaltungsgrößen innerhalb eines Überlappungsgebiets durchgeführt werden muss. Dieser Ansatz ist sehr rechenaufwendig und wirkt nicht robust. Daher wird der Ansatz in dieser Arbeit nicht weiterverfolgt. Zudem wurde eingangs dieses Kapitels die Anforderung definiert, dass der Kopplungsansatz eine möglichst geringe Komplexität aufweisen soll. In diesem Zusammenhang sollen idealerweise die üblichen Verfahren zur Aufprägung von Randbedingungen angewendet werden. Bei der FV-Methode entspricht dies der direkten Aufprägung der Randbedingungen an den Flächenelementen des Kopplungsrandes. Dieser Ansatz ist numerisch robust und effizient. Bei den auf dem OG-Ansatz basierenden Verfahren wird allerdings ein Überlappungsgebiet definiert, an dem eine Überblendung der Strömungsvariablen der einzelnen Rechengebiete durchgeführt wird. Demnach erfüllen sowohl das Verfahren nach Mancip (2003) als auch die übrigen auf dem OG-Ansatz basierenden Verfahren die zuvor genannte Anforderung nicht. Im Hinblick auf eine geringe Komplexität des Kopplungsansatzes sind die auf dem PG-Ansatz basierenden Methoden besser geeignet, da kein Überlappungsgebiet zur Überblendung der Strömungsvariablen verwendet wird. Die Methode nach Napoli et al. (2016) und Monteleone et al. (2015) basiert auf dem PG-Ansatz und zeigt die für diese Arbeit größte Relevanz unter den bisher dargelegten Verfahren. Jedoch muss auch bei dieser Methode festgestellt werden, dass die Kopplungsbedingungen für das FV-Rechengebiet über Geisterzellen und nicht, wie üblicherweise bei der FV-Methode, über Randflächen aufgeprägt werden. Zudem werden zur Aufprägung der Kopplungsbedingungen für das SPH-Rechengebiet dynamisch generierte Geisterpartikel verwendet. Wie bereits in Abschnitt 2.1 erläutert wurde, ist die Verwendung statischer Geisterpartikel insbesondere für nichtebene Ränder deutlich robu-

ter, da die räumliche Anordnung der Geisterpartikel stets homogen ist. Darüber hinaus werden Partikel durch instantane Ereignisse an den Rändern generiert und gelöscht. Dadurch kann, wie auch bei den übrigen Verfahren, nicht gewährleistet werden, dass die Massenströme der beiden Rechengebiete zu jedem Zeitpunkt der Simulation und an jedem Ort des Kopplungsrandes gleich sind. Eine kontinuierliche Massenänderung der Partikel auf Basis der lokalen Massenströme am Kopplungsrand wurde bisher nicht in Betracht gezogen. In Abschnitt 2.2 wurde erläutert, dass dieser Ansatz vorteilhaft ist. Insbesondere bei einem Embedded-SPH-Ansatz könnte auf diese Weise die Gleichheit der Massenströme der Rechengebiete sowohl zu jedem Zeitpunkt der Simulation als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes verbessert werden.

Im nächsten Abschnitt werden die im letzten Absatz identifizierten Lücken der bestehenden Kopplungsansätze hinsichtlich eines geeigneten Embedded-SPH-Verfahrens zusammengefasst. Darauf aufbauend wird die Zielsetzung dieser Arbeit formuliert.

2.4 Zielsetzung

Zusammenfassend muss festgestellt werden, dass die zu Beginn dieses Kapitels definierten Anforderungen an eine Embedded-SPH-Methode nicht vollumfänglich durch bisher verfügbare Embedded-SPH-Ansätze erfüllt werden können. Bei den meisten Verfahren werden zur Kopplung zusätzliche Überlappungsgebiete benötigt, über die eine unnötige Komplexität eingeführt wird. Bei anderen Verfahren werden Geisterzellen zur Aufprägung von Kopplungsbedingungen für das FV-Rechengebiet verwendet. Es handelt sich bei diesen Verfahren daher um speziell für die Kopplung entwickelte Sonderlösungen, bei denen nicht die üblichen Methoden zur Aufprägung von Randbedingungen der beiden numerischen Verfahren verwendet werden. Hierdurch wird eine direkte und unkomplizierte Kopplung verfügbarer Software zur Strömungssimulation erschwert. Außerdem wurde bisher nicht der Versuch unternommen, eine Gleichheit der Massenströme der Rechengebiete sowohl zu jedem Zeitpunkt der Simulation als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes herzustellen. Hierzu wäre eine kontinuierliche Änderung der Masse randnaher Partikel auf Basis der am Kopplungsrand definierten Massenströme notwendig. Darüber hinaus wurde bis heute die Anwendung statischer Geisterpartikel zur Aufprägung gekoppelter und offener Randbedingungen nicht in Betracht gezogen, obwohl diese Methode durch ein hohes Maß an Flexibilität und Robustheit charakterisiert ist. Auch für offene nichtgekoppelte Randbedingungen in der SPH-Methode wäre dieser Ansatz von Vorteil, um komplexe Strömungsfelder am Kopplungsrand zu realisieren.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist deshalb, ein Embedded-SPH-Verfahren zu entwickeln und zu validieren, über das beliebig komplexe Strömungsfelder zwischen den Rechengebieten der SPH- und der FV-Methode advektiert werden können. Bei der Entwicklung dieses Verfahrens sollen die zuvor genannten Nachteile verfügbarer Methoden adressiert werden.

Insbesondere soll erstmalig ein einheitlicher Ansatz entwickelt werden, bei dem dieselben Methoden zur Aufprägung von offenen Randbedingungen auch zur Aufprägung von Kopplungsbedingungen verwendet werden können. Die Kopplungs- und Randbedingungen unterscheiden sich in diesem Fall lediglich durch einen anderen Berechnungsansatz. Durch die Anwendung

der üblichen Ansätze zur Aufprägung von Randbedingungen beschränkt sich der Entwicklungsaufwand des Kopplungsansatzes auf geeignete Verfahren in der SPH-Methode. In diesem Zusammenhang sollen erstmalig statische Geisterpartikel zur Aufprägung von sowohl offenen als auch gekoppelten Randbedingungen bei der SPH-Methode angewendet werden. Im Zuge der Entwicklung dieses einheitlichen Konzepts befasst sich diese Arbeit zu einem großen Teil neben gekoppelten Randbedingungen auch mit nichtgekoppelten offenen Randbedingungen.

Zudem soll der Versuch unternommen werden, über einen Ansatz zur kontinuierlichen Massenänderung randnaher Partikel die Abweichung zwischen den Massenströmen der Rechengebiete sowohl zu jedem Zeitpunkt der Simulation als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes zu minimieren. Wie bereits erläutert wurde, setzt die Anwendung statischer Geisterpartikel die Generierung und Löschung von Partikeln im internen Rechengebiet voraus. Durch die Generierung und Löschung von Partikelmasse können im randnahen Bereich inhomogene räumliche Anordnungen der Partikel entstehen. Bedingt durch diese Inhomogenitäten können unphysikalische Oszillationen der Strömungsvariablen hervorgerufen werden. Es ist für diese Arbeit daher ein weiteres Ziel, das SPH-Verfahren durch die gezielte Auswahl und Erprobung verfügbarer Ansätze zur hinreichenden Verminderung dieser Oszillationen zu optimieren.

Diese Arbeit konzentriert sich auf die grundsätzliche Entwicklung offener und gekoppelter Randbedingungen für die SPH-Methode. Mit der Validierung des vorliegenden Verfahrens anhand von akademischen Testfällen soll die Anwendbarkeit des Verfahrens auf komplexe Strömungsfelder demonstriert werden. Dies ist eine wesentliche Voraussetzung bei der Simulation von Zerstäubungsprozessen. Die Anwendung des Verfahrens auf die Simulation von Mehrphasenströmungen und Zerstäubungsprozessen in technisch relevanten Injektorkonfigurationen bleibt Nachfolgearbeiten vorbehalten.

3 Mathematische Beschreibung der Strömung

In diesem Kapitel werden die Gleichungen zur Beschreibung des Strömungsfelds eingeführt. Wie in Kapitel 2 dargelegt wurde, ist das Ziel dieser Arbeit die Entwicklung einer Embedded-SPH-Methode. Das langfristige Ziel ist die Applizierung dieser Methode auf die Simulation der Primärzerstäubung in technisch relevanten Konfigurationen im Bereich der Verbrennungstechnik. Der Aufwand zur Entwicklung und Integration der für Brennkammersimulationen notwendigen Modellierungsansätze sowie die Applizierung dieses Verfahrens auf entsprechende Testfälle würde über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen. Daher soll diese Arbeit als erster Entwicklungsschritt hin zu dem zuvor genannten langfristigen Ziel angesehen werden. In diesem Sinne soll, wie in Kapitel 2 erläutert wurde, demonstriert werden, dass komplexe Strömungsfelder über die Schnittstellen zwischen den gekoppelten Rechengebieten transferiert werden können. Unter „komplex“ werden an dieser Stelle instationäre Strömungen mit signifikanten Gradienten der Strömungsvariablen verstanden. Zur Anwendung dieser Strömungsfelder ist es ausreichend, laminare, inkompressible, einphasige und isotherme Strömungen mit konstanter Viskosität zu betrachten. Hierdurch wird der Entwicklungsaufwand für die Embedded-SPH-Methode deutlich reduziert. Eine Erweiterung des Verfahrens auf die Modellierung turbulenter und mehrphasiger Strömungen sowie weiteren bei der Verbrennungssimulation notwendigen Modellierungsansätzen ist zukünftigen Arbeiten vorbehalten.

Zur mathematischen Beschreibung des im letzten Absatz definierten Fluidtyps ist die Berechnung des Fluiddrucks und der Fluidgeschwindigkeit notwendig. Hierfür müssen die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen gelöst werden. Die Lösung der Energiegleichung ist für ein isothermes und inkompressibles Fluid nicht notwendig. Braun (2018) argumentiert, dass aus Effizienzgründen bei der Simulation der Primärzerstäubung ein WCSPH-Ansatz verwendet werden sollte. Daher wurde in Kapitel 2 entschieden, auch in dieser Arbeit einen WCSPH-Ansatz zu nutzen. Daraus ergibt sich die Modellierung eines schwach-kompressiblen Fluids und die Notwendigkeit einer Zustandsgleichung. Die Dichtevariation des Fluids ist bei diesem Ansatz gering, sodass das Fluid als quasi-inkompressibel betrachtet werden kann. Die mathematischen Vereinfachungen der Erhaltungsgleichungen, die sich für ein inkompressibles Fluid ergeben, können daher auch bei der WCSPH-Methode angewendet werden. Im Hinblick auf die schwache Kompressibilität des Fluids wird dieses als barotrop behandelt. Dadurch besteht weiterhin keine Notwendigkeit zur Lösung der Energiegleichung.

Bevor die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen in den Abschnitten 3.2 und 3.3 vorgestellt werden, wird in Abschnitt 3.1 das Konzept einer allgemeinen Transportgleichung eingeführt, aus der sich die zuvor genannten Gleichungen generieren lassen. Für diese allgemeine Transportgleichung wird das Arbitrary-Lagrangian-Eulerian(ALE)-Konzept (Donea et al., 2004) eingeführt. Durch diesen Ansatz lässt sich insbesondere eine beliebige Transportgeschwindigkeit des den Gleichungen zugrundeliegenden Kontrollvolumens ermöglichen. Hierdurch können in Kapitel 4 wichtige numerische Konzepte der SPH-Methode realisiert werden. Die Zustandsgleichung zur Kopplung des Drucks und der Dichte wird in Abschnitt 3.4 erläutert. Die in den folgenden Abschnitten eingeführten Gleichungen dienen als Grundlage für die Entwicklung der diskretisierten Gleichungen der SPH-Methode, die in Kapitel 4 dargelegt werden.

3.1 Allgemeine Transportgleichung

Die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen lassen sich auf Basis einer allgemeinen Transportgleichung formulieren. Die differentielle Form dieser Transportgleichung lautet wie folgt:

$$\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi = 0 \quad (3.1)$$

In Gl. 3.1 sind $t, \rho, \phi, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{F}_\phi \in \mathbb{R}^n$ der Reihe nach die physikalische Zeit, die Fluidichte, eine allgemeine Transportgröße des Fluids, der Geschwindigkeitsvektor des Fluids und der Flussvektor des Skalars ϕ , wobei n die Anzahl der räumlichen Dimensionen repräsentiert. Im Folgenden werden sowohl Vektoren als auch Matrizen, wie bereits in Gl. 3.1 erkennbar ist, durch fettgedruckte Symbole repräsentiert. Die 2-Norm bzw. der Betrag eines Vektors wird durch die Schreibweise $\|\cdot\|$ gekennzeichnet. Skalarprodukte, Matrix-Vektor-Multiplikationen und Matrizenmultiplikationen werden durch einen Punkt zwischen den zu multiplizierenden Größen und somit durch $(\cdot) \cdot (\cdot)$ dargestellt. Entsprechend wird die Divergenz eines Vektors oder eines Tensors, wie bereits in Gl. 3.1 erkennbar ist, durch $\nabla \cdot (\cdot)$ ausgedrückt. Dagegen werden Gradienten eines Skalars im Folgenden durch $\nabla (\cdot)$, also ohne einen Punkt nach dem ∇ Operator, und Gradienten eines Vektors durch $(\nabla \otimes (\cdot))^\top$ dargestellt, wobei $(\cdot)^\top$ die Transponierung eines Vektors bzw. einer Matrix und $(\cdot) \otimes (\cdot)$ das dyadische Produkt repräsentiert.

Die integrale Form der Transportgleichung (Gl. 3.1) ergibt sich aus einer Integration von Gl. 3.1 über ein zeitlich variantes makroskopisches Kontrollvolumen V :

$$\int_{V(t)} \frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} dv + \int_{V(t)} \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) dv + \int_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi dv = 0 \quad (3.2)$$

In Gl. 3.2 ist die Größe dv ein infinitesimal kleines Volumenelement. In Abb. 3.1 sind das makroskopische Kontrollvolumen V sowie das infinitesimale Volumenelement dv veranschaulicht.

Auf Basis des Geschwindigkeitsfelds $\hat{\mathbf{u}}$, das im Folgenden Transportgeschwindigkeit genannt wird, wird das Kontrollvolumen V advektiert und verformt. Darüber hinaus wird das Geschwindigkeitsfeld $\delta\hat{\mathbf{u}}$, das im Folgenden Geschwindigkeitsdifferenz genannt wird, als die Differenz der Transportgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}$ und der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ definiert:

$$\delta\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u} \quad (3.3)$$

In Abb. 3.1 ist eine Strömung durch mögliche Stromlinien dargestellt. Auf Basis dieses Strömungsfelds liegt sowohl an dem Volumenelement dv als auch am Rand S des Kontrollvolumens V eine bestimmte Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ an. Mögliche Transportgeschwindigkeiten $\hat{\mathbf{u}}$ und die sich daraus ergebenden Geschwindigkeitsdifferenzen $\delta\hat{\mathbf{u}}$ sind ebenfalls in Abb. 3.1 veranschaulicht. Über das Reynolds-Transport-Theorem lässt sich die zeitliche Änderungsrate $d/dt (\cdot)$ des Integrals des Skalars $\rho\phi$ über dem Kontrollvolumen V wie folgt ausdrücken:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho\phi dv = \int_{V(t)} \frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} dv + \int_{V(t)} \nabla \cdot (\rho\phi \hat{\mathbf{u}}) dv \quad (3.4)$$

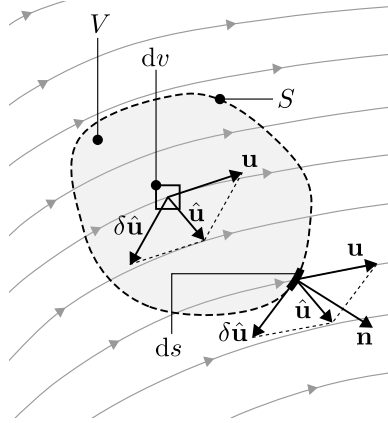


Abbildung 3.1: Geschwindigkeitsfeld an einem Kontrollvolumen des Fluids

Unter Berücksichtigung von Gl. 3.2 und Gl. 3.3 ergibt sich aus Gl. 3.4 der folgende Ausdruck:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \phi dv = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\rho \phi \delta \hat{\mathbf{u}}) dv - \int_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi dv \quad (3.5)$$

Gl. 3.5 entspricht dem bereits einleitend erwähnten ALE-Konzept. Diese Gleichung beschreibt die zeitliche Änderungsrate der Erhaltungsgröße respektive des Volumenintegrals der Größe $\rho \phi$ in Abhängigkeit des Flussvektors $\mathbf{F}_\phi$ und des konvektiven Flusses (erster Term auf der rechten Seite in Gl. 3.5). Der konvektive Fluss ist dabei abhängig von der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$. Zur besseren Veranschaulichung der Bedeutung von Gl. 3.5 können die Volumenintegrale auf der rechten Seite in Gl. 3.5 über den Gauß'schen Integralsatz in Oberflächenintegrale umgewandelt werden:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \phi dv = \int_{S(t)} \rho \phi \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} ds - \int_{S(t)} \mathbf{F}_\phi \cdot \mathbf{n} ds \quad (3.6)$$

In Gl. 3.6 sind S , ds und $\mathbf{n}$ der Reihe nach die zeitlich variante Oberfläche des Kontrollvolumens V , ein infinitesimal kleines Flächenelement der Oberfläche S sowie der aus dem Kontrollvolumen V herauszeigende Normaleneinheitsvektor der Oberfläche S . Die genannten Größen sind in Abb. 3.1 veranschaulicht. Der erste Term auf der rechten Seite in Gl. 3.6 repräsentiert den konvektiven Fluss des Skalars $\rho \phi$, der die Oberfläche S durchquert.

Auf Basis des zuletzt genannten Terms ist bei einem numerischen Verfahren zur Lösung der Gl. 3.6 die Wahl der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ maßgebend. Für eine Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}} = -\mathbf{u}$ gilt gemäß Gl. 3.3 die Identität $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, wobei $\mathbf{0}$ für den Nullvektor steht. In diesem Fall sind die Position und die Größe des Kontrollvolumens V zeitlich invariant. Diese Art des Kontrollvolumens ist die Grundlage für das FV-Verfahren mit einem statischen Rechengitter. An der Oberfläche des Kontrollvolumens entsteht ein konvektiver Fluss, über den das Volumenintegral des Skalars $\rho \phi$ geändert wird. Der konvektive Fluss ist dabei durch die Fluidgeschwindigkeit an der Oberfläche des Kontrollvolumens definiert. Die zeitliche Änderungsrate $d/dt(\cdot)$ entspricht in diesem Fall der partiellen zeitlichen Ableitung in Gl. 3.2. Bei der ursprünglichen Form der SPH-Methode ist die Geschwindigkeitsdifferenz hingegen als $\delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ definiert, und somit gilt gemäß Gl. 3.3 die Identität $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$. In diesem Fall ist das Kontrollvolumen zeitlich variant, und die Oberfläche des Kontrollvolumens wird mit der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ advektiert. Das

Volumenintegral des Skalars $\rho\phi$ kann sich somit nicht durch konvektive Flüsse ändern. Daher entspricht die zeitliche Änderungsrate $d/dt (\cdot)$ der Materialableitung.

Darüber hinaus existieren Verfahren, die durch keinen der beiden zuvor erläuterten Extremfälle ($\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ bzw. $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$) charakterisiert sind. In Kapitel 4 werden im Zusammenhang mit der SPH-Methode stabilisierende Maßnahmen vorgeschlagen, bei denen den Partikeln kleine Werte der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}$ aufgeprägt werden. Zudem wird in Kapitel 5 ein Verfahren für offene Randbedingungen vorgestellt, bei dem lokal sehr große Werte der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}$ auftreten. Die Gl. 3.5 ist die Grundlage, um diese Art von Verfahren mathematisch korrekt zu beschreiben. Die praktische Umsetzung dieser Beschreibung bei der SPH-Methode ist jedoch problematisch. Dies wird in Abschnitt 4.5 diskutiert.

Analog zu Gl. 3.1 lässt sich außerdem eine allgemeine Transportgleichung für eine Vektorgröße $\Phi \in \mathbb{R}^n$ formulieren:

$$\frac{\partial (\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \rho\Phi) + \nabla \cdot \mathbf{F}_\Phi = \mathbf{0} \quad (3.7)$$

In Gl. 3.7 repräsentieren $(\cdot) \otimes (\cdot)$ das dyadische Produkt und $\mathbf{0}$ den Nullvektor. Die Matrix $\mathbf{F}_\Phi = [\mathbf{F}_{\phi_1}, \dots, \mathbf{F}_{\phi_n}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ setzt sich spaltenweise aus den Flussvektoren $\mathbf{F}_{\phi_i}$ der Komponenten ϕ_i der Vektorgröße $\Phi = [\phi_1, \dots, \phi_n]^\top$ zusammen. Analog zu Gl. 3.5 lässt sich die integrale Erhaltungsgleichung für die vektorielle Größe Φ formulieren:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho\Phi dv = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\delta\hat{\mathbf{u}} \otimes \rho\Phi) dv - \int_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{F}_\Phi dv \quad (3.8)$$

Im Hinblick auf das in Kapitel 5 noch zu erläuternde Verfahren für offene Randbedingungen ist es vorteilhaft, den Flussvektor $\mathbf{F}_\phi$ (bzw. die Matrix $\mathbf{F}_\Phi$ der Flussvektoren) in einen nichtdiffusiven Anteil $\mathbf{F}_{c,\phi}$ (bzw. $\mathbf{F}_{c,\Phi}$) und einen diffusiven Anteil $\mathbf{F}_{d,\phi}$ (bzw. $\mathbf{F}_{d,\Phi}$) zu zerlegen:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_\phi &= \mathbf{F}_{c,\phi} + \mathbf{F}_{d,\phi} \\ \mathbf{F}_\Phi &= \mathbf{F}_{c,\Phi} + \mathbf{F}_{d,\Phi} \end{aligned} \quad (3.9)$$

In den nächsten Abschnitten werden auf Basis von Gl. 3.5 bzw. Gl. 3.8 die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen formuliert. Hierfür wird der entsprechende Flussvektor $\mathbf{F}_\phi$ (bzw. die entsprechende Matrix $\mathbf{F}_\Phi$ der Flussvektoren) definiert.

3.2 Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung ergibt sich durch Einsetzen von $\phi = 1$ und dem Flussvektor

$$\mathbf{F}_{\phi=1} = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

in Gl. 3.5 zu:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dv = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\rho \delta\hat{\mathbf{u}}) dv \quad (3.11)$$

Sowohl der nichtdiffusive als auch der diffusive Anteil des Flussvektors $\mathbf{F}_{\phi=1}$ sind gleich dem Nullvektor:

$$\mathbf{F}_{c,\phi=1} = \mathbf{0} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{F}_{d,\phi=1} = \mathbf{0} \quad (3.13)$$

Wie noch in Kapitel 4 zu erläutern ist, kann zum Zweck der Stabilisierung des SPH-Verfahrens in Gl. 3.11 ein diffusiver Flussvektor $\mathbf{F}_{d,\phi=1} \neq \mathbf{0}$ angewendet werden. Dieser hat gemäß Gl. 3.11 nur einen numerischen und keinen physikalischen Hintergrund.

3.3 Impulsgleichung

Die Impulsgleichung ergibt sich durch Einsetzen von $\Phi = \mathbf{u}$ und der Matrix der Flussvektoren

$$\mathbf{F}_{\Phi=\mathbf{u}} = -\boldsymbol{\sigma} \quad (3.14)$$

in Gl. 3.8 zu:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dv = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\delta \hat{\mathbf{u}} \otimes \rho \mathbf{u}) dv + \int_{V(t)} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dv \quad (3.15)$$

In Gl. 3.14 und Gl. 3.15 ist die Größe $\boldsymbol{\sigma}$ der Spannungstensor, der für ein Newton'sches Fluid und auf Basis der Stokes'schen Hypothese wie folgt definiert ist:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu \left[\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\top - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (3.16)$$

In Gl. 3.16 sind p , μ und $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ der Reihe nach der Fluiddruck, die dynamische Viskosität und der Einheitstensor. Wie zu Beginn dieses Kapitels dargelegt wurde, können aufgrund der lediglich sehr schwachen Kompressibilität des Fluids mathematische Vereinfachungen bezogen auf ein inkompressibles Fluid angewendet werden. Daher kann die Divergenz des Geschwindigkeitsvektors in Gl. 3.16 vernachlässigt werden:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu [\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\top] \quad (3.17)$$

Darüber hinaus kann die dynamische Viskosität μ für das eingangs dieses Kapitels eingeführte barotrope und einphasige Fluid als konstant angenommen werden. Unter dieser Voraussetzung und der zuvor eingeführten Annahme der Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfelds folgt durch Einsetzen von Gl. 3.17 in Gl. 3.15 die folgende Form der Impulsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dv = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\delta \hat{\mathbf{u}} \otimes \rho \mathbf{u}) dv - \int_{V(t)} \nabla p dv + \int_{V(t)} \nabla \cdot (\mu \nabla \otimes \mathbf{u}) dv \quad (3.18)$$

Der nichtdiffusive Anteil und der diffusive Anteil der Matrix $\mathbf{F}_{\Phi=\mathbf{u}}$ der Flussvektoren sind auf Grundlage der zuvor dargelegten Zusammenhänge wie folgt definiert:

$$\mathbf{F}_{c,\Phi=\mathbf{u}} = p\mathbf{I} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{F}_{d,\Phi=\mathbf{u}} = -\mu [\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\top] \quad (3.20)$$

3.4 Zustandsgleichung und Schallgeschwindigkeit

Wie zu Beginn dieses Kapitels dargelegt wurde, wird in dieser Arbeit ein schwach-kompressibler Ansatz zur Beschreibung des Fluids gewählt. Dabei wird die Kompressibilität des Fluids über eine Zustandsgleichung modelliert. Über diese Zustandsgleichung werden die Fluidichte ρ und der Fluiddruck p miteinander gekoppelt. Die Zustandsgleichung schließt außerdem das Differentialgleichungssystem, das aus Gl. 3.11 und Gl. 3.18 besteht. Für inkompressible Fluide, wie z. B. Wasser, kann die Tait-Zustandsgleichung nach Cole (1948) verwendet werden:

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] + p_0 \quad (3.21)$$

In Gl. 3.21 sind ρ_0 , p_0 und c_0 der Reihe nach die konstanten Referenzwerte der Fluidichte, des Fluiddrucks und der Schallgeschwindigkeit c . Die Konstante γ bestimmt die Steifigkeit zwischen dem Druck und der Dichte. In dieser Arbeit wird $\gamma = 7$ verwendet. Ist die Dichte ρ gleich der Referenzdichte ρ_0 , ergibt sich gemäß Gl. 3.21 die Identität zwischen dem Druck p und dem Referenzdruck p_0 . In dieser Arbeit wird stets ein Referenzdruck von $p_0 = 0 \text{ N/m}^2$ definiert. Geht der Referenzwert c_0 der Schallgeschwindigkeit gegen einen unendlichen Wert, ergibt sich gemäß Gl. 3.21 die Modellierung eines inkompressiblen Fluids ($\rho = \rho_0 = \text{const}$). Die Schallgeschwindigkeit c ist unter der Annahme isentroper Zustandsänderungen über der Schallwelle, also konstanter spezifischer Entropie s , wie folgt definiert:

$$c = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s} \quad (3.22)$$

Durch Einsetzen der Zustandsgleichung (Gl. 3.21) in Gl. 3.22 lässt sich die folgende Gleichung für die Schallgeschwindigkeit herleiten:

$$c = c_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{2}} \quad (3.23)$$

In Abschnitt 4.7 wird das explizite Zeitschrittverfahren erläutert, das zur numerischen Lösung der Erhaltungsgleichungen (Gl. 3.11 und Gl. 3.18) verwendet wird. Bei einem expliziten Zeitschrittverfahren ist die Zeitschrittweite an ein Stabilitätskriterium basierend auf der Courant-Friedrichs-Lewy(CFL)-Zahl gekoppelt. Je größer der Referenzwert c_0 der Schallgeschwindigkeit gewählt wird, desto geringer ist basierend auf dem CFL-Kriterium die maximal zulässige Zeitschrittweite. Die Motivation bei einer Vielzahl von Strömungssimulationen ist die Analyse der

Hauptströmung einer strömungstechnischen Problemstellung. Dabei ist oft eine zeitlich genaue Auflösung der Schallausbreitung nicht von Interesse. Die Hauptströmung, die nun durch eine Fluidgeschwindigkeit u_0 charakterisiert wird, wird durch sehr viel größere Zeitskalen als bei der Schallausbreitung bestimmt. Somit könnte die Hauptströmung mit sehr viel größeren Zeitschritten zeitlich hinreichend genau berechnet werden. Daraus ergibt sich, dass der Mehraufwand bezogen auf die Rechenzeit der Simulation der Hauptströmung mit einer Verkleinerung der Mach-Zahl $Ma = u_0/c_0$ zunimmt. Um mit dem gewählten schwach-kompressiblen Ansatz einen vertretbaren Simulationsaufwand zu gewährleisten, wird ein möglichst großer Wert der Mach-Zahl Ma angestrebt. Dies kann durch eine künstliche Verkleinerung des Referenzwerts der Schallgeschwindigkeit realisiert werden. Es muss jedoch beachtet werden, dass die eingangs dieses Kapitels eingeführte Annahme eines quasi-inkompressiblen Fluids nicht verletzt wird. Diese Annahme gilt für den Fall, dass die Dichtevariation innerhalb des Rechengebiets maximal 1 % der Referenzdichte ρ_0 beträgt (Höfler, 2013). Hierfür darf die Mach-Zahl maximal einen Wert von $Ma = 0,1$ annehmen (Höfler, 2013). Aus dieser Einschränkung ergibt sich somit für eine gegebene charakteristische Geschwindigkeit u_0 der Hauptströmung der minimal zulässige Referenzwert c_0 der Schallgeschwindigkeit. Diese Definition der Schallgeschwindigkeit c_0 wurde bei der Durchführung der in Kapitel 7 gezeigten Testfälle angewendet.

In diesem Kapitel wurden die Gleichungen zur Beschreibung der Fluidströmung eingeführt. Im anschließenden Kapitel wird erläutert, wie diese Gleichungen unter der Anwendung der SPH-Methode numerisch gelöst werden können. Dabei wird insbesondere das in diesem Kapitel erläuterte ALE-Konzept diskutiert, da bei dem in dieser Arbeit entwickelten Verfahren besonders in Randnähe Partikelgeschwindigkeiten auftreten, die deutlich von der Strömungsgeschwindigkeit abweichen.

4 Smoothed Particle Hydrodynamics

In Kapitel 3 wurden die Formulierungen einer allgemeinen Transportgleichung sowie der Kontinuitäts- und Impulsgleichungen auf Basis des ALE-Ansatzes eingeführt. Im Allgemeinen wird zur Lösung dieser Gleichungen ein numerisches Verfahren, wie z. B. die SPH-Methode, benötigt. Das Ziel dieser Arbeit ist, ein Embedded-SPH-Verfahren zu entwickeln, bei dem SPH-Rechengebiete mit FV-Rechengebieten gekoppelt werden können. Wie in Kapitel 2 dargelegt wurde, ist hierfür der maßgebliche Entwicklungsaufwand der SPH-Methode zuzuordnen. Daher wird die SPH-Methode in diesem Kapitel näher erläutert. Es soll dargestellt werden, wie die in Kapitel 3 eingeführten Gleichungen mit der SPH-Methode diskretisiert werden können.

Der wesentliche Unterschied der SPH-Methode gegenüber gitterbasierten Methoden ist die Art der räumlichen Diskretisierung des Rechengebiets. Bei der SPH-Methode wird die räumliche Diskretisierung über Volumenelemente, die Partikel genannt werden, realisiert. Diese Partikel werden auf Basis des Strömungsfelds advektiert, während die Stützstellen bei gitterbasierten Methoden in der Strömungsmechanik üblicherweise statisch sind. In den Abschnitten 4.1, 4.2 und 4.3 wird auf die grundsätzlichen Konzepte der SPH-Methode zur Diskretisierung der räumlichen Ableitungen eingegangen. In der weiterführenden Literatur, z. B. in der von Liu und Liu (2010), Monaghan (2005), Violeau (2012) und Violeau und Rogers (2016), können darüber hinaus exzellente theoretische Beschreibungen sowie ein Überblick über den aktuellen Entwicklungsstand und die vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten der SPH-Methode gefunden werden.

Wie bereits in der Zielsetzung dieser Arbeit (vgl. Abschnitt 2.4) erwähnt wurde, bestehen numerische Unzulänglichkeiten der SPH-Methode. Diese sind insbesondere kritisch, wenn die räumliche Partikelanordnung innerhalb des Rechengebiets lokal inhomogen ist. Eine inhomogene Partikelanordnung ist z. B. durch lokal schwankende Partikelabstände charakterisiert. Es wurden während der letzten zwei Jahrzehnte Methoden entwickelt, um die Robustheit der SPH-Methode gegenüber diesen numerischen Unzulänglichkeiten zu verstärken. Das in Kapitel 5 noch vorzustellende Embedded-SPH-Verfahren ist durch inhomogene Partikelanordnungen am Kopplungsrand charakterisiert. Daher ist es an dieser Stelle wichtig, ausführlich auf die Methoden zur Verbesserung der Stabilität der SPH-Methode einzugehen und geeignete Verfahren auszuwählen. Dies wird in Abschnitt 4.4 diskutiert.

In der vorliegenden Arbeit ist es außerdem wichtig, dass die Partikel insbesondere an offenen Rändern unabhängig von dem lokalen Strömungsfeld advektiert werden können. Aus diesem Grund wurden die Erhaltungsgleichungen in Kapitel 3 auf Grundlage des ALE-Ansatzes formuliert. Die Applizierung dieses Ansatzes auf die SPH-Methode ist allerdings problematisch. Diese Problematik wird in Abschnitt 4.5 aufgezeigt. Auf Grundlage dieser Diskussion werden in Abschnitt 4.5 die Formulierungen der Erhaltungsgleichungen eingeführt, die in dieser Arbeit bei dem SPH-Verfahren anzuwenden sind.

In Abschnitt 4.6 werden die SPH-Operatoren zur Diskretisierung der räumlichen Ableitungen der Erhaltungsgleichungen angewendet. In Abschnitt 4.7 wird der gewählte Ansatz zur zeitlichen Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen eingeführt.

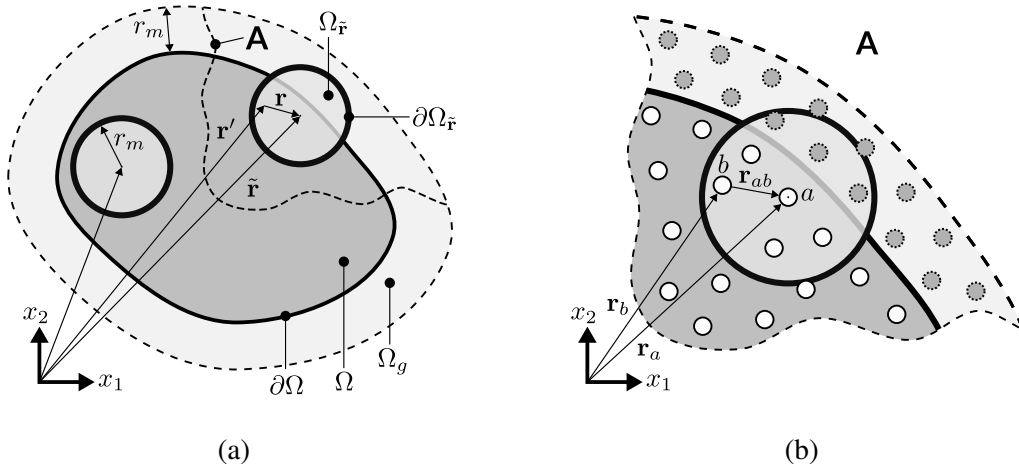


Abbildung 4.1: (a): Rechengebiet mit Gebietsrand und extrudierter Randregion.
 (b): Ausschnitt des durch Partikel diskretisierten Rechengebiets

4.1 Kernel-Approximation

Ein wesentlicher Vorteil der SPH-Methode gegenüber gitterbasierten Methoden ist die Flexibilität bei der Advektion von Materialeigenschaften und Materialgrenzen. Mit der SPH-Methode lassen sich z. B. die Phasengrenzen bei der Simulation von Mehrphasenströmungen intrinsisch und ohne numerische Diffusion durch die Bewegung der Partikel advektieren. Diese wesentliche Eigenschaft der SPH-Methode wird dadurch ermöglicht, dass zwischen den Partikeln keine feste geometrische Topologie herrscht. Somit können sich anfängliche Partikelanordnungen zeitlich beliebig umformen, und extreme Materialdeformationen können ermöglicht werden. Diese Eigenschaft bringt aber den Nachteil mit sich, dass räumliche Ableitungen nicht wie bei gitterbasierten Methoden über geometrisch fest verbundene Stützstellen diskretisiert werden können. Daher werden Ortsableitungen bei der SPH-Methode mit Hilfe einer Glättungsfunktion, die auch Kernel genannt wird, diskretisiert. Über den Kernel eines Partikels werden alle Nachbarpartikel innerhalb eines gewissen Einflussgebiets des Kernels durch eine geeignete Gewichtung bei der räumlichen Diskretisierung berücksichtigt. In diesem Abschnitt wird die mathematische Definition dieser räumlichen Diskretisierung vorgestellt.

Das Konzept der SPH-Methode basiert auf der Identität zwischen einer beliebigen Funktion $\psi(\tilde{\mathbf{r}}, t)$ und deren Faltung mit der Dirac-Funktion $\delta(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}')$, wobei $\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}' \in \mathbb{R}^3$ und t Ortsvektoren und die Zeit darstellen (Violeau, 2012):

$$\psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) = \int_{\Omega} \psi(\mathbf{r}', t) \delta(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}') d\mathbf{v}' \quad (4.1)$$

In Gl. 4.1 repräsentiert $d\mathbf{v}' = d^3\mathbf{r}'$ ein infinitesimales Volumenelement des Gebiets Ω . Das Gebiet Ω ist in Abb. 4.1a dargestellt. Die folgenden Zusammenhänge lassen sich anhand dieser Abbildung nachvollziehen. Bei der SPH-Methode wird die Dirac-Funktion durch die räumlich begrenzte Glättungsfunktion $w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h)$, die auch Kernel genannt wird, ersetzt, wobei die sogenannte Glättungslänge h ein charakteristisches Längenmaß des Einflussgebiets dieses Kernels

ist. Der Index des Formelzeichens w_n des Kernels drückt die Abhängigkeit des Kernels von der Anzahl der räumlichen Dimensionen n aus. Der Kernel hängt, wie auch die Dirac-Funktion, von dem Verbindungsvektor $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}'$ ab. Er ist dabei (in der Regel) als gerade Funktion von $\mathbf{r}$ definiert. Somit ist der Kernel $w_n(r, h)$ symmetrisch um den Punkt $\tilde{\mathbf{r}}$ und damit nur abhängig vom Abstand $r = \|\mathbf{r}\|$, wobei $\|\cdot\|$ die 2-Norm bzw. den Betrag eines Vektors darstellt. Der Abstand r wird des Weiteren als dimensionsloser Abstand q angegeben:

$$q = \frac{r}{h} \quad (4.2)$$

Aufgrund der Kompaktheit des Kernels ist dieser nur für Ortsvektoren $\mathbf{r}'$, die innerhalb des Einflussgebiets $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ liegen, ungleich null. Das Einflussgebiet $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Kernels ist demnach die Zone um die Position $\tilde{\mathbf{r}}$, innerhalb derer der Kernel ungleich null ist. Der Radius dieses Einflussgebiets und der entsprechende dimensionslose Radius sind durch r_m und $q_m = r_m/h$ bestimmt. Grundlegende Eigenschaften des Kernels, aus denen sich wichtige Merkmale der SPH-Methode ergeben, können aus den Arbeiten von Liu und Liu (2010) und Violeau (2012) entnommen werden. Die Kernel-Approximation $\langle \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \rangle$ der Funktion $\psi(\tilde{\mathbf{r}}, t)$ ist wie folgt definiert:

$$\psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \approx \langle \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \rangle = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \psi(\mathbf{r}', t) w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{v}' \quad (4.3)$$

Analog zu der Approximation der Funktion ψ lässt sich auch deren Gradient $\nabla\psi$ mit demselben Prinzip durch eine Approximation auf Basis des Kernels darstellen (Violeau, 2012):

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \approx \langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \rangle = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \nabla_{\mathbf{r}'} \psi(\mathbf{r}', t) w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{v}' \quad (4.4)$$

Der Index des ∇ Operators in Gl. 4.4 gibt an, nach welchem Ortsvektor differenziert wird. Die Gl. 4.4 lässt sich über die Kettenregel, den Gauß'schen Integralsatz und die Identität $\nabla_{\mathbf{r}'} w_n = -\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w_n$ wie folgt umformulieren (Violeau, 2012):

$$\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \rangle = \int_{\partial\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \psi(\mathbf{r}', t) w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) \mathbf{n}(\mathbf{r}') ds' + \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \psi(\mathbf{r}', t) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{v}' \quad (4.5)$$

In Gl. 4.5 sind $ds' = d^2\mathbf{r}'$ und $\mathbf{n}(\mathbf{r}')$ ein infinitesimales Flächenelement der Oberfläche $\partial\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Einflussgebiets $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ und der aus dem Einflussgebiet herauszeigende Normaleneinheitsvektor dieses Flächenelements. An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass Gl. 4.3 und Gl. 4.4 nur gültig sind, wenn das Einflussgebiet $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Kernels nicht den Rand $\partial\Omega$ des Gebiets Ω überlappt ($\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \partial\Omega = \emptyset$)⁸. Andernfalls müssen die Integrale in Gl. 4.3 und Gl. 4.4 normiert werden. Ansätze hierfür werden von de Leffe et al. (2009), Ferrand et al. (2012) und Kulasegaram et al. (2004) vorgeschlagen. In Kapitel 2 wurde erläutert, dass die Berechnung des entsprechenden Normierungsparameters rechenaufwendig ist. Um die Notwendigkeit einer Normierung der genannten Gleichungen zu vermeiden, wird in dieser Arbeit die innere Domäne Ω mit einem Randgebiet Ω_g um einen Abstand extrudiert, der größer oder gleich dem Radius r_m des Einflussgebiets des Kernels ist (vgl. Abb. 4.1a). Das Einflussgebiet des Kernels ist auf beiden Gebieten, Ω und Ω_g ,

⁸ $\emptyset$ entspricht der Nullmenge.

definiert, und die Approximationen der Funktion ψ und deren Gradienten sind auf das Gebiet Ω beschränkt. Damit ist sichergestellt, dass das Einflussgebiet vollständig im inneren Gebiet und im Randgebiet enthalten ist ($\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \subseteq \Omega \cup \Omega_g$). Da der Kernel w_n am Rand $\partial\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Einflussgebiets gleich null ist, entfällt das erste Integral in Gl. 4.5:

$$\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \psi(\tilde{\mathbf{r}}, t) \rangle = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \psi(\mathbf{r}', t) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (4.6)$$

In diesem Abschnitt wurde die Kernel-Approximation eingeführt. Um eine Berechnung des Kernels nahe der Ränder zu gewährleisten, wird die innere Domäne Ω durch ein Randgebiet Ω_g erweitert. Dies ist die Grundlage für die Verwendung von Geisterpartikeln, die in Kapitel 2 zur Aufprägung von Rand- und Kopplungsbedingungen ausgewählt wurden. Im nächsten Abschnitt wird der in dieser Arbeit verwendete Kernel eingeführt. Danach wird die Partikel-Approximation erläutert, über die die Diskretisierung der räumlichen Ableitungen ermöglicht wird.

4.2 Glättungsfunktion (Kernel)

Die Glättungsfunktion, die auch Kernel genannt wird, und deren Gradient lassen sich im Allgemeinen wie folgt definieren:

$$w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) = \frac{\alpha_n}{h^n} f(q) \quad (4.7)$$

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w_n(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}', h) = \frac{\alpha_n}{h^{n+1}} \frac{\partial f(q)}{\partial q} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.8)$$

In Gl. 4.7 und Gl. 4.8 ist die Größe α_n ein von der Anzahl der räumlichen Dimensionen n abhängiger Vorfaktor und $f(q)$ eine Funktion des dimensionslosen Abstands q . In dieser Arbeit wird der Quintic-Kernel verwendet. Für diesen Kernel sind der Vorfaktor α_n und die Funktion f wie folgt definiert (Morris et al., 1997):

$$\alpha_n = \begin{cases} \frac{1}{120} & n = 1 \\ \frac{7}{478\pi} & n = 2 \\ \frac{1}{120\pi} & n = 3 \end{cases} \quad (4.9)$$

$$f(q) = \begin{cases} (3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5 & 0 \leq q < 1 \\ (3-q)^5 - 6(2-q)^5 & 1 \leq q < 2 \\ (3-q)^5 & 2 \leq q < 3 \\ 0 & 3 \leq q \end{cases} \quad (4.10)$$

In Gl. 4.10 ist ersichtlich, dass der Quintic-Kernel oberhalb eines dimensionslosen Abstands von $q = 3$ gleich null ist. Demnach beträgt der dimensionslose Radius des Einflussgebiets $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$

des Kernels $q_m = 3$. Im Folgenden wird auf den Index n im Formelzeichen w_n des Kernels und auf den Hinweis zur Abhängigkeit des Kernels von der Glättungslänge h verzichtet.

4.3 Partikel-Approximation

Bei der SPH-Methode wird das kontinuierliche Gebiet Ω durch eine endliche Anzahl von Stützstellen, die Partikel genannt werden, diskretisiert. In dieser Arbeit besetzen die Partikel das Gebiet Ω in gleichmäßigen Abständen zueinander. Es werden somit keine expliziten lokalen Unterschiede der Partikeldichte aufgeprägt. Die räumliche Auflösung des Gebiets Ω ist daher durch einen mittleren Partikelabstand r_{ref} definiert,⁹ der im nachfolgenden Teil der Arbeit auch Referenzpartikelabstand genannt wird.

Zur Diskretisierung räumlicher Ableitungen wird die sogenannte Partikel-Approximation eingeführt. Das Partikel a ist dabei durch den Ortsvektor $\mathbf{r}_a$, das Volumen V_a und die Transportgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a$, die im weiteren Verlauf der Arbeit auch Partikelgeschwindigkeit genannt wird, charakterisiert. Außerdem kann eine beliebige Funktion ψ an der Position $\mathbf{r}_a$ des Partikels a definiert werden. Zur besseren Lesbarkeit wird die Funktion an der Position des Partikels mit dem Index des Partikels versehen. Außerdem wird die Zeit t nicht weiter in den Formeln mitgeführt. Demnach gilt z. B. $\psi_a = \psi(\mathbf{r}_a, t)$ für die Funktion ψ an dem Partikel a . Der in Abb. 4.1a markierte Bereich A ist in Abb. 4.1b als ein durch Partikel diskretisiertes Gebiet vergrößert dargestellt. Die folgenden Zusammenhänge lassen sich anhand dieser Abbildung nachvollziehen. Die Integrale in Gl. 4.3 und Gl. 4.6 werden durch Partikel-Approximationen $[\psi]_a$ bzw. $[\nabla\psi]_a$ an der Position $\mathbf{r}_a$ des Partikels a basierend auf Quadraturformeln ersetzt:

$$\langle \psi(\mathbf{r}_a, t) \rangle \approx [\psi]_a = \sum_b V_b \psi_b w_{ab} \quad (4.11)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}_a, t) \rangle \approx [\nabla\psi]_a = \sum_b V_b \psi_b \nabla_a w_{ab} \quad (4.12)$$

Die kontinuierlichen Integrale werden demnach durch Summationen über die mit dem Volumen gewichteten Werte der Funktion ψ an den Stellen der Nachbarpartikel b approximiert. Wie bereits in Gl. 4.11 und Gl. 4.12 erkennbar ist, wird der Kernel bzw. dessen Gradient zur besseren Lesbarkeit im Folgenden als $w_{ab} = w(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)$ bzw. $\nabla_a w_{ab} = \nabla_{\mathbf{r}_a} w(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)$ geschrieben. Der Gradient eines Vektorfelds Ψ ergibt sich analog zu Gl. 4.12:

$$\langle (\nabla_{\mathbf{r}} \otimes \Psi(\mathbf{r}_a, t))^{\top} \rangle \approx [(\nabla \otimes \Psi)^{\top}]_a = \sum_b V_b \Psi_b \otimes \nabla_a w_{ab} \quad (4.13)$$

Wie Liu und Liu (2010) und Violeau (2012) zeigen, lassen sich durch die geschickte Anwendung gewisser Identitäten weitere Approximationen des Differentialoperators herleiten, die durch vorteilhafte Eigenschaften charakterisiert sind. Z. B. ist die folgende Approximation der Divergenz

⁹Aufgrund der nur schwachen Kompressibilität des Fluids kann sich der mittlere Abstand zwischen den Partikeln während der Simulation nur geringfügig ändern.

des Vektorfelds Ψ exakt, wenn das Vektorfeld homogen ist (Violeau, 2012):

$$[\nabla \cdot \Psi]_a = -\frac{1}{\rho_a} \sum_b m_b \Psi_{ab} \cdot \nabla_a w_{ab} \quad (4.14)$$

In Gl. 4.14 sind ρ_a und m_b die Fluidichte des Partikels a und die Masse des Partikels b , und die Größe $\Psi_{ab} = \Psi_a - \Psi_b$ ist die Differenz der Werte des Vektorfelds Ψ an den Partikeln a und b . Dieser Operator wird üblicherweise zur Approximation der Geschwindigkeitsdivergenz genutzt, da durch dessen Anwendung im Falle eines konstanten Geschwindigkeitsfelds keine Dichteänderung durch inhomogene Partikelanordnungen entstehen kann. Ein oft verwendeter Operator zur Approximation des Gradienten des Skalars ψ ist wie folgt definiert:

$$[\nabla \psi]_a = \sum_b V_b (\psi_a + \psi_b) \nabla_a w_{ab} \quad (4.15)$$

Diese Formulierung des Gradienten bewirkt eine antisymmetrische Interaktion zwischen den Partikeln a und b . Die numerischen Flüsse, die zwischen diesen Partikeln ausgetauscht werden, sind somit reziprok. Durch diese Art von Operator kann die Erhaltung gewährleistet werden.

Partikel-Approximationen der Ableitungen zweiter Ordnung werden benötigt, um Diffusionsterme zu berechnen. In den Erhaltungsgleichungen tauchen diese in der Form $\nabla \cdot (d_\psi \nabla \psi)$ für den Skalar ψ bzw. $\nabla \cdot (d_\Psi \nabla \otimes \Psi)$ für den Vektor Ψ auf, wobei d_ψ und d_Ψ die Diffusionskoeffizienten der Funktionen ψ und Ψ sind. Ableitungen zweiter Ordnung können unter anderem über verschachtelte Partikel-Approximationen der Ableitungen erster Ordnung oder über Formulierungen der zweiten Ableitung des Kernels realisiert werden. Beide Ansätze sind nicht optimal. Die erste Möglichkeit führt zu einem erhöhten Rechenaufwand und die zweite Möglichkeit zu einer verringerten Robustheit gegenüber inhomogenen Partikelanordnungen (Morris et al., 1997). Morris et al. (1997) zeigen eine dritte Möglichkeit, bei der die äußere Ableitung, also die Divergenz, über eine Partikel-Approximation und die innere Ableitung, also der Gradient, über eine Finite-Differenzen-Approximation bestimmt werden. Violeau (2012) leitet solch eine Approximation über dieselbe Identität, die auch zur Herleitung von Gl. 4.15 verwendet wurde, her:

$$[\nabla \cdot (d_\psi \nabla \psi)]_a = 2 \sum_b V_b d_{\psi,ab} \frac{\psi_{ab}}{r_{ab}} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \quad (4.16)$$

$$[\nabla \cdot (d_\Psi \nabla \otimes \Psi)]_a = 2 \sum_b V_b d_{\Psi,ab} \frac{\Psi_{ab}}{r_{ab}} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \quad (4.17)$$

In Gl. 4.16 und Gl. 4.17 sind die Größen ψ_{ab} , Ψ_{ab} und $\mathbf{r}_{ab}$ wieder als Differenz der Werte der jeweiligen Größen an den Partikeln a und b zu verstehen, und $r_{ab} = \|\mathbf{r}_{ab}\|$ ist der Abstand der Partikel a und b . Die Quotienten aus dem Skalar ψ_{ab} bzw. dem Vektor Ψ_{ab} und dem Partikelabstand r_{ab} stellen die Finite-Differenzen-Approximationen des Gradienten dar. Die Diffusionskoeffizienten $d_{\psi,ab}$ und $d_{\Psi,ab}$ sind als Mittelwerte der Diffusionskoeffizienten der

Partikel a und b definiert:

$$d_{\psi,ab} = \frac{d_{\psi,a} + d_{\psi,b}}{2} \quad (4.18)$$

$$d_{\Psi,ab} = \frac{d_{\Psi,a} + d_{\Psi,b}}{2} \quad (4.19)$$

Die Operatoren in Gl. 4.16 und Gl. 4.17 bewirken antisymmetrische Interaktionen zwischen den Partikeln a und b und somit eine Reziprozität der numerischen Flüsse.

Mit den in diesem Abschnitt eingeführten Partikel-Approximationen können im weiteren Verlauf der Arbeit räumliche Ableitungen mit der SPH-Methode diskretisiert werden. Im nächsten Abschnitt wird auf relevante numerische Unzulänglichkeiten der SPH-Methode und entsprechende Verfahren zur Verringerung der Einflüsse dieser Unzulänglichkeiten eingegangen.

4.4 Numerische Unzulänglichkeiten der SPH-Methode

In diesem Abschnitt werden Unzulänglichkeiten der SPH-Methode besprochen. Diese sind insbesondere für das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren zur Behandlung von Partikeln an offenen Rändern relevant. Die SPH-Methode ist numerisch stabil, wenn die räumliche Anordnung der Partikel hinreichend homogen und isotrop ist. Bei dem in Kapitel 5 noch zu erläuternden Verfahren zur Behandlung offener Randbedingungen entstehen allerdings anisotrope Partikelanordnungen. Das Verfahren ist somit anfällig gegen die numerischen Unzulänglichkeiten der SPH-Methode. Diese Unzulänglichkeiten können zu Instabilitäten bis hin zu Simulationsabbrüchen sowie zu erheblichen Ungenauigkeiten führen. Daher werden in diesem Abschnitt Verfahren eingeführt, die diesen numerischen Unzulänglichkeiten entgegenwirken.

Die Verwendung dieser Verfahren birgt allerdings negative Konsequenzen, wie z. B. die Erhöhung des Rechenaufwands oder die Einführung numerischer Diffusionsterme in den Erhaltungsgleichungen. Die Berücksichtigung der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ (vgl. Kapitel 3) in den Erhaltungsgleichungen kann zudem erforderlich sein. Die sich hieraus ergebende Herausforderung wird in Abschnitt 4.5 noch erläutert. Für den Erfolg dieser Arbeit ist es daher wichtig, diese Verfahren mit Bedacht auszuwählen. Ein Teil dieser Arbeit befasst sich daher auch in Kapitel 6 und Anhang A.5 mit der Bewertung der Einflüsse dieser Korrekturansätze im Zusammenhang mit offenen Randbedingungen. Es existieren unter anderem zwei grundsätzliche numerische Unzulänglichkeiten der SPH-Methode, die nachstehend kurz erläutert werden, bevor in den nächsten Abschnitten detailliert auf die Korrekturansätze eingegangen wird.

Auf der einen Seite kann es zu anisotropen Partikelanordnungen und zu Verklumpungen von Partikeln kommen. Hierfür gibt es mehrere Gründe: Zum einen tritt die sogenannte Paarungsinstabilität auf, wenn die Anzahl der Nachbarpartikel innerhalb des Einflussgebiets des Kernels einen gewissen Wert überschreitet, der abhängig von dem verwendeten Kernel ist (Dehnen und Aly, 2012). Zum anderen führt eine Kombination aus negativen Fluidrücken an den Partikeln und einem negativen Wert der zweiten Ableitung des Kernels zu der sogenannten Dehnungsinstabilität. In diesem Fall kommt es zu einer anziehenden Kraft zwischen benachbarten Partikeln,

wenn diese einen gewissen relativ zur Glättungslänge definierten Mindestabstand zueinander unterschreiten (Monaghan, 2000; Swegle et al., 1995). Durch die aus den Kräften resultierende Inhomogenität der räumlichen Partikelanordnung verringert sich die Genauigkeit der Partikel-Approximationen. Ein weiterer Grund für eine Anisotropie der Partikelanordnung resultiert aus der Tatsache, dass die Advektion der Partikel entlang der Stromlinien des Geschwindigkeitsfelds erfolgt, wenn die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$, wie in der ursprünglichen Form der SPH-Methode, gleich null ist. Ähnlich wie bei der Klumpenbildung der Partikel entsteht hierbei eine inhomogene Partikelanordnung, die zu einer Verschlechterung der Simulationsgenauigkeit führt (Oger et al., 2016). Dieser Effekt tritt paradoxer Weise auf, wenn Maßnahmen zur Verbesserung der Stabilität und Genauigkeit der SPH-Methode angewendet werden.

Auf der anderen Seite sind die Genauigkeit und die Konsistenzordnung der ursprünglichen SPH-Methode gering. Die Konsistenzordnung ist als der maximale Grad eines Polynoms definiert, das mit der SPH-Methode exakt berechnet werden kann (Liu und Liu, 2010). Der Fehler der Kernel-Approximation verhält sich proportional zum Quadrat der Glättungslänge (Monaghan, 2005). Die Kernel-Approximation hat die Konsistenzordnung 1 (Liu und Liu, 2010). Eine lineare Funktion kann somit unter Anwendung der Kernel-Approximation exakt berechnet werden. Zur Bestimmung der Genauigkeit der Partikel-Approximation unterscheiden Quinlan et al. (2006) bei einer eindimensionalen Betrachtung zwischen dem Fall einer äquidistanten Partikelanordnung und dem Fall einer basierend auf einer Normalverteilung aufgeprägten Störung der Positionen der Nachbarpartikel. Im Falle der äquidistanten Anordnung verhält sich der Fehler oberhalb einer gewissen Glättungslänge wie bei der Kernel-Approximation. Unterhalb dieser Glättungslänge ist der Fehler auf einen Diskretisierungsfehler limitiert, der sich abhängig von dem verwendeten Kernel mit der Verringerung des Verhältnisses aus dem Partikelabstand und der Glättungslänge ändert. Auf Basis der Partikel-Approximation kann die exakte Berechnung einer räumlich konstanten Funktion nicht garantiert werden. Demnach ist selbst die Konsistenzordnung 0 nicht erfüllt (Liu und Liu, 2010). Aufgrund der geringen Konsistenzordnung und der Diskretisierungsfehler ist das Dichtefeld mit einem Rauschen behaftet. Durch geringe räumliche Dichteunterschiede entstehen auf Basis der Zustandsgleichung (Gl. 3.21) große Fluktuationen des Druckfelds. Inhomogene Partikelanordnungen begünstigen diese Fluktuationen. Interessant ist, dass durch die Druckgradienten, die aus dem Rauschen des Druckfelds resultieren, eine exakte Advektion der Partikel entlang der Stromlinien des Strömungsfelds unterbunden und einer entsprechenden Partikelanisotropie entgegengewirkt wird.

Im Folgenden werden verschiedene Verfahren eingeführt, die den erläuterten numerischen Unzulänglichkeiten entgegenwirken. Eine Verbesserung der Genauigkeit und Konsistenz der Partikel-Approximationen kann durch eine Korrektur des Kernel-Gradienten erreicht werden (vgl. Abschnitt 4.4.1). Unphysikalische Fluktuationen der Fluidichte und des Fluidrucks können durch eine Stabilisierung des Dichtefelds verringert werden. Ermöglicht würde dies zum einen über eine alternative Berechnung der Fluidichte (vgl. Abschnitt 4.4.2), die einer impliziten zeitlichen Diskretisierung ähnelt, und zum anderen durch die Anwendung numerischer Diffusionsterme für die Fluidichte (vgl. Abschnitt 4.4.3). Anisotrope Partikelverteilungen sowie Verklumpungen von Partikeln können wiederum durch eine Homogenisierung der räumlichen Verteilung

der Partikel über eine kontrollierte Verschiebung der Partikel verhindert werden (vgl. Abschnitt 4.4.4).

4.4.1 Korrektur des Kernel-Gradienten

Wie einleitend erläutert wurde, ist bei der SPH-Methode die Konsistenzordnung 0 auf Basis der Partikel-Approximation nicht erfüllt. Dadurch lassen sich konstante Funktionen durch den Interpolationsoperator (vgl. Gl. 4.11) nicht exakt berechnen. Verstärkt wird dieses Problem durch anisotrope Partikelanordnungen, die in der Umgebung offener Gebietsränder, die Bestandteil des in dieser Arbeit entwickelten Verfahrens für offene und gekoppelte Randbedingungen sind, auftreten können. Aus demselben Grund ist auch die Partikel-Approximation des Gradienten einer konstanten oder linearen Funktion auf Basis des Operators in Gl. 4.12 mit Ungenauigkeiten behaftet. Diese Ungenauigkeiten können Instabilitäten der Strömungsvariablen auslösen. Um die Konsistenz einer bestimmten Ordnung größer 0 sowie die exakte Berechnung des Gradienten einer linearen Funktion zu gewährleisten, müssen gewisse den Kernel und dessen Gradienten betreffende Identitäten erfüllt sein (Bonet und Lok, 1999; Liu und Liu, 2010; Violeau, 2012). Durch das Aufprägen dieser Identitäten können Korrekturterme für den in Abschnitt 4.2 vorgestellten Kernel und dessen Gradienten bestimmt werden. Bonet und Lok (1999) schlagen eine Kernel-Korrektur vor, über die die Konsistenzordnung 1 für die SPH-Methode und entsprechend eine exakte Berechnung des Gradienten einer linearen Funktion gewährleistet werden kann. Dafür wird der korrigierte Kernel $\tilde{w}_{ab}$ nach Shepard (1968) verwendet. Basierend auf diesem korrigierten Kernel wird wiederum ein korrigierter Kernel-Gradient hergeleitet:

$$\tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab} = \mathbf{L}_a \nabla_a \tilde{w}_{ab} \quad (4.20)$$

Der Gradient $\nabla_a \tilde{w}_{ab}$ des Shepard-Filters und die Korrekturmatrix $\mathbf{L}_a$ sind wie folgt definiert:

$$\nabla_a \tilde{w}_{ab} = \frac{1}{[1]_a} \left(\nabla_a w_{ab} - \frac{[\nabla 1]_a}{[1]_a} \right) \quad (4.21)$$

$$\mathbf{L}_a = \left(\sum_b V_b \nabla_a \tilde{w}_{ab} \otimes \mathbf{r}_b \right)^{-1} \quad (4.22)$$

In Gl. 4.21 sind $[1]_a$ und $[\nabla 1]_a$ die Partikel-Approximationen einer konstanten Funktion mit dem Wert 1 und deren Gradienten, wobei diese Approximationen unter Anwendung des unkorrigierten Kernels berechnet werden. Der korrigierte Kernel-Gradient $\tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab}$ kann in den entsprechenden SPH-Operatoren zur Approximation von Ortsableitungen (vgl. Abschnitt 4.3) anstatt des unkorrigierten Kernel-Gradienten $\nabla_a w_{ab}$ angewendet werden. Allerdings ist die Anwendung der Korrektur mit zwei Nachteilen behaftet: Der unkorrigierte Gradient ist eine ungerade Funktion des Partikelabstands $\mathbf{r}_{ab}$. Demnach gilt die Identität $\nabla_a w_{ab} = -\nabla_b w_{ba}$, wodurch sich prinzipiell antisymmetrische Interaktionen zwischen den Partikeln a und b formulieren lassen. Diese ermöglichen wiederum eine konservative Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen. Der korrigierte Gradient $\tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab}$ ist nicht durch diese Eigenschaft charakterisiert. Daher sind die numerischen Flüsse zwischen zwei Partikeln nicht mehr reziprok. Darüber hinaus erhöht sich

die Rechenzeit zur Berechnung des Kernel-Gradienten aufgrund der Bestimmung der Inversen des Klammerterms in Gl. 4.22. Aus diesen Gründen ist es wichtig, diese Korrektur nur auf Terme anzuwenden, bei denen die zuvor erläuterten Nachteile mit der durch die Korrektur bewirkten Verbesserung der Genauigkeit und Stabilität gerechtfertigt werden können. Der Einfluss der Korrektur des Kernel-Gradienten auf den Druckgradienten, die Geschwindigkeitsdivergenz und Diffusionsterme wird in Abschnitt A.5.2 untersucht und in Kapitel 6 zusammengefasst. Die Korrektur ist vor allem in randnahen Bereichen des Rechengebiets notwendig, in denen verhältnismäßig große Inhomogenitäten der Partikelverteilung auftreten können. In Abschnitt 5.2.6 und Abschnitt 5.3.1 wird die Korrektur daher bei der Diskretisierung der räumlichen Ableitungen der Strömungsgrößen an den noch einzuführenden Stützstellen des Gebietsrands angewendet. Außerdem werden in Abschnitt 4.5 Korrekturterme in den Erhaltungsgleichungen definiert, die unter Anwendung der Kernel-Korrektur in Abschnitt 4.6 diskretisiert werden.

4.4.2 Dichteberechnung über die diskrete Approximation

Die zeitliche Änderungsrate der Fluidichte ρ wird über die Kontinuitätsgleichung (Gl. 3.11) ausgedrückt. Wie noch gezeigt wird, erfolgt die zeitliche Integration der Strömungsvariablen in dieser Arbeit auf Basis eines expliziten Zeitschrittverfahrens. Diese Art der zeitlichen Integration ist, so auch im Falle der Kontinuitätsgleichung, grundsätzlich nur bedingt stabil. Vila (1999) führt an, dass die Berechnung der Fluidichte über eine Interpolation der Fluidichte der Nachbarpartikel unter Anwendung der Partikel-Approximation gemäß Gl. 4.11 eine implizite zeitliche Diskretisierung darstellt. Diese Art der Berechnung der Dichte, die von Monaghan (2005) vorgeschlagen wird, wird nachfolgend diskrete Approximation genannt und soll insbesondere bei der Simulation von Stößen robuster sein als die Berechnung der Dichte über die Kontinuitätsgleichung unter Anwendung eines expliziten Zeitschrittverfahrens. An dieser Stelle ist die Idee, dass dieser Ansatz auch eine verbesserte numerische Robustheit für die noch einzuführende Methode zur Behandlung offener Randbedingungen ermöglichen könnte. Für den Fall, dass die Partikelgeschwindigkeit von der lokalen Strömungsgeschwindigkeit abweicht, müssen allerdings Korrekturen bei diesem Ansatz appliziert werden. In diesem Abschnitt wird daher auf die Äquivalenz zwischen der physikalischen Fluidichte ρ und der über die diskrete Approximation ermittelten Dichte $\tilde{\rho}$ eingegangen.

Die über die diskrete Approximation berechnete Dichte $\tilde{\rho}_a$ des Partikels a ist auf Basis von Gl. 4.11 wie folgt definiert:

$$\tilde{\rho}_a = [\rho]_a = \sum_b V_b \rho_b w_{ab} = \sum_b m_b w_{ab} \quad (4.23)$$

In Gl. 4.23 ist die Größe $m_b = V_b \rho_b$ die Masse des Partikels b . Um die Äquivalenz zwischen der Dichte ρ_a basierend auf der Kontinuitätsgleichung und der Dichte $\tilde{\rho}_a$ basierend auf Gl. 4.23 zu demonstrieren, wird das totale Differential auf Gl. 4.23 angewendet:

$$d\tilde{\rho}_a = d \left(\sum_b m_b w_{ab} \right) \quad (4.24)$$

Nachfolgend wird die Kettenregel auf Gl. 4.24 angewendet:

$$d\tilde{\rho}_a = \sum_b \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_a}{\partial m_b} \right|_{w_{ab}} dm_b + \sum_b \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_a}{\partial w_{ab}} \right|_{m_b} dw_{ab} \quad (4.25)$$

Es ist zu beachten, dass der Kernel w_{ab} bis auf den Abstandsvektor $\mathbf{r}_{ab}$ nur von Konstanten abhängig ist. Daher ergibt sich unter Anwendung des Differentialoperators d/dt die folgende Gleichung:

$$d\tilde{\rho}_a = \sum_b w_{ab} dm_b + \sum_b m_b \frac{\partial w_{ab}}{\partial \mathbf{r}_{ab}} \cdot \frac{d\mathbf{r}_{ab}}{dt} dt \quad (4.26)$$

Die partielle Ableitung des Kernels im zweiten Term in Gl. 4.26 ist gleich dem Gradienten $\nabla_a w_{ab}$ des Kernels. Außerdem kann die zeitliche Änderungsrate des Abstandsvektors $\mathbf{r}_{ab}$ über die Differenz $\hat{\mathbf{u}}_{ab} = \hat{\mathbf{u}}_a - \hat{\mathbf{u}}_b$ der Partikelgeschwindigkeiten der Partikel a und b ausgedrückt werden:

$$d\tilde{\rho}_a = \sum_b w_{ab} dm_b + \sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{ab} dt \quad (4.27)$$

Die Differenz $\hat{\mathbf{u}}_{ab}$ der Partikelgeschwindigkeiten lässt sich unter Anwendung von Gl. 3.3 in den Anteil $\delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} = \delta \hat{\mathbf{u}}_a - \delta \hat{\mathbf{u}}_b$ der Geschwindigkeitsdifferenz und den Anteil $\mathbf{u}_{ab} = \mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b$ der Strömungsgeschwindigkeit zerlegen:

$$d\tilde{\rho}_a = \sum_b w_{ab} dm_b + \underbrace{\sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_{ab}}_{-\rho_a [\nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}]_a} dt + \underbrace{\sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \mathbf{u}_{ab}}_{-\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a} dt \quad (4.28)$$

Die beiden letzten Terme in Gl. 4.28 enthalten Diskretisierungen von Geschwindigkeitsdivergenzen auf Basis des in Gl. 4.14 definierten SPH-Operators. Vorgreifend auf Abschnitt 4.5, in dem die Erhaltungsgleichungen der SPH-Methode eingeführt werden, wird an dieser Stelle bereits darauf hingewiesen, dass der letzte Term in Gl. 4.28 einem der Terme der Kontinuitätsgleichung (vgl. Gl. 4.66) entspricht. Zudem treten in der Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.66 in Abschnitt 4.5) ein Korrekturterm basierend auf der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ und ein Dichtediffusionsterm auf. Die Anteile der beiden zuletzt genannten Terme an der Dichteänderung $d\rho_a$ lassen sich durch entsprechende Differentiale $d\rho_{a,c}^S$ und $d\rho_{a,c}^D$ (vgl. Gl. 4.75 und Gl. 4.76 in Abschnitt 4.5) bestimmen, die im Folgenden zu dem Differential $d\rho_{a,c}$ zusammengefasst werden:

$$d\rho_{a,c} = d\rho_{a,c}^S + d\rho_{a,c}^D \quad (4.29)$$

Die Dichteänderung $d\rho_a$ auf Basis der in Abschnitt 4.5 noch einzuführenden Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.66) kann somit wie folgt formuliert werden:

$$d\rho_a = -\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a dt + d\rho_{a,c} \quad (4.30)$$

Aus der Subtraktion der Gl. 4.28 von Gl. 4.30 ergibt sich die folgende Formulierung:

$$d\rho_a = d\tilde{\rho}_a - \sum_b w_{ab} dm_b - \sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} dt + d\rho_{a,c} \quad (4.31)$$

Anhand Gl. 4.31 ist ersichtlich, dass im Allgemeinen die Änderungen der Dichte basierend auf der diskreten Approximation (Gl. 4.23) und der Kontinuitätsgleichung (und somit auch die Dichten ρ_a und $\tilde{\rho}_a$) äquivalent sind, wenn 1) die Masse m_b zeitlich invariant ist, 2) die Partikel entlang der Stromlinien advektiert werden ($\hat{\mathbf{u}}_a = \mathbf{u}_a$, $\hat{\mathbf{u}}_b = \mathbf{u}_b$ bzw. $\delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} = \mathbf{0}$) und 3) der Term $d\rho_{a,c}$ gleich null ist. Wie im weiteren Verlauf der Arbeit noch erläutert wird, ist keine der genannten Voraussetzungen in dieser Arbeit erfüllt. Die Dichten ρ_a und $\tilde{\rho}_a$ sind also nicht äquivalent.

Bisher wurde die zuvor erläuterte Problematik bei Anwendung der diskreten Approximation (Gl. 4.23) meist ignoriert. Lediglich Ferrand et al. (2017) berücksichtigen im Zusammenhang mit semianalytischen offenen Randbedingungen (vgl. Abschnitt 2.2), dass die zuvor erläuterten Definitionen der Dichte unter gewissen Gegebenheiten nicht äquivalent sind. Bei dem Verfahren von Ferrand et al. (2017) werden die Partikel des inneren Rechengebiets zwar mit der Strömungsgeschwindigkeit advektiert ($\delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$), jedoch sind die an den offenen Rändern platzierten Eckpartikel, wie in Abschnitt 2.2 erläutert wurde, statisch ($\delta \hat{\mathbf{u}} = -\mathbf{u}$). Daher berücksichtigen Ferrand et al. (2017) den Divergenzterm in Gl. 4.31. Sie treffen außerdem die Annahme, dass die Massenänderung dm_b entkoppelt von der Dichteänderung $d\rho_a$ betrachtet werden kann. Dies führt dazu, dass die Massenänderung dm_b zu null gesetzt wird. Für diesen Fall folgt aus Gl. 4.24 die folgende Vereinfachung für das Differential der Dichte $\tilde{\rho}_a$:

$$d\tilde{\rho}_a = \sum_b m_b dw_{ab} \quad (4.32)$$

Ebenfalls unter der Annahme $dm_b = 0$ kg und unter Berücksichtigung des Zusammenhangs zwischen dem totalen Differential des Kernels und der Divergenz der Partikelgeschwindigkeiten kann der dritte Term auf der rechten Seite in Gl. 4.31 umformuliert werden (Ferrand et al., 2017):

$$\sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} dt = \sum_b m_b d_\delta w_{ab} \quad (4.33)$$

Über das Differential d_δ wird in Gl. 4.33 eine Änderung auf Basis der relativen Partikelverschiebung $\delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} dt$ ausgedrückt, wobei $\delta \hat{\mathbf{u}}_{ab}$ die Differenz der Geschwindigkeitsdifferenzen der Partikel a und b beschreibt. Durch Einsetzen von Gl. 4.32 und Gl. 4.33 sowie des Ausdrucks $dm_b = 0$ kg in Gl. 4.31 und durch anschließende Integration zwischen den Zeitpunkten v und $v + 1$ folgt die Approximation der Dichte nach Ferrand et al. (2017):

$$\rho_a^{v+1} = \rho_a^v + \sum_b m_b^v \left(w_{ab}^{v+1} - w_{ab}^\delta \right) + \int_{\rho_{a,c}^v}^{\rho_{a,c}^{v+1}} d\rho_{a,c} \quad (4.34)$$

In Gl. 4.34 kennzeichnen die hochgestellten Symbole v , $v + 1$ und δ die Zustände zu den entsprechenden Zeitpunkten und den Zustand nach der Advektion der Partikel gemäß der Ge-

schwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_{ab}$ (ausgehend vom Zeitpunkt ν). Der Nachteil bei der Anwendung von Gl. 4.34 ist, dass die Partikelnachbarsuche und die Berechnung des Kernels aufgrund des zusätzlichen Terms w_{ab}^δ zweimal pro Zeitschritt durchgeführt werden müssen. Der Vorteil von Gl. 4.34 ist hingegen, dass die zeitliche Integration der Dichte (abgesehen von dem Differential $d\rho_{a,c}$) exakt ist. Dies wird dadurch ermöglicht, dass die Massenänderung der Partikel instantan zum Zeitpunkt $\nu + 1$ durchgeführt wird und die Masse bei der Berechnung der Dichte nicht zeitlich integriert werden muss.

Eine Alternative zu Gl. 4.34 kann über die direkte Integration von Gl. 4.31 entwickelt werden. Die Dichte zum Zeitpunkt $\nu + 1$ ist demnach wie folgt definiert:

$$\rho_a^{\nu+1} = \rho_a^\nu + \sum_b m_b^{\nu+1} (w_{ab}^{\nu+1} - w_{ab}^\nu) - \int_{t^\nu}^{t^{\nu+1}} \sum_b m_b \nabla_a w_{ab} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_{ab} dt + \int_{\rho_{a,c}^\nu}^{\rho_{a,c}^{\nu+1}} d\rho_{a,c} \quad (4.35)$$

Der Nachteil von Gl. 4.35 ist, dass sich bei der zeitlichen Integration des dritten Terms auf der rechten Seite ein numerischer Integrationsfehler ergibt. Dadurch kann nicht gewährleistet werden, dass die Dichte in einem Strömungsfeld mit homogener Strömungsgeschwindigkeit konstant ist. Der Fehler ist in diesem Fall abhängig von der Zeitschrittweite bei der zeitlichen Integration. Der Vorteil von Gl. 4.35 ist allerdings, dass die Nachbarsuche und die Berechnung des Kernels nur einmal pro Zeitschritt durchgeführt werden müssen, da der Kernel w_{ab}^ν von dem vorherigen Zeitschritt gegeben ist und nur der Kernel $w_{ab}^{\nu+1}$ bestimmt werden muss.

Die Gemeinsamkeit der Formulierungen in Gl. 4.35 und Gl. 4.34 ist, dass sie die diskrete Approximation $\tilde{\rho}_a$ enthalten. Daher können diese Formulierungen entsprechend der Aussage nach Vila (1999) zu einer Stabilisierung des SPH-Verfahrens beitragen. Im Gegensatz zu der üblicherweise genutzten Annahme einer Äquivalenz zwischen der diskreten Approximation der Dichte $\tilde{\rho}_a$ und der Fluid-dichte ρ_a wurden in diesem Abschnitt allgemeingültige Formulierungen der Fluid-dichte ρ_a auf Basis von Gl. 4.35 und Gl. 4.34 vorgestellt, die auch im Falle von $\delta \hat{\mathbf{u}} \neq \mathbf{0}$ und/oder $d\rho_{a,c} \neq 0$ konsistent sind. Der Einfluss dieser Formulierungen auf die Simulationsergebnisse wird in Abschnitt A.5.3 untersucht und in Kapitel 6 zusammengefasst.

4.4.3 Diffusive Terme in der Kontinuitätsgleichung

Wie einleitend in Abschnitt 4.4 erläutert wurde, kommt es aufgrund von numerischen Ungenauigkeiten der Partikel-Approximation insbesondere im Falle von inhomogenen Partikelanordnungen zu einem unphysikalischen Rauschen der Strömungsvariablen. Dieses Rauschen führt auf Basis der Kontinuitätsgleichung zu Fluktuationen der Fluid-dichte. Aufgrund der steifen Kopplung zwischen der Fluid-dichte und dem Fluid-druck in der Zustandsgleichung (Gl. 3.21) werden diese Dichteoszillationen in um ein Vielfaches stärkere Druckoszillationen übertragen. Eine Möglichkeit, diese Oszillationen durch numerische Dämpfung zu reduzieren, besteht in der Einführung künstlicher Diffusionsterme in der Kontinuitätsgleichung. Ein geeigneter Diffusionsterm der Dichte ρ kann entsprechend Gl. 4.16 mit dem Diffusionskoeffizienten d_ρ definiert

werden:

$$[\nabla \cdot (d_\rho \nabla \rho)]_a = 2 \sum_b V_b d_{\rho,ab} \frac{\rho_{ab}}{r_{ab}} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \quad (4.36)$$

Gemäß Gl. 4.18 wird der Diffusionskoeffizient $d_{\psi,ab}$ des beliebigen Felds ψ als arithmetischer Mittelwert der Diffusionskoeffizienten der Partikel a und b definiert. In diesem Abschnitt werden alternative Definitionen des Diffusionskoeffizienten $d_{\rho,ab}$ der Dichte ρ basierend auf verschiedenen in der Literatur verfügbaren Verfahren zur Anwendung diffusiver Terme in der Kontinuitätsgleichung vorgestellt.

Molteni und Colagrossi (2009) definieren den Diffusionskoeffizienten $d_{\rho,ab}$ als das Produkt aus der Glättungslänge h , dem Referenzwert der Schallgeschwindigkeit c_0 und einem Regelparameter ξ :

$$d_{\rho,ab} = \xi h c_0 \quad (4.37)$$

Diese Definition des Diffusionskoeffizienten ist ähnlich der des von Monaghan (1992) eingeführten künstlichen Viskositätsterms der Impulsgleichung. Der Regelparameter ξ muss problemspezifisch kalibriert werden, um eine hinreichende Dämpfung der Druckoszillationen zu gewährleisten, ohne die Genauigkeit der Simulation zu sehr zu verringern. Dies ist ein Nachteil dieses Ansatzes. Da der Diffusionskoeffizient proportional zu der Glättungslänge h ist, geht der Diffusionsterm gegen null, wenn die räumliche Auflösung erhöht wird ($h \rightarrow 0$). Daher sind die diskretisierte Kontinuitätsgleichung, die den Diffusionsterm enthält, und die kontinuierliche Differentialgleichung (vgl. Gl. 3.11), die den Diffusionsterm nicht enthält, konsistent zueinander. Das ist ein Vorteil dieser Formulierung. Antuono et al. (2010) führen Korrekturen dieses Diffusionsterms zur Anwendung des Verfahrens nahe freier Fluidoberflächen ein. Dieser Ansatz ist auch unter der Bezeichnung δ -SPH bekannt.

Bei dem Verfahren nach Ferrand et al. (2017) wird ein Diffusionsterm verwendet, der ähnlich entwickelt wird wie bei der Herleitung von Druckkorrekturverfahren zur impliziten Lösung der gekoppelten Kontinuitäts- und Impulsgleichungen. Für die Herleitung werden die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen ohne Viskositätsterm in der Lagrange'schen Betrachtungsweise, also mit Geschwindigkeitsdifferenzen $\delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, angewendet. Die Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ im Divergenzterm der Kontinuitätsgleichung zum Zeitpunkt v wird durch die Strömungsgeschwindigkeit des Zeitpunkts $v + 1$ ersetzt, die sich aus der zeitlichen Integration der Impulsgleichung ergibt. Daraus resultiert die folgende Formulierung der Kontinuitätsgleichung:

$$\left[\frac{d\rho}{dt} \right]^v = -\rho^v \nabla \cdot \mathbf{u}^{v+1} = -\rho^v \nabla \cdot \mathbf{u}^v + \underbrace{\rho^v \nabla \cdot \left(\frac{\delta t^v}{\rho^v} \nabla p^v \right)}_{\text{Diffusionsterm}} \quad (4.38)$$

Der letzte Term in Gl. 4.38 ähnelt einem Diffusionsterm für den Druck p mit dem Koeffizienten $d_p = \delta t / \rho$.¹⁰ Der Koeffizient $d_{p,ab}$ des SPH-Operators zur Approximation dieses Diffusionsterms wird in der Arbeit von Ferrand et al. (2017) als harmonischer Mittelwert der entsprechenden Werte an den Partikeln a und b definiert. Darüber hinaus führen Ferrand et al.

¹⁰Der Koeffizient d_p ist in diesem Fall kein Diffusionskoeffizient, sondern lediglich proportional zu einem Diffusionskoeffizienten.

(2017) einen Regelparameter ξ zur problemspezifischen Kalibrierung ein. Daraus wird für den Koeffizienten $d_{p,ab}$ des Druckdiffusionsterms der folgende Ausdruck entwickelt:

$$d_{p,ab} = \frac{2\xi\delta t}{\rho_a + \rho_b} \quad (4.39)$$

Um eine äquivalente Formulierung des Druckdiffusionsterms nach Ferrand et al. (2017) zu dem Dichtediffusionsterm gemäß Gl. 4.36 zu finden, muss der Druckgradient im Druckdiffusionsterm unter Anwendung der Definition der Schallgeschwindigkeit (vgl. Gl. 3.22) in einen Dichtegradienten umgewandelt werden. Zudem muss die Dichte vor dem Diffusionsterm in Gl. 4.38 zu dem Diffusionskoeffizienten multipliziert werden. Somit resultiert für den Diffusionskoeffizienten $d_{\rho,ab}$ des Dichtediffusionsterms der folgende Ausdruck:

$$d_{\rho,ab} = \frac{2\xi\rho_a c_0^2 \delta t}{\rho_a + \rho_b} \quad (4.40)$$

Der Einfachheit halber wird der Referenzwert c_0 der Schallgeschwindigkeit anstatt der Werte an den Partikeln a und b verwendet. Es ist ersichtlich, dass der Diffusionskoeffizient in Gl. 4.40 nicht proportional zur Glättungslänge h ist und somit, anders als bei dem Verfahren nach Molteni und Colagrossi (2009), nicht gegen null geht, wenn die räumliche Auflösung erhöht wird ($h \rightarrow 0$). Außerdem ist auch bei diesem Verfahren der Nachteil eines Regelparameters ξ präsent.

Eine weitere Möglichkeit zur numerischen Dämpfung der Dichteoszillationen ist die Applizierung von Riemann-Lösern, die von Vila (1999) im Zuge der Entwicklung des SPH-ALE-Verfahrens in der SPH-Methode eingeführt werden. Der numerische Fluss einer Erhaltungsgröße zwischen zwei Partikeln basiert dabei auf dem Godunov-Ansatz. Der Mittelpunkt zwischen den Positionen dieser Partikel wird als Diskontinuität zweier Zustände betrachtet. Bei dem ursprünglichen Godunov-Ansatz wird eine Upwind-Diskretisierung verwendet, bei der diese zwei Zustände gleich den Zuständen der jeweiligen Partikel angenommen werden. Antuono et al. (2010) führen an, dass hierdurch intrinsisch eine sehr große numerische Diffusion aufgeprägt wird, die allerdings im Unterschied zu den beiden zuvor erläuterten Verfahren unabhängig von Regelparametern ist. Neuhauser (2014) weist auf die Möglichkeit hin, diese numerische Diffusion durch die Anwendung des MUSCL-Verfahrens mit Limiter Funktionen auf ein notwendiges Maß zu reduzieren. Die exakte Lösung des Riemann-Problems für Systeme nichtlinearer Differentialgleichungen ist sehr aufwendig. Zwar existieren Verfahren, über die die Lösung des Riemann-Problems hinreichend gut durch eine Linearisierung approximiert werden kann (Toro, 2009), allerdings muss auch bei diesen Verfahren für jede Partikel-Interaktion zwischen unterschiedlichen Wellenstrukturen unterschieden werden. Mehrere mathematische Schritte sind daher notwendig, um den numerischen Fluss zwischen zwei Partikeln zu berechnen. Darüber hinaus zeigen Ferrari et al. (2009) auf, dass die numerische Diffusion bei dem SPH-ALE-Verfahren nach Vila (1999) nicht nur in der Kontinuitätsgleichung, sondern ebenfalls in allen weiteren Erhaltungsgleichungen eingeführt wird, in denen ein zusätzlicher numerischer Diffusionsterm aus Stabilitätsgründen nicht zwingend erforderlich ist.

Ein geschickter Ansatz zur Aufprägung einer intrinsischen numerischen Diffusion wird von Ferrari et al. (2009) vorgeschlagen. Dieser Ansatz beruht ebenfalls auf der Godunov-Methode und ist unabhängig von einem Regelparаметer ξ . Außerdem ist die Einführung der numerischen Diffusion, anders als bei der SPH-ALE-Methode von Vila (1999), auf die Kontinuitätsgleichung begrenzt. Ferrari et al. (2009) definieren den numerischen Fluss zwischen zwei Partikeln auf Basis des Harten-Lax-van Leer(HLL)-Verfahrens, bei dem das Riemann-Problem nicht durch eine Linearisierung approximiert wird. Stattdessen wird die Wellenstruktur innerhalb der sogenannten Stern-Region zwischen den bekannten linken und rechten Zuständen integral betrachtet. Der integrale Mittelwert des Zustandsvektors innerhalb der Stern-Region kann dann exakt beschrieben werden (Toro, 2009). Der Zustandsvektor und der entsprechende Flussvektor werden innerhalb der Stern-Region als homogen angenommen. Um den Flussvektor vollständig zu definieren, ist eine Annahme für die Geschwindigkeiten der zwei Wellen, die die Stern-Region einschließen, notwendig. Ferrari et al. (2009) nutzen dafür den Ansatz nach Rusanov. Dabei haben beide Wellengeschwindigkeiten den gleichen Absolutwert, aber unterschiedliche Vorzeichen. Der HLL-Flussvektor besteht aus einem Anteil, der über Zentralknoten approximiert wird, und einem diffusiven Anteil. Ferrari et al. (2009) wenden den diffusiven Anteil des HLL-Flussvektors als zusätzlichen Dichtediffusionsterm in der Kontinuitätsgleichung an. Wird dieser Term in die Form von Gl. 4.36 überführt, ergibt sich der folgende Ausdruck für den Diffusionskoeffizienten:

$$d_{\rho,ab} = \frac{q_{ab} h c_{ab}}{2} \quad (4.41)$$

In Gl. 4.41 sind $c_{ab} = \max [c_a, c_b]$ und q_{ab} der Maximalwert der Schallgeschwindigkeiten der Partikel a und b sowie der mit der Glättungslänge h normierte Abstand r_{ab} zwischen den Partikeln a und b . Bei dem Ansatz nach Ferrari et al. (2009) ist kein Regelparаметer ξ vorhanden und somit keine problemspezifische Kalibrierung notwendig. Darüber hinaus ist der Diffusionskoeffizient proportional zur Glättungslänge h , wodurch der Diffusionsterm gegen null geht, wenn die räumliche Auflösung erhöht wird ($h \rightarrow 0$). Zudem ist keine aufwendige Lösung eines Riemann-Problems erforderlich. Der Ansatz nach Ferrari et al. (2009) ist der einzige, der diese Vorteile vereint. Aus diesem Grund wird der Ansatz nach Ferrari et al. (2009) in dieser Arbeit verwendet.

Durch Einsetzen des Diffusionskoeffizienten gemäß Gl. 4.41 in Gl. 4.36 ergibt sich der Dichtediffusionsterm nach Ferrari et al. (2009):

$$[\nabla \cdot (d_{\rho} \nabla \rho)]_a^{\mathcal{F}} = \sum_b V_b \rho_{ab} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \max [c_a, c_b] \quad (4.42)$$

Durch die Einbindung des Dichtediffusionsterms in der Partikel-Approximation der Kontinuitätsgleichung, ist der Flussvektor $\mathbf{F}_{\phi=1}$ (vgl. Abschnitt 3.2) nicht gleich null. Bei Verwendung des Dichtediffusionsterms gilt daher die folgende Identität für die Partikel-Approximation der Divergenz dieses Flussvektors:

$$[\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a = - [\nabla \cdot (d_{\rho} \nabla \rho)]_a^{\mathcal{F}} \quad (4.43)$$

In Abschnitt 4.4.2 wurde des Weiteren der Ansatz zur Berechnung der Fluidichte auf Basis der diskreten Approximation eingeführt. Dabei wurde darauf hingewiesen, dass im Falle der Anwendung eines Dichtediffusionsterms das zusätzliche Differential $d\rho_{a,c}^{\mathcal{D}}$, das einen Anteil des Differentials $d\rho_{a,c}$ repräsentiert (vgl. Gl. 4.29), berücksichtigt werden muss. Auf Grundlage der in diesem Abschnitt dargestellten Definition des Dichtediffusionsterms ist dieses Differential $d\rho_{a,c}^{\mathcal{D}}$ wie folgt definiert:

$$d\rho_{a,c}^{\mathcal{D}} = - \left[\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1} \right]_a dt = \left[\nabla \cdot (d_\rho \nabla \rho) \right]_a^{\mathcal{F}} dt \quad (4.44)$$

Mit dem in diesem Abschnitt eingeführten Dichtediffusionsansatz steht ein Verfahren zur Dämpfung von Dichtefluktuationen zur Verfügung, die vor allem aufgrund von inhomogenen räumlichen Verteilungen der Partikel am Rand auftreten können. Der Einfluss der Dichtediffusion wird in Abschnitt A.5.4 untersucht und in Kapitel 6 zusammengefasst.

4.4.4 Partikelverschiebung

Wie einleitend in Abschnitt 4.4 dargestellt wurde, können aufgrund gewisser Instabilitätsmechanismen inhomogene Partikelanordnungen in der Form von Verklumpungen mehrerer Partikel entstehen (Dehnen und Aly, 2012; Monaghan, 2000; Swegle et al., 1995). Außerdem können sich entlang der Stromlinien des Strömungsfelds großskalige Partikelformationen ausbilden, die ebenfalls zu einer Inhomogenität der Partikelanordnung führen (Oger et al., 2016). Diese Partikelformationen können insbesondere dann entstehen, wenn Verfahren zur Verbesserung der Genauigkeit und der Stabilität der SPH-Methode, z. B. die in den letzten Abschnitten vorgestellten Verfahren, angewendet werden (Oger et al., 2016). Die Anwendung dieser Verfahren wird sich im weiteren Verlauf dieser Arbeit zum Teil als notwendig herausstellen. Zudem wird bei dem in Kapitel 5 noch einzuführenden Verfahren zur Behandlung offener Randbedingungen eine Partikelanordnung nahe dem Rand aufgeprägt, die weder homogen noch isotrop, allerdings zur Erfüllung der in Kapitel 2 festgelegten Ziele für das Verfahren zur Aufprägung offener Randbedingungen notwendig ist. Daher muss an dieser Stelle ein geeignetes Verfahren eingeführt werden, mit dem die Partikelanordnung kontinuierlich homogenisiert werden kann. Ohne ein solches Verfahren kann es zu weiteren Ungenauigkeiten bei der Partikel-Approximation kommen.

Colagrossi et al. (2012) zeigen, dass das Ergebnis der Partikel-Approximation des Gradienten einer konstanten Funktion ψ mit dem Wert $\psi = 1$ auf Basis von Gl. 4.12 ein Maß für die Inhomogenität der Partikelanordnung darstellt. Der entsprechende Gradientenvektor zeigt dabei in die Richtung des größten Defizits der Partikeldichte. Es wird daher angestrebt, den Betrag dieses Gradienten zu verringern. Es wurden verschiedene Verfahren entwickelt, bei denen über die zuvor dargestellte Approximation des Gradienten eine künstliche Kraft abgeleitet wird, durch die die Partikel in Richtung von Defiziten der Partikeldichte beschleunigt werden. Die auf dieser Kraft basierende Beschleunigung $\hat{\mathbf{a}}_a^S$ des Partikels a kann im Allgemeinen wie folgt definiert werden:

$$\hat{\mathbf{a}}_a^S = -\frac{1}{\rho_a} \sum_b V_b p_{ab} \nabla_a w_{ab} \quad (4.45)$$

Der Druck p_{ab} in Gl. 4.45 wird nachfolgend Pseudodruck genannt. Die im Folgenden vorgestellten Verfahren unterscheiden sich im Wesentlichen anhand der Definition des Pseudodrucks p_{ab} . Monaghan (2000) schlägt vor, eine homogene Partikelanordnung durch Aufprägung von abstoßenden Kräften zwischen den Partikeln zu gewährleisten. Die Motivation für die Entwicklung dieses Verfahrens ist, das Auftreten der Dehnungsinstabilität (Monaghan, 2000; Swegle et al., 1995) zu vermeiden. Lind et al. (2012) weisen darauf hin, dass diese abstoßende Kraft ebenfalls das Auftreten der Paarungsinstabilität (Dehnen und Aly, 2012) vermeidet. Monaghan (2000) definiert den Pseudodruck p_{ab} wie folgt:

$$p_{ab} = \xi_1 \frac{\rho_b^2 p_a + \rho_a^2 p_b}{\rho_a \rho_b} \left[\frac{w_{ab}}{w(\bar{\mathbf{r}}_a)} \right]^{\xi_2} \quad (4.46)$$

In Gl. 4.46 sind ξ_1 und ξ_2 Regelparameter, die problemspezifisch kalibriert werden müssen. Der Ausdruck $w(\bar{\mathbf{r}}_a)$ dient als Normierungsgröße und repräsentiert den Wert des Kernels für einen mittleren Partikelabstand $\|\bar{\mathbf{r}}_a\|$. Dieser mittlere Partikelabstand wird auf Basis der Partikel bestimmt, die sich innerhalb des Einflussgebiets des Partikels a befinden. Genauer zur Definition des mittleren Partikelabstands geht aus dem Artikel von Monaghan (2000) nicht hervor. Über den in eckigen Klammern stehenden Term in Gl. 4.46 wird sichergestellt, dass die abstoßende Kraft mit Reduzierung des Partikelabstands r_{ab} größer wird. Dies ist wichtig, da sich der Betrag des Kernel-Gradienten bei sehr geringen Partikelabständen mit weiterer Reduzierung des Partikelabstands verringert. Lind et al. (2012) stellen heraus, dass der Term essentiell ist, um Partikelverklumpungen als Folge der eingangs erwähnten Instabilitäten zu vermeiden. Bei großen Partikelabständen hingegen nimmt die Kraft stark ab. Somit ist diese Formulierung weniger gut geeignet, um großskalige inhomogene Partikelformationen, die in der Arbeit von Oger et al. (2016) diskutiert werden, zu vermeiden.

Bei dem Ansatz nach Xu et al. (2009) wird anstatt des Gradienten $\nabla_a w_{ab}$ des Kernels der Abstandsvektor $\mathbf{r}_{ab}$ der Partikel a und b zur Bestimmung der Richtung der Kraft verwendet. Grundsätzlich ist die Richtung des Vektors für ein Partikelpaar gemäß Gl. 4.8 aber dieselbe. Die entsprechende Beschleunigung ist nach Xu et al. (2009) wie folgt definiert:

$$\hat{\mathbf{a}}_a^S = -\xi \frac{\|\mathbf{u}\|_{\max}}{\delta t} \sum_b \frac{\bar{r}_a^2}{r_{ab}^3} \mathbf{r}_{ab} \quad (4.47)$$

In Gl. 4.47 ist die Größe ξ ein zur problemspezifischen Kalibrierung definierter Regelparameter, $\bar{r}_a$ ein mittlerer Partikelabstand, δt die Zeitschrittweite und $\|\mathbf{u}\|_{\max}$ das Maximum des Betrags der Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Rechengebiets. Über das Verhältnis der Strömungsgeschwindigkeit und der Zeitschrittweite wird zum Zweck der Stabilisierung des Verfahrens sichergestellt, dass die Partikelverschiebung auf Basis dieser Beschleunigung während eines Zeitschritts nicht größer ist, als die maximale Strecke, die ein Partikel während eines Zeitschritts auf Basis der Strömungsgeschwindigkeit advektiert wird. Der mittlere Partikelabstand $\bar{r}_a$ zwischen dem Partikel a und dessen Nachbarpartikeln wird als Normierung für den Partikelabstand

r_{ab} genutzt und ist wie folgt definiert:

$$\bar{r}_a = \frac{1}{|\mathcal{P}_a|} \sum_{b \in \mathcal{P}_a} r_{ab} \quad (4.48)$$

In Gl. 4.48 ist die Größe $\mathcal{P}_a$ die Menge der Nachbarpartikel des Partikels a , und $|\mathcal{P}_a|$ stellt die Anzahl der Partikel dieser Menge dar. Über die Summe in Gl. 4.47 wird gewährleistet, dass die Partikelverschiebung in Richtung des maximalen Defizits der Partikeldichte gerichtet ist. Die Gl. 4.47 lässt sich ebenfalls in die Form von Gl. 4.45 überführen. Der zugehörige Pseudodruck p_{ab} ist in diesem Fall wie folgt definiert:

$$p_{ab} = \xi h \frac{\|\mathbf{u}\|_{\max}}{\delta t} \frac{\bar{r}_a^2}{r_{ab}^2} \frac{\rho_a}{w_{ab} V_b} \frac{f(q_{ab})}{f'(q_{ab})} \quad (4.49)$$

In Gl. 4.49 ist f eine Funktion des dimensionslosen Partikelabstands q_{ab} , die in Gl. 4.7 bei der Definition des Kernels angewendet wurde. Der Ausdruck f' ist die Ableitung dieser Funktion nach dem dimensionslosen Partikelabstand q_{ab} .

Lind et al. (2012) leiten eine Formulierung der Partikelverschiebung in Analogie zum Fick'schen Diffusionsgesetz her. Dabei wird die Erkenntnis genutzt, dass Gl. 4.11 und Gl. 4.12 mit $\psi = 1$ die Konzentration der Partikel und den entsprechenden Konzentrationsgradienten definieren. Lind et al. (2012) definieren den Vektor der Partikelverschiebung eines Partikels als das Produkt aus diesem Konzentrationsgradienten und einem Diffusionskoeffizienten. Der Diffusionskoeffizient wird basierend auf einem Stabilitätskriterium der Advektion-Diffusion-Transportgleichung zu $h^2 \delta t / 2$ bestimmt, wobei δt die Zeitschrittweite darstellt. Lind et al. (2012) argumentieren, dass die eingangs erwähnte Verklumpung von Partikeln zusätzlich durch den von Monaghan (2000) eingeführten Term gemäß Gl. 4.46 berücksichtigt werden muss. Der resultierende Pseudodruck p_{ab} ist daher wie folgt definiert:

$$p_{ab} = \frac{\rho_a}{2} \left(\frac{h}{\delta t} \right)^2 \left(1 + \xi_1 \left[\frac{w_{ab}}{w(\bar{\mathbf{r}}_a)} \right]^{\xi_2} \right) \quad (4.50)$$

Die Regelparameter werden in der Arbeit von Lind et al. (2012) zu $\xi_1 = 0,2$ und $\xi_2 = 4$ gesetzt. Bis auf den zweiten Term in der Klammer in Gl. 4.50, der der Partikelverklumpung entgegenwirken soll, ist unter Anwendung dieser Formulierung des Pseudodrucks somit keine Kalibrierung von Regelparametern notwendig. Dies ist vorteilhaft gegenüber den zuvor erläuterten Verfahren. Ein weiterer Vorteil ist, dass der Betrag der Beschleunigung bei Erhöhung der räumlichen Auflösung ($h \rightarrow 0$) gegen null geht. Somit liegt im Grenzfall keine Partikelverschiebung vor.

Sun et al. (2019) schlagen eine Formulierung des Pseudodrucks ähnlich der nach Lind et al. (2012) vor. Der Unterschied besteht darin, dass die Limitierung der Partikelverschiebung nicht über eine Stabilitätsbetrachtung, sondern ähnlich dem Verfahren nach Xu et al. (2009) basierend auf einer charakteristischen Strömungsgeschwindigkeit $c_0 \text{Ma}$ definiert wird, wobei Ma eine für das strömungstechnische Problem repräsentative Machzahl und c_0 der Referenzwert der

Schallgeschwindigkeit sind. Der Pseudodruck p_{ab} ist demnach wie folgt definiert:

$$p_{ab} = \rho_a q_m h \frac{c_0 \text{Ma}}{\delta t} \left(1 + \xi_1 \left[\frac{w_{ab}}{w(\bar{\mathbf{r}}_a)} \right]^{\xi_2} \right) \quad (4.51)$$

In Gl. 4.51 ist die Größe q_m der dimensionslose Radius des Einflussgebiets des Kernels. In der Arbeit von Sun et al. (2019) wird außerdem erklärt, dass nach der Berechnung der Partikelverschiebung gemäß Gl. 4.45 eine zusätzliche Limitierung der Partikelverschiebung auf Basis des Maximums der Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Rechengebiets durchgeführt werden muss.

Über die Ansätze nach Lind et al. (2012) und Sun et al. (2019) wird die Neigung zur Generierung von sowohl großskaligen inhomogenen Partikelformationen als auch Partikelverklumpungen verringert. Hingegen werden bei den Verfahren nach Adami et al. (2013) und Zhang et al. (2017) Definitionen des Pseudodrucks p_{ab} hergeleitet, mit denen ausschließlich auf die Verringerung der großskaligen Partikelinhomogenitäten abgezielt wird. Bei beiden Verfahren hat der Pseudodruck die folgende Form:

$$p_{ab} = p_{a,0} \frac{\rho_b^2 + \rho_a^2}{\rho_a \rho_b} \quad (4.52)$$

In Gl. 4.52 ist die Größe $p_{a,0}$ der sogenannte Hintergrunddruck. Auf Basis dieses Hintergrunddrucks wird die Stärke der Partikelverschiebung bestimmt. Adami et al. (2013) setzen diesen Hintergrunddruck gleich einem Wert, der in der Größenordnung des Terms $\rho_0 c_0^2 / \gamma$ liegt, der bereits als Vorfaktor in der Zustandsgleichung eingeführt wurde (vgl. Gl. 3.21). Es wird jedoch angemerkt, dass der Hintergrunddruck beliebig groß sein darf, solange die Zeitschrittweite δt entsprechend verkleinert wird. Zhang et al. (2017) definieren den Hintergrunddruck ähnlich der Definition nach Adami et al. (2013). Jedoch wird der Hintergrunddruck auf einen Maximalwert gleich dem Zehnfachen des Absolutwerts des Fluiddrucks des Partikels a und auf einen Minimalwert gleich dem Maximum des Fluiddrucks im Rechengebiet begrenzt.

Bei der Auswahl eines der in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahrens zur Partikelverschiebung wird an dieser Stelle die Adaptivität des Verfahrens an die jeweilige strömungstechnische Problemstellung betrachtet. Das Verfahren soll in der Lage sein, bei einer gegebenen Zeitschrittweite δt und ohne die Notwendigkeit einer Kalibrierung von Regelparametern eine möglichst große Partikelverschiebung zu gewährleisten. Abgesehen von den Regelparametern des zweiten Terms in der Klammer in Gl. 4.50 erfüllt das Verfahren nach Lind et al. (2012) diese Kriterien. Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Testfällen konnte auch ohne den zweiten Term in der Klammer in Gl. 4.50 keine Verklumpung von Partikeln beobachtet werden. Außerdem konnte auch keine Notwendigkeit zur Limitierung der Partikelverschiebung, die z. B. von Sun et al. (2019) erläutert wird, festgestellt werden. Somit wird an dieser Stelle das Verfahren nach Lind et al. (2012) ohne den mit Regelparametern behafteten zweiten Term in der Klammer in Gl. 4.50 ausgewählt. Damit ergibt sich für die Beschleunigung $\hat{\mathbf{a}}_a^S$ die folgende Formulierung:

$$\hat{\mathbf{a}}_a^S = -\frac{1}{2} \left(\frac{h}{\delta t} \right)^2 \sum_b V_b \nabla_a w_{ab} \quad (4.53)$$

Die Geschwindigkeit $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ der Partikelverschiebung des Partikels a repräsentiert einen Anteil an der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ des Partikels a (vgl. Gl. 4.69 im nächsten Abschnitt). Die Geschwindigkeit $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ ist abhängig von der Beschleunigung $\hat{\mathbf{a}}_a^S$ wie folgt definiert:

$$\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S = \hat{\mathbf{a}}_a^S \delta t \quad (4.54)$$

Zuletzt sei noch angemerkt, dass in verschiedenen Verfahren, z. B. im Verfahren nach Braun (2018), durch die Definition eines Referenzdrucks p_0 ungleich null in der Zustandsgleichung (Gl. 3.21) implizit über die Partikel-Approximation des Druckgradienten in der Impulsgleichung eine Partikelverschiebung induziert wird. In diesem Fall ist der Pseudodruck p_{ab} in Gl. 4.45 gleich dem Referenzdruck p_0 . Dieser Ansatz kann aber nur bei einer moderaten Geschwindigkeit $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ gerechtfertigt werden. Durch diesen Ansatz wird die Advektion der Partikel basierend auf der physikalischen Strömungsgeschwindigkeit und der Partikelverschiebung quasi „vermischt“. Eine Korrektur der Strömungsvariablen ist grundsätzlich notwendig, aber aufgrund der fehlenden Information über die Geschwindigkeit $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ dann nicht möglich.

In dieser Arbeit ist die Geschwindigkeit $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ insbesondere in der Nähe der offenen Ränder im Vergleich zur physikalischen Strömungsgeschwindigkeit nicht vernachlässigbar. Eine Korrektur der Strömungsvariablen kann, wie von Lind et al. (2012) und Xu et al. (2009) vorgeschlagen wird, nach der zeitlichen Integration der Erhaltungsgleichungen über eine Taylor-Reihe basierend auf der Partikelverschiebung durchgeführt werden. Als Alternative können die Erhaltungsgleichungen, wie z. B. von Adami et al. (2013), Sun et al. (2019), Vila (1999) und Zhang et al. (2017) gezeigt wird, umformuliert werden, um den Einfluss der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ direkt zu berücksichtigen. Dieser Ansatz findet in der vorliegenden Arbeit Anwendung.

Mit dem in diesem Abschnitt eingeführten Ansatz zur Partikelverschiebung können inhomogene räumliche Verteilungen der Partikel, die in der vorliegenden Arbeit vor allem in der Nähe offener Ränder vorkommen können, homogenisiert werden. Dadurch können die Genauigkeit und die Stabilität der Partikel-Approximationen verbessert werden. Der Einfluss dieser Formulierungen auf die Simulationsergebnisse wird in Abschnitt A.5.5 untersucht und in Kapitel 6 zusammengefasst. Im folgenden Abschnitt 4.5 wird erläutert, wie die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ des Partikels a in den Erhaltungsgleichungen berücksichtigt wird.

4.5 Erhaltungsgleichungen der Partikel-Approximation

In diesem Abschnitt wird eine geeignete Formulierung der Erhaltungsgleichungen für eine Partikel-Approximation hergeleitet und diskutiert. Die Diskussion und der Vorschlag zur Formulierung der Erhaltungsgleichungen orientieren sich an der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021). Bei der Partikel-Approximation der Erhaltungsgleichungen gibt es unter den in dieser Arbeit vorliegenden Zielsetzungen mehrere Schwierigkeiten. In dieser Arbeit sollen statische Geisterpartikel zur Diskretisierung der offenen bzw. gekoppelten Ränder verwendet werden. Durch die daraus bedingte Änderung der Masse randnaher Partikel kann es zum einen zu inhomogenen räumlichen Verteilungen der Partikel kommen. Aus diesem Grund wurden in

den vorausgegangenen Abschnitten Verfahren eingeführt, mit denen die Konsistenz und Genauigkeit des vorliegenden Verfahrens gewährleistet werden sollen. Dabei entstehen im Vergleich zur ursprünglichen Form der SPH-Methode zusätzliche Terme in den Erhaltungsgleichungen, die die Dichtediffusion (vgl. Abschnitt 4.4.3) und die Partikelverschiebung (vgl. Abschnitt 4.4.4) betreffen. Zum anderen können in der Nähe offener Ränder erhebliche Abweichungen zwischen der Partikel- und der Strömungsgeschwindigkeit entstehen. In gleicher Weise wie bei der Partikelverschiebung müssen hierfür zusätzliche Terme in den Erhaltungsgleichungen definiert werden. Es wird gezeigt, dass die zusätzlichen Terme hinsichtlich der Erhaltung herausfordernd sind.

Als Grundlage für die Herleitung dient die allgemeine Transportgleichung, die in Kapitel 3 erläutert wurde. Das Reynolds-Transport-Theorem für den Skalar ϕ (vgl. Gl. 3.4 und Gl. 3.5) ist der Ausgangspunkt in diesem Abschnitt und wird an dieser Stelle wiederholt:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dv}_{(1)} = \underbrace{\int_V \left[\frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \hat{\mathbf{u}}) \right] dv}_{(2)} = \underbrace{\int_V [\nabla \cdot (\rho \phi \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi] dv}_{(3)} \quad (4.55)$$

Die drei Terme in Gl. 4.55 werden mit umkreisten Indizes gekennzeichnet, da sie im Verlauf dieses Abschnitts häufiger vorkommen und auf diese Weise einfacher referenziert werden können. Aufgrund der Advektion der Partikel bei der SPH-Methode können Deformationen der Kontrollvolumina dieser Partikel entstehen. Dadurch kann sich das Volumen dieser Partikel zeitlich ändern. Durch Einsetzen von $\phi = 1/\rho$ in Gl. 4.55 folgt aus den Termen (1) und (2) die zeitliche Änderungsrate des Volumens V :

$$\frac{dV}{dt} = \int_V [\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}] dv = \int_V [\nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \mathbf{u}] dv \quad (4.56)$$

Die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ unter dem zweiten Integral in Gl. 4.56 hat im Folgenden eine besondere Bedeutung. Dieser Term bewirkt eine Volumenänderung auf Basis der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$. Über diese Volumenänderung werden konvektive Flüsse an der Begrenzungsfläche des Volumens V realisiert. Der konvektive Fluss des Skalars $\rho \phi$ wird durch den ersten Divergenzterm des Terms (3) in Gl. 4.55 repräsentiert. Ein besseres Verständnis über den konvektiven Term kann durch eine Zerlegung dieses Terms unter Anwendung der Kettenregel erlangt werden:

$$\nabla \cdot (\rho \phi \delta \hat{\mathbf{u}}) = \underbrace{\rho \phi \nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}}_{\text{Volumenänderung}} + \underbrace{\rho \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \phi}_{\text{Skalarkorrektur}} + \underbrace{\phi \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \rho}_{\text{Dichtekorrektur}} \quad (4.57)$$

Die Terme auf der rechten Seite in Gl. 4.57 haben von links nach rechts gelesen die folgende Bedeutung: Der erste Term beschreibt eine Änderung der Erhaltungsgröße $V \rho \phi$ basierend auf einer Volumenvariation. Wie bereits erläutert wurde, resultiert diese Volumenvariation aus der Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$. Über den zweiten Term hingegen wird eine Korrektur des Skalars ϕ durchgeführt, um die Abweichung der Transportgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}$

von der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ zu kompensieren. Mit dem dritten Term wird eine ähnliche Korrektur für die Dichte ρ durchgeführt.

Für den Skalar $\phi = 1$ lässt sich über die Terme (1) und (3) der Gl. 4.55 die integrale Form der Kontinuitätsgleichung herleiten:

$$\frac{dm}{dt} = \int_V [\nabla \cdot (\rho \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}] dv \quad (4.58)$$

In Gl. 4.58 ist die Größe $m = \rho V$ die Masse des Volumens V , die sich aus dem Volumenintegral des Terms (1) (vgl. Gl. 4.55) für den Fall $\phi = 1$ ergibt. Unter dem Integral in Gl. 4.58 tritt erneut ein Divergenzterm basierend auf der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ auf, über den sich ein konvektiver Massenfluss ergibt. Dies zeigt einen wesentlichen Unterschied zu der ursprünglichen Form der SPH-Methode auf. Bei der ursprünglichen Form der SPH-Methode werden die Partikel entlang der Stromlinien des Strömungsfelds advektiert ($\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$ bzw. $\delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$). Außerdem werden keine künstlichen dissipativen Terme in der Kontinuitätsgleichung angewendet ($\mathbf{F}_{\phi=1} = \mathbf{0}$). In diesem Fall ist gemäß Gl. 4.58 die Masse m des Volumens V zeitlich invariant. Daher ist die Masse m_a eines Partikels a konstant. Dem Partikel a ist somit über die gesamte betrachtete physikalische Zeit dasselbe Material zugeordnet. Der Differentialoperator d/dt entspricht daher der Materialableitung. Da die Masse m_a des Partikels a zeitlich invariant ist, kann der Zustand des Partikels a unter Anwendung der ursprünglichen Form der SPH-Methode ausschließlich durch die zeitliche Integration intensiver bzw. primitiver Größen (z. B. der Dichte ρ und des Skalars ϕ) berechnet werden. Für die zeitliche Integration primitiver Größen ist die differentielle Form der Erhaltungsgleichungen geeignet. Für deren Herleitung muss der Term (2) in Gl. 4.55 unter Anwendung der Definition des Differentialoperators

$$\frac{d(\cdot)}{dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla(\cdot) \quad (4.59)$$

sowie unter Anwendung der Kettenregel wie folgt umformuliert werden:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi \hat{\mathbf{u}})}_{(2)} = \frac{d(\rho\phi)}{dt} + \rho\phi \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} = \underbrace{\rho \frac{d\phi}{dt} + \phi \left(\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} \right)}_{(4)} \quad (4.60)$$

Der Term (2) in Gl. 4.55 lässt sich somit durch den Term (4) (vgl. Gl. 4.60) ersetzen. Außerdem sind die Volumenintegrale, die die Terme (2) und (3) in Gl. 4.55 umfassen, für ein beliebiges Volumen V identisch. Daher besteht auch eine Identität zwischen den Termen (4) und (3):

$$\rho \frac{d\phi}{dt} + \phi \left(\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} \right) = \nabla \cdot (\rho\phi \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi} \quad (4.61)$$

Durch Einsetzen von $\phi = 1$ in Gl. 4.61 ergibt sich die differentielle Form der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} + \nabla \cdot (\rho \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1} \quad (4.62)$$

Durch Einsetzen von Gl. 4.62 in Gl. 4.61 folgt außerdem die Gleichung zur Beschreibung der zeitlichen Änderungsrate des Skalars ϕ :

$$\rho \frac{d\phi}{dt} = \nabla \cdot (\rho \phi \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi - \phi (\nabla \cdot (\rho \delta \hat{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}) \quad (4.63)$$

Gl. 4.62 und Gl. 4.63 lassen sich durch Anwendung der Kettenregel zu den folgenden Ausdrücken vereinfachen:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \rho - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1} \quad (4.64)$$

$$\rho \frac{d\phi}{dt} = \rho \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi + \phi \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1} \quad (4.65)$$

Die differentiellen Formulierungen in Gl. 4.64 und Gl. 4.65, die die zeitliche Änderung intensiver bzw. primitiver Größen beschreiben, sind im Gegensatz zu den integralen Formulierungen unabhängig von der Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz und somit unabhängig von der Volumenänderung. Der einzige Beitrag der Geschwindigkeitsdifferenz in Gl. 4.64 und Gl. 4.65 erfolgt über die Korrekturterme der Dichte und des Skalars ϕ (vgl. Gl. 4.57). Im Folgenden wird die Partikel-Approximation für die Gln. 4.64 und 4.65 eingeführt. Die Strömungsvariablen an einem Partikel a werden dabei als homogen innerhalb des Partikelvolumens V_a angenommen:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = -\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a + \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \quad (4.66)$$

$$m_a \frac{d\phi_a}{dt} = V_a \left(\rho_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \phi]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi]_a + \phi_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \right) \quad (4.67)$$

Die in eckigen Klammern eingeschlossenen und mit einem Index a versehenen räumlichen Ableitungen sind, wie bereits in Abschnitt 4.3 erläutert wurde, als Approximationen durch SPH-Operatoren zu verstehen. Unter den zuvor für die ursprüngliche Form der SPH-Methode eingeführten Bedingungen vereinfachen sich Gl. 4.66 und Gl. 4.67 wie folgt:

$$\left(\hat{\mathbf{u}}_a = \mathbf{u}_a \wedge [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a = 0 \right) \Rightarrow \begin{cases} \frac{d\rho_a}{dt} &= -\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a \\ m_a \frac{d\phi_a}{dt} &= -V_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi]_a \end{cases} \quad (4.68)$$

Unter Anwendung der zweiten Gleichung des Gleichungssystems 4.68 kann die Erhaltung der Größe $m_a \phi_a$ gewährleistet werden, indem ein antisymmetrischer SPH-Operator (vgl. Abschnitt 4.3) zur Diskretisierung des Terms $[\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi]_a$ angewendet wird. Dies stellt einen wesentlichen Vorteil der ursprünglichen Form der SPH-Methode dar.

In der vorliegenden Arbeit weichen die Voraussetzungen allerdings von den zuvor für die ursprüngliche Form der SPH-Methode genannten Bedingungen ab. Wie bereits am Ende des Abschnitts 4.4.4 und zu Beginn dieses Abschnitts diskutiert wurde, ist die Berücksichtigung der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ in den Erhaltungsgleichungen erforderlich. Das Partikel a wird daher in dem vorliegenden Verfahren lokal nicht mit der Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a$, sondern mit einer Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a = \mathbf{u}_a + \delta \hat{\mathbf{u}}_a$ advektiert. Die Geschwindigkeitsdifferenz

$\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ des Partikels a setzt sich dabei aus mehreren Einflüssen zusammen. Zum einen entstehen, insbesondere in der Nähe der offenen Ränder, lokale Geschwindigkeitsdifferenzen aufgrund des in Abschnitt 4.4.4 erläuterten Partikelverschiebungsansatzes. Die resultierende Komponente der Geschwindigkeitsdifferenz wurde in Abschnitt 4.4.4 als $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ bezeichnet. Deutlich größere Geschwindigkeitsdifferenzen treten zum anderen aufgrund des in dieser Arbeit entwickelten Verfahrens für offene Randbedingungen auf, bei dem randnahen Partikeln eine Geschwindigkeitsdifferenz aufgeprägt wird (vgl. Abschnitt 5.4). Diese Geschwindigkeitsdifferenz wird im Folgenden $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^B$ genannt. Die gesamte Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ setzt sich also aus der Summe der zuvor genannten Komponenten zusammen:

$$\delta \hat{\mathbf{u}}_a = \delta \hat{\mathbf{u}}_a^S + \delta \hat{\mathbf{u}}_a^B \quad (4.69)$$

Darüber hinaus wurde in Abschnitt 4.4.3 ein numerischer Diffusionsterm zur Stabilisierung des Dichtefelds eingeführt, der in der Kontinuitätsgleichung angewendet werden soll. Daher ist die Bedingung $\mathbf{F}_{\phi=1} = \mathbf{0}$ in der vorliegenden Arbeit ungültig. Aus den genannten Gründen kann das Gleichungssystem 4.68 der ursprünglichen Form der SPH-Methode in der vorliegenden Arbeit nicht angewendet werden.

Ein alternativer Ansatz, über den konvektive Flüsse bei der SPH-Methode berücksichtigt werden können, wird von Vila (1999) vorgeschlagen. Dabei wird der ALE-Ansatz auf die SPH-Methode angewendet. Der Ansatz wird SPH-ALE genannt. Statt der zeitlichen Integration primitiver Größen, wie der des Skalars ϕ in Gl. 4.67, werden bei diesem Ansatz extensive Größen auf Basis der Volumenintegrale, die in Gl. 4.55 die Terme (1) und (3) umfassen, zeitlich integriert. Da extensive Größen integriert werden, muss das Volumen unter Anwendung der Gl. 4.56 zusätzlich zeitlich integriert werden. Im Falle einer zeitlich variablen Masse des Volumens muss zudem Gl. 4.58 verwendet werden. Die Volumenintegrale in Gl. 4.55, Gl. 4.56 und Gl. 4.58 werden von Oger et al. (2016) durch Produkte aus dem Partikelvolumen V_a und dem volumengemittelten Wert des Terms unter dem entsprechenden Integral ersetzt. Hieraus ergibt sich das folgende Gleichungssystem:

$$\begin{cases} \frac{dV_a}{dt} &= V_a ([\nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}]_a + [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a) \\ \frac{dm_a}{dt} &= V_a ([\nabla \cdot (\rho \delta \hat{\mathbf{u}})]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a) \\ \frac{d\{V_a(\rho\phi)_a\}}{dt} &= V_a ([\nabla \cdot (\rho\phi \delta \hat{\mathbf{u}})]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi]_a) \end{cases} \quad (4.70)$$

Dieses Gleichungssystem berücksichtigt in konsistenter Weise die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ und kann durch Anwendung antisymmetrischer SPH-Operatoren in eine konservative Partikel-Approximation überführt werden. Dies ist der wesentliche Vorteil des SPH-ALE-Ansatzes. Die Erhaltungsgröße $\{V_a(\rho\phi)_a\}$ sowie die Masse m_a ändern sich gemäß Gl. 4.70 unter anderem durch konvektive Flüsse, die bei Vorliegen einer Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ entstehen. Eine wichtige Implikation dieses konvektiven Flusses ist demnach, dass die Partikelmasse m_a nicht konstant ist und als zusätzliche extensive Größe des Partikels bei der zeitlichen Integration des Zustands des Partikels berücksichtigt werden muss. Dies ist der wesentliche Unterschied zu

der ursprünglichen SPH-Methode, bei der, wie bereits erläutert wurde, ein gewisser Teil des Kontinuums über die gesamte physikalische Zeit demselben Partikel zugeordnet ist.

Die konvektiven Terme in Gl. 4.70 würden bewirken, dass durch Interaktionen zwischen Partikeln des inneren Rechengebiets und des Geistergebiets konvektive Flüsse über einen offenen Rand übertragen werden. Es klingt zunächst vielversprechend, konvektive Flüsse auf natürliche Weise über Partikel-Interaktionen zu realisieren. In der Praxis stellt sich jedoch heraus, dass dieser Ansatz problematisch ist. Unter anderem ist der konvektive Fluss mit numerischen Ungenauigkeiten behaftet, sodass es nicht möglich erscheint, auf diese Weise einen Massenstrom an einem offenen Rand exakt aufzuprägen. Aufgrund dieser Tatsache ließe sich die Zielsetzung dieser Arbeit mit diesem Ansatz nicht erfüllen.

Daher wird in dieser Arbeit stattdessen ein Algorithmus entwickelt (vgl. Abschnitt 5.4), über den die Massenänderung der Partikel an offenen Rändern auf eine kontrollierte Weise gesteuert wird. Aus diesem Ansatz resultiert ein Quellterm $\dot{m}_a^B$ für die Masse des Partikels a . Dieser Quellterm repräsentiert die Massenänderung, die das Partikel a durch die Volumenänderung aufgrund einer Interaktion mit dem Rand erfährt. Diese Volumenänderung resultiert aus der Tatsache, dass die Partikel in dem vorliegenden Verfahren nicht über einen offenen Rand advektiert werden. Das Volumen randnaher Partikel, die sich von einem offenen Rand entfernen bzw. einem offenen Rand nähern, muss daher erhöht bzw. verringert werden, um das Volumen des Rechengebiets zu erhalten. In der ersten Gleichung des Gleichungssystems 4.70 würde eine ähnliche Volumenänderung auch auf Basis der Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^B$ realisiert werden. Da diese Volumenänderung allerdings über den zuvor erläuterten Quellterm repräsentiert wird, darf die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^B$ nicht berücksichtigt werden. Der zweite Beitrag zu der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ ist die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^S$ basierend auf dem Partikelverschiebungsansatz. Sun et al. (2019) argumentieren, dass die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^S$ nur lokal und zeitlich begrenzt in Relation zur Strömungsgeschwindigkeit relevante Werte annimmt und die entsprechende Volumenänderung demnach vernachlässigt werden kann. Diese Beobachtung wurde auch im Rahmen dieser Arbeit gemacht. Aus diesem Grund wird die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^S$ vernachlässigt.

Wie bereits erläutert wurde, sind die Änderungsraten der Skalare ρ_a und ϕ_a gemäß Gl. 4.64 und Gl. 4.65 unabhängig von der Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$. Es ist trivial zu zeigen, dass diese Gleichungen unverändert bleiben, wenn die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ in den integralen Gleichungen (Gl. 4.56 und Gl. 4.58) des Volumens und der Masse vernachlässigt werden. Der Beitrag der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ entsteht demnach einzig über die Korrekturterme der Dichte ρ und des Skalars ϕ (vgl. Gl. 4.57). Durch Einsetzen von Gl. 4.57 mit $\phi = 1$ in die integrale Form der Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.58) ergibt sich die folgende Gleichung:

$$\frac{dm}{dt} = \int_V [\rho \nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}} + \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \rho - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}] dv \quad (4.71)$$

Die Partikel-Approximation der Gl. 4.71 in Verbindung mit jenen in Gl. 4.66 und Gl. 4.67 ergeben bei Vernachlässigung der Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ das folgende

Gleichungssystem:

$$\left([\nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}]_a = 0 \wedge \frac{dV_a}{dt} = V_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a + \dot{V}_a^{\mathcal{B}} \right) \Rightarrow \begin{cases} \frac{dm_a}{dt} &= V_a \left(\delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \right) + \dot{m}_a^{\mathcal{B}} \\ \frac{d\rho_a}{dt} &= -\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a + \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \\ m_a \frac{d\phi_a}{dt} &= V_a \left(\rho_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \phi]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi}]_a + \phi_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \right) \end{cases} \quad (4.72)$$

In Gl. 4.72 ist die Größe $\dot{V}_a^{\mathcal{B}}$ der zum Massenquellterm $\dot{m}_a^{\mathcal{B}}$ analoge Volumenquellterm. Das Gleichungssystem 4.72 enthält Terme, die im Gegensatz zu dem SPH-ALE-Ansatz nicht konservativ diskretisierbar sind. Der Grund hierfür ist, dass vor den SPH-Operatoren neben dem Partikelvolumen V_a weitere Größen stehen, die dem Partikel a zugeordnet sind. Besonders die Erhaltung der Masse ist eine substantielle Eigenschaft in der numerischen Strömungsmechanik. Eine Möglichkeit, die im Rahmen der Wahrung dieser Eigenschaft gerechtfertigt werden kann, ist die Vernachlässigung des Dichtekorrekturterms in der integralen Kontinuitätsgleichung (erste Gleichung des Gleichungssystems 4.72). Dies führt dazu, dass die Gleichung zur Beschreibung der Volumenänderungsrate modifiziert werden muss, um die Konsistenz der Kontinuitätsgleichung zu wahren. Hieraus ergibt sich das folgende Gleichungssystem:

$$\left([\nabla \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}]_a = 0 \wedge \frac{dV_a}{dt} = V_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a - \frac{V_a}{\rho_a} \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a + \dot{V}_a^{\mathcal{B}} \right) \Rightarrow \begin{cases} \frac{dm_a}{dt} &= -V_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a + \dot{m}_a^{\mathcal{B}} \\ \frac{d\rho_a}{dt} &= -\rho_a [\nabla \cdot \mathbf{u}]_a + \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \\ m_a \frac{d\phi_a}{dt} &= V_a \left(\rho_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \phi]_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi}]_a + \phi_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \right) \end{cases} \quad (4.73)$$

Die Implikation des Gleichungssystems 4.73 ist eine Verletzung des Reynolds-Transport-Theorems. Es ist allerdings anzumerken, dass ähnliche Modifikationen bereits in anderen Arbeiten, wie z. B. in denen von Adami et al. (2013), Lind et al. (2012) und Sun et al. (2019), jedoch ohne entsprechende Diskussion, angewendet werden. Eine äquivalente Umformung der unteren Gleichung des Gleichungssystems 4.73 zur Gewährleistung der Erhaltung der Größe $V_a \rho_a \phi_a$ ist nicht möglich. Neben dem Korrekturterm (Gradient des Skalars ϕ) ist auch der Term, der den Flussvektor $\mathbf{F}_{\phi=1}$ enthält, nicht als konservative Formulierung diskretisierbar. In anderen Arbeiten, wie z. B. in denen von Antuono et al. (2010) und Ferrari et al. (2009), wird dieser Term in der Gleichung des Skalars ϕ_a vernachlässigt. Ebenso wird der Flussvektor $\mathbf{F}_{\phi=1}$, außer von Oger et al. (2016) im Zusammenhang mit dem SPH-ALE-Verfahren, nicht als Massenänderung, sondern nur als Dichteänderung und somit implizit als Volumenänderung berücksichtigt. Dies ist allerdings auf Basis des Reynolds-Transport-Theorems inkonsistent.

Die Partikel-Approximation für den Vektor Φ_a lässt sich analog zu der Partikel-Approximation zur Beschreibung der Änderungsrate des Skalars ϕ_a herleiten:

$$m_a \frac{d\Phi_a}{dt} = V_a \left(\rho_a [(\nabla \otimes \Phi)^\top]_a \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_a - [\nabla \cdot \mathbf{F}\Phi]_a + \Phi_a [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a \right) \quad (4.74)$$

Die beiden letzten Terme (der Dichtekorrekturterm und der Dichtediffusionsterm) der differentiellen Form der Kontinuitätsgleichung im Gleichungssystem 4.73 müssen bei dem Verfahren zur Bestimmung der Dichte basierend auf der diskreten Dichte-Approximation, das in Abschnitt 4.4.2 erläutert wurde, berücksichtigt werden. In Abschnitt 4.4.2 wurde hierfür das Differential $d\rho_{a,c}$ definiert, das sich aus der Summe der Beiträge auf Basis der Dichtekorrektur $d\rho_{a,c}^S$ und der Dichtediffusion $d\rho_{a,c}^D$ ergibt (vgl. Gl. 4.29). Diese beiden Beiträge ergeben sich nun aus der Umformulierung der beiden letzten Terme der differentiellen Form der Kontinuitätsgleichung in totale Differentiale:

$$d\rho_{a,c}^S = \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_a dt \quad (4.75)$$

$$d\rho_{a,c}^D = - [\nabla \cdot \mathbf{F}_{\phi=1}]_a dt \quad (4.76)$$

In diesem Abschnitt wurden Partikel-Approximationen für die Strömungsgleichungen hergeleitet und diskutiert. Wie eingangs dieses Kapitels erläutert wurde, bestehen besondere Anforderungen an die Erhaltungsgleichungen, da sich die Partikel insbesondere im randnahen Bereich nicht mit der Strömungsgeschwindigkeit bewegen und sich daraus Geschwindigkeitsdifferenzen $\delta \hat{\mathbf{u}}$ ergeben. Durch diese Geschwindigkeitsdifferenzen entstünden zusätzliche konvektive Flüsse zwischen Partikeln, die prinzipiell mit dem ALE-Ansatz mathematisch beschrieben werden könnten. Aufgrund der Anforderung einer möglichst genauen Aufprägung von Massenströmen an den offenen Rändern des Rechengebiets, wurde entschieden, den Massenfluss an einem offenen Rand über einen Quellterm in der Massenerhaltungsgleichung zu beschreiben, der in Kapitel 5 noch zu definieren ist. Durch die Einführung dieses Quellterms besteht der Beitrag der Geschwindigkeitsdifferenz in den Transportgleichungen einzig in Form von Korrekturtermen der transportierten Größen. Darüber hinaus ist die Anwendung eines Dichtediffusionsterms erforderlich, der in der Kontinuitätsgleichung und in der Massenerhaltungsgleichung berücksichtigt ist. Die in diesem Abschnitt erläuterten Modifikationen der Erhaltungsgleichungen können wichtige Einflüsse auf die Erhaltung und die Konsistenz dieser Gleichungen haben. Die Implikationen dieser Modifikationen werden daher in Kapitel 6 und in Anhang A.5 detailliert analysiert.

4.6 Räumliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen

In diesem Abschnitt wird die räumliche Diskretisierung der in den letzten Abschnitten eingeführten Gleichungen vorgestellt. In Abschnitt 4.5 wurde die Formulierung der Partikel-Approximation des Differentialgleichungssystems diskutiert, über das der Zustand des Partikels a zeitlich integriert werden soll. Das System besteht aus der integralen Kontinuitätsgleichung zur Berechnung der Partikelmasse m_a , der differentiellen Kontinuitätsgleichung zur Berechnung der Fluidichte ρ_a und je einer Gleichung in differentieller Form für jeden zu berechnenden

Skalar ϕ_a und/oder Vektor Φ_a . Gemäß Kapitel 3 werden in der vorliegenden Arbeit keine zusätzlichen Skalare ϕ_a und lediglich die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a$ als zusätzliche Vektorgröße des Partikels a berücksichtigt. Zur Bestimmung der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a$ des Partikels a muss die Impulsgleichung diskretisiert werden. Wie in Abschnitt 4.5 erläutert wurde, sind verschiedene Gleichungssysteme möglich (Gl. 4.72 und Gl. 4.73), die sich lediglich in der Formulierung der integralen Kontinuitätsgleichung unterscheiden. In diesem Abschnitt ist es unerheblich, welche dieser Formulierungen betrachtet wird. Außerdem wurden in Abschnitt 4.4.2 auf Basis der diskreten Dichte-Approximation zwei alternative Ansätze zur Berechnung der Fluidichte ρ_a vorgestellt. Bei Anwendung dieser Ansätze wird die Kontinuitätsgleichung nicht berechnet. In den zuvor erwähnten Gleichungen sind die Partikel-Approximationen bisher noch über Platzhalter repräsentiert. In diesem Abschnitt werden die in den Abschnitten 4.3, 4.4.1 und 4.4.3 definierten SPH-Operatoren verwendet, um diese Platzhalter zu ersetzen.

Die Partikel-Approximation der differentiellen Form der Kontinuitätsgleichung (zweite Gleichung des Gleichungssystems 4.72) wird wie folgt diskretisiert:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_a}{dt} = & \sum_b m_b \mathbf{u}_{ab} \cdot \nabla_a w_{ab} + \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot \sum_b V_b \rho_b \tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab} \\ & + \sum_b V_b \rho_{ab} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \max [c_a, c_b] \end{aligned} \quad (4.77)$$

In Gl. 4.77 wird über den ersten Term auf der rechten Seite die Divergenz der Fluidgeschwindigkeit unter Anwendung des Operators gemäß Gl. 4.14 approximiert. Der zweite Term entspricht der Approximation des Dichtekorrekturterms, der unter Anwendung des SPH-Operators gemäß Gl. 4.12 approximiert wird. Dabei wird der korrigierte Kernel-Gradient $\tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab}$ (vgl. Abschnitt 4.4.1) verwendet, um eine Approximation mit einer Konsistenzordnung 1 zu gewährleisten. Der letzte Term repräsentiert die Approximation des Dichtediffusionsterms gemäß der Formulierung nach Ferrari et al. (2009) (vgl. Gl. 4.42 in Abschnitt 4.4.3).

Bei der Anwendung der diskreten Dichte-Approximation (vgl. Abschnitt 4.4.2) zur Berechnung der Fluidichte ρ_a ist die Diskretisierung des Differentials $d\rho_{a,c}$ erforderlich, das gemäß Gl. 4.29, Gl. 4.75 und Gl. 4.76 definiert ist. Die entsprechende Diskretisierung ergibt sich gemäß den in Gl. 4.77 verwendeten Operatoren zu:

$$d\rho_{a,c} = \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot \sum_b V_b \rho_b \tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab} dt + \sum_b V_b \rho_{ab} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \max [c_a, c_b] dt \quad (4.78)$$

Die integrale Form der Kontinuitätsgleichung (erste Gleichung des Gleichungssystems 4.72) wird analog zu Gl. 4.77 diskretisiert:

$$\frac{dm_a}{dt} = V_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot \sum_b V_b \rho_b \tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab} + V_a \sum_b V_b \rho_{ab} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \max [c_a, c_b] + \dot{m}_a^B \quad (4.79)$$

Über den ersten Term auf der rechten Seite der Gl. 4.79, den Dichtekorrekturterm, wird die Erhaltung der Masse verletzt. Dies kann, wie in Abschnitt 4.5 erläutert wurde, durch Entfernung

dieses Terms aus Gl. 4.79 vermieden werden. Dies führt, wie in Abschnitt 4.5 dargelegt wurde, allerdings zu einer inkonsistenten Volumenänderungsrate.

Die Impulsgleichung ergibt sich durch Einsetzen von $\Phi = \mathbf{u}$ und $\mathbf{F}_\Phi = \mathbf{F}_{\Phi=\mathbf{u}}$ in Gl. 4.74, wobei $\mathbf{F}_{\Phi=\mathbf{u}}$ gemäß Gl. 3.14 definiert ist:

$$\begin{aligned} m_a \frac{d\mathbf{u}_a}{dt} = m_a \left(\sum_b V_b \mathbf{u}_b \otimes \tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab} \right) \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}_a - V_a \sum_b V_b (p_a + p_b) \nabla_a w_{ab} \\ + 2V_a \sum_b V_b \frac{\mu_{ab} \mathbf{u}_{ab}}{r_{ab}^2 + 0,01h^2} (\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla_a w_{ab}) \\ - \mathbf{u}_a V_a \sum_b V_b \rho_{ab} \left(\frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \cdot \nabla_a w_{ab} \right) \max [c_a, c_b] \end{aligned} \quad (4.80)$$

In Gl. 4.80 repräsentiert der erste Term auf der rechten Seite die aufgrund der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ definierte Geschwindigkeitskorrektur. Dieser Term wird unter Anwendung des SPH-Operators in Gl. 4.13 diskretisiert. Dabei wird der korrigierte Kernel-Gradient $\tilde{\nabla}_a \tilde{w}_{ab}$ (vgl. Abschnitt 4.4.1) verwendet, um eine Approximation mit einer Konsistenzordnung 1 zu gewährleisten. Der zweite und dritte Term sind die Bestandteile der Divergenz des Flussvektors $\mathbf{F}_{\Phi=\mathbf{u}}$, wobei der zweite Term den Druckgradienten und der dritte Term den Viskositätsterm repräsentieren. Beide Terme sind durch eine konservative Diskretisierung charakterisiert. Zur Diskretisierung des Druckgradienten wird der in Gl. 4.15 definierte Operator verwendet. Der Viskositätsterm wird unter Anwendung des von Morris et al. (1997) eingeführten Operators diskretisiert. Dieser Operator ist ähnlich dem in Gl. 4.17 definierten Operator. Die Größen $\mathbf{u}_{ab} = \mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b$ und $\mu_{ab} = (\mu_a + \mu_b) / 2$ repräsentieren die Differenz der Fluidgeschwindigkeiten und den arithmetischen Mittelwert der dynamischen Viskositäten der Partikel a und b . Der letzte Term in Gl. 4.80 berücksichtigt den Einfluss der Dichtediffusion auf den Impuls. Sowohl der erste als auch der letzte Term in Gl. 4.80 verletzen die Impulserhaltung.

4.7 Zeitliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen

In Kapitel 2 wurde ausgeführt, dass aus Effizienzgründen ein explizites Zeitschrittverfahren für die zeitliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen gewählt werden soll. In dieser Arbeit wird ein explizites Euler-Zeitschrittverfahren appliziert, das die Konsistenzordnung 1 hat. Daher wird die folgende Approximation für die zeitliche Integration einer beliebigen Größe ψ_a angewendet:

$$\int_{\psi_a^v}^{\psi_a^{v+1}} d\psi_a = \psi_a^{v+1} - \psi_a^v = \int_{t^v}^{t^{v+1}} \frac{d\psi_a}{dt} dt \approx \left[\frac{d\psi_a}{dt} \right]^v \delta t^v \quad (4.81)$$

In Gl. 4.81 kennzeichnet das hochgestellte Symbol v bzw. $v + 1$, dass es sich um Größen des v -ten Zeitpunkts bzw. um dessen nachfolgenden Zeitpunkt handelt. Die Größe δt^v ist die Zeitschrittweite des v -ten Zeitpunkts. Dieses Prinzip wird auf Gl. 4.77, Gl. 4.78, Gl. 4.79 und Gl. 4.80 angewendet. Explizite Zeitschrittverfahren sind nur bedingt stabil. Daher müssen gewisse

Zeitschrittkriterien angewendet werden, um die Zeitschrittweite δt zu limitieren (Höfler, 2013):

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta t_{\text{CFL}} = \frac{h}{c + \max_a(\|\mathbf{u}_a\|)} \\ \delta t_{\text{ACC}} = \sqrt{\frac{h}{\max_a(\|\frac{d\mathbf{u}_a}{dt}\|)}} \\ \delta t_{\text{VIS}} = h^2 \min_a \left(\frac{\rho_a}{\mu_a} \right) \\ \delta t = \min \left(\frac{1}{4} \delta t_{\text{CFL}}, \frac{1}{4} \delta t_{\text{ACC}}, \frac{1}{8} \delta t_{\text{VIS}} \right) \end{array} \right. \quad (4.82)$$

Die zu wählende Zeitschrittweite δt bestimmt sich demnach aus dem Minimum der Zeitschrittweiten, die auf Basis des CFL-Kriteriums (δt_{CFL}), der maximalen Beschleunigung (δt_{ACC}) und der Viskosität (δt_{VIS}) berechnet werden.

5 Entwicklung eines neuen Verfahrens für offene und gekoppelte Randbedingungen

In Kapitel 4 wurde die SPH-Methode eingeführt. Unter anderem wurden Ansätze erläutert, über die in diesem Kapitel die Entwicklung eines neuen Verfahrens ermöglicht wird, das zur Behandlung offener und gekoppelter Ränder in der SPH-Methode verwendet werden kann. Unter dem Begriff „gekoppelte Ränder“ werden Ränder verstanden, über die die Rechengebiete der SPH- und der FV-Methode miteinander gekoppelt werden können (vgl. Abschnitt 2.3). Über das zu entwickelnde Verfahren können demnach SPH-Rechengebiete im Sinne einer Embedded-SPH-Methode in FV-Rechengebiete eingebettet werden.

In Kapitel 2 wurden einleitend Anforderungen an eine Embedded-SPH-Methode definiert. Die daraus resultierenden Ziele bei der Entwicklung einer Embedded-SPH-Methode werden an dieser Stelle zusammengefasst:

1. Die Komplexität des Kopplungsansatzes soll minimal sein. Als Konsequenz sollen die Ansätze der SPH- und der FV-Methode zur Aufprägung von Randbedingungen auf Kopplungsränder angewendet werden.
2. Bei der Übertragung der Strömung über den Kopplungsrand sollen keine signifikanten unphysikalischen Störungen bzw. Oszillationen der Strömungsvariablen hervorgerufen werden.
3. Über das zu entwickelnde Verfahren sollen beliebig komplexe Strömungsfelder zwischen den Rechengebieten advektiert werden.
4. Die Abweichung vom Gleichgewicht der Massenströme der Rechengebiete soll zu jedem Zeitpunkt als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes minimiert werden.

In Abschnitt 2.3 wurden verfügbare Embedded-SPH-Methoden detailliert diskutiert und anhand ihrer Eigenschaften klassifiziert. Dabei wurde festgestellt, dass nach derzeitigem Stand kein Embedded-SPH-Verfahren existiert, über das die genannten Ziele gesamtheitlich erfüllt werden können. Insbesondere das Ziel einer minimalen Komplexität des Verfahrens wurde bisher nicht ausreichend verfolgt.

Daher wurde in Abschnitt 2.4 eine Vereinheitlichung der Ansätze zur Aufprägung von Rand- und Kopplungsbedingungen als ein Ziel dieser Arbeit definiert. Über dieses Vorgehen können bei einer Embedded-SPH-Methode die in der FV-Methode bestehenden und hinsichtlich der numerischen Effizienz und Robustheit optimierten Verfahren zur Aufprägung von Randbedingungen an einem Kopplungsrand angewendet werden. Hierdurch muss keine Methodenentwicklung für die FV-Methode geleistet werden. Stattdessen beschränkt sich der Entwicklungsaufwand der Embedded-SPH-Methode auf die Erarbeitung eines einheitlichen Ansatzes zur Aufprägung von Rand- und Kopplungsbedingungen für die SPH-Methode. Zurzeit existiert noch eine Vielzahl unterschiedlicher Ansätze zur Aufprägung von Randbedingungen. Insbesondere bei Embedded-SPH-Verfahren wurden bisher spezielle Sonderlösungen zur Aufprägung von Kopplungsbedingungen entwickelt, wie in Abschnitt 2.3 erläutert wurde.

In Abschnitt 5.1 wird die grundsätzliche Architektur eines geeigneten Verfahrens zur Erfüllung der zuvor genannten Ziele diskutiert und definiert. Hieraus ergeben sich mehrere Methoden, die

in den Abschnitten 5.2, 5.3 und 5.4 entwickelt werden müssen. In Abschnitt 5.5 wird zuerst ein kurzes Zwischenfazit zu den in diesem Abschnitt entwickelten Methoden gezogen, und danach wird kurz auf die Programmcodes für das SPH- und das FV-Verfahren sowie auf deren Kommunikation und Lösungsablauf eingegangen. Die Inhalte dieses Kapitels orientieren sich in Teilen an der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021).

5.1 Diskussion des Kopplungsansatzes

In Kapitel 2 wurden bereits Ansätze definiert, um die zu Beginn dieses Kapitels erwähnten Ziele zu erfüllen. Diese Ansätze werden im Folgenden kurz erläutert. Aus der nachfolgenden Diskussion werden außerdem die Methoden identifiziert, die in diesem Kapitel entwickelt werden müssen.

Zum einen wurde die Anwendung des Patched-Grid(PG)-Ansatzes für die Kopplung vorgesehen. Bei diesem Ansatz wird ein Rand $\partial\Omega_{AB} = \partial\Omega_A = \partial\Omega_B$ definiert, über den das SPH-Rechengebiet Ω_B und das FV-Rechengebiet Ω_A voneinander abgegrenzt werden (vgl. Abb. 2.8b). Nur dieser Ansatz ermöglicht die Anwendung der üblicherweise verwendeten Methoden zur Aufprägung von Randbedingungen bei der SPH- und der FV-Methode. Die alternative Methode zum PG-Ansatz ist der Overlapping-Grid(OG)-Ansatz, bei dem eine zusätzliche Region eingeführt wird, in der sich die beiden Rechengebiete überlappen (vgl. Abb. 2.8c). Dies entspricht weder bei der SPH- noch bei der FV-Methode dem üblicherweise verwendeten Ansatz zur Aufprägung von Randbedingungen und erfüllt somit nicht das erste der eingangs dieses Kapitels genannten Ziele. Im Zusammenhang mit dem PG-Ansatz ist die Methode nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016) hier als bisher einzig relevantes Embedded-SPH-Verfahren zu erwähnen. In Abschnitt 2.3 wurde erläutert, dass die direkte Interaktion zwischen den Zellen des FV-Rechengebiets (Ω_A) und den Partikeln des SPH-Rechengebiets (Ω_B) über den Austausch numerischer Flüsse nicht praktikabel ist. Daher werden bei der Methode nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016) beide Rechengebiete, das SPH- und das FV-Rechengebiet, um Geistergebiete $\Omega_{g,A}$ und $\Omega_{g,B}$ erweitert, die jeweils das gekoppelte Rechengebiet überlappen (vgl. Abb. 2.10d und Abb. 2.10e). Innerhalb dieser Geisterregionen werden die Strömungsvariablen des überlappenden Gebiets interpoliert. Die interpolierten Werte werden als Kopplungsbedingungen zur Verfügung gestellt (vgl. Abb. 2.11b). Im Falle der FV-Methode entspricht die Aufprägung von Randbedingungen über Geistergebiete allerdings nicht dem üblicherweise verwendeten Ansatz. Bei der FV-Methode sollten auch die Kopplungsbedingungen direkt am Kopplungsrand und nicht über Geisterzellen aufgeprägt werden. In Abb. 5.1 ist veranschaulicht, welcher Ansatz in dieser Arbeit daher angestrebt wird. Die SPH-Partikel des Rechengebiets Ω_B interagieren mit den Geisterpartikeln, an denen die Strömungsvariablen der umliegenden FV-Zellen interpoliert werden (vgl. Abb. 5.1a). Die am Rand $\partial\Omega_A = \partial\Omega_{AB}$ anliegenden FV-Zellen interagieren direkt mit den angrenzenden Flächenelementen des Rands Ω_{AB} (vgl. Abb. 5.1b). Diese Flächenelemente werden im Folgenden Randsegmente genannt. Die Randsegmente sind in Abb. 5.1 als Linienelemente mit zentriertem weißen Kreis gekennzeichnet. Diese Darstellung wird auch im Folgenden verwendet. In diesem Kapitel muss demnach eine Methode entwickelt werden, um die Kopplungsbedingungen für das FV-Rechengebiet über die Randsegmente des

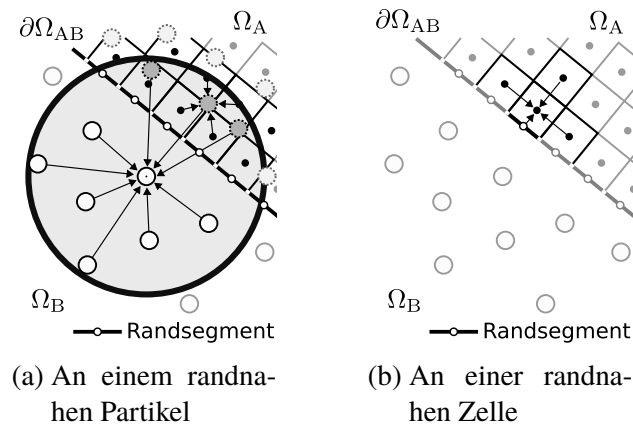


Abbildung 5.1: Informationsfluss bei dem vorgeschlagenen Verfahren zur Kopplung eines SPH-Rechengebiets mit einem FV-Rechengebiet

Rands $\partial\Omega_A = \partial\Omega_{AB}$ aufzuprägen. Hierüber kann das erste der zu Beginn dieses Kapitels genannten Ziele erfüllt werden. Eine wesentliche Herausforderung ist dabei die Berechnung des Strömungszustands dieser Randsegmente.

Zum anderen wurde in Kapitel 2 definiert, dass an der Geisterregion des SPH-Rechengebiets statische Geisterpartikel verwendet werden sollen. Dieser Ansatz gehört zu der Gruppe von Ansätzen, die im Zusammenhang mit offenen Rändern nicht auf dem Prinzip der Pufferzonen basieren. In Abschnitt 2.2 wurde erläutert, dass Ansätze basierend auf dem Prinzip der Pufferzonen für komplexe Strömungsfelder nicht robust sind, da die Geisterpartikel explizit entsprechend dem lokalen Strömungsfeld advektiert werden. Neben der Anwendung statischer Geisterpartikel wurden in den Abschnitten 2.1 und 2.2 weitere Verfahren erläutert, bei denen die Geisterpartikel dynamisch basierend auf der räumlichen Verteilung der randnahen Partikel des Rechengebiets positioniert werden, z. B. durch Spiegelung am Rand. Im Falle von komplexen Geometrien des Rands $\partial\Omega_B = \partial\Omega_{AB}$ sollte die Anwendung statischer Geisterpartikel bevorzugt werden. Dies wurde in Abschnitt 2.1 diskutiert. Da statische Geisterpartikel nicht advektiert werden, bleibt die räumliche Verteilung der Geisterpartikel unbeeinflusst von der Komplexität des lokalen Strömungsfelds. Inhomogene räumliche Verteilungen der Partikel im Geistergebiet werden somit vermieden. Dadurch können beliebig komplexe Strömungsfelder am Rand realisiert werden. Somit wird das dritte der eingangs dieses Kapitels definierten Ziele erfüllt. Zum heutigen Stand existiert weder ein Verfahren zur Behandlung offener Randbedingungen noch ein Verfahren zur Behandlung gekoppelter Randbedingungen auf Basis von statischen Geisterpartikeln. Dieser Ansatz muss demnach in diesem Kapitel entwickelt werden.

Eine wesentliche Implikation der Anwendung statischer Geisterpartikel ist, dass Partikel des Rechengebiets Ω_B den Rand nicht durchqueren können. Konvektive Flüsse (somit auch der Massenstrom) am offenen Rand können daher nicht wie bei Ansätzen mit Pufferzonen durch die Advektion der Partikel durch den Rand realisiert werden. Eine alternative Methode, um konvektive Flüsse am Rand zu ermöglichen, bietet der ALE-Ansatz, der in Abschnitt 4.5 für die SPH-Methode erläutert wurde. Bei Verwendung des Gleichungssystems 4.70 würden sich auf natürliche Weise konvektive Flüsse zwischen randnahen Partikeln des Rechengebiets und

den Geisterpartikeln des offenen Rands ergeben, da die Geisterpartikel nicht advektiert werden ($\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$) und somit eine Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}} = -\mathbf{u}$ aufweisen. In Abschnitt 4.5 wurde darauf hingewiesen, dass diese konvektiven Flüsse numerischen Ungenauigkeiten unterliegen, da Partikel-Approximationen für die Berechnung dieser Flüsse verwendet werden. Außerdem muss ohnehin eine weitere Methode zur Anpassung der Partikelmasse implementiert werden, um eine homogene Verteilung der Masse der Partikel des Rechengebiets zu gewährleisten sowie Partikeldefizite und -überschüsse im randnahen Bereich zu vermeiden. Daher wird von der Berechnung konvektiver Flüsse über Partikel-Approximationen abgesehen. Die numerischen Flüsse, die über Partikel-Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln realisiert werden sollen, beschränken sich daher auf nichtkonvektive Flüsse.

Der dritte und gleichzeitig in dieser Arbeit angestrebte Ansatz, um konvektive Flüsse an offenen und gekoppelten Rändern zu realisieren, ist durch die Anwendung eines Algorithmus zur Generierung und Entfernung von Partikelmasse im randnahen Bereich gegeben. In diesem Zusammenhang wurden in Abschnitt 2.2 verschiedene Ansätze vorgestellt. Die meisten dieser Ansätze beruhen auf einer instantanen Generierung und Löschung von Partikeln, die basierend auf bestimmten Zuständen ausgelöst wird. Alle Partikel des Rechengebiets besitzen somit die gleiche Masse, und zu bestimmten Zeitpunkten werden Partikel mit dieser Masse generiert und entfernt. Bei der Methode nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016), die in diesem Abschnitt bereits erwähnt wurde, wird z. B. ein Partikel in Randnähe eingefügt, wenn ein Partikeldefizit festgestellt wird. Leroy et al. (2016) stellen heraus, dass der Ein- und Auslass von Masse an offenen Rändern zeitlich gleichmäßig und nicht durch bestimmte Zustände ausgelöste instantane Generierungen und Entfernungen von Partikeln durchgeführt werden sollte, um Störungen der Strömungsvariablen zu verringern. Dieser Ansatz wird auch in dieser Arbeit verfolgt. Daher muss in diesem Kapitel eine Methode entwickelt werden, über die die Masse randnaher Partikel zu- und abnehmen kann. Die Massenänderung soll dabei gemäß den Massenströmen, die auf den Strömungszuständen der Randsegmente basieren, definiert werden. Über die in Abschnitt 4.5 eingeführten Gleichungssysteme (Gl. 4.72 und Gl. 4.73) kann bereits die konvektive Massenänderung eines Partikels a über den Massenquellterm $\dot{m}_a^B$ in den Erhaltungsgleichungen realisiert werden. Dieser Quellterm muss in diesem Kapitel definiert werden.

Über den genannten Algorithmus müssen außerdem Partikel am Rand generiert und entfernt werden, um Partikeldefizite und -überschüsse zu vermeiden. An dieser Stelle muss erwähnt werden, dass es bei einer Generierung und Entfernung von Partikelmasse im randnahen Bereich unweigerlich zu inhomogenen räumlichen Verteilungen der Partikel kommt. Um daraus entstehende Störungen der Strömungsvariablen hinreichend zu vermindern und somit das zweite der zu Beginn dieses Kapitels genannten Ziele zu erfüllen, werden die in Abschnitt 4.4 eingeführten Methoden verwendet.

Die in der vorangegangenen Diskussion skizzierten Methoden begünstigen das vierte der eingangs dieses Kapitels genannten Ziele. Die Kombination der erläuterten Methoden ist von signifikanter Bedeutung, um die Abweichung vom Gleichgewicht der Massenströme der Rechengebiete zu jedem Zeitpunkt als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes zu minimieren. Der Grund hierfür wird anhand von Abb. 5.2 erläutert, in der der Informationsfluss im Bereich der Kopplung ähnlich wie in Abschnitt 2.3 dargestellt ist. Im Vergleich zu den bisherigen Dar-

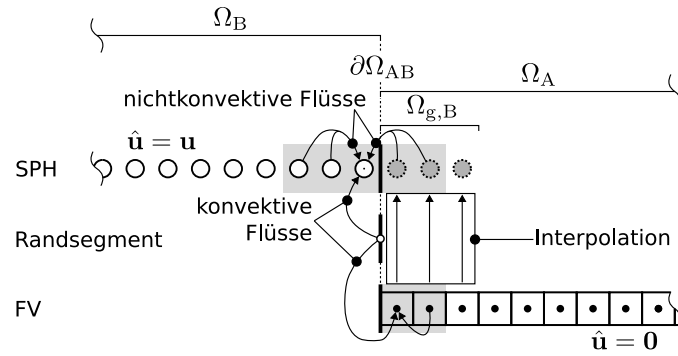


Abbildung 5.2: Vereinfachte Darstellung zum Informationsfluss im Bereich der Kopplung bei dem vorgeschlagenen Embedded-SPH-Verfahren

stellungen in Abschnitt 2.3 wird in Abb. 5.2 eine zusätzliche Reihe für das Randsegment als zentrales Element des Kopplungsansatzes eingeführt. Die folgenden Aspekte sind in Abb. 5.2 veranschaulicht:

- Wie bei dem Ansatz nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016) wird ein Geistergebiet $\Omega_{g,B}$ definiert, über das Randbedingungen für das SPH-Rechengebiet Ω_B bereitgestellt werden.
- Diese Randbedingungen werden durch eine Interpolation der Strömungsvariablen der FV-Zellen des Gebiets Ω_A an den Geisterpartikeln bestimmt.
- Anders als bei dem Ansatz nach Monteleone et al. (2015) und Napoli et al. (2016) wird das FV-Rechengebiet Ω_A nicht durch ein Geistergebiet erweitert. Die Randbedingungen für das FV-Rechengebiet werden direkt über die Strömungszustände der Randsegmente an den Flächenelementen des Rands aufgeprägt.
- Konvektive Flüsse randnaher Partikel werden auf Basis der Strömungszustände der Randsegmente aufgeprägt. Nichtkonvektive Flüsse randnaher Partikel werden durch Partikel-Interaktionen zwischen diesen Partikeln und Geisterpartikeln realisiert.

Die Massenänderung der Partikel basiert hauptsächlich auf konvektiven Flüssen.¹¹ Da numerische Flüsse an Randzellen sowie konvektive Flüsse an randnahen Partikeln über den Strömungszustand der Randsegmente definiert werden, lässt sich die Abweichung vom Gleichgewicht der Massenströme zwischen den gekoppelten Rechengebieten an jedem Ort des Kopplungsrandes minimieren. Da außerdem eine kontinuierliche Massenänderung der Partikel angestrebt wird, kann diese Minimierung zu jedem Zeitschritt erfolgen. Über diesen Sachverhalt wird das vierte der eingangs erläuterten Ziele erfüllt.

Es muss außerdem gewährleistet werden, dass das in diesem Abschnitt erläuterte Verfahren auch für einfache offene Randbedingungen ohne signifikante Anpassungen der grundlegenden Architektur des Ansatzes verwendet werden kann. Auf diese Weise stünde so wie für die FV-Methode ein einheitlicher Ansatz zur Aufprägung von Randbedingungen und Kopplungsbedingungen für

¹¹Über den numerischen Diffusionsterm, der aus Gründen der Verbesserung der numerischen Stabilität in die Kontinuitätsgleichung integriert wurde (vgl. Abschnitt 4.5), kann ein zusätzlicher diffusiver Massenfluss der Partikel entstehen.

die SPH-Methode zur Verfügung. Bei einfachen offenen Randbedingungen fehlt die Information über die Strömung außerhalb des SPH-Rechengebiets, die bei gekoppelten Randbedingungen durch eine Interpolation der Zellwerte des FV-Rechengebiets an den Geisterpartikeln bereitgestellt wird. Dies ist der einzige Unterschied im Vergleich zu dem Fall eines gekoppelten Rands. Im Falle von offenen Rändern muss stattdessen eine Kombination aus Randbedingungen und Informationen des SPH-Rechengebiets genutzt werden, um die Strömungszustände der Geisterpartikel zu bestimmen. Beide Informationen werden, wie weiter unten gezeigt wird, über die Randsegmente bereitgestellt.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion müssen die folgenden Methoden in diesem Kapitel entwickelt werden:

Methode zur Zustandsbeschreibung der Randsegmente: Wie zuvor erläutert wurde, muss der Strömungszustand, der auf Basis eines Zustandsvektors bestehend aus der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}$ und dem Fluiddruck p repräsentiert wird, an den Randsegmenten definiert sein, um den numerischen Fluss für das FV-Rechengebiet und den konvektiven Massenstrom für das SPH-Rechengebiet zu bestimmen. Des Weiteren soll das Verfahren gleichermaßen auch für offene Randbedingungen bei der SPH-Methode anwendbar sein. Hierfür muss der Strömungszustand des Rands ebenfalls bekannt sein, um auch in diesem Fall den Massenstrom der randnahen Partikel sowie die Strömungszustände der Geisterpartikel zu bestimmen. Es muss demnach ein Verfahren entwickelt werden, um den Randzustand zeitlich zu integrieren. Dieses Verfahren wird in Abschnitt 5.2 eingeführt.

Methode zur Zustandsbeschreibung der Geisterpartikel: Zur Aufprägung der Randbedingungen für das SPH-Rechengebiet muss der Strömungszustand der Geisterpartikel sowohl im Falle gekoppelter als auch einfacher offener Randbedingungen definiert werden. Im Falle gekoppelter Randbedingungen ist dies trivial, da lediglich eine Interpolation der Strömungszustände randnaher Zellen an den Geisterpartikeln notwendig ist. Im Falle einfacher offener Randbedingungen ist der Strömungszustand außerhalb des SPH-Rechengebiets nicht bekannt und muss basierend auf den Strömungszuständen des Rands und des SPH-Rechengebiets bestimmt werden. Diese Verfahren werden in Abschnitt 5.3 eingeführt.

Methode zur Massenänderung randnaher Partikel: Die Übertragung konvektiver Flüsse zwischen dem Rand und randnahen Partikeln wird über einen Algorithmus realisiert. Über diesen Algorithmus wird die Massenänderung randnaher Partikel basierend auf den Strömungszuständen der Randsegmente definiert. Hieraus resultiert der Massenquellterm $\dot{m}_a^B$, der in Abschnitt 4.5 eingeführt wurde. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, die Partikelabstände und die Partikelmasse im randnahen Bereich möglichst konsistent zueinander zu definieren, um die Inhomogenität der räumlichen Partikelanordnung zu verringern und unphysikalische Oszillationen der Strömungsvariablen zu minimieren. Dieses Verfahren wird in Abschnitt 5.4 eingeführt.

5.2 Zustandsbeschreibung der Randsegmente

Die Randsegmente sind das zentrale Merkmal des vorgeschlagenen Ansatzes zur Behandlung offener und gekoppelter Randbedingungen. Über die Randsegmente wird die räumliche Dis-

(vgl. Abb. 5.3). Um eine Flächenrepräsentation des Randsegments auch im Falle von weniger als drei räumlichen Dimensionen zu gewährleisten, wird das Segment in die entsprechend fehlenden räumlichen Dimensionen um einen Referenzpartikelabstand r_{ref} extrudiert. Dazu wird ein lokales kartesisches Koordinatensystem R'_s mit den Komponenten $(\xi_s, \eta_{1,s}, \eta_{2,s})$ an der Position $\mathbf{r}_s$ definiert, wobei der Einheitsvektor der Komponente ξ_s in Richtung des Normaleinheitsvektors $\mathbf{n}_s$ zeigt (vgl. Abb. 5.3). Die Einheitsvektoren der restlichen Komponenten $\eta_{1,s}$ und $\eta_{2,s}$ liegen innerhalb der Ebene des Flächensegments. Im Falle einer räumlichen Dimension ist die Orientierung dieser räumlichen Dimensionen willkürlich und ohne Einfluss auf das Simulationsergebnis. Im Falle von zwei räumlichen Dimensionen wird der Einheitsvektor der Komponente $\eta_{1,s}$ in Richtung des entsprechenden Liniensegments gerichtet (vgl. Abb. 5.3). Die zuvor angesprochene Extrusion wird demnach im Falle einer räumlichen Dimension in die Richtungen $\eta_{1,s}$ und $\eta_{2,s}$ durchgeführt und der Flächeninhalt entspricht $A_s = r_{\text{ref}}^2$. Im Falle von zwei räumlichen Dimensionen wird die Extrusion nur in die Richtung von $\eta_{2,s}$ durchgeführt und der Flächeninhalt ergibt sich demnach zu $A_s = l_s r_{\text{ref}}$, wobei l_s die Länge des Liniensegments ist.

5.2.2 Abgrenzung zwischen offenen und gekoppelten Rändern

Im letzten Abschnitt wurde das Randsegment s hinsichtlich dessen geometrischer Eigenschaften spezifiziert. Für die vollständige Charakterisierung des Randsegments s ist außerdem die Definition des Zustandsvektors $\mathbf{X}_s$ des Randsegments notwendig. Dieser Zustandsvektor $\mathbf{X}_s = [p_s, \mathbf{u}_s^\top]^\top$ besteht aus dem Fluiddruck p_s und der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_s$ und ist der Position $\mathbf{r}_s$ zugeordnet. Diese Zustandsbeschreibung gilt sowohl für offene als auch für gekoppelte Randbedingungen. Jedoch unterscheidet sich sowohl der Zweck für die Bereitstellung als auch die Methode zur Berechnung dieses Zustands grundlegend zwischen der Anwendung auf gekoppelte und einfache offene Ränder.

Im Falle von gekoppelten Rändern ist sowohl der Strömungszustand innerhalb als auch außerhalb des SPH-Rechengebiets Ω bekannt. Der Strömungszustand außerhalb des SPH-Rechengebiets, also innerhalb des Geistergebiets Ω_g , wird über den Strömungszustand des FV-Rechengebiets bestimmt. Um das zeitliche Fortschreiten der Strömungsvariablen im SPH- als auch im FV-Rechengebiet zu bestimmen, sind ebenfalls Verfahren denkbar, bei denen kein Zustandsvektor am Rand notwendig ist. In Abschnitt 5.1 wurde jedoch erläutert, dass die Zustandsbeschreibung direkt am Rand vorteilhaft ist, um erstens die Abweichung vom Massengleichgewicht zwischen den beiden Rechengebieten zu minimieren und zweitens den etablierten Ansatz zur Aufprägung von Randbedingungen direkt am Rand ohne Geisterzellen bei der FV-Methode zu realisieren. Prinzipiell könnte der Strömungszustand des Rands auch über eine Interpolation zwischen den Volumenelementen der beiden gekoppelten Rechengebiete bestimmt werden. Hierfür wäre jedoch eine iterative Berechnung der Strömungszustände der Rechengebiete oder eine direkte Kopplung der Strömungsgleichungen des SPH- und des FV-Verfahrens über ein gekoppeltes Gleichungssystem notwendig. Die zuerst genannte Alternative wird aufgrund einer signifikanten Erhöhung der Rechenzeit nicht in Betracht gezogen. Die zuletzt genannte Alternative ist nicht umsetzbar, da die Lösungsverfahren der SPH- und der FV-Methode grundsätzlich

unterschiedlich sind. Somit muss der Randzustand auf Basis einer zeitlichen Integration der Strömungsgleichungen bestimmt werden. Für die Diskretisierung der Strömungsgleichungen wird in dieser Arbeit die SPH-Methode verwendet. Da der Strömungszustand bei gekoppelten Rändern über die Partikel des SPH-Rechengebiets Ω und die Geisterpartikel innerhalb des FV-Rechengebiets auf beiden Seiten des Rands bekannt ist, ist die zeitliche Integration des Zustandsvektors $\mathbf{X}_s$ trivial und kann prinzipiell äquivalent zu der zeitlichen Integration der Strömungszustände der Partikel des Rechengebiets Ω durchgeführt werden.

Bei einfachen offenen Rändern (ohne Kopplung) ist die Bestimmung des Strömungszustands des Rands nicht trivial. Dieser Fall grenzt sich gegenüber dem gekoppelten Fall durch das Fehlen der Zustandsinformation außerhalb des SPH-Rechengebiets Ω , also innerhalb des Geistergebiets Ω_g , ab. In diesem Fall müssen Randbedingungen spezifiziert werden, die das gewünschte physikalische Verhalten der Strömung an den Rändern beschreiben. Diese Bedingungen werden üblicherweise direkt am Rand $\partial\Omega$ und nicht an einem extrudierten Geistergebiet Ω_g definiert. Demnach ist im Falle von einfachen offenen Rändern die Behandlung des Strömungszustands am Gebietsrand $\partial\Omega$, im Gegensatz zu dem Fall von gekoppelten Rändern, zwingend notwendig. Durch eine geschickte Definition dieser Randbedingungen wird angestrebt, eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen der berechneten Strömungsdynamik und dem Verhalten des realen Systems zu erreichen. Es wird ein Teil der Strömungsvariablen am Rand als bekannt angenommen (z. B. die Geschwindigkeitskomponenten an einem Einflussrand oder der Druck an einem Ausflussrand). Diese Art der Randbedingung ist somit eine Dirichlet-Randbedingung. Es ist nicht praktikabel, alle Strömungsgrößen als Dirichlet-Randbedingung vorzugeben. Jedoch erfordert die numerische Methode, dass genauso viele unabhängige Randbedingungen aufgebracht werden wie es zu lösende Gleichungen gibt. Daher werden üblicherweise zusätzlich von Neumann-Randbedingungen herangezogen. Poinsoot und Veynante (2011) bezeichnen diese Art der Randbedingung als „numerische“ Randbedingung, über die lediglich die Anforderung der numerischen Methode erfüllt werden soll. Poinsoot und Veynante (2011) argumentieren, dass diese Art der Randbedingung daher in vielen Fällen nicht als physikalisch korrekt anzusehen ist, und dass die Strömungsvariablen am Rand ebenso wie innerhalb des Rechengebiets entsprechend den Strömungsgleichungen und nicht auf Grundlage von Extrapolationen des Rechengebiets beschrieben werden sollten. Aus diesem Grund werden die Strömungsgleichungen in der vorliegenden Arbeit auch im Falle von einfachen offenen Rändern am Rand angewendet. Anders als bei gekoppelten Randbedingungen müssen dabei allerdings die spezifizierten Randbedingungen (z. B. Dirichlet-Randbedingungen) berücksichtigt werden. Zu diesem Zweck wird das sogenannte Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions(NSCBC)-Verfahren (Poinsoot und Lele, 1992) herangezogen.

Bei dem NSCBC-Verfahren wird eine spezielle Form der Erhaltungsgleichungen verwendet, die in Abschnitt 5.2.3 erläutert wird. Diese Erhaltungsgleichungen werden in Kombination mit Randbedingungen, die in Abschnitt 5.2.4 erklärt werden, zur Definition des Strömungszustands an offenen Rändern genutzt. Diese Formulierung der Erhaltungsgleichungen lässt sich auch im Falle gekoppelter Ränder anwenden, wie in Abschnitt 5.2.5 erläutert wird.

5.2.3 Die NSCBC-Methode

Die NSCBC-Methode basiert auf dem Local-One-Dimensional-Inviscid(LODI)-Verfahren nach Thompson (1987), bei dem charakteristische Randbedingungen definiert werden. Bei dem LODI-Ansatz werden die Strömungsgleichungen umgeschrieben, um den Informationstransfer, der durch die partiellen Differentialgleichungen beschrieben wird, in bestimmte charakteristische Richtungen zu zerlegen. Zu diesem Zweck werden Kurven in einem Raum-Zeit-Diagramm bestimmt, die Charakteristiken genannt werden. Entlang dieser Charakteristiken sind gewisse Ausdrücke, die von den Strömungsvariablen abhängig sind, konstant. Über diese Zerlegung lässt sich feststellen, welche Informationen das Rechengebiet Ω durch den Rand $\partial\Omega$ verlassen und welche Informationen durch diesen Rand in das Rechengebiet eingetragen werden. Die Zerlegung lässt sich nur für Differentialgleichungen durchführen, die hyperbolisch sind und ausschließlich partielle Ableitungen nach einer einzigen Raumrichtung enthalten. Z. B. trifft dies auf die eindimensionalen Euler-Gleichungen zu. Die Strömungsgleichungen in der vorliegenden Arbeit, die Navier-Stokes-Gleichungen, sind aufgrund der viskosen Terme nicht rein hyperbolisch und enthalten partielle Ableitungen nach mehreren Raumrichtungen. Die zuvor erläuterte Zerlegung lässt sich somit nicht direkt auf die Navier-Stokes-Gleichungen anwenden. Bei der NSCBC-Methode wird daher die zeitliche Änderungsrate des Zustandsvektors in mehrere Anteile zerlegt. Ein Anteil repräsentiert die Änderungsrate gemäß dem LODI-Ansatz. Über die übrigen Anteile werden Korrekturen für die im ersten Anteil vernachlässigten Diffusionsterme und Ortsableitungen nach zum Rand tangentialen Raumrichtungen berücksichtigt. Die Zerlegung wird ausführlich in Anhang A.1 erläutert. Als Ergebnis dieser Zerlegung resultiert die folgende Gleichung zur Beschreibung der zeitlichen Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}_s = [p_s, \mathbf{u}_s^\top]^\top$:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = -\mathbf{T} \cdot \left(\underbrace{\mathbf{R} \cdot \mathcal{L}}_{\text{LODI-Ansatz}} - \underbrace{\sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{D}'_{\eta_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \eta_i}}_{\text{Tangentiale Raumrichtungen}} \right) - \underbrace{\mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}}}_{\text{Diffusiver Anteil}} \quad (5.1)$$

Der Index „s“ des Randsegments wird zum Zwecke einer besseren Übersichtlichkeit in Gl. 5.1 und den nachfolgenden Ausführungen nicht weiter aufgeführt. Der Ursprung von Gl. 5.1 liegt in der Matrizenschreibweise der Erhaltungsgleichungen. Dabei werden die konservativen Strömungsgrößen zu einem konservativen Zustandsvektor $\mathbf{Z} = [\rho, \rho \mathbf{u}^\top]^\top$ zusammengefasst. Der letzte Term in Gl. 5.1 repräsentiert über den Flussvektor $\mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}} = [\mathbf{F}_{d,\phi=1}, \mathbf{F}_{d,\phi=\mathbf{u}}]$ den diffusiven Anteil der Erhaltungsgleichungen. Die Anteile $\mathbf{F}_{d,\phi=1}$ und $\mathbf{F}_{d,\phi=\mathbf{u}}$ des diffusiven Flussvektors wurden in Kapitel 3 erläutert. Die Größe $\mathbf{A}$ ist die Jacobi-Matrix, die zur Transformation von Ableitungen des konservativen Zustandsvektors $\mathbf{Z}$ in Ableitungen des primitiven Zustandsvektors $\mathbf{X}$ angewendet wird. Der Klammerterm in Gl. 5.1 repräsentiert den konvektiven Anteil der Änderungsrate des primitiven Zustandsvektors. Die Ableitungen und Zustandsvektoren sind dabei in dem lokalen Koordinatensystem R' definiert. Dies wird über den Apostroph an den jeweiligen Größen gekennzeichnet. Über den zweiten Term in der Klammer werden Ortsableitungen des Zustandsvektors nach den zum Randsegment s tangentialen Raumrichtungen η_i

berücksichtigt. Die Matrizen $\mathbf{D}'_{\eta,i}$ bestehen aus der Jacobi-Matrix $\mathbf{A}'$ sowie aus Ableitungen konvektiver Terme der Erhaltungsgleichungen nach dem Zustandsvektor $\mathbf{X}'$. Über die Matrix $\mathbf{T}$ wird eine Transformation des Klammerterms vom lokalen Koordinatensystem R' in das globale Koordinatensystem R durchgeführt. Der erste Term in der Klammer repräsentiert den über den LODI-Ansatz berechneten Anteil

$$\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\mathbf{R} \cdot \mathcal{L} \quad (5.2)$$

der Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ im lokalen Koordinatensystem R' . Über den Index „ c, ξ “ in Gl. 5.2 wird gekennzeichnet, dass bei der zeitlichen Ableitung nur konvektive Flüsse und nur Ortsableitungen nach der Raumrichtung ξ berücksichtigt werden. Die Matrix $\mathbf{R}$ entspricht dem Zeilenvektor der rechten Eigenvektoren der Matrix $\mathbf{D}'_{\xi}$, die analog zu den Matrizen $\mathbf{D}'_{\eta,i}$ für die zum Randsegment s orthogonale Raumrichtung ξ definiert ist. Der Vektor $\mathcal{L}$ ist wie folgt definiert:

$$\mathcal{L} = [\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_{n+1}]^T \quad \text{mit} \quad \mathcal{L}_i = \lambda_i \mathbf{l}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \quad (5.3)$$

Die Komponenten $\mathcal{L}_i$ des Vektors $\mathcal{L}$ werden als Variationen der Wellenamplituden bezeichnet. Sie sind als Terme der Eigenwerte λ_i der Matrix $\mathbf{D}'_{\xi}$, der dazugehörigen linken Eigenvektoren $\mathbf{l}_i$ und der Ableitungen des Zustandsvektors nach der zum Randsegment orthogonalen Raumrichtung definiert. Wie in Anhang A.1 erläutert wird, ergeben sich aus Gl. 5.2 und Gl. 5.3 für die hier behandelten Strömungsgleichungen $n + 1$ charakteristische Gleichungen:

$$\mathbf{l}_i \cdot \left(\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} + \lambda_i \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \right) = 0 \quad \text{mit} \quad i \in \{1, \dots, n + 1\} \quad (5.4)$$

Gemäß Gl. 5.4 ist das Skalarprodukt $\mathbf{l}_i \cdot d\mathbf{X}'/dt$ aus dem linken Eigenvektor $\mathbf{l}_i$, der zu dem Eigenwert λ_i gehört, und der substantiellen Ableitung des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ entlang der charakteristischen Kurve $d\xi/dt = \lambda_i$ konstant. Die charakteristische Kurve wird durch den Eigenwert λ_i vorgeschrieben. Über diese Schreibweise wird zwischen Informationen (bzw. Ausdrücken des Zustandsvektors), die in das Rechengebiet eintreten (positiver Eigenwert $\lambda_i > 0$) und aus dem Rechengebiet austreten (negativer Eigenwert $\lambda_i < 0$), unterschieden. Wie in Anhang A.1 erläutert wird, ergeben sich für die ersten zwei Eigenwerte die Ausdrücke $\lambda_1 = u_{\xi} + c$ und $\lambda_2 = u_{\xi} - c$. Für jede transversale Geschwindigkeitskomponente $u_{\eta,l}$ mit $l \in \{1, \dots, n - 1\}$ ergibt sich ein weiterer Eigenwert $\lambda_{2+l} = u_{\xi}$. Aufgrund der Einschränkung auf subsonische Strömungen ist die Schallgeschwindigkeit c stets größer als die Komponente u_{ξ} der Fluidgeschwindigkeit. Daher ist der Eigenwert $\lambda_1 = u_{\xi} + c$ stets größer als null und ist somit einer in das Rechengebiet eintretenden Welle zugeordnet. Im Gegensatz dazu ist der Eigenwert $\lambda_2 = u_{\xi} - c$ stets kleiner als null und somit einer aus dem Rechengebiet austretenden Welle zugeordnet. Die Wellen, die den Eigenwerten $\lambda_{2+l} = u_{\xi}$ mit $l \in \{1, \dots, n - 1\}$ zugeordnet sind, können je nach Vorzeichen der Komponente u_{ξ} der Fluidgeschwindigkeit entweder in das Rechengebiet eintreten ($u_{\xi} > 0$, Einströmrand) oder austreten ($u_{\xi} < 0$, Ausströmrand).

Über Gl. 5.2 und Gl. 5.4 wird demnach der Informationstransfer in Normalenrichtung zum Randsegment gemäß des LODI-Ansatzes beschrieben. Diese Gleichungen werden zum einen verwendet, um Randbedingungen für offene Ränder zu formulieren. Dies wird in Abschnitt 5.2.4

erläutert. Zum anderen können die genannten Gleichungen auch im Falle von gekoppelten Rändern zur Bestimmung des Randzustands angewendet werden. In diesem Fall werden allerdings, anders als bei einfachen offenen Rändern, keine zusätzlichen Randbedingungen benötigt. Dies wird in Abschnitt 5.2.5 erläutert. Sowohl für offene als auch für gekoppelte Ränder wird schließlich Gl. 5.1 angewendet, um die im LODI-Ansatz vernachlässigten Terme zu berücksichtigen. Die grundsätzliche Architektur des Verfahrens zur Berechnung des Randzustands ist zwischen offenen und gekoppelten Rändern einheitlich.

5.2.4 Definition von Randbedingungen an offenen Rändern

In diesem Abschnitt wird dargelegt, wie Randbedingungen für offene Ränder unter Anwendung von Gl. 5.2 aufgeprägt werden können. Hierfür ist es sinnvoll, dieses Differentialgleichungssystem in die Gleichungen für die einzelnen Komponenten des Zustandsvektors $\mathbf{X}' = [p, \mathbf{u}'^\top]^\top$ zu zerlegen. Durch Einsetzen von Gl. 5.3 in Gl. 5.2 sowie unter Berücksichtigung der in Abschnitt 5.2.3 genannten Eigenwerte λ_i und der in Anhang A.1 definierten Matrix $\mathbf{L}$ bzw. $\mathbf{R}$ für die linken bzw. rechten Eigenvektoren $\mathbf{l}_i$ bzw. $\mathbf{r}_i$ (vgl. Gl. A.17 bzw. Gl. A.18) ergeben sich die folgenden Gleichungen:

$$\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2) \quad (5.5)$$

$$\left. \frac{\partial u_\xi}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\frac{1}{2\rho c} (\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2) \quad (5.6)$$

$$\left. \frac{\partial u_{\eta_l}}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\mathcal{L}_{2+l} \quad \text{mit } l \in \{1, \dots, n-1\} \quad (5.7)$$

Die Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_i$ lassen sich gemäß Gl. 5.3 und unter Berücksichtigung der in Anhang A.1 definierten linken Eigenvektoren (vgl. Gl. A.17) wie folgt definieren:

$$\mathcal{L}_1 = \lambda_1 \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} + \rho c \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} \right) \quad (5.8)$$

$$\mathcal{L}_2 = \lambda_2 \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} - \rho c \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} \right) \quad (5.9)$$

$$\mathcal{L}_{2+l} = \lambda_{2+l} \frac{\partial u_{\eta_l}}{\partial \xi} \quad \text{mit } l \in \{1, \dots, n-1\} \quad (5.10)$$

Wie bereits dargelegt wurde, werden die Wellen, die durch einen negativen Eigenwert λ_i charakterisiert sind, aus dem Rechengebiet heraus advektiert. In diesem Fall können die partiellen Ableitungen in den Definitionen der zugehörigen Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_i$ basierend auf den Informationen des Rechengebiets bestimmt werden. Aufgrund des Eigenwerts $\lambda_2 = u_\xi - c$ gilt dies bei Unterschallströmungen für die Komponente $\mathcal{L}_2$. Außerdem gilt dies für die Komponenten $\mathcal{L}_{2+l}$ im Falle eines Ausströmrandes ($\lambda_{2+l} < 0$). Auf der anderen Seite wird die Komponente $\mathcal{L}_1$ im Falle von Unterschallströmungen aufgrund des positiven Eigenwerts $\lambda_1 = u_\xi + c$ nicht über die Informationen des Rechengebiets bestimmt. Die zugehörige

Welle wird in diesem Falle in das Rechengebiet hinein advektiert. Dies gilt ebenfalls im Falle eines Einströmrandes ($\lambda_{2+l} > 0$) für die Komponenten $\mathcal{L}_{2+l}$. In Abb. 5.3 ist der zuvor erläuterte Sachverhalt für einen Ausströmzustand am Randsegment s dargestellt.

Um die zeitlichen Änderungsraten in Gl. 5.5, Gl. 5.6 und Gl. 5.7 zu berechnen, müssen alle Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_i$ bekannt sein. Hierzu werden die Randbedingungen nachfolgend auf konsistente Weise berücksichtigt, um die Komponenten $\mathcal{L}_i$ zu definieren, die nicht auf Basis von Informationen des Rechengebiets bestimmt werden können. Im Falle eines Einströmrandes ($\lambda_{2+l} > 0$) müssen die zeitlichen Änderungsraten (und entsprechende Anfangswerte) der transversalen Geschwindigkeitskomponenten $u_{\eta,l}$ vorgegeben werden. Dies entspricht einer Dirichlet-Randbedingung. Für den Fall einer am Rand zeitlich konstanten Geschwindigkeitskomponente $u_{\eta,l}$ ist die Variation der Wellenamplitude $\mathcal{L}_{2+l}$ gemäß Gl. 5.7 gleich null. Die Komponente $\mathcal{L}_1$ ist immer einem positiven Eigenwert $\lambda_1 = u_\xi + c$ zugeordnet und muss somit über eine weitere Randbedingung bestimmt werden. Die Komponenten $\mathcal{L}_1$ und $\mathcal{L}_2$ sind außerdem jeweils über Gl. 5.5 und Gl. 5.6 miteinander gekoppelt. Sowohl die zeitliche Variation des Fluiddrucks p als auch die der Komponente u_ξ der Fluidgeschwindigkeit normal zum Randsegment werden somit durch die Superposition dieser beiden Variationen der Wellenamplituden bestimmt. Durch die Wahl der Komponente $\mathcal{L}_1$ wird vorgegeben, in welchem Ausmaß die aus dem Rechengebiet eintreffenden Wellen am Randsegment reflektiert werden. Der Reflexionskoeffizient des Randsegments ist durch den folgenden Ausdruck gegeben (Selle et al., 2004):

$$R = \frac{\mathcal{L}_1}{\mathcal{L}_2} \quad (5.11)$$

Ein Betrag des Reflexionskoeffizienten von $|R| = 0$ würde bedeuten, dass der Rand für alle aus dem Rechengebiet eintreffenden Wellen durchlässig ist. Dies würde einer Komponente $\mathcal{L}_1 = 0 \text{ N}/(\text{m}^2 \text{ s})$ entsprechen. Physikalisch bedeutet dies, dass den Rand keine Wellen bzw. Informationen von außerhalb des Rechengebiets erreichen und der Randzustand nur durch die Informationen des Rechengebiets verändert werden kann. Im Gegensatz dazu ergibt sich ein vollständig reflektierender Rand für einen Betrag des Reflexionskoeffizienten von $|R| = 1$. In diesem Falle werden alle aus dem Rechengebiet eintreffenden Wellen vollständig reflektiert. Dieses Verhalten des Rands kann durch zwei unterschiedliche Randbedingungen erreicht werden: 1) eine Dirichlet-Randbedingung des Fluiddrucks p , wodurch $dp/dt = 0 \text{ N}/(\text{m}^2 \text{ s})$ und $\mathcal{L}_1 = -\mathcal{L}_2$ gilt (vgl. Gl. 5.5), oder 2) eine Dirichlet-Randbedingung für die Komponente u_ξ der Fluidgeschwindigkeit, wodurch $du_\xi/dt = 0 \text{ m}/\text{s}^2$ und $\mathcal{L}_1 = \mathcal{L}_2$ gilt (vgl. Gl. 5.6). Ein intermediäres Reflexionsverhalten des Randsegments kann ebenfalls durch die Anwendung nichtreflektierender Randbedingungen erreicht werden. Dieser Ansatz wird in Anhang A.6 untersucht.

Mit dem in diesem Abschnitt dargelegten Vorgehen zur Definition der Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_i$ kann der Anteil des LODI-Ansatzes an den zeitlichen Änderungsraten der Komponenten des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ gemäß Gl. 5.5, Gl. 5.6 und Gl. 5.7 berechnet werden.

5.2.5 Übertragung auf gekoppelte Ränder

In Abschnitt 5.2.3 wurde die NSCBC-Methode eingeführt. Wie in Abschnitt 5.2.3 erläutert wurde, wird bei dieser Methode der LODI-Ansatz verwendet, um den Informationstransfer in entsprechend über das Randsegment eintretende und austretende Wellen zu zerlegen. Für eine durch den Rand aus dem SPH-Rechengebiet austretende Welle (negativer Eigenwert) wird die Variation der Wellenamplitude über Gl. 5.8, Gl. 5.9 oder Gl. 5.10 bestimmt. Für eine durch den Rand in das SPH-Rechengebiet eintretende Welle (positiver Eigenwert) muss im Falle einfacher offener Ränder eine zusätzliche Randbedingung berücksichtigt werden, um die Variation der Wellenamplitude zu bestimmen (vgl. Abschnitt 5.2.4).

Im Gegensatz dazu sind im Falle von gekoppelten Rändern alle Informationen über die in das SPH-Rechengebiet eintretenden Wellen (positiver Eigenwert) auf Grundlage des Strömungsfelds des FV-Rechengebiets verfügbar. Daher können im Falle gekoppelter Ränder unabhängig von der Ausbreitungsrichtung der Wellen alle Variationen der Wellenamplituden gemäß Gl. 5.8, Gl. 5.9 oder Gl. 5.10 bestimmt werden. Der für einfache offene Ränder entwickelte Ansatz wird also ohne Einschränkungen auf den Fall eines gekoppelten Rands übertragen.

5.2.6 Anwendung der NSCBC-Methode in der SPH-Methode

In den vorangegangenen Abschnitten wurden das Vorgehen und die Gleichungen zur Berechnung der zeitlichen Änderungsraten des Zustandsvektors $\mathbf{X}_s$ des Randsegments s im Falle offener sowie gekoppelter Randbedingungen definiert. Wie zuvor erläutert wurde, soll dieser Zustandsvektor unter Anwendung der SPH-Methode berechnet werden. Somit müssen die entsprechenden zeitlichen und räumlichen Diskretisierungen der Gl. 5.1 definiert werden.

Die zeitliche Diskretisierung wird, wie in Abschnitt 4.7 für den Fall der Partikel des internen Rechengebiets bereits erläutert wurde, über ein explizites Euler-Zeitschrittverfahren mit der Konsistenzordnung 1 realisiert:

$$\int_{\mathbf{X}_s^v}^{\mathbf{X}_s^{v+1}} d\mathbf{X}_s = \mathbf{X}_s^{v+1} - \mathbf{X}_s^v = \int_{t^v}^{t^{v+1}} \frac{\partial \mathbf{X}_s}{\partial t} dt \approx \left[\frac{\partial \mathbf{X}_s}{\partial t} \right]^v \delta t^v \quad (5.12)$$

In Gl. 5.12 kennzeichnet das hochgestellte Symbol v bzw. $v + 1$, dass es sich um Größen des v -ten Zeitpunkts bzw. um dessen nachfolgenden Zeitpunkt handelt. Die Größe $\delta t^v = t^{v+1} - t^v$ ist die Zeitschrittweite des v -ten Zeitpunkts. Um die Stabilität des numerischen Verfahrens zu gewährleisten, werden die Randsegmente ebenfalls in den in Abschnitt 4.7 erläuterten Gleichungen (vgl. Gl. 4.82) zur Bestimmung der Zeitschrittweite δt berücksichtigt.

Gl. 5.1, die zur Berechnung der zeitlichen Änderungsrate $\partial \mathbf{X}_s / \partial t$ des Zustandsvektors des Randsegments s angewendet wird, wird an dieser Stelle als Definition zum Zeitpunkt v wiederholt:

$$\left[\frac{\partial \mathbf{X}_s}{\partial t} \right]^v = -\mathbf{T}_s \cdot \left(\mathbf{R}_s^v \cdot \mathcal{L}_s^v + \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{D}_{\eta,i,s}^v \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \eta_i} \right)_s^v \right) - \mathbf{A}_s^v \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z},s}^v \quad (5.13)$$

Die mit der SPH-Methode zu diskretisierenden Ortsableitungen beziehen sich zum einen auf die Divergenz $\nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z},s}$ der Matrix der diffusiven Flussvektoren $\mathbf{F}_{d,\mathbf{Z},s} = [\mathbf{F}_{d,\phi=1,s}, \mathbf{F}_{d,\Phi=\mathbf{u},s}]$. Dieser Divergenzterm enthält den Viskositätsterm der Impulsgleichung (vgl. Gl. 3.20) sowie den künstlichen Dichtediffusionsterm der Kontinuitätsgleichung (vgl. Abschnitt 4.4.3). Beide Terme werden analog zu den bereits bei den Differentialgleichungen der Partikel des Rechengebiets eingeführten SPH-Operatoren diskretisiert (vgl. Gl. 4.77 und Gl. 4.80). Sowohl die Partikel des Rechengebiets als auch die Partikel des Geistergebiets werden bei der Anwendung dieser SPH-Operatoren berücksichtigt. Dieses Vorgehen wird sowohl für offene als auch gekoppelte Ränder verfolgt.

Zum anderen beziehen sich die zu diskretisierenden Ortsableitungen auf den Gradienten des Zustandsvektors $(\nabla' \otimes \mathbf{X}')^\top$. Die Anteile dieses Gradienten, die sich auf die innerhalb der Ebene des Randsegments s liegenden Koordinatenrichtungen $\eta_{l,s}$ mit $l \in \{1, \dots, n-1\}$ beziehen, werden über den zweiten Term in der Klammer in Gl. 5.13 berücksichtigt. Der Anteil des Gradienten, der sich auf die Koordinatenrichtung ξ_s normal zum Randsegment s bezieht, ist über die Komponenten des Vektors der Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_s$ (vgl. Gl. 5.8, Gl. 5.9 und Gl. 5.10) berücksichtigt. Bei der praktischen Umsetzung im Simulationsprogramm wird der Gradient $(\nabla \otimes \mathbf{X})^\top$ des im globalen Koordinatensystem R definierten Zustandsvektors $\mathbf{X}$ mittels der SPH-Methode berechnet und anschließend mittels einer Koordinatentransformation unter Anwendung der Matrix $\mathbf{T}_s$ (vgl. Gl. A.5) in den im lokalen Koordinatensystem R'_s definierten Gradienten $(\nabla' \otimes \mathbf{X}')^\top$ umgewandelt. Der Gradient des Zustandsvektors $(\nabla \otimes \mathbf{X})^\top$ lässt sich in die Gradienten des Fluiddrucks ∇p und der Fluidgeschwindigkeit $(\nabla \otimes \mathbf{u})^\top$ zerlegen, für deren Diskretisierung Gl. 4.12 und Gl. 4.13 herangezogen werden:

$$[\nabla p]_s = \sum_b V_b p_b \tilde{\nabla}_s \tilde{w}_{sb} \quad (5.14)$$

$$[(\nabla \otimes \mathbf{u})^\top]_s = \sum_b V_b \mathbf{u}_b \otimes \tilde{\nabla}_s \tilde{w}_{sb} \quad (5.15)$$

Bei der Definition dieser SPH-Operatoren wird der korrigierte Kernel-Gradient $\tilde{\nabla}_s \tilde{w}_{sb}$ (vgl. Abschnitt 4.4.1) angewendet, da speziell am Rand eine vergleichsweise inhomogene räumliche Verteilung der Partikel auftreten kann.

Nachfolgend wird erläutert, welche Partikelgruppen bei der Berechnung der SPH-Operatoren in Gl. 5.14 und Gl. 5.15 herangezogen werden sollen. Im Falle von einfachen offenen Randbedingungen wurde bereits in Abschnitt 5.2.4 erläutert, dass die Informationen über den Zustandsvektor $\mathbf{X}_s$ und somit über die Strömungsvariablen p_s und $\mathbf{u}_s$ nur innerhalb des SPH-Rechengebiets vorliegen. Demnach müsste die Berechnung einseitiger Gradienten unter Berücksichtigung der Partikel des SPH-Rechengebiets, und nicht der Geisterpartikel, durchgeführt werden. Im Zuge dieser Arbeit wurde jedoch festgestellt, dass die Berechnung einseitiger Gradienten selbst unter Anwendung des korrigierten Kernel-Gradienten zu unbefriedigenden Ergebnissen hinsichtlich der Genauigkeit und der Stabilität der Methode führt. Daher werden diese Gradienten in dieser Arbeit ebenfalls unter Berücksichtigung der Partikel des Geistergebiets berechnet. Um eine korrekte Repräsentation des Gradienten des internen Rechengebiets am Randsegment zu ge-

währleisten, müssen die Werte der Partikel des Geistergebiets entsprechend diesen Gradienten widerspiegeln. Die Methode zur Erreichung dieses Ziels wird im nächsten Abschnitt erläutert.

Um eine Konsistenz zwischen den Strömungsvariablen der Partikel des Rechengebiets und der Randsegmente zu wahren, müssen die Operatoren zur Berechnung der Gradienten der Strömungsvariablen an Partikeln und Randsegmenten dieselben Stützstellen berücksichtigen. Sowohl im Falle offener als auch gekoppelter Ränder werden die SPH-Operatoren für die Partikel des Rechengebiets unter Einbeziehung der Partikel des Geistergebiets berechnet. Dies muss daher auch für die Operatoren in Gl. 5.14 und Gl. 5.15 beachtet werden. Aus diesem Grund werden die Gradienten gemäß Gl. 5.14 und Gl. 5.15 auch im Falle gekoppelter Randbedingungen sowohl für in das SPH-Rechengebiet eintretende als auch aus dem SPH-Rechengebiet austretende Wellen unter Einbeziehung der Partikel des Geistergebiets berechnet. Die für die Berechnung der Variationen der Wellenamplituden $\mathcal{L}_1$ und $\mathcal{L}_2$ in Gl. 5.8 und Gl. 5.9 verwendeten Gradienten sind somit identisch.

In diesem Abschnitt wurde das Verfahren zur Berechnung des Strömungszustands der Randsegmente definiert. Dieser Strömungszustand wird in Abschnitt 5.4 sowohl für einfache offene als auch gekoppelte Ränder verwendet, um die Massenänderung randnaher Partikel zu berechnen. Im Falle gekoppelter Ränder wird der Strömungszustand der Randsegmente außerdem auf die Flächenelemente des FV-Rechengebiets aufgeprägt. Im Falle einfacher offener Ränder wird der Strömungszustand der Randsegmente zur Bestimmung der Strömungszustände der Geisterpartikel genutzt. Dieser Ansatz wird im nächsten Abschnitt erläutert.

5.3 Zustandsbeschreibung der Geisterpartikel

Bei dem vorliegenden SPH-Verfahren muss das Einflussgebiet des Kernels vollständig mit Partikeln besetzt sein. Sowohl für Partikel innerhalb des randnahen Bereichs des SPH-Rechengebiets Ω als auch für die Randsegmente des Rands $\partial\Omega$ ist diese Bedingung nicht ohne Weiteres erfüllt. Daher müssen Geisterpartikel eingeführt werden, die den randnahen Bereich Ω_g außerhalb des SPH-Rechengebiets Ω besetzen. Wird ein Geisterpartikel von dem Einflussgebiet des Kernels eines Partikels des SPH-Rechengebiets Ω oder eines Randsegments des Rands $\partial\Omega$ umschlossen, wird es bei der Berechnung der entsprechenden SPH-Operatoren mit einbezogen. Wie bereits in Abschnitt 5.1 erläutert wurde, werden in dieser Arbeit statische Geisterpartikel verwendet. Diese können vor der Simulation in Form eines Pre-Processing-Schritts generiert werden und bieten eine hohe Flexibilität hinsichtlich der Randgeometrie. Außerdem ist die räumliche Verteilung der Geisterpartikel von der Komplexität des lokalen Strömungsfelds unbeeinflusst, da die Geisterpartikel nicht advektiert werden. Es können somit keine inhomogenen räumlichen Verteilungen der Partikel innerhalb des Geistergebiets Ω_g entstehen. Dies ist eine wichtige Eigenschaft, da das vorliegende Verfahren insbesondere im Falle von gekoppelten Rändern für beliebig komplexe Strömungsfelder anwendbar sein muss.

In diesem Abschnitt wird das Verfahren zur Berechnung des Zustandsvektors $\mathbf{X}_g = [p_g, \mathbf{u}_g^\top]^\top$ eines Geisterpartikels g des Gebiets Ω_g erläutert. Der Strömungszustand der Geisterpartikel ergibt sich zum Zeitpunkt ν sowohl im Falle gekoppelter als auch im Falle offener Ränder unmit-

telbar aus den zum selben Zeitpunkt ν bekannten Strömungszuständen der umgebenden aktiven Stützstellen. Zu diesen aktiven Stützstellen zählen die Partikel des SPH-Rechengebiets Ω , die Zellen des FV-Rechengebiets sowie die Randsegmente des Rands $\partial\Omega$. Daher werden Geisterpartikel als passive Stützstellen angesehen. Das bedeutet, dass die Strömungsgleichungen an diesen Partikeln nicht gelöst werden. Zur Berechnung der Strömungsgleichungen und folglich zum Fortschreiten der Strömungszustände der Partikel des SPH-Rechengebiets Ω und der Randsegmente des Rands $\partial\Omega$ zum nächsten Zeitpunkt $\nu + 1$ müssen die Strömungszustände der Geisterpartikel zum Zeitpunkt ν bekannt sein. Bei der praktischen Implementierung des Lösungsverfahrens werden daher die Strömungszustände der aktiven Stützstellen zum Zeitpunkt $\nu + 1$ am Ende des Zeitschritts $\nu \rightarrow \nu + 1$ genutzt, um den Strömungszustand der Geisterpartikel zum Zeitpunkt $\nu + 1$ zu berechnen. Dieser Strömungszustand steht demnach zu Beginn des nächsten Zeitschritts $\nu + 1 \rightarrow \nu + 2$ zur Berechnung der Strömungsgleichungen der Partikel des Rechengebiets und der Randsegmente zur Verfügung. Zur Realisierung dieses Vorgehens muss in diesem Abschnitt folglich das Verfahren zur Berechnung des Zustandsvektors $\mathbf{X}_g = [p_g, \mathbf{u}_g^\top]^\top$ des Geisterpartikels g basierend auf den Strömungszuständen der aktiven Stützstellen definiert werden. Die Methode zur Berechnung dieses Zustandsvektors unterscheidet sich zwischen dem Fall eines offenen und eines gekoppelten Rands. In Abschnitt 5.3.1 bzw. Abschnitt 5.3.2 wird die Methode zur Berechnung des Zustandsvektors an einfachen offenen bzw. gekoppelten Rändern erläutert. Die Berechnungsmethode zur Bestimmung des Zustandsvektors unterscheidet sich zwischen diesen beiden Fällen lediglich dadurch, dass im Falle einfacher offener Ränder eine Extrapolation der Strömungszustände der Randsegmente und bei gekoppelten Rändern eine Interpolation der Strömungszustände der FV-Zellen durchgeführt wird. Die grundsätzliche Architektur des Verfahrens ist für beide Fälle identisch.

5.3.1 Zustandsbeschreibung für offene Ränder

Bei der Berechnung des Zustandsvektors eines Geisterpartikels eines einfachen offenen Rands besteht die Problematik, dass der Strömungszustand des Gebiets, in dem sich dieses Geisterpartikel befindet, nicht bekannt ist. Daher muss der Strömungszustand des Geisterpartikels von den Strömungszuständen der Partikel des SPH-Rechengebiets und der Randsegmente extrapoliert werden. Die Geisterpartikel sind in diesem Fall als Hilfsmittel anzusehen, um die an den Randsegmenten definierten Strömungszustände auf eine möglichst konsistente Weise bei der Berechnung der SPH-Operatoren der Partikel des SPH-Rechengebiets aufzuprägen.

Wie in Abschnitt 5.2 erläutert wurde, werden in dem vorliegenden Verfahren keine sogenannten „numerischen“ Randbedingungen verwendet, bei denen z. B. der Gradient einer Strömungsvariable am Rand zu null gesetzt wird. Alle Strömungsvariablen sind am Rand durch die Lösung der Erhaltungsgleichungen oder direkt als Dirichlet-Randbedingung vorgegeben. Dies bedeutet, dass sich prinzipiell für jede Strömungsvariable beliebige Gradienten am Rand einstellen können. Über diese Gradienten bestimmen sich die numerischen Flüsse, die zwischen dem Rand und einem Partikel des SPH-Rechengebiets ausgetauscht werden. Um diese Flüsse auf eine möglichst konsistente Weise zu berechnen, ist es folglich wichtig, dass eine konsistente Berechnung des Gradienten einer Strömungsvariable an einem randnahen Partikel mit den Strömungszuständen

der Geisterpartikel ermöglicht wird. Ein naheliegender Ansatz ist eine lineare Extrapolation des Strömungsfelds an den Positionen der Geisterpartikel. Um den Rechenaufwand bei dieser Extrapolation möglichst gering zu halten, sollte sie universell durchgeführt werden. Dies bedeutet, dass bei der Berechnung der Interaktionen aller Partikel des Rechengebiets dieselben extrapolierten Funktionswerte der Geisterpartikel verwendet werden. Ein universeller Funktionswert an einer Position im Geistergebiet sollte auf Basis von Informationen des Rands berechnet werden. Dabei ist wichtig, dass die Konsistenzordnung 1 der Kernel-Approximation des hier verwendeten SPH-Verfahrens nicht verletzt wird. Über eine Konsistenzordnung 1 wird sichergestellt, dass der Funktionswert einer linearen Funktion sowie der Gradient dieser Funktion durch die Kernel-Approximation exakt reproduziert werden können. In Anhang A.2 wird dargelegt, dass die Konsistenzordnung durch die erläuterte Extrapolation der Strömungsgrößen an den Positionen der Geisterpartikel bewahrt werden kann. Dieser Ansatz wird demnach weiterverfolgt.

Um die Funktionswerte an Positionen innerhalb des Geistergebiets zu berechnen, müssen die Gradienten ∇X_i der Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ an dem Rand $\partial\Omega$ bestimmt werden. Bei der praktischen Implementierung der Methode wird hierfür die Partikel-Approximation verwendet, um die Gradienten an diskreten Stützstellen des Rands, den Randsegmenten, zu bestimmen. Die Partikel-Approximation des Gradienten $[\nabla X_i]_s$ an der Position $\mathbf{r}_s$ des Randsegments s ist wie folgt definiert:

$$[\nabla X_i]_s = \sum_{b \in C} V_b X_{i,b} \nabla_s w + \sum_{g \in \mathcal{G}} V_g X_{i,g} \nabla_s w \quad (5.16)$$

In Gl. 5.16 wird zwischen den Beiträgen der Menge C der Partikel des SPH-Rechengebiets und der Menge $\mathcal{G}$ der Partikel des Geistergebiets unterschieden. Bei der Berechnung dieser Partikel-Approximation bestehen zwei Schwierigkeiten.

Die erste Schwierigkeit besteht darin, dass durch die räumlichen Diskretisierungen des Geistergebiets bzw. des Rands durch Geisterpartikel bzw. Randsegmente keine Zuordnung zwischen den Positionen innerhalb des Geistergebiets und den Positionen an dem Rand definiert ist. Vielmehr besetzt jedes Geisterpartikel ein gewisses Volumen des Geistergebiets, das entsprechend durch denselben Funktionswert X_i charakterisiert ist. Gleiches gilt für den Rand, an dem jedes Randsegment eine gewisse Fläche mit homogenem Funktionswert X_i belegt. Es muss demnach ein geeignetes Extrapolationsschema angewendet werden, um den Funktionswert an einer Stützstelle des diskretisierten Geistergebiets basierend auf den Stützstellen des Rands zu definieren. Eine wichtige Anforderung, die sich aus verschiedenen Lösungsansätzen im Verlaufe dieser Arbeit ergeben hat, ist die Kompaktheit dieser Extrapolation. Z. B. würde bei der Extrapolation unter der Anwendung eines SPH-Operators ein zu großer räumlicher Bereich von Stützstellen berücksichtigt werden, wodurch der Funktionswert X_i zu stark geglättet würde. Dies würde dazu führen, dass das Strömungsfeld beim Übergang von den Partikeln des SPH-Rechengebiets zu den Geisterpartikeln nicht mehr konsistent wäre. Aus diesem Grund müssen lokale Extrapolationsverfahren verwendet werden.

In dieser Arbeit wird daher ein kompaktes bzw. lokales Extrapolationsverfahren vorgeschlagen. Das Geistergebiet wird hierfür durch zwei verschiedene Dirichlet-Zerlegungen diskretisiert, und die Überlappungen der Elemente dieser Gebiete werden als Grundlage für das Extrapolationsverfahren verwendet.

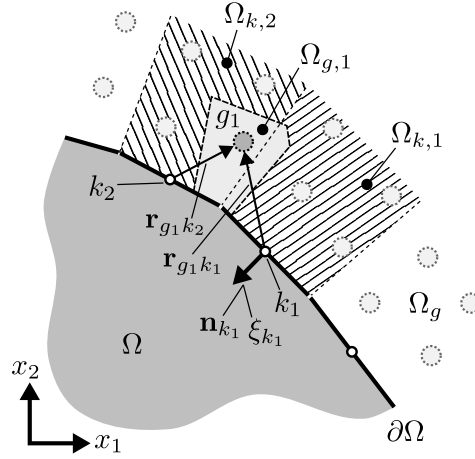


Abbildung 5.4: Extrapolation der Strömungszustände der Randsegmente an einem Geisterpartikel

tionsschema verwendet. Dies ist in Abb. 5.4 dargestellt. Aus der ersten Zerlegung resultieren die Einflussgebiete der Randsegmente. In Abb. 5.4 sind zwei dieser Gebiete ($\Omega_{k,1}$ und $\Omega_{k,2}$) der Randsegmente k_1 und k_2 als unterschiedlich schraffierte Flächen dargestellt. Die zweite Zerlegung repräsentiert die Volumina der Geisterpartikel. In Abb. 5.4 ist das Gebiet $\Omega_{g,1}$ des Volumens des Geisterpartikels g_1 dargestellt. Für beide Zerlegungen ist jede Position innerhalb des Geistergebiets eindeutig einer Zelle und somit einer Stützstelle zugeordnet. Es entstehen eindeutige Überlappungen zwischen den resultierenden Zellen der beiden Zerlegungen. Die Volumina der Überlappungen dieser Zellen werden als Wichtungsfaktoren bei der Extrapolation angewendet. Somit ergibt sich der Funktionswert $X_{i,g}$ eines Geisterpartikels $g \in \mathcal{G}$ aus den Extrapolationen der Funktionswerte der Randsegmente, deren Einflussgebiete das Einflussgebiet der Zelle des Geisterpartikels g überlappen:

$$X_{i,g} = \sum_k \frac{V_{\cap, gk}}{V_{c,g}} \left(X_{i,k} + r_{gk,\xi} [\nabla X_i]_{k,\xi} \right) \quad \text{mit} \quad r_{gk,\xi} = \mathbf{r}_{gk} \cdot \mathbf{n}_k, [\nabla X_i]_{k,\xi} = \mathbf{n}_k \cdot [\nabla X_i]_k \quad (5.17)$$

In Gl. 5.17 sind $V_{c,g}$, $V_{\cap, gk}$, $\mathbf{r}_{gk}$ und $\mathbf{n}_k$ das Volumen der Zelle des Partikels g , das Volumen der Überlappung der Zelle des Partikels g mit dem Einflussgebiet des Randsegments k , der Abstandsvektor $\mathbf{r}_g - \mathbf{r}_k$ zwischen den Stützstellen des Partikels g und des Randsegments k und der in das Rechengebiet zeigende Normaleneinheitsvektor des Randsegments k . Analog zu der in Anhang A.2 erläuterten Extrapolation für ein kontinuierliches Geistergebiet wird über Gl. 5.17 eine Extrapolation in Normalenrichtung der Randsegmente durchgeführt. Durch Einsetzen von Gl. 5.17 in Gl. 5.16 und Bildung des Skalarprodukts mit dem Normaleneinheitsvektor $\mathbf{n}_s$ des Randsegments s ergibt sich der folgende Ausdruck für den Gradienten $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ in Normalenrichtung ξ_s des Randsegments s :

$$[\nabla X_i]_{s,\xi} = \sum_{b \in \mathcal{C}} V_b X_{i,b} \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w + \sum_{g \in \mathcal{G}} \sum_k V_g \frac{V_{\cap, gk}}{V_{c,g}} \left(X_{i,k} + r_{gk,\xi} [\nabla X_i]_{k,\xi} \right) \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w \quad (5.18)$$

Anhand von Gl. 5.18 wird auf die zweite Schwierigkeit der Methode hingewiesen. Der Gradient $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ des Randsegments s ist über ein lineares Gleichungssystem mit den Gradienten $[\nabla X_i]_{k,\xi}$ der umgebenden Randsegmente k gekoppelt. Die Kopplungsterme sind über die Geisterpartikel g definiert, die sich innerhalb der Kernel-Einflussgebiete mehrerer Randsegmente befinden. Die Lösung dieses Gleichungssystems wäre zu jedem Zeitpunkt während der Simulation notwendig, um die Gradienten $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ gemäß Gl. 5.18 zu berechnen und somit die Strömungszustände der Geisterpartikel g gemäß Gl. 5.17 zu bestimmen. Um die Lösung dieses Gleichungssystems und damit einen zusätzlichen Berechnungsaufwand zu vermeiden, wird in dieser Arbeit eine gewisse zeitliche Relaxation des Gradienten akzeptiert. Dazu werden auf der rechten Seite in Gl. 5.18 die Werte der Gradienten $[\nabla X_i]_{k,\xi}$ des aktuellen Zeitpunkts v genutzt, um den Gradienten $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ des Randsegments s des nächsten Zeitpunkts $v + 1$ zu berechnen:

$$[\nabla X_i]_{s,\xi}^{v+1} = \sum_{b \in C} V_b X_{i,b} \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w + \sum_{g \in \mathcal{G}} \sum_k V_g \frac{V_{\cap,gk}}{V_{c,g}} \left(X_{i,k} + r_{gk,\xi} [\nabla X_i]_{k,\xi}^v \right) \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w \quad (5.19)$$

Bei nur einer räumlichen Dimension lässt sich der Einfluss der Relaxation leicht bewerten. In diesem Fall besteht der Rand nur aus einem Randsegment s . In Anhang A.3 wird unter Anwendung vereinfachter Randbedingungen untersucht, nach wie vielen Zeitschritten ein durch Ungenauigkeiten der Strömungsgrößen vorliegender anfänglicher Fehler des am Randsegment berechneten Gradienten reduziert wird. Für einen anfänglichen normierten Fehler des Gradienten von 100 % verringert sich der Fehler nach ca. drei bzw. sieben Zeitschritten auf 10 % bzw. 1 %. Die Relaxation wird daher als akzeptabel bewertet.

5.3.2 Übertragung auf gekoppelte Ränder

Der Zustandsvektor $\mathbf{X}_g$ eines Geisterpartikels g ist im Falle eines gekoppelten Rands erheblich einfacher zu definieren als bei einem offenen Rand. Die Partikel des Geistergebiets sind an Positionen definiert, die durch das FV-Rechengebiet überlappt werden (vgl. Abb. 5.1a). Zum Ende des Zeitschritts ist der Strömungszustand der überlappenden Zellen des FV-Rechengebiets bekannt. Daher können die Strömungszustände der Geisterpartikel über eine Interpolation der Werte der Strömungsvariablen an den FV-Zellen bestimmt werden. Verschiedene Interpolationsverfahren würden an dieser Stelle in Frage kommen.

In Abschnitt 5.3.1 wurde dargelegt, dass für die Berechnung des Zustandsvektors $\mathbf{X}_g$ an offenen Rändern lokale Extrapolationsverfahren bevorzugt werden sollten, um eine Kompaktheit der Extrapolation zu gewährleisten. Analog gilt dies auch für die Interpolation der FV-Zellen an einem Geisterpartikel im Falle eines gekoppelten Rands. Eine Interpolation auf Basis von SPH-Operatoren würde einen zu großen räumlichen Bereich von Stützstellen berücksichtigen und den Zustandsvektor zu stark glätten. Aus diesem Grund sollte für die Interpolation innerhalb des FV-Rechengebiets ein lokales Interpolationsverfahren verwendet werden. In dieser Arbeit wird ein lokales Interpolationsverfahren appliziert, das Teil des Programmpakets OpenFOAM¹³ ist. Das Verfahren basiert auf der Verwendung von baryzentrischen Koordinaten (Möbius,

¹³Das Programmpaket OpenFOAM wird in dieser Arbeit für das FV-Verfahren verwendet.

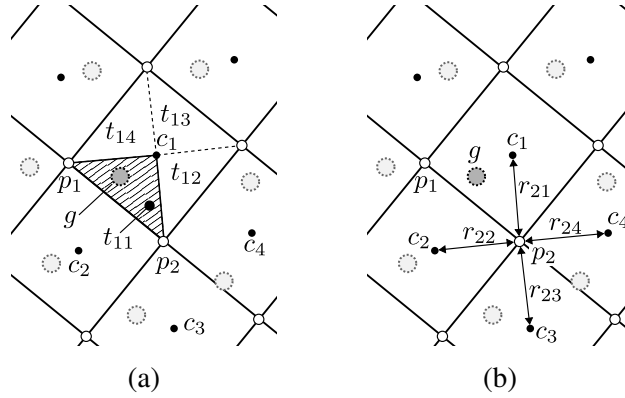


Abbildung 5.5: Interpolation der Strömungszustände der Zellen an einem Geisterpartikel

1827). Die Methode wird im Folgenden anhand des Geisterpartikels g erläutert. In Abb. 5.5a sind Geisterpartikel veranschaulicht, die von einem FV-Rechengitter überlappt werden. Bei der Interpolation werden sowohl Zellmittelpunkte c_j als auch Verbindungspunkte p_k zwischen den Zellen berücksichtigt. Zunächst wird die Zelle c_j identifiziert, in der sich das Geisterpartikel g befindet (Zelle c_1 in Abb. 5.5a). Diese Zelle wird anschließend in Tetraeder t_{jl} zerlegt, die sich den Mittelpunkt der Zelle c_j teilen. Danach wird der Tetraeder identifiziert, innerhalb dessen sich das Geisterpartikel g befindet (als Dreieck abstrahierter Tetraeder t_{11} in Abb. 5.5a). Die Interpolation der Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ an dem Geisterpartikel g erfolgt auf Basis der Werte der Funktion X_i an den Eckpunkten des Tetraeders:

$$X_{i,g} = b_{t,c} X_{i,c} + \sum_{p \in \mathcal{P}_t} b_{t,p} X_{i,p} \quad \text{mit} \quad b_{t,c} + \sum_{p \in \mathcal{P}_t} b_{t,p} = 1 \quad (5.20)$$

In Gl. 5.20 ist die Größe $\mathcal{P}_t$ die Menge der Eckpunkte, die die Zellen verbinden und gleichzeitig Teil des Tetraeders t sind (Eckpunkte p_1 und p_2 in Abb. 5.5a). $X_{i,c}$ und $X_{i,p}$ sind jeweils die Funktionswerte der Komponente X_i an dem Zellmittelpunkt und den Eckpunkten, die den Tetraeder geometrisch definieren. Entsprechend sind $b_{t,c}$ und $b_{t,p}$ die Wichtungsfaktoren dieser Stützstellen. Diese Wichtungsfaktoren sind gleich den baryzentrischen Koordinaten dieser Stützstellen innerhalb des Tetraeders t . Über diese Definition wird gewährleistet, dass der Einfluss einer Stützstelle auf das Ergebnis der Interpolation mit Verringerung des Abstands zwischen dem Geisterpartikel und dieser Stützstelle erhöht wird. Aufgrund der Eigenschaften der baryzentrischen Koordinaten ergibt sich exakt der Wert einer Stützstelle als Ergebnis der Interpolation, wenn die Position des Geisterpartikels g mit der Position derselben Stützstelle übereinstimmt.

Da der Zustandsvektor $\mathbf{X}$ bei dem FV-Verfahren an den Zellmittelpunkten c_j definiert ist, müssen die Werte $X_{i,p}$ der Komponente i an den Eckpunkten p_k bestimmt werden. Hierzu wird eine weitere Interpolation auf Basis einer inversen Distanzwichtung der Funktionswerte $X_{i,c}$ der Zellen durchgeführt. Dies ist in Abb. 5.5b für den Eckpunkt p_2 veranschaulicht. Die Interpolation der Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ an dem Eckpunkt p erfolgt auf Basis

der Werte der Funktion X_i an den Mittelpunkten der mit dem Eckpunkt p verbundenen Zellen:

$$X_{i,p} = \sum_{c \in C_p} \frac{1}{r_p} \frac{1}{r_{pc}} X_{i,c} \quad \text{mit} \quad r_p = \sum_{c \in C_p} \frac{1}{r_{pc}} \quad (5.21)$$

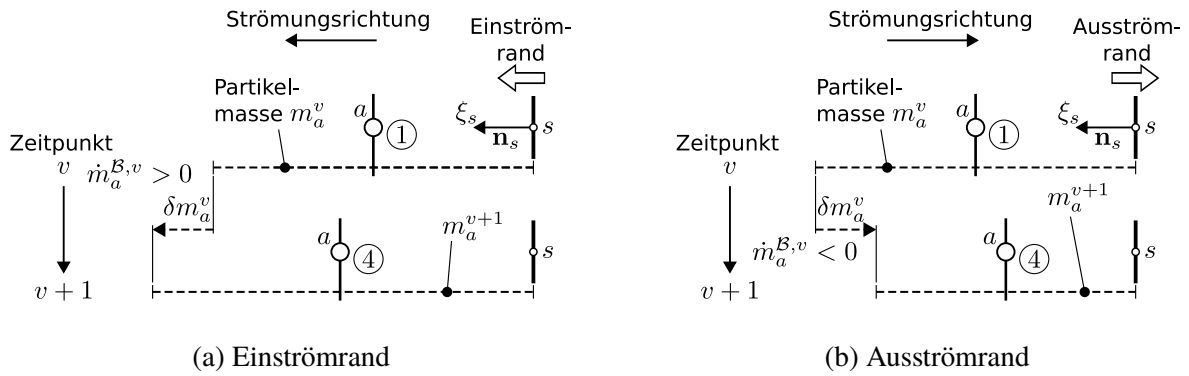
In Gl. 5.20 ist die Größe C_p die Menge der Zellen, die mit dem Eckpunkt p verbunden sind. Die Größe r_{pc} repräsentiert den Abstand zwischen dem Eckpunkt p und der Zelle c (vgl. Abb. 5.5b).

5.4 Massenänderung randnaher Partikel

In Abschnitt 5.1 wurde dargelegt, dass bei der SPH-Methode konvektive Flüsse an offenen und gekoppelten Rändern aufgrund der Anwendung statischer Geisterpartikel nicht durch die Advektion der Partikel durch den Rand realisiert werden können. Es wurde außerdem argumentiert, dass der SPH-ALE-Ansatz zur Realisierung konvektiver Flüsse am Rand nicht geeignet ist, da die Aufprägung eines Massenstroms am Rand aufgrund von Ungenauigkeiten der Partikel-Approximation bei dieser Methode ungenau ist. Während nichtkonvektive Flüsse zwischen Partikeln des Rechengebiets und dem Rand über Interaktionen zwischen diesen Partikeln und Geisterpartikeln realisiert werden, müssen konvektive Flüsse daher auf eine andere Weise umgesetzt werden.

Es wurde daher in Abschnitt 5.1 vorgeschlagen, konvektive Flüsse am Rand durch die Anwendung eines Algorithmus zur Generierung und Entfernung von Partikelmasse im randnahen Bereich zu realisieren. In diesem Zusammenhang wurden in Abschnitt 4.5 zwei mögliche Gleichungssysteme eingeführt (Gl. 4.72 und Gl. 4.73), mittels derer konvektive Flüsse des Partikels a über einen Massenquellterm $\dot{m}_a^{\mathcal{B}}$ in den Erhaltungsgleichungen berücksichtigt werden. Wie in Abschnitt 5.1 erläutert wurde, soll der Massenquellterm $\dot{m}_a^{\mathcal{B}}$ gemäß den Massenströmen, die auf den Strömungszuständen der Randsegmente basieren, angepasst werden. Da die Massenströme am Rand des FV-Rechengebiets gleich den Massenströmen der Randsegmente sind, lässt sich somit die Abweichung vom Massengleichgewicht zwischen Partikeln des SPH-Rechengebiets und Zellen des FV-Rechengebiets sowohl global als auch lokal minimieren. Um diese Abweichung zu jedem Zeitschritt zu minimieren, soll die Massenänderung der Partikel zeitlich kontinuierlich sein. Auf diese Weise lassen sich zudem Störungen der Strömungsvariablen verringern. Mit der Änderung der Partikelmasse geht außerdem die Generierung neuer Partikel und die Entfernung von Partikeln einher, um Partikeldefizite und -überschüsse am Rand zu vermeiden.

In diesem Abschnitt ist folglich das Ziel, einen Algorithmus zur Bestimmung des Quellterms $\dot{m}_a^{\mathcal{B}}$ des Partikels a zu entwickeln, über den die konvektiven Massenflüsse der Randsegmente und der Partikel nach Möglichkeit in ein Gleichgewicht gebracht werden sollen. Die Erläuterung des Algorithmus orientiert sich hauptsächlich an der in Abb. 5.6 dargestellten eindimensionalen Konfiguration. In Abb. 5.6a bzw. Abb. 5.6b wird dabei der Fall eines Einstrom- bzw. Ausstromrands betrachtet. Die Konfiguration besteht in beiden Fällen aus dem Partikel a , das in der Nähe eines Rands angeordnet ist. Da die Konfiguration eindimensional ist, ist der Rand einzig durch das Randsegment s definiert. Im eindimensionalen Fall kann dem Partikel a eine geometrische

Abbildung 5.6: Massenänderung des Partikels a zwischen den Zeitpunkten v und $v+1$

Form zugeordnet werden. Die Position des Partikels a befindet sich im Massenschwerpunkt des Partikelvolumens V_a . Das Partikelvolumen ist in Abb. 5.6 durch die horizontale gestrichelte Linie gekennzeichnet. Da das Partikelvolumen V_a durch eine homogene Fluidichte ρ_a charakterisiert ist, ist die Länge der horizontalen Linie auch proportional zur Partikelmasse m_a . Für eine vereinfachte Darstellung des Algorithmus wird außerdem eine homogene Fluidichte $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ in diesem Rechengebiet angenommen, sodass sich die Masse sowie Massenänderungen des Partikels a in Abb. 5.6 als Längen darstellen lassen können. Im Speziellen wird in diesem Abschnitt eine Massenänderung δm_a^v des Partikels a vom Zeitpunkt v zum Zeitpunkt $v+1$ entwickelt. Diese Massenänderung kann wie folgt in den Quellterm $\dot{m}_a^{\mathcal{B},v}$ zum Zeitschritt v umgerechnet werden:

$$\dot{m}_a^{\mathcal{B},v} = \frac{\delta m_a^v}{\delta t^v} \quad (5.22)$$

In Gl. 5.22 ist die Größe δt^v die Zeitschrittweite des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$. Die Massenänderung ist in Abb. 5.6 dargestellt. An einem Einströmrand (vgl. Abb. 5.6a) nimmt die Masse des Partikels a vom Zeitpunkt v zum Zeitpunkt $v+1$ (in Abb. 5.6 von oben nach unten) zu. Dies entspricht einem positiven Masseninkrement δm_a^v sowie einem positiven Massenstrom $\dot{m}_a^{\mathcal{B},v}$. An einem Ausströmrand (vgl. Abb. 5.6b) nimmt die Masse des Partikels a vom Zeitpunkt v zum Zeitpunkt $v+1$ ab. Dies entspricht einem negativen Masseninkrement δm_a^v sowie einem negativen Massenstrom $\dot{m}_a^{\mathcal{B},v}$. Nach Ausführung des Algorithmus ist das Partikel durch die neue Masse m_a^{v+1} zum Zeitpunkt $v+1$ sowie durch eine neue Position charakterisiert (vgl. Abb. 5.6).

Der Algorithmus ist vorerst nur für ebene Ränder gültig. Eine Erweiterung auf beliebig geformte Ränder bleibt Nachfolgearbeiten vorbehalten. Im Falle einfacher offener Ränder sind ebene Geometrien die Regel. Im Falle gekoppelter Ränder wäre die Anwendbarkeit auf nichtebene Ränder allerdings vorteilhaft, um beliebige Gebiete innerhalb des globalen Rechengebiets als SPH-Rechengebiete auswählen zu können. Der Algorithmus ist für offene und gekoppelte Ränder äquivalent, sodass in diesem Abschnitt nicht zwischen diesen beiden Rändertypen unterschieden werden muss. Der Algorithmus wurde von Werdelmann et al. (2021) entwickelt. Eine Vorgängerversion dieses Ansatzes wurde von Werdelmann et al. (2014) veröffentlicht.

Der Algorithmus unterteilt sich in fünf wesentliche Schritte, die in den folgenden Abschnitten erläutert werden. Ein wesentlicher Schritt des Algorithmus besteht darin, Partikel in Randnähe

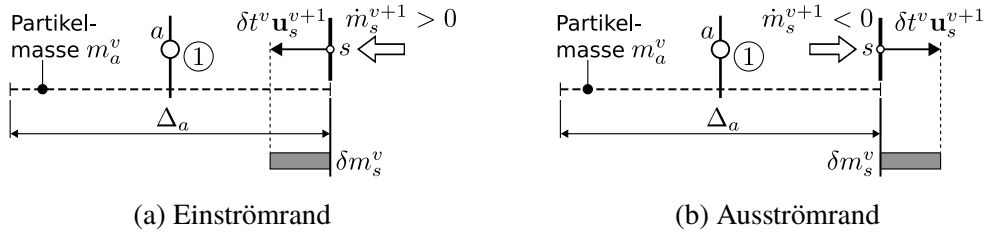


Abbildung 5.7: Vorbereitungsschritt des Algorithmus

zu identifizieren, die für eine Massenänderung aufgrund einer Interaktion mit dem Rand berücksichtigt werden sollen (Identifizierungsschritt). Diese Partikel werden der Partikelmenge $\mathcal{P}$ zugeordnet. Dieser Vorgang wird zum Teil zu Beginn als auch am Ende des Algorithmus ausgeführt. Um diesen Vorgang zu beschreiben, müssen allerdings erst die vier weiteren Bestandteile des Algorithmus (Vorbereitungsschritt, Prädiktor-Schritt, Korrektur-Schritt und Nachbereitungsschritt) erläutert werden. Während der Ausführung des Algorithmus durchläuft das Partikel a vier verschiedene Zustände. Diese werden wie in der eindimensionalen Darstellung gemäß Abb. 5.6 durch die umkreisten Indizes neben dem Partikel a repräsentiert. Der Anfangs- bzw. Endzustand des Partikels a zum Zeitpunkt v bzw. $v + 1$ wird durch den Index ① bzw. ④ repräsentiert (vgl. Abb. 5.6).

5.4.1 Vorbereitungsschritt

Bei dem Vorbereitungsschritt wird für jedes Randsegment s ein Zielwert δm_s^v für die über dieses Randsegment während des Zeitschritts $v \rightarrow v + 1$ zu übertragende Masse berechnet. Der Massenstrom an dem Randsegment s wird basierend auf dem Strömungszustand zum Zeitpunkt $v+1$ definiert, da bei der FV-Methode ein implizites Zeitschrittverfahren angewendet wird und der Massenstrom somit am Ende des Zeitschritts an dem SPH- und dem FV-Rechengebiet identisch sein muss. Über das in Abschnitt 5.2 vorgestellte Verfahren lässt sich der Zustandsvektor $\mathbf{X}_s^{v+1}$ des Randsegments s ermitteln. Aus diesem Zustandsvektor ergeben sich die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_s^{v+1}$ und die Fluidichte ρ_s^{v+1} des Randsegments s zum Zeitpunkt $v + 1$. Der Massenstrom $\dot{m}_s^{v+1}$ zum Zeitpunkt $v + 1$ kann aus diesen Größen wie folgt berechnet werden:

$$\dot{m}_s^{v+1} = \left(\mathbf{u}_s^{v+1} \cdot \mathbf{n}_s \right) A_s \rho_s^{v+1} \quad (5.23)$$

Die Größen $\mathbf{n}_s$ und A_s sind der am Randsegment s in das Rechengebiet zeigende Normaleneinheitsvektor (vgl. Abb. 5.6) sowie die Querschnittsfläche des Randsegments s (vgl. Abschnitt 5.2.1). Auf Basis dieses Massenstroms und der Zeitschrittweite δt^v wird während des Zeitschritts $v \rightarrow v + 1$ das Masseninkrement δm_s^v am Rand übertragen:

$$\delta m_s^v = \dot{m}_s^{v+1} \delta t^v \quad (5.24)$$

Der Sachverhalt ist in Abb. 5.7a für einen Einströmrand und in Abb. 5.7b für einen Ausströmrand dargestellt. Der graue Balken in Abb. 5.7 repräsentiert die für den Algorithmus als Zielwert geltende Massenänderung δm_s^v für das Randsegment s . Ein positiver Massenstrom $\dot{m}_s^{v+1}$ bzw.

ein positives Masseninkrement δm_s^v (grauer Balken *innerhalb* des Rechengebiets in Abb. 5.7a) bedeutet, dass Masse über das Randsegment s in das SPH-Rechengebiet eintritt. In diesem Fall zeigt der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{u}_s^{v+1}$ des Randsegments s in das Rechengebiet hinein. Ein negativer Massenstrom $\dot{m}_s^{v+1}$ bzw. ein negatives Masseninkrement δm_s^v (grauer Balken *außerhalb* des Rechengebiets in Abb. 5.7b) bedeutet entsprechend, dass Masse aus dem Rechengebiet austritt. In diesem Fall zeigt der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{u}_s^{v+1}$ des Randsegments s aus dem Rechengebiet heraus.

Bei dem Vorbereitungsschritt bleibt der Zustand des Partikels a unverändert. In den nachfolgenden Abschnitten wird auf die drei weiteren Schritte des Algorithmus (Prädiktor-Schritt, Korrektor-Schritt und Nachbereitungsschritt) eingegangen, bei denen der Zustand des Partikels a modifiziert wird.

5.4.2 Prädiktor-Schritt

Bei dem Prädiktor-Schritt wird für jedes im Identifizierungsschritt ausgewählte Partikel $a \in \mathcal{P}$ eine Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ evaluiert. Die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ ist als der Teil der Masse des Partikels a definiert, der den Rand während des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ aufgrund der Advektion des Partikels durchdringt. Hierfür ist zum einen die Berechnung der Verschiebung des Partikels während des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ notwendig. Zum anderen sind Modellannahmen für die geometrische Form des Partikels a erforderlich.

Das Prinzip der Modellannahme für die geometrische Form des Partikels a ist in Abb. 5.8a veranschaulicht. Die tatsächliche geometrische Form des Partikels ist unbekannt. Auch wenn die Form bei der Initialisierung der Simulation bekannt ist (z. B. bei Anordnung der Partikel als äquidistantes Gitter), so wird die geometrische Form durch den Impulsaustausch zwischen Partikeln deformiert. Das Partikel kann somit beliebig geformt sein. In Abb. 5.8a ist diese Form des Partikels a als „mögliche Form“ bezeichnet. Für die Modellierung der Interaktion zwischen dem Partikel und dem Rand wird an dieser Stelle vereinfachend die Annahme getroffen, dass die Form des Partikels einem Quader entspricht. Die Stirnfläche dieses Quaders ist parallel zum Rand $\partial\Omega$ ausgerichtet und durch Seitenlängen gleich dem Referenzwert der Partikelabstände r_{ref} charakterisiert. Die Stirnfläche ist demnach durch die Referenzfläche $A_{\text{ref}} = r_{\text{ref}}^2$ gegeben. Über diese Referenzfläche wird der Massenaustausch zwischen dem Partikel a und dem Rand realisiert. Die Länge der Seiten, die in Normalenrichtung zum Rand orientiert sind, ist als Ausdehnung Δ_a des Partikels a definiert. Der Abstand zwischen der Stirnseite und dem Rand wird durch die Größe d_a repräsentiert und wird nachfolgend als der Abstand des Partikels zum Rand bezeichnet. Die beschriebene Form des Partikels a ist in Abb. 5.8a mit einer gestrichelten Kontur dargestellt und als „Modellform“ bezeichnet. Unter den zuletzt getroffenen Annahmen besteht ein direkter Zusammenhang zwischen der Ausdehnung Δ_a und dem Volumen V_a des Partikels a :

$$\Delta_a = \frac{V_a}{A_{\text{ref}}} \quad (5.25)$$

Die Ausdehnung des Partikels ist ebenfalls in Abb. 5.7 für die eindimensionale Konfiguration dargestellt.

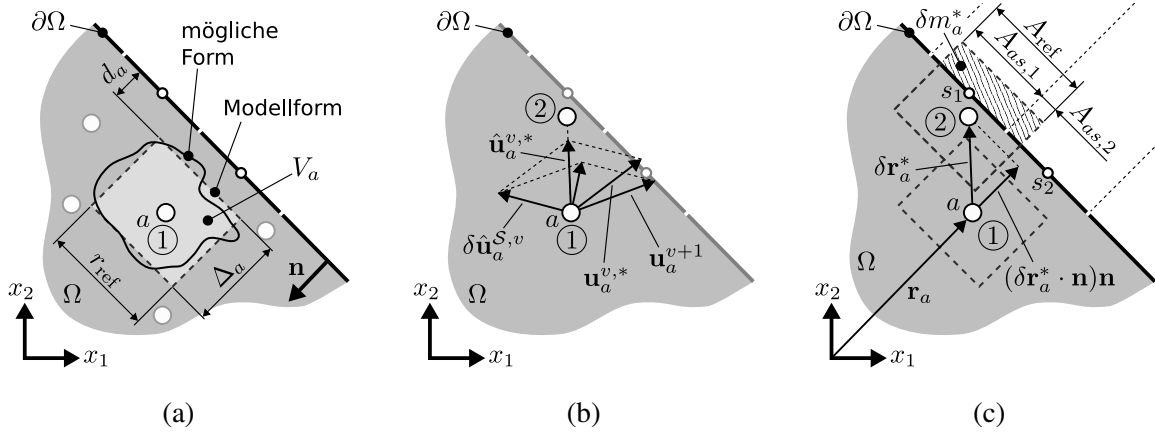


Abbildung 5.8: (a): Modellannahmen für die geometrische Form eines Partikels und die Partikel-Rand-Abstände.

(b): Relevante Geschwindigkeitsvektoren bei dem Prädiktor-Schritt.

(c): Zuteilung der Massenänderung eines Partikels auf überlappende Randsegmente

Im Folgenden wird auf die Berechnung der Verschiebung des Partikels während des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ eingegangen. Die Verschiebungsgeschwindigkeit des Partikels a ergibt sich aus der Summe der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a^{v+1}$ zum Zeitpunkt $v+1$ und der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}_a^{S,v}$, die basierend auf dem Partikelverschiebungsansatz (vgl. Abschnitt 4.4.4) berechnet wird. Wie bereits in Abschnitt 4.5 erwähnt wurde und in den nachfolgenden zwei Abschnitten erläutert wird, wird über den Algorithmus eine zusätzliche Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}_a^{B,v}$ an dem Partikel a aufgeprägt. Demnach ist die Gesamtgeschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}_a^v$ des Partikels a auch von dem Ergebnis dieses Algorithmus abhängig (vgl. Gl. 4.69) und im Prädiktor-Schritt des Algorithmus nicht bekannt. Da in der Impulsgleichung (Gl. 4.80) ein Geschwindigkeitskorrekturterm (erster Term der rechten Seite in Gl. 4.80) verwendet wird, der von der Gesamtgeschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}_a^v$ abhängig ist, lässt sich die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a^{v+1}$ zum Zeitpunkt $v+1$ in diesem Schritt des Algorithmus noch nicht berechnen. Daher wird für die Abschätzung der Partikelverschiebung an dieser Stelle eine intermediäre Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ angewendet:

$$\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} = \mathbf{u}_a^{v,*} + \delta\hat{\mathbf{u}}_a^{S,v} \quad (5.26)$$

In Gl. 5.26 ist die Größe $\mathbf{u}_a^{v,*}$ eine intermediäre Fluidgeschwindigkeit, die sich aus der zeitlichen Integration der Impulsgleichung (Gl. 4.80) unter Vernachlässigung des Geschwindigkeitskorrekturterms (erster Term der rechten Seite in Gl. 4.80) ergibt. Eine mögliche Konstellation der zuvor erläuterten Geschwindigkeitsvektoren ist in Abb. 5.8b veranschaulicht.

Auf Grundlage der intermediären Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ ergibt sich der Verschiebungsvektor $\mathbf{r}_a^{v,*}$, der für die Berechnung der Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ des Partikels a relevant ist:

$$\delta\mathbf{r}_a^{v,*} = \hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \delta t^v + \underbrace{\min \left[\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} \delta t^v + (\Delta_a + d_a), 0 \right]}_{\text{Nur für ausströmende Partikel relevant } (\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} < 0)} \mathbf{n} \quad (5.27)$$

Nur für ausströmende Partikel relevant ($\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} < 0$)

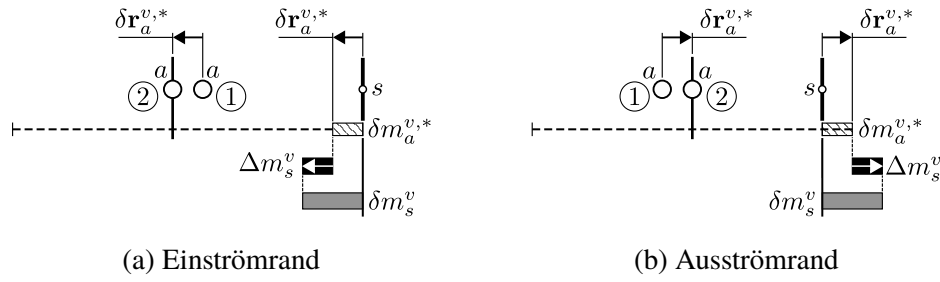


Abbildung 5.9: Prädiktor-Schritt des Algorithmus

In Gl. 5.27 ist die Größe $\mathbf{n}$ der in das Rechengebiet hineinzeigende Normaleneinheitsvektor des Rands (vgl. Abb. 5.8a). Die Bedeutung des zweiten Terms in Gl. 5.27 wird weiter unten in diesem Abschnitt erläutert. Unter Berücksichtigung der Modellannahme für die geometrische Form des Partikels ist die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ basierend auf der Partikelverschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ wie folgt definiert:

$$\delta m_a^{v,*} = \begin{cases} \delta \mathbf{r}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} A_{\text{ref}} \rho_a + d_a A_{\text{ref}} \rho_a & \text{für } a \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.28)$$

In Gl. 5.27 und Gl. 5.28 sind die jeweils zweiten Terme auf der rechten Seite Korrekturterme, die nur für aus dem Rechengebiet austretende Partikel ($\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} < 0$) ungleich null sind. Vorerst wird der Fall eines in das Rechengebiet eintretenden Partikels ($\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} > 0$) betrachtet. Das Partikel a ist in diesem Fall nur Teil der Menge identifizierter Partikel $\mathcal{P}$, wenn der Partikel-Rand-Abstand d_a gleich null ist. Daher ist der zweite Term auf der rechten Seite in Gl. 5.28 für in das Rechengebiet eintretende Partikel stets gleich null. Außerdem ist das zweite Argument des min-Operators in Gl. 5.27 stets größer null, da das Skalarprodukt $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n}$ für in das Rechengebiet eintretende Partikel sowie die Größen Δ_a und d_a stets größer null sind. Für diese Partikel vereinfachen sich die Definitionen der Größen $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ und $\delta m_a^{v,*}$ daher zu den folgenden Gleichungen:

$$\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} > 0 \Rightarrow \begin{cases} \delta \mathbf{r}_a^{v,*} = \hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \delta t^v \\ \delta m_a^{v,*} = \begin{cases} \delta \mathbf{r}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} A_{\text{ref}} \rho_a & \text{für } a \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{cases} \quad (5.29)$$

In Abb. 5.9a ist die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ des Partikels a an einem Einlassrand veranschaulicht. Die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ ist durch einen schraffierten Balken dargestellt. Die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ repräsentiert den Wechsel des Partikels a vom Zustand ① zum Zustand ②. Durch die Advektion des Partikels in das Rechengebiet hinein würde ein Volumendefizit unmittelbar am Rand entstehen. Dieses Defizit muss durch eine positive Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ (schraffierter Balken *innerhalb* des Rechengebiets in Abb. 5.9a) des Partikels a kompensiert werden. Die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ ist proportional zu dem Volumendefizit, das durch die Verschiebung der Modellform des Partikels am Rand hinterlassen werden würde.

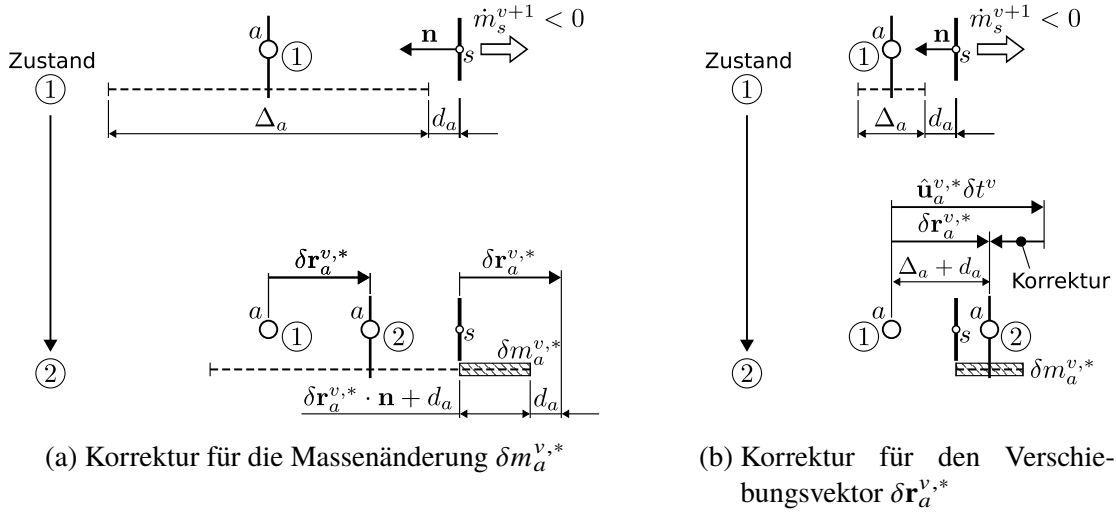


Abbildung 5.10: Korrekturen während des Prädiktor-Schritts

In dem in Abb. 5.9b dargestellten Fall eines aus dem Rechengebiet austretenden Partikels a an einem Ausströmrand steht das Partikel beim Zustand ① bereits mit dem Rand in Berührung ($d_a = 0$ m). Daher kann diese Konfiguration analog zu dem zuvor erläuterten Fall eines in das Rechengebiet eintretenden Partikels betrachtet werden. Durch die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ des Partikels a aus dem Rechengebiet hinaus ($\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} < 0$) würde ein Volumenüberschuss unmittelbar am Rand entstehen. Dieser Überschuss muss durch eine negative Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ (schraffierter Balken *außerhalb* des Rechengebiets in Abb. 5.9b) des Partikels a kompensiert werden.

Im Allgemeinen müssen die Korrekturterme in Gl. 5.27 und Gl. 5.28 für ein aus dem Rechengebiet austretendes Partikel berücksichtigt werden. Der Zweck dieser Terme wird im Folgenden erläutert. Eine Massenänderung eines Partikels wird bei dem in dieser Arbeit verfolgten Ansatz nur realisiert, wenn die Modellform (vgl. Abb. 5.8a) des Partikels den Rand berührt. Dies ist der Fall, wenn der Abstand d_a (vgl. Abb. 5.8a) zwischen dem Partikel und dem Rand in Normalenrichtung zum Rand null beträgt. Wie bereits erwähnt wurde, ist dies für ein in das Rechengebiet eintretendes Partikel stets der Fall, wenn dieses Partikel zur Partikelmenge $\mathcal{P}$ gehört. Bei einem Partikel, das gemäß der intermediären Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ zum Rand hin advektiert wird, kann es vorkommen, dass die Modellform des Partikels erst während dieser Advektion mit dem Rand in Berührung kommt. Dies ist in Abb. 5.10a dargestellt. Beim Zustand ① (oben in Abb. 5.10a) besteht ein Abstand $d_a > 0$ zwischen dem Randsegment und dem Partikel. Würde die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ in diesem Fall proportional zu der Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n}$ sein, würde die Strecke zur Überwindung des Abstands d_a ebenfalls als Massenänderung berücksichtigt werden. Allerdings soll nur eine Massenänderung realisiert werden, während das Partikel den Rand berührt. Durch Addition des zweiten Terms in Gl. 5.28 wird die Massenänderung um die Masse reduziert, die sich aus der Verschiebung zur Überwindung des Abstands d_a ergeben würde. Daher muss erst der vorhandene Abstand d_a zum Rand überwunden werden, bevor der restliche Teil der Strecke, den das Partikel zurücklegt, in eine Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ übertragen werden kann. Das Prinzip ist im unteren Teil in Abb. 5.10a dargestellt.

Die zweite Korrektur, die durch den zweiten Term in Gl. 5.27 repräsentiert wird, betrifft ebenfalls nur aus dem Rechengebiet austretende Partikel und im Speziellen solche Partikel, deren Masse durch die Interaktion mit dem Rand während des Zeitschritts $\nu \rightarrow \nu + 1$ vollständig entfernt wird ($\delta m_a^{\nu,*} = -m_a^\nu$). Diese Situation ist in Abb. 5.10b veranschaulicht. Beim Zustand ① (oben in Abb. 5.10b) besteht zwischen dem Rand und dem Partikel ein Abstand $d_a > 0$ in Normalenrichtung zum Rand. Außerdem ist das Partikel durch die Ausdehnung Δ_a charakterisiert. Die intermediäre Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{\nu,*}$ kann prinzipiell ausreichend groß sein, um eine Verschiebung des Partikels zu bewirken, über die das Partikel vollständig durch den Rand und darüber hinaus advektiert wird. Eine entsprechende Verschiebung in Form des Vektors $\hat{\mathbf{u}}_a^{\nu,*} \delta t^\nu$ ist im unteren Teil in Abb. 5.10b dargestellt. Würde dieser Vektor als Partikelverschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{\nu,*}$ herangezogen werden, würde der Gegenwert der Massenänderung $\delta m_a^{\nu,*}$ gemäß Gl. 5.28 größer sein als die Partikelmasse m_a^ν . Es muss allerdings sichergestellt werden, dass die Masse des Partikels a nach Addition des Masseninkrements $\delta m_a^{\nu,*}$ nicht kleiner als null ist. Daher repräsentiert der zweite Term in Gl. 5.27 eine Limitierung der Komponente des Verschiebungsvektors in Normalenrichtung des Rands. Über diese Limitierung wird verhindert, dass das Partikel a weiter als die Summe aus dem aktuellen Partikel-Rand-Abstand d_a und der Ausdehnung Δ_a in Richtung des Rands verschoben werden kann. Dies ist im unteren Teil in Abb. 5.10b dargestellt. In diesem Fall sind der Absolutwert der Massenänderung $\delta m_a^{\nu,*}$ und die Partikelmasse m_a^ν identisch, und das Partikel haftet außerhalb des Rechengebiets am Rand.

Wie in diesem Abschnitt erläutert wurde, wird im Prädiktor-Schritt für jedes Partikel $a \in \mathcal{P}$ eine Massenänderung $\delta m_a^{\nu,*}$ bestimmt, die sich aus der Interaktion des Partikels mit dem Rand ergibt. Wie eingangs erläutert wurde, ist das Ziel, die Masseninkremente δm_a^ν der Partikel und die Masseninkremente der Randsegmente δm_s^ν in ein Gleichgewicht zu bringen. Die Masseninkremente $\delta m_a^{\nu,*}$ erfüllen dieses Gleichgewicht in der Regel nicht. Daher besteht ein Ungleichgewicht Δm_s^ν zwischen den zuvor erwähnten Masseninkrementen. Im Falle der eindimensionalen Konfiguration mit nur einem Partikel a in Abb. 5.9 repräsentiert die Größe $\Delta m_s^\nu = \delta m_s^\nu - \delta m_a^{\nu,*}$ das Ungleichgewicht zwischen den Masseninkrementen des Randsegments s und dem Partikel a . Das Ungleichgewicht ist durch den schwarzen Balken in Abb. 5.9 repräsentiert. Der Pfeil innerhalb des Balkens zeigt an, ob die Massenbilanz positiv (nach links) oder negativ (nach rechts) ist. Im nächsten Abschnitt, wird der Korrektor-Schritt erläutert, bei dem angestrebt wird, das Ungleichgewicht Δm_s^ν zu kompensieren.

5.4.3 Korrektor-Schritt

Der dritte Schritt des Algorithmus ist der Korrektor-Schritt. Unter anderem aufgrund der Annahmen für die geometrische Form des Partikels (vgl. Abb. 5.8a) kann die im Prädiktor-Schritt vorhergesagte Massenänderung $\delta m_a^{\nu,*}$ ungenau sein. Allerdings wird angestrebt, dass die Summe der Massenänderungen δm_s^ν aller Randsegmente s gleich der Summe der Massenänderungen δm_a^ν aller identifizierten Partikel ist:

$$\sum_s \delta m_s^\nu = \sum_a \delta m_a^\nu \quad (5.30)$$

Diese Identität gilt in der Regel nicht für die im Prädiktor-Schritt vorhergesagten Masseninkremente $\delta m_a^{v,*}$:

$$\sum_s \delta m_s^v \neq \sum_a \delta m_a^{v,*} \quad (5.31)$$

Um Gl. 5.30 zu erfüllen, wird daher ein weiteres Masseninkrement $\delta m_a^{v,**}$ des Partikels a eingeführt, das sich aus der Summe bestimmter Beiträge $\delta m_{as}^{v,**}$ der Randsegmente s ergibt:

$$\delta m_a^{v,**} = \sum_s \delta m_{as}^{v,**} \quad (5.32)$$

Die gesamte Massenänderung δm_a^v des Partikels a , die durch die Interaktion mit dem offenen Rand auftritt, ist als Summe der beiden Inkremente $\delta m_a^{v,*}$ und $\delta m_a^{v,**}$ definiert:

$$\delta m_a^v = \delta m_a^{v,*} + \delta m_a^{v,**} \quad (5.33)$$

Das Ziel ist, die Beiträge $\delta m_{as}^{v,**}$ in einer Weise zu bestimmen, sodass die Bilanz der Massenänderungen an den Randsegmenten und Partikeln nicht nur global gemäß Gl. 5.30, sondern auch möglichst lokal erfüllt ist. Dazu werden Wichtungsfaktoren b_{as} bestimmt, die den Einfluss des Randsegments s auf das Partikel a definieren. Um die Erhaltung der Masse möglichst auch lokal zu gewährleisten, wird der Wert des Wichtungsfaktors b_{as} über die Schnittmenge zwischen dem Volumen der Modellform des Partikels a (vgl. Abb. 5.8a) und dem Flächenelement des Randsegments s bestimmt. In Abb. 5.8c ist dies für die Schnittflächen $A_{as,1}$ und $A_{as,2}$ des Partikels a mit den Randsegmenten s_1 und s_2 dargestellt. Die Summe der einzelnen Schnittflächen A_{as} des Partikels a entspricht der Referenzfläche A_{ref} . Der Wichtungsfaktor b_{as} ist damit in Abhängigkeit von der Schnittfläche A_{as} wie folgt definiert:

$$b_{as} = \frac{A_{as}}{A_{\text{ref}}} \quad (5.34)$$

Für die Wichtungsfaktoren b_{as} des Partikels a gilt außerdem:

$$\sum_s b_{as} = \frac{1}{A_{\text{ref}}} \sum_s A_{as} = 1 \quad (5.35)$$

Es wird nun für jedes Randsegment s die bereits im letzten Abschnitt erwähnte lokale Massenbilanz Δm_s^v zwischen dem Zielwert δm_s^v und den mit den Faktoren b_{as} gewichteten Massenänderungen $\delta m_a^{v,*}$ der Partikel a aufgestellt. Ein anfängliches Ungleichgewicht Δm_s^v soll durch die zusätzlichen Masseninkremente $\delta m_{as}^{v,**}$ nach Möglichkeit kompensiert werden:

$$\Delta m_s^v = \delta m_s^v - \sum_a b_{as} \delta m_a^{v,*} = \sum_a \delta m_{as}^{v,**} \quad (5.36)$$

Bei einer an den Randsegmenten s vorliegenden lokalen Massenerhaltung ist eine globale Massenerhaltung am Rand unmittelbar gegeben. Dies lässt sich durch Einsetzen von Gl. 5.36

für δm_s^v und Gl. 5.33 für δm_a^v in Gl. 5.30 zeigen:

$$\sum_s \left(\sum_a b_{as} \delta m_a^{v,*} + \sum_a \delta m_{as}^{v,**} \right) = \sum_a \delta m_a^{v,*} + \sum_a \delta m_a^{v,**} \quad (5.37)$$

Durch Vertauschen der Summenzeichen der Doppelsummen über s und a auf der linken Seite in Gl. 5.37 und unter Berücksichtigung von Gl. 5.35 und Gl. 5.32 wird ersichtlich, dass beide Seiten in Gl. 5.37 identisch sind und Gl. 5.30 damit erfüllt ist. Die Beiträge $\delta m_{as}^{v,**}$ werden über die folgende Gleichung definiert:

$$\delta m_{as}^{v,**} = \begin{cases} \max [\Delta m_s^v, - (m_a^v + \delta m_a^{v,*})] & \text{für } b_{as} \neq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.38)$$

Um eine lokale Massenerhaltung am Randsegment s zu erreichen, wird das Partikel a zur Kompensation des Massenungleichgewichts Δm_s^v des Randsegments s in Gl. 5.38 nur berücksichtigt, wenn der Wichtungsfaktor b_{as} ungleich null ist. Für die Berechnung des Masseninkrements $\delta m_{as}^{v,**}$ wird der Zustand ② des Partikels herangezogen (vgl. Abb. 5.8c). Dabei wird zuerst das Partikel mit dem geringsten Abstand $(\mathbf{r}_a^v + \delta \mathbf{r}_a^{v,*} - \mathbf{r}_s) \cdot \mathbf{n}$ zum Rand für eine zusätzliche Massenänderung $\delta m_{as}^{v,**}$ gemäß Gl. 5.38 berücksichtigt. Im Falle einer positiven Massenbilanz Δm_s^v ist $\delta m_{as}^{v,**}$ gemäß Gl. 5.38 stets gleich der Massenbilanz Δm_s^v . Durch das zum Randsegment nächstgelegene Partikel wird in diesem Fall die komplette Kompensation des anfänglichen Ungleichgewichts Δm_s^v erreicht. Im Falle einer negativen Massenbilanz Δm_s^v kann das zweite Argument des max-Operators entscheidend werden. Über das zweite Argument wird sichergestellt, dass die Partikelmasse nicht negativ werden kann. Ist das Ungleichgewicht Δm_s^v kleiner als der Gegenwert der Partikelmasse ($\Delta m_s^v < -(m_a^v + \delta m_a^{v,*})$), kann das anfängliche Ungleichgewicht Δm_s^v durch das identifizierte Partikel nicht vollständig kompensiert werden. Daher wird das Partikel mit dem nächstgrößeren Partikel-Rand-Abstand ausgewählt, um einen weiteren Beitrag $\delta m_{as}^{v,**}$ gemäß Gl. 5.38 bereitzustellen. Nach jeder Evaluierung von Gl. 5.38 wird das Ungleichgewicht Δm_s^v durch Subtraktion des zuletzt definierten Beitrags $\delta m_{as}^{v,**}$ korrigiert. Dieser Vorgang wird so oft wiederholt, bis das korrigierte Ungleichgewicht Δm_s^v gleich null ist. In diesem Fall ist gemäß Gl. 5.36 die lokale und globale Massenbilanz erfüllt, wobei Δm_s^v in Gl. 5.36 dem anfänglichen Ungleichgewicht entspricht.

Im Gegensatz zu dem Prädiktor-Schritt, bei dem die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ durch die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ realisiert wird, ergibt sich bei dem Korrektor-Schritt aus der Massenänderung $\delta m_{as}^{v,**}$ eine zusätzliche Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,**}$:

$$\delta \mathbf{r}_a^{v,**} = \mathbf{n} \left(\frac{\delta m_a^{v,**}}{\rho_a A_{\text{ref}}} \right) \quad (5.39)$$

Der Klammerterm in Gl. 5.39 repräsentiert die Änderung der Ausdehnung Δ_a des Partikels a in Normalenrichtung zum Rand, die durch die Massenänderung $\delta m_a^{v,**}$ hervorgerufen wird. Durch die in diesem Abschnitt erläuterten Prozessschritte wird der Wechsel des Partikels vom Zustand ② zum Zustand ③ bewirkt. Dieser Zustandswechsel ist in Abb. 5.11 für den Fall der bereits

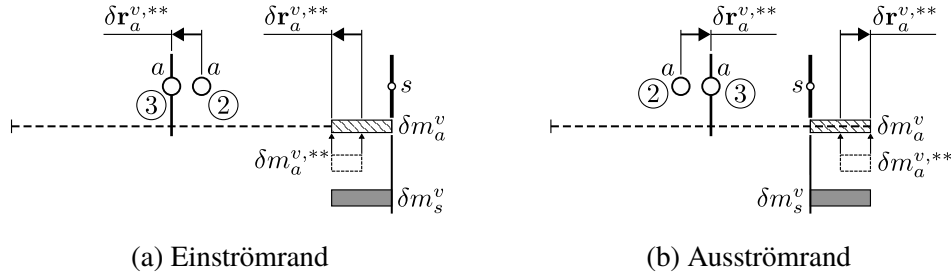


Abbildung 5.11: Korrektur-Schritt des Algorithmus

eingeführten eindimensionalen Konfiguration dargestellt. Bei der betrachteten Konfiguration ist nur ein Partikel, das Partikel a , verfügbar, um eine Kompensation des Massenungleichgewichts Δm_s^v zu erreichen. Sowohl im Falle des Einströmrandes (vgl. Abb. 5.11a) als auch im Falle des Ausströmrandes (vgl. Abb. 5.11b) wird das Ungleichgewicht vollständig durch die zusätzliche Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ kompensiert. Die gesamte Massenänderung δm_a^v des Partikels ergibt sich durch Addition des Inkrements $\delta m_a^{v,*}$ zu der bereits während des Prädiktor-Schritts (vgl. Abb. 5.9) realisierten Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$. Nach der Ausführung des Korrektur-Schritts sind die Massenänderung δm_a^v des Partikels a und die Massenänderung δm_s^v des Randsegments s identisch (vgl. Abb. 5.11). Die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ des Partikels ist ebenfalls in Abb. 5.11 veranschaulicht. Im nächsten Abschnitt wird der Nachbereitungsschritt erläutert.

5.4.4 Nachbereitungsschritt

Bei dem Nachbereitungsschritt wird die in den letzten beiden Schritten evaluierte Massenänderung δm_a^v des Partikels a zur Berechnung der Masse des Partikels zum Zeitpunkt $v + 1$ angewendet:

$$m_a^{v+1} = m_a^v + \delta m_a^v \quad (5.40)$$

In Abb. 5.12 ist der entsprechende Wechsel des Partikels a vom Zustand ③ zum Zustand ④ veranschaulicht. Im Falle des Einströmrandes (vgl. Abb. 5.12a) wird die Massenänderung δm_a^v in eine Vergrößerung der Partikelmasse umgesetzt. Dies wird durch die Verlängerung der horizontalen gestrichelten Linie im Vergleich zu Abb. 5.11a repräsentiert. Im Falle des Ausströmrandes (vgl. Abb. 5.12b) wird die Massenänderung δm_a^v in eine Verkleinerung der Partikelmasse umgesetzt. Dies wird durch die Verkürzung der horizontalen gestrichelten Linie im Vergleich zu Abb. 5.11b repräsentiert. In beiden Fällen haftet die Modellform des Partikels nach der Massenänderung am Rand.

Durch die Massenänderung des Partikels a ist die Position des Partikels nicht mehr gleich der Position des Massenschwerpunkts des Modellvolumens des Partikels a . Daher wird eine dritte Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,***}$ definiert, um das Partikel an die Position des Massenschwerpunkts zu verschieben:

$$\delta \mathbf{r}_a^{v,***} = -\frac{\mathbf{n}}{2} \left(\frac{\delta m_a^v}{\rho_a A_{\text{ref}}} \right) \quad (5.41)$$

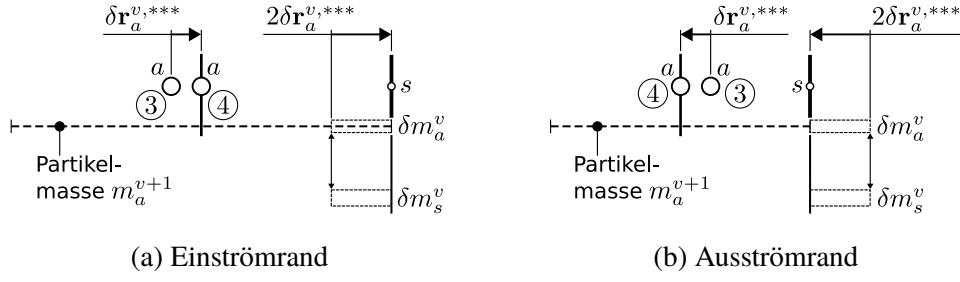


Abbildung 5.12: Nachbereitungsschritt des Algorithmus

Der Klammerterm in Gl. 5.41 repräsentiert die Änderung der Ausdehnung Δ_a des Partikels a in Normalenrichtung zum Rand, die durch die Massenänderung δm_a^v hervorgerufen wird. Die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,***}$ des Partikels ist ebenfalls in Abb. 5.12 veranschaulicht.

Die beiden Verschiebungsvektoren $\delta \mathbf{r}_a^{v,**}$ und $\delta \mathbf{r}_a^{v,***}$ bewirken Partikelverschiebungen, die einer Abweichung von der Verschiebung gemäß der physikalischen Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_a$ entsprechen. Daher müssen diese Verschiebungen in den Korrekturtermen der Erhaltungsgleichungen berücksichtigt werden. Die beiden Verschiebungen werden hierfür zu einer zusätzlichen Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^{\mathcal{B},v}$ zusammengefasst:

$$\delta \hat{\mathbf{u}}_a^{\mathcal{B},v} = \frac{\delta \mathbf{r}_a^{v,**} + \delta \mathbf{r}_a^{v,***}}{\delta t^v} \quad (5.42)$$

Die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^{\mathcal{B},v}$ ist neben der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^{\mathcal{S},v}$ auf Basis des Partikelverschiebungsansatzes ein Bestandteil der Gesamtgeschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^v$ (vgl. Gl. 4.69).

5.4.5 Beschreibung grundlegender Partikel-Rand-Interaktionen

Im Folgenden werden die zuvor erläuterten Schritte an verschiedenen Konfigurationen des Partikels a und des Rands $\partial\Omega$ erklärt. Es wird wieder der Fall nur einer räumlichen Dimension und damit nur eines Randsegments s des Rands $\partial\Omega$ betrachtet. Außerdem wird vorerst der Identifizierungsschritt ignoriert und vorausgesetzt, dass die Partikelmenge $\mathcal{P}$ genau ein Partikel, das Partikel a , enthält.

Dieses Szenario ist in Abb. 5.13 für den Fall eines positiven Massenstroms an dem Randsegment s veranschaulicht (Einströmrand). Die gewählte Darstellung orientiert sich an der aus den letzten Abschnitten bekannten Darstellung. Von links nach rechts sind in Abb. 5.13 die verschiedenen Schritte des Algorithmus dargestellt. Der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{u}_s^{v+1}$ des Randsegments zeigt in das Rechengebiet (Einströmrand). Der graue Balken repräsentiert den Zielwert der Massenänderung δm_s^v an dem Randsegment s , der im Vorbereitungsschritt definiert wird. Bei der Konfiguration in Abb. 5.13a ist das Partikel a durch eine Geschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ charakterisiert, über die das Partikel vom Rand weg advektiert wird und die betragsmäßig kleiner ist als die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_s^{v+1}$ am Randsegment. Im Prädiktor-Schritt wird daher eine Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ kleiner als δm_s^v bestimmt (schraffierter Balken). Das Partikel wird basierend auf dem

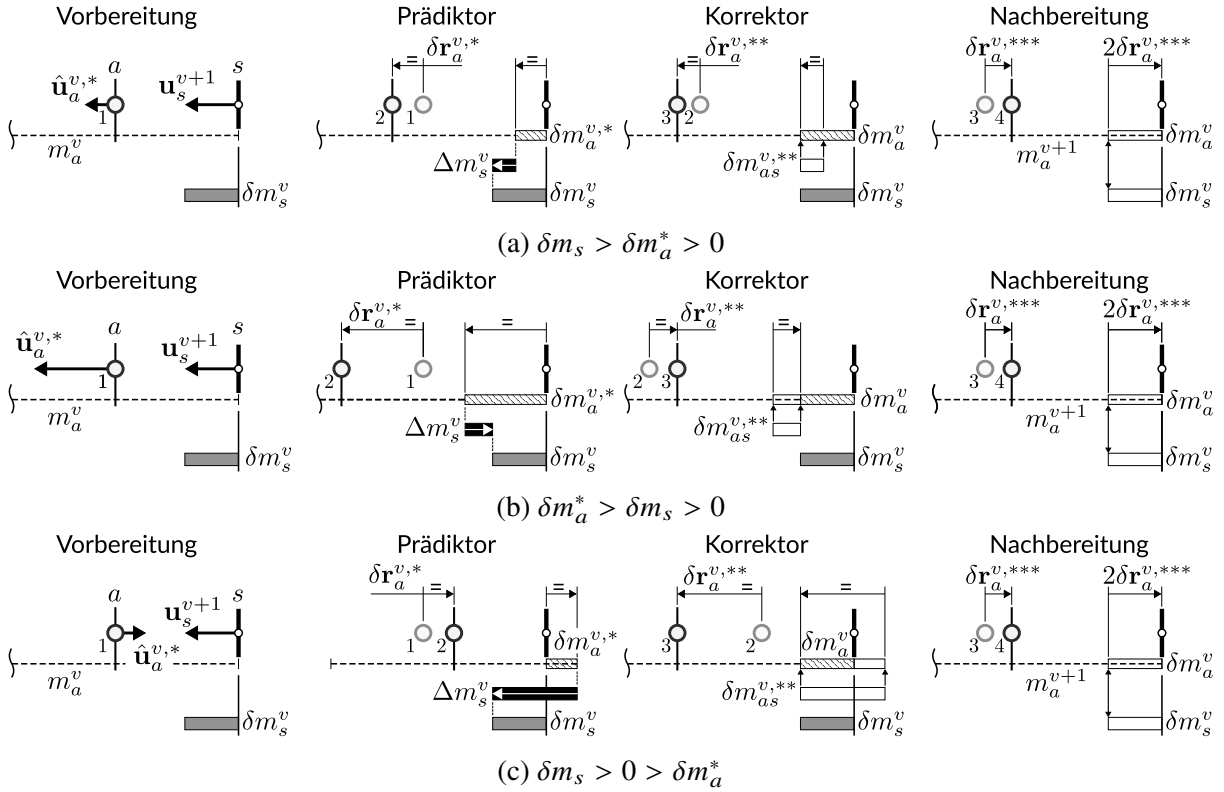


Abbildung 5.13: Ablauf des Algorithmus für verschiedene mögliche Szenarien an einem Einströmrand und für den Fall eines einzigen mit dem Rand interagierenden Partikels

Verschiebungsvektor $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ vom Rand weg advektiert. Die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ resultiert aus dem Volumendefizit, das durch die Advektion des Partikels gemäß dem Verschiebungsvektor $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ entstehen würde. Aufgrund der unterschiedlichen Geschwindigkeiten an dem Partikel und dem Randsegment resultiert eine Massenbilanz Δm_s^v (schwarzer Balken) ungleich null. Über die Richtung des Pfeils innerhalb des schwarzen Balkens wird angegeben, ob die Massenbilanz positiv (nach links) oder negativ (nach rechts) ist. Bei der dargelegten Konfiguration ist die Massenbilanz daher positiv. Im Korrektor-Schritt wird das Massenungleichgewicht Δm_s^v vollständig durch die Massenänderung $\delta m_a^{v,**}$ kompensiert. Entsprechend ergibt sich die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,**}$, über die das Partikel weiter vom Rand weg advektiert wird. Nach dem Korrektor-Schritt sind die Massenänderung δm_a^v des Partikels a und die Massenänderung δm_s^v des Randsegments s identisch. Im Nachbereitungsschritt wird die Massenänderung δm_a^v zu der Partikelmasse addiert, woraus die Partikelmasse m_a^{v+1} am Ende des Zeitschritts resultiert. Über die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,***}$ wird das Partikel a an die Position seines Massenschwerpunkts advektiert.

Der Fall in Abb. 5.13b unterscheidet sich zu dem zuvor diskutierten Fall durch eine Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$, die betragsmäßig größer ist als die Geschwindigkeit $\mathbf{u}_s^{v+1}$ am Rand. Dadurch ist die im Prädiktor-Schritt berechnete Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ größer als der Zielwert δm_s^v und die Massenbilanz Δm_s^v negativ. Im Korrektor-Schritt wird dieses negative Massenungleichgewicht erneut vollständig von der Massenänderung $\delta m_a^{v,**}$ kompensiert. Die Gesamt-

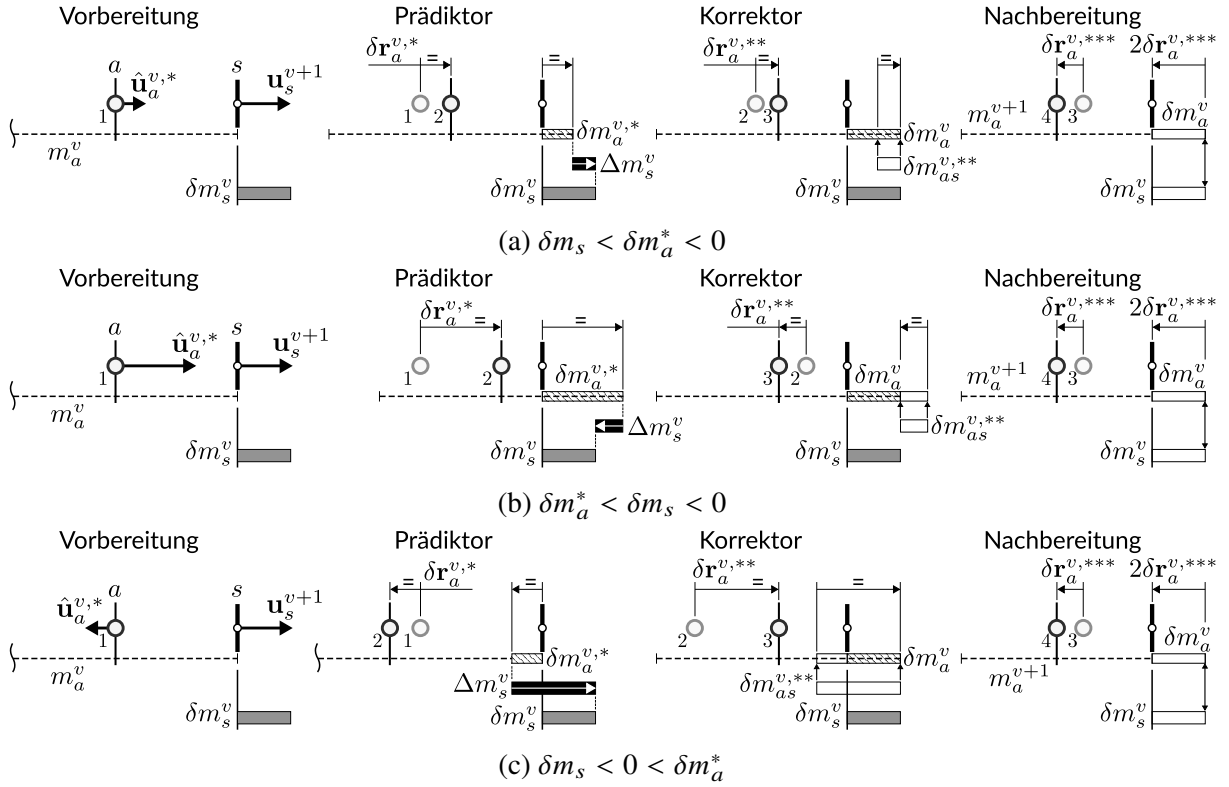


Abbildung 5.14: Ablauf des Algorithmus für verschiedene mögliche Szenarien an einem Ausströmrand und für den Fall eines einzigen mit dem Rand interagierenden Partikels

massenänderung δm_a^v des Partikels a ist damit kleiner als die im Prädiktor-Schritt bestimmte Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$.

Der Fall in Abb. 5.13c repräsentiert den Extremzustand, bei dem der Rand durch einen Einstromzustand definiert ist und das Partikel a basierend auf der Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ aus dem Rechengebiet heraus advektiert wird. Die Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ des Partikels a im Prädiktor-Schritt ist somit negativ. Diese negative Massenänderung resultiert aus dem Volumenüberschuss, der durch die Advektion des Partikels gemäß dem Verschiebungsvektor $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ entstehen würde. Das Massenungleichgewicht Δm_s^v ist positiv und gleich der Summe aus den Beträgen der Massenzinkremente δm_s^v und $\delta m_a^{v,*}$. Dieses Massenungleichgewicht wird im Korrektor-Schritt dadurch kompensiert, dass über die Massenänderung $\delta m_a^{v,**}$ die gesamte negative Massenänderung $\delta m_a^{v,*}$ des Partikels aufgehoben und dem Partikel die positive Massenänderung δm_s^v hinzugefügt wird. Entsprechend groß ist in diesem Fall die Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,**}$.

In Abb. 5.14 sind die zu Abb. 5.13 analogen Szenarien für den Fall eines negativen Massenstroms an dem Randsegment s dargestellt (Ausströmrand). Bei der Konfiguration in Abb. 5.14a ist die Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a^{v,*}$ betragsmäßig kleiner als die Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_s^{v+1}$ des Randsegments. Daraus resultiert ein negatives Massenungleichgewicht Δm_s^v . Um das Massenungleichgewicht zu kompensieren, wird eine weitere Advektion des Partikels in Richtung des Randsegments, die sich aus dem Verschiebungsvektor $\delta \mathbf{r}_a^{v,**}$ ergibt, aufgeprägt. Die den Rand überlappende Partikelmasse δm_a^v wird im Nachbereitungsschritt entfernt. Hieraus resultiert die

Partikelmasse m_a^{v+1} . Das Partikel muss weiter vom Rand weg advektiert werden, damit die Position des Partikels gleich der Position des Massenschwerpunkts ist. Bei den Konfigurationen in Abb. 5.14b bzw. Abb. 5.14c sind die Szenarien einer im Vergleich zur Fluidgeschwindigkeit am Rand betragsmäßig größeren Partikelgeschwindigkeit bzw. entgegengesetzter Geschwindigkeitsvektoren dargestellt.

5.4.6 Sonderfälle der Partikel-Rand-Interaktion und Identifizierungsschritt

Die in Abb. 5.13 und Abb. 5.14 dargestellten Szenarien beschränken sich auf einfache Fälle, bei denen nur ein Partikel mit dem Randsegment interagiert und dieses Partikel sowohl vor als auch nach der Ausführung der bereits dargelegten Schritte des Algorithmus mit dem Rand in Berührung steht. Diese Bedingungen sind nicht zwingend gegeben. Außerdem wurde bisher der Identifizierungsschritt noch nicht erläutert. Aus diesem Schritt ergibt sich die Menge $\mathcal{P}$ der mit dem Rand interagierenden Partikel. Die Identifizierung der Partikel ist eng mit einigen Sonderfällen der Partikel-Rand-Interaktion verknüpft. Daher werden diese beiden Prozesse in diesem Abschnitt zusammen erläutert.

Im Vergleich zu den bereits eingeführten Konfigurationen wird der Ausschnitt des Rechengebiets in Abb. 5.15 für den Fall eines Ausströmrandes auf zwei Partikel a_1 und a_2 erweitert. In Abb. 5.15 sind drei verschiedene Szenarien dargestellt. Allen Szenarien ist gemein, dass das zum Rand nächstgelegene Partikel a_1 bereits vor Beginn des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ mit dem Rand in Berührung steht ($d_{a,1} = 0$ m). Damit ist dieses Partikel bereits Teil der Partikelmenge $\mathcal{P}$. Das vom Rand weiter entfernt positionierte Partikel a_2 hingegen steht zu Beginn des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ nicht mit dem Rand in Berührung ($d_{a,2} > 0$) und gehört daher zu Beginn des Zeitschritts nicht zu der Partikelmenge $\mathcal{P}$. Dies wird in Abb. 5.15, sowie in den nachfolgenden Abbildungen, durch eine gestrichelte Kontur des Kreises, der das Partikel repräsentiert, gekennzeichnet. Bei dem Szenario in Abb. 5.15a wird die Masse des Partikels a_1 im Prädiktor-Schritt vollständig durch den Rand advektiert ($\delta m_{a,1}^{v,*} = -m_{a,1}^v$). Da das Masseninkrement δm_s^v des Rands betragsmäßig größer ist als die Partikelmasse $m_{a,1}^v$, ergibt sich ein negatives Massenungleichgewicht Δm_s^v . Dieses lässt sich im ersten Korrektor-Schritt zu keinem Anteil kompensieren ($\delta m_{a,1}^{v,**} = 0$ kg). Bei dem Szenario in Abb. 5.15b hingegen wird nicht die gesamte Partikelmasse durch den Rand advektiert ($\delta m_{a,1}^{v,*} > -m_{a,1}^v$). Daher kann im ersten Korrektor-Schritt ein gewisser Anteil des negativen Massenungleichgewichts Δm_s^v kompensiert werden ($\delta m_{a,1}^{v,**} < 0$). Sowohl bei dem Szenario in Abb. 5.15a als auch bei dem in Abb. 5.15b bleibt allerdings nach dem ersten Korrektor-Schritt ein negatives Massenungleichgewicht bestehen. Da das Partikel a_1 bei diesen beiden Szenarien das einzige Partikel der Partikelmenge $\mathcal{P}$ repräsentiert, gibt es keine Möglichkeit eines zweiten Korrektor-Schritts. Damit bleibt nach Ausführung des Algorithmus ein negatives Massenungleichgewicht Δm_s^v bestehen. Dieses Szenario stellt eines von zwei möglichen Szenarien dar, bei denen die Massenänderungen des Rands und der Partikel nicht in ein Gleichgewicht gebracht werden können. Im Regelfall ist allerdings mehr als ein Partikel Teil der Menge $\mathcal{P}$. Falls doch nur ein Partikel in der Partikelmenge $\mathcal{P}$ enthalten ist, kann dieser Zustand bei Vorliegen einer homogenen räumlichen Anordnung der Partikel nur für wenige Zeitschritte bestehen.

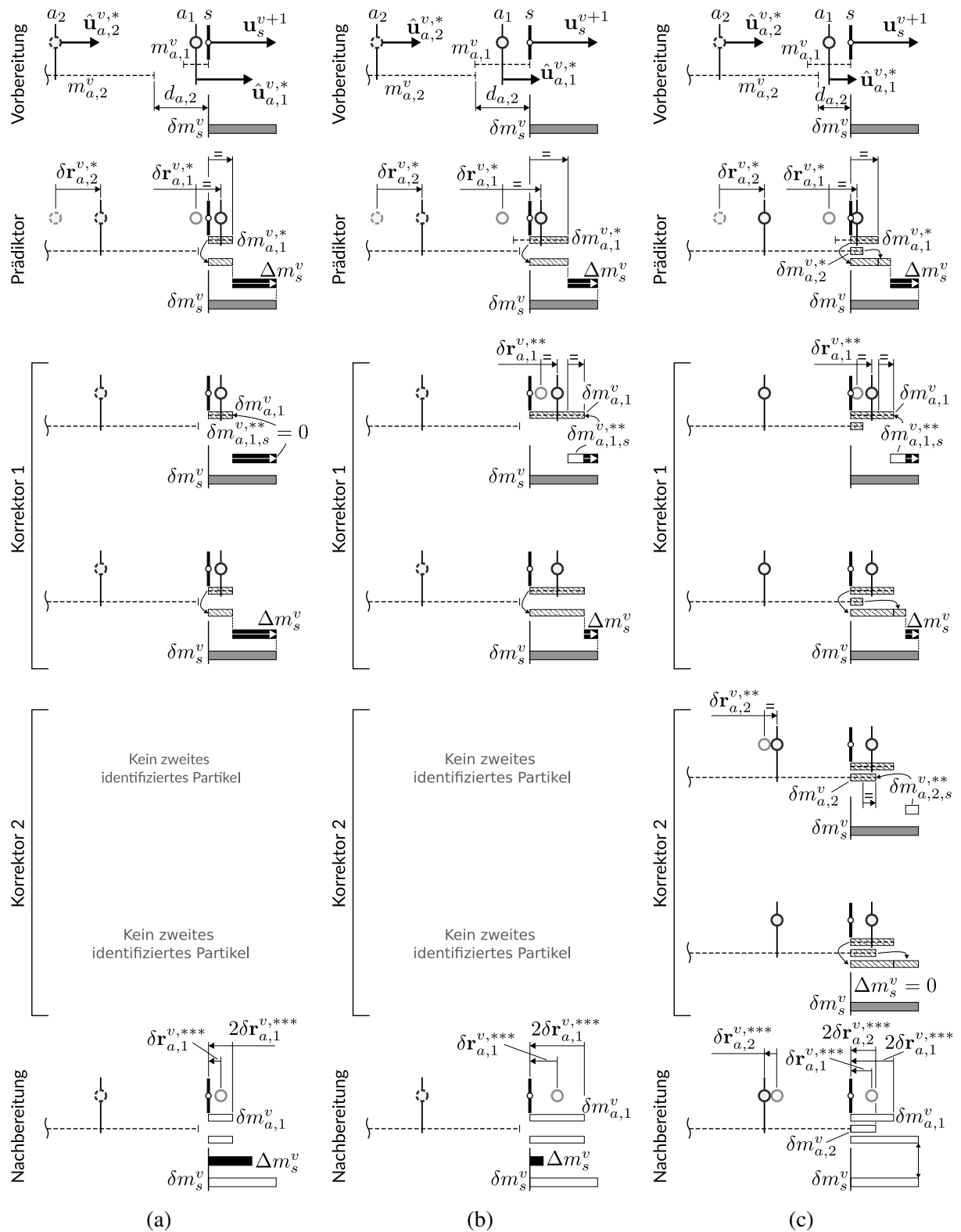


Abbildung 5.15: Ablauf des Algorithmus für verschiedene mögliche Zustände an einem Ausströmrand und für den Fall von zwei mit dem Rand interagierenden Partikeln

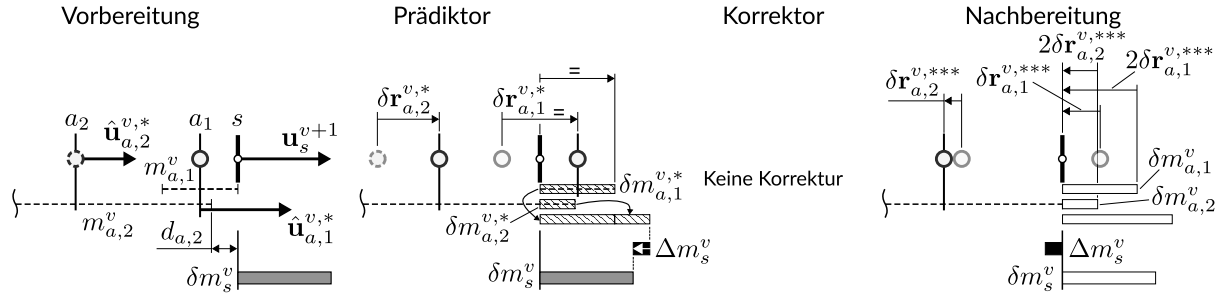


Abbildung 5.16: Ablauf des Algorithmus für den Sonderfall eines Überschusses an austretender Partikelmasse

Das Szenario in Abb. 5.15c stellt den Fall dar, bei dem mehr als ein Partikel für eine Massenänderung identifiziert wird. Zu Beginn des Zeitschritts ist nur das Partikel a_1 Teil der Partikelmenge $\mathcal{P}$. Im Prädiktor-Schritt und im ersten Korrektor-Schritt ist ersichtlich, dass die Masse des Partikels a_1 vollständig durch den Rand advektiert wird. Die Massenänderung $\delta m_{a,1}^v$ des Partikels a_1 wäre erneut nicht ausreichend, um die Massenänderung des Randsegments zu kompensieren. Jedoch unterscheidet sich der Fall in Abb. 5.15c von den zuvor erläuterten Szenarien darin, dass ein weiteres Partikel a_2 für eine Massenänderung berücksichtigt wird. An diesem Beispiel lässt sich nachvollziehen, wie ein Partikel (hier das Partikel a_2), das zu Beginn des Zeitschritts noch nicht Teil der Partikelmenge $\mathcal{P}$ ist, während des Zeitschritts in die Menge $\mathcal{P}$ aufgenommen wird. Das Kriterium für diese Aufnahme ist, dass ein Partikel a den Rand nach der Verschiebung gemäß dem Vektor $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ überlappt. Unter Berücksichtigung dieses Kriteriums lautet die Definition der Menge $\mathcal{P}$ wie folgt:

$$\mathcal{P} = \{a \mid a \in \mathcal{P} \vee \delta \mathbf{r}_a^{v,*} \cdot \mathbf{n} + d_a < 0\} \quad (5.43)$$

Über das erste Argument der Bedingung in Gl. 5.43 wird berücksichtigt, dass Partikel, die im letzten Zeitschritt in der Menge $\mathcal{P}$ enthalten waren, auch in diesem Zeitschritt berücksichtigt werden. Diese Bedingung ist, wie weiter unten noch erläutert wird, für einen Einströmrand erforderlich. Bei dem Szenario in Abb. 5.15c wird das zweite Argument der Bedingung in Gl. 5.43 sowohl für das Partikel a_1 als auch für das Partikel a_2 erfüllt. Da nun zwei Partikel Teil der Menge $\mathcal{P}$ sind, wird im Prädiktor-Schritt die Summe beider Masseninkremente $\delta m_{a,1}^{v,*}$ und $\delta m_{a,2}^{v,*}$ gebildet, um das Massenungleichgewicht Δm_s^v zu bestimmen. Wie bereits erläutert wurde, wird im Korrektor-Schritt für eine weitere Massenänderung $\delta m_a^{v,**}$ zuerst das Partikel berücksichtigt, das nach der Verschiebung $\delta \mathbf{r}_a^{v,*}$ den geringsten Partikel-Rand-Abstand $(\mathbf{r}_a^v + \delta \mathbf{r}_a^{v,*} - \mathbf{r}_s) \cdot \mathbf{n}$ aufweist. In dem dargestellten Fall wird demnach zuerst versucht, das Massenungleichgewicht über das Partikel a_1 auszugleichen. Da dies nicht vollständig umsetzbar ist, wird im zweiten Korrektor-Schritt das Partikel a_2 für eine weitere Massenänderung $\delta m_{a,2}^{v,**}$ herangezogen. Dadurch kann das Massenungleichgewicht Δm_s^v vollkommen ausgeglichen werden. Allen Szenarien in Abb. 5.15 ist gemein, dass die Masse des Partikels a_1 zu $m_{a,1}^{v+1} = 0$ kg reduziert wird. In diesem Fall wird das Partikel a_1 am Ende des Zeitschritts aus dem Rechengebiet entfernt.

Der zweite Fall, bei dem ein Massenungleichgewicht Δm_s^v am Ende des Zeitschritts bestehen bleibt, ist in Abb. 5.16 veranschaulicht. Dieser Fall betrifft ebenfalls nur Ausströmrande

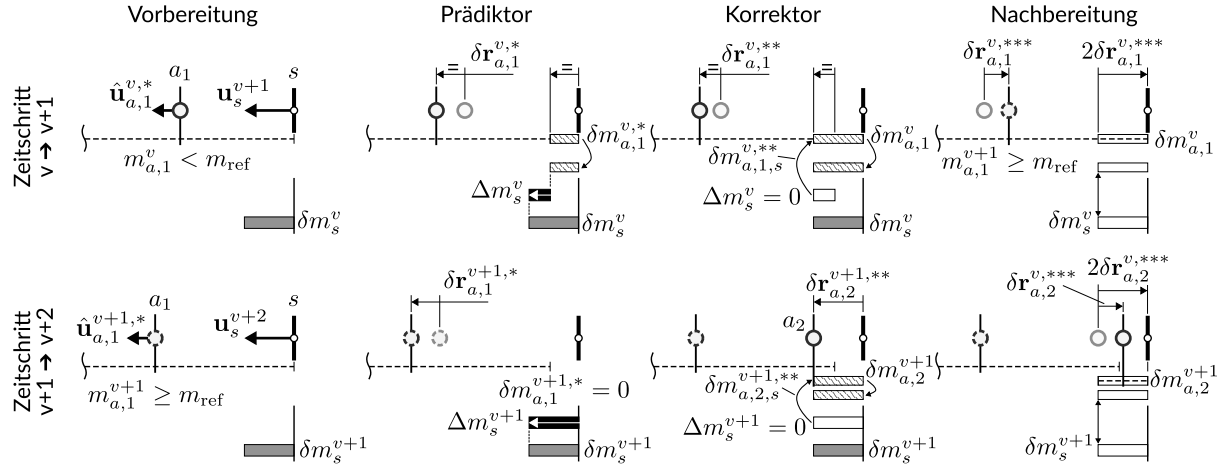


Abbildung 5.17: Ablauf des Algorithmus für den Fall der Generierung eines neuen Partikels

($\delta m_s^v < 0$). Die dargestellte Konfiguration ist dadurch charakterisiert, dass die Summe der Massenänderungen $\delta m_{a,1}^{v,*}$ und $\delta m_{a,2}^{v,*}$ im Prädiktor-Schritt negativ aber betragsmäßig größer als die Massenänderung δm_s^v des Randsegments ist. Dadurch entsteht ein positives Massenungleichgewicht Δm_s^v . Für den Fall eines einzigen Partikels wurde diese Konfiguration bereits in Abschnitt 5.4.5 kurz erläutert. Der gemäß den zuvor dargestellten Konfigurationen konsistente Ansatz zum Ausgleich des Massenungleichgewichts ist eine entsprechende Vergrößerung der Masse des Partikels a_1 über ein Masseninkrement $\delta m_{a,1}^{v,**}$. Dieses Vorgehen ist jedoch kritisch, da es zu einer Akkumulation von Partikelmasse und Partikeln an dem Rand kommen kann. Dies wurde während der Verifizierung des Algorithmus festgestellt. Daher wird diese Art von Massenungleichgewicht nicht ausgeglichen. Dies ist in Abb. 5.16 dargestellt.

Zuletzt wird noch ein wichtiger Prozess an einem Einströmrand dargestellt, über den neue Partikel im Rechengebiet erzeugt werden. Dazu sind in Abb. 5.17 zwei Zeitschritte ($v \rightarrow v+1$ und $v+1 \rightarrow v+2$) an einem Einströmrand dargestellt. Das Partikel a_1 berührt zu Beginn des Zeitschritts $v \rightarrow v+1$ den Rand und war somit zum Ende des letzten Zeitschritts Teil der Menge $\mathcal{P}$. Die Masse $m_{a,1}$ des Partikels a_1 ist zu Beginn des ersten dargestellten Zeitschritts kleiner als die Referenzmasse $m_{\text{ref}} = r_{\text{ref}}^3 \rho_0$, wobei ρ_0 die Referenzdichte des Fluids repräsentiert (vgl. Abschnitt 3.4). Das Partikel wird im Prädiktor-Schritt vom Rand weg advektiert. Damit ergibt sich nach der Verschiebung $\delta \mathbf{r}_{a,1}^{v,*}$ keine Überlappung zwischen dem Partikel und dem Rand. Das zweite Argument der Bedingung in Gl. 5.43 ist daher nicht erfüllt. Nur durch das erste Argument der Bedingung in Gl. 5.43 bleibt das Partikel Teil der Menge $\mathcal{P}$. Basierend auf dem ersten Argument der Bedingung in Gl. 5.43 wäre die Zugehörigkeit des Partikels zu der Menge $\mathcal{P}$ allerdings endlos. Das Partikel würde eine impraktikabel große Masse erreichen. Um die Masse eines Partikels zu limitieren, wird daher am Ende des Zeitschritts eine zweite Aktualisierung der Menge $\mathcal{P}$ durchgeführt. Hierbei handelt es sich um eine Fluchtbedingung für das Partikel, um eine Beendigung der Interaktion zwischen dem Partikel und dem Rand zu erreichen:

$$\mathcal{P} = \{a \mid a \in \mathcal{P} \wedge m_a^{v+1} < m_{\text{ref}}\} \quad (5.44)$$

Durch das zweite Argument der Bedingung wird erreicht, dass Partikel mit einer Masse m_a^{v+1} größer oder gleich der Referenzmasse m_{ref} aus der Menge $\mathcal{P}$ entfernt werden. Das erste Argument ist notwendig, damit der Menge $\mathcal{P}$ keine zusätzlichen Partikel hinzugefügt werden. Bei dem Fall in Abb. 5.17 tritt das zweite Argument in Gl. 5.44 für das Partikel a_1 in Kraft. Das Partikel a_1 wird daher am Ende des ersten Zeitschritts aus der Menge $\mathcal{P}$ entfernt. Zu Beginn des zweiten Zeitschritts ist die Menge $\mathcal{P}$ daher leer. Das Partikel a_1 wird im Prädiktor-Schritt weiter von dem Rand weg advektiert. Es besteht keine Überlappung zwischen dem Partikel a_1 und dem Rand. Damit ist das Partikel a_1 während des zweiten Zeitschritts gemäß Gl. 5.43 nicht Teil der Menge $\mathcal{P}$. Im Prädiktor-Schritt wird somit ein Massenungleichgewicht $\Delta m_s^{v+1} = \delta m_s^{v+1}$ bestimmt, das aufgrund der leeren Menge $\mathcal{P}$ nicht kompensiert werden kann. Daher muss im Korrektor-Schritt ein neues Partikel a_2 an der Position des Randsegments $\mathbf{r}_s$ generiert werden. Dieses Partikel erbt bei seiner Generierung den Strömungszustand des Randsegments ($\mathbf{X}_{a,2} = \mathbf{X}_s$) und wird der Menge $\mathcal{P}$ hinzugefügt. Damit steht nun ein Partikel zur Verfügung, um das Massenungleichgewicht zu kompensieren, wie in Abb. 5.17 dargestellt ist.

5.5 Zwischenfazit und Anmerkungen zur Implementierung sowie zum Programmablauf

In diesem Kapitel wurde ein einheitliches Konzept für einfache offene und gekoppelte Randbedingungen entwickelt. Auf Basis der Zielsetzung (vgl. Abschnitt 2.4) soll in dem Verfahren die Anwendung statischer Geisterpartikel zur Diskretisierung des Geistergebiets vorgesehen werden. Hieraus ergibt sich unmittelbar, dass Ansätze zur Advektion von Partikeln am Rand auf Basis von Pufferzonen nicht anwendbar sind. Daher wurde in Abschnitt 5.4 ein Algorithmus entwickelt, über den randnahe Partikel eine zeitlich kontinuierliche Änderung der Masse erfahren und innerhalb des inneren Rechengebiets am Rand erzeugt und gelöscht werden. Der zentrale Bestandteil des in diesem Kapitel entwickelten Verfahrens sind die Randsegmente, die den Gebietsrand besetzen. Diese Randsegmente wurden eingeführt, um den Strömungszustand des Rands zu bestimmen. Zur Berechnung des Randzustands wurde das NSCBC-Verfahren eingeführt. Mit diesem Verfahren lassen sich sowohl Randbedingungen als auch Kopplungsbedingungen auf eine konsistente und insbesondere einheitliche Weise definieren. Über den Randzustand wird zum einen die zeitlich kontinuierliche Massenänderung der randnahen Partikel definiert. Zum anderen wird der Zustand der Geisterpartikel im Falle von einfachen offenen Rändern von den Randsegmenten extrapoliert. Für gekoppelte Ränder wird der Zustand der Randsegmente an den Flächenelementen des FV-Rechengebiets aufgeprägt. Als Verbindungsglied zwischen den Flächenelementen des FV-Rechengebiets und der Massenänderung randnaher Partikel werden die Randsegmente genutzt, um die Abweichung der Massenströme der gekoppelten Rechengebiete zu jedem Zeitpunkt als auch an jedem Ort des Kopplungsrandes zu minimieren. Insgesamt wurden für die drei Bestandteile des Verfahrens (Massenänderung randnaher Partikel, Randsegmente, statische Geisterpartikel) einheitliche Ansätze für gekoppelte und einfache offene Ränder entwickelt.

Der Programmcode für das in dieser Arbeit erläuterte SPH-Verfahren und entsprechend auch für das in diesem Kapitel erläuterte Verfahren zur Berechnung von einfachen offenen Randbedingungen und Kopplungsbedingungen wurde von Grund auf in der Programmiersprache Python geschrieben. Während diese interpretierte Programmiersprache eine zügige Entwicklung sowie Anpassung des Codes erlaubt, ist die Geschwindigkeit bei der Ausführung des Programms deutlich schlechter als bei maschinennahen Programmiersprachen. Daher wurden leistungskritische Programmteile mit der Programmiersprache Cython (Dalcin et al., 2011) geschrieben. Dieser Python-ähnliche Programmcode kann in die maschinennahe Programmiersprache C übersetzt und anschließend kompiliert werden. Hierdurch konnte ein guter Kompromiss zwischen effizienter Programmierung und Ausführung gefunden werden. Dennoch sollten die Verfahren zukünftig in einen performanteren Code implementiert werden.

Für das FV-Verfahren wurde ein Löser in der Open-Source-CFD-Software OpenFOAM (Weller et al., 1998) programmiert. Dabei wurde dasselbe physikalische Modell wie im SPH-Verfahren implementiert (vgl. Kapitel 3). Als Lösungsverfahren wird das PIMPLE-Verfahren¹⁴ in OpenFOAM genutzt. Für die zeitliche Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen wird ein implizites Euler-Zeitschrittverfahren gewählt, das die Konsistenzordnung 1 hat. Für die räumliche Diskretisierung der Gradienten- und Diffusionsterme wird ein Zentraldifferenzenverfahren verwendet. Divergenzterme werden entweder mit einem Upwind-Verfahren oder einem Total-Variation-Diminishing (TVD)-Verfahren diskretisiert. In den nachfolgenden Kapiteln wird erwähnt, welches der beiden Verfahren angewendet wird.

Die Kommunikation zwischen den beiden Programmcodes sowie die Parallelisierung des SPH-Codes werden mit Message Passing Interface (MPI) (Gabriel et al., 2004) realisiert. Eine Parallelisierung des FV-Verfahrens mit MPI ist Teil der OpenFOAM-Software. Eine detaillierte Beschreibung der Architektur für die einzelnen Programme sowie deren Kommunikation würde an dieser Stelle zu weit gehen. In diesem Abschnitt soll lediglich der grobe Ablauf des Programms erläutert werden. Das SPH-Programm fungiert als Hauptprozess, der innerhalb der Programmausführung mit MPI je nach Parallelisierung einen oder mehrere Subprozess(e) für das FV-Verfahren startet. In einem Initialisierungsschritt werden Zuordnungslisten erstellt, über die die Prozesse die Strömungsgrößen der jeweiligen Stützstellen kontrolliert austauschen können. Zum einen müssen die SPH-Prozesse die Strömungswerte der Randsegmente an die FV-Prozesse senden. Zum anderen müssen die FV-Prozesse die Strömungswerte an den Stellen der Geisterpartikel interpolieren und an die SPH-Prozesse senden. Entsprechend müssen die jeweils anderen Prozesse diese Werte empfangen.

Während eines Zeitschritts $\nu \rightarrow \nu + 1$ werden zuerst mehrere Schritte im SPH-Programm durchgeführt:

1. Die Interaktionspaare zwischen Randsegmenten und Partikeln sowie zwischen Partikeln des inneren Rechengebiets und Geisterpartikeln werden identifiziert.

¹⁴Das PIMPLE-Verfahren ist eine Kombination aus den Verfahren Pressure-Implicit-with-Splitting-of-Operators (PISO) nach Issa (1986) und Semi-Implicit-Method-for-Pressure-Linked-Equations (SIMPLE) nach Patankar (1980).

2. Die Partikel-Approximationen der räumlichen Ableitungen, die für die Bestimmung der zeitlichen Änderungsraten der Strömungsvariablen der Randsegmente und Partikel des inneren Rechengebiets benötigt werden, werden gemäß Abschnitt 4.6 und Abschnitt 5.2.6 berechnet.
3. Die zeitlichen Änderungsraten der Strömungszustände der Randsegmente werden gemäß Abschnitt 5.2.6 berechnet.
4. Die zeitlichen Änderungsraten der Fluidgeschwindigkeit der Partikel des inneren Rechengebiets werden gemäß Abschnitt 4.6 vorerst ohne den Korrekturterm für die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}$ bestimmt.
5. Die Zeitschrittweite δt wird gemäß Abschnitt 4.7 berechnet.
6. Die Strömungszustände der Randsegmente werden gemäß Abschnitt 5.2.6 zeitlich integriert. Dabei werden ggf. Dirichlet-Randbedingungen aufgeprägt. Damit ist der Strömungszustand der Randsegmente zum Zeitpunkt $\nu + 1$ verfügbar.
7. Die Fluidgeschwindigkeiten der Partikel des inneren Rechengebiets werden vorerst ohne Berücksichtigung des Korrekturterms für die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}$ gemäß Abschnitt 4.7 zeitlich integriert. Daraus resultieren die intermediären Fluidgeschwindigkeiten $\mathbf{u}^*$, die für den Algorithmus zur Massenänderung randnaher Partikel benötigt werden.
8. Die Geschwindigkeitsdifferenzen $\delta\hat{\mathbf{u}}^S$ auf Basis des Partikelverschiebungsansatzes werden gemäß Abschnitt 4.4.4 bestimmt.
9. Der Algorithmus zur Massenänderung randnaher Partikel wird gemäß Abschnitt 5.4 ausgeführt. Daraus resultieren die Massenquellterme $\dot{m}^B$ und die Geschwindigkeitsdifferenzen $\delta\hat{\mathbf{u}}^B$.
10. Die Gesamtgeschwindigkeitsdifferenzen $\delta\hat{\mathbf{u}}$ werden aus der Summe der Komponenten $\delta\hat{\mathbf{u}}^S$ und $\delta\hat{\mathbf{u}}^B$ bestimmt.
11. Die zeitlichen Änderungsraten der Strömungszustände und der Massen der Partikel des inneren Rechengebiets werden gemäß Abschnitt 4.6 bestimmt.
12. Die Strömungszustände und Massen der Partikel des inneren Rechengebiets werden gemäß Abschnitt 4.7 zeitlich integriert. Damit ist der Strömungszustand der Partikel des inneren Rechengebiets zum Zeitpunkt $\nu + 1$ verfügbar.

Nach diesen Schritten sind die Strömungszustände sowohl der Randsegmente als auch der Partikel des inneren Rechengebiets für den Zeitpunkt $\nu + 1$ bestimmt. Da bei dem FV-Programm ein implizites Zeitschrittverfahren angewendet wird, wird der Strömungszustand der Randsegmente des Zeitpunkts $\nu+1$ mit MPI an die FV-Prozesse übertragen und an den Flächenelementen des Gebietsrands des FV-Rechengebiets als Dirichlet-Randbedingungen aufgeprägt. Unter Anwendung dieser Kopplungsbedingungen und ggf. weiterer Randbedingungen wird der Strömungszustand der Zellen des FV-Rechengebiets zeitlich integriert und steht daher auch zum Zeitpunkt $\nu + 1$ zur Verfügung. Als letzter Schritt werden die Strömungszustände der Geisterpartikel, die bisher nur zum Zeitpunkt ν definiert waren, für den Zeitpunkt $\nu + 1$ berechnet. Für Kopplungsränder wird das Interpolationsverfahren gemäß Abschnitt 5.3.2 angewendet. Hierfür wird die Interpolation im FV-Programm durchgeführt, und die Ergebnisse werden mit MPI an die SPH-Prozesse

gesendet. Für nichtgekoppelte Ränder wird das Extrapolationsverfahren gemäß Abschnitt 5.3.1 angewendet. Nach diesem Schritt stehen die Strömungszustände aller Stützstellen zum Zeitpunkt $v + 1$ zur Verfügung, und es kann mit dem nächsten Zeitschritt fortgefahren werden.

Wie an mehreren Stellen erwähnt wurde, lässt das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren verschiedene Variationsmöglichkeiten zu. Diese werden in Anhang A.5 anhand einfacher eindimensionaler Testfälle mit offenen Rändern untersucht. Das Ziel der Untersuchung ist, ein SPH-Verfahren zu definieren, das bei Anwendung auf Problemstellungen mit offenen Rändern möglichst genau und stabil ist sowie eine sehr gute Massenerhaltung aufweist. Die wesentlichen Ergebnisse dieser Untersuchung sind im folgenden Kapitel 6 zusammengefasst. Das in Kapitel 6 ausgewählte SPH-Verfahren wird darauf folgend in Kapitel 7 anhand komplexer zweidimensionaler Testfälle sowohl mit einfachen offenen als auch gekoppelten Rändern validiert.

6 Analyse und Optimierung des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern

In Kapitel 4 und Kapitel 5 wurden das SPH-Verfahren und das neue Verfahren zur Behandlung offener sowie gekoppelter Ränder dargestellt. Die eingeführten Ansätze lassen verschiedene Variationsmöglichkeiten zu, die einen signifikanten Einfluss auf die Genauigkeit, die Stabilität und die Erhaltung konservativer Größen haben können. Diese Variationsmöglichkeiten werden im Rahmen dieser Arbeit untersucht. Das Ziel der Untersuchung ist, ein SPH-Verfahren zu definieren, das bei Anwendung auf Problemstellungen mit offenen Rändern möglichst genau und stabil ist sowie eine sehr gute Massenerhaltung aufweist. Die detaillierten Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Anhang A.5 gezeigt. In diesem Kapitel werden die verwendete Bewertungsmethodik und die wesentlichen Erkenntnisse der Untersuchung dargestellt.

Die untersuchten Variationen werden im Folgenden kurz zusammengefasst. In Anhang A.5 wird die Motivation zur Untersuchung der jeweiligen Variation detaillierter diskutiert. Die Variationen betreffen insbesondere die Ansätze zur Verringerung der numerischen Unzulänglichkeiten der SPH-Methode, die in Abschnitt 4.4 erläutert wurden. Zu diesen Ansätzen zählen das Korrekturverfahren für den Kernel-Gradienten, die Berechnung der Fluidichte über die diskrete Approximation, der Dichtediffusionsansatz und der Partikelverschiebungsansatz. Es wurde in Abschnitt 4.4 darauf hingewiesen, dass diese Ansätze neben der Verbesserung der Stabilität des Verfahrens auch negative Eigenschaften aufweisen können. Daher sollten diese Ansätze nur auf Basis einer sorgfältigen Bewertung eingesetzt werden. Des Weiteren wurde in Abschnitt 4.5 diskutiert, wie die Partikel-Approximation der Erhaltungsgleichungen unter Anwendung von Korrekturtermen für die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ definiert werden muss. Der SPH-ALE-Ansatz und die damit verbundene Einbindung des Divergenzterms der Geschwindigkeitsdifferenz wurde in dieser Arbeit ausgeschlossen (vgl. Abschnitt 4.5). Dadurch besteht eine Problematik hinsichtlich der Konsistenz und der Erhaltung der betreffenden Gleichungen (vgl. Abschnitt 4.5). Als Konsequenz aus der Vernachlässigung des Divergenzterms der Geschwindigkeitsdifferenz musste ein Dichtekorrekturterm eingeführt werden, der als Skalarprodukt aus der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ und dem Dichtegradienten definiert ist. Außerdem muss eine konsistente Einbindung des Dichtediffusionsterms in den Strömungsgleichungen gewährleistet werden. Sowohl der Dichtekorrekturterm als auch der Dichtediffusionsterm können dabei entweder als Terme zur Massenänderung oder als Terme zur Volumenänderung herangezogen werden. Darüber hinaus soll der Einfluss bestimmter Besonderheiten des in dieser Arbeit entwickelten Ansatzes zur Behandlung offener Ränder bewertet werden. Hierzu zählt zum einen die in Abschnitt 5.3.1 eingeführte lineare Extrapolation der Strömungsgrößen an den Geisterpartikeln. Zum anderen wurde in Abschnitt 5.4 erläutert, dass die Gleichheit der konvektiven Massenströme der Partikel und Randsegmente an einem offenen Rand nicht immer am Rand erzwungen werden darf. Auch diese Maßnahme wird in Anhang A.5 beleuchtet.

Im Folgenden wird kurz auf die Bewertungsmethodik eingegangen, die in diesem Kapitel angewendet wird. Die Analyse wird auf die Anwendung von Rechengebieten mit einfachen offenen Rändern beschränkt. Die Schlussfolgerungen, die auf Grundlage der Ergebnisse dieser Untersuchung getroffen werden, lassen sich auf den Fall mit gekoppelten Rändern übertragen, da sich die

zu untersuchenden Variationen lediglich auf die SPH-Methode beschränken und nicht die FV-Methode betreffen. Die Untersuchung wird an zwei generischen und eindimensionalen Testfällen durchgeführt. Hierbei besteht gegenüber mehrdimensionalen Testfällen der Vorteil, dass eine Analyse sehr viel detaillierter durchgeführt werden kann. Es werden Referenzlösungen dieser Testfälle bereitgestellt, die analytisch oder auf Basis der FV-Methode generiert wurden. Diese Referenzlösungen werden genutzt, um die Genauigkeit der SPH-Simulationen zu bewerten.

Um die Einflüsse der einzelnen zuvor erläuterten Variationen der SPH-Methode zu bewerten, bedarf es außerdem einer Referenzkonfiguration für die SPH-Methode. Die Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens ist durch die folgenden Eigenschaften charakterisiert:

- Die Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.77) wird anstatt der diskreten Approximation (vgl. Abschnitt 4.4.2) zur Berechnung der Dichte herangezogen.
- Die Diskretisierungen der Erhaltungsgleichungen gemäß Gl. 4.77 und Gl. 4.79 werden angewendet, um die zeitlichen Änderungsraten der Fluidichte und der Partikelmasse zu berechnen. Sowohl der Dichtekorrekturterm als auch der Dichtediffusionsterm bewirken eine Massenänderung der Partikel. Die Gl. 4.80 wird, allerdings ohne Berücksichtigung des Dichtediffusionsterms, zur Berechnung der Änderungsrate der Fluidgeschwindigkeit verwendet.
- Bei der Berechnung aller in den zuvor genannten Gleichungen vorkommenden SPH-Operatoren werden Interaktionen mit Geisterpartikeln berücksichtigt. Darüber hinaus wird bei allen Operatoren die Korrektur des Kernel-Gradienten angewendet (vgl. Abschnitt 4.4.1).
- Der Dichtediffusionsterm wird gemäß den Definitionen in Gl. 4.42 und Gl. 4.43 angewendet.
- Der Partikelverschiebungsansatz wird gemäß der Definition der Partikelbeschleunigung in Gl. 4.53 angewendet.
- Der Ansatz zur Behandlung offener Randbedingungen wird gemäß Kapitel 5 angewendet.

In Anhang A.5 wird für jede durchgeführte Simulation nur eine einzige Eigenschaft der SPH-Methode geändert. Die Simulationsergebnisse der entsprechenden Konfiguration der SPH-Methode werden dann hinsichtlich der Genauigkeit, der Stabilität und der Erhaltung der Masse mit den Simulationsergebnissen der Referenzkonfiguration verglichen. Somit kann der Einfluss jeder Eigenschaft isoliert bewertet werden. Die Simulationen mit der Referenzkonfiguration werden im Folgenden und in Anhang A.5 mit der Abkürzung `sim_ref` gekennzeichnet.

In Abschnitt 6.1 werden die zwei eindimensionalen Testfälle sowie die für die Bewertung verwendete Auswertemethodik erläutert. Außerdem werden die Simulationsergebnisse der Referenzsimulation `sim_ref` bewertet. Die wesentlichen Erkenntnisse aus den Ergebnissen, die in Anhang A.5 für die einzelnen Variationen der SPH-Methode detailliert erörtert werden, sind in Abschnitt 6.2 zusammengefasst. In Abschnitt 6.3 wird auf Basis dieser Erkenntnisse eine optimierte Konfiguration der SPH-Methode ausgewählt und bewertet. Diese optimierte Konfiguration wird im restlichen Teil dieser Arbeit angewendet.

6.1 Beschreibung der Testfälle und Bewertung der Referenzkonfiguration

In diesem Abschnitt werden die zwei eindimensionalen Testfälle (Testfall A und Testfall B) erläutert. Außerdem wird eine Bewertung der eingangs dargelegten Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens durchgeführt. Die Testfälle und die Auswertemethodik orientieren sich an der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021). Der Zweck der Testfälle ist, die Genauigkeit und Stabilität sowie die Erhaltung der Masse für die verschiedenen Konfigurationen des SPH-Verfahrens zu untersuchen. Die beiden Testfälle sind bis auf die Anwendung eines Quellterms in der Impulsgleichung identisch. Auf den Quellterm wird in Abschnitt 6.1.1 näher eingegangen. Sowohl der Aufbau als auch der Anfangszustand der Testfälle sind in Abb. 6.1 dargestellt. Die wichtigsten Eigenschaften der Testfälle sind in Tab. 6.1 zusammengefasst. Die Testfälle werden durch eine dimensionslose Schreibweise charakterisiert, die wie folgt definiert ist:

$$x_+ = \frac{x}{L} \quad , \quad t_+ = \frac{tc_0}{L} \quad , \quad u_+ = \frac{u}{u_0} \quad , \quad p_+ = \frac{p\gamma}{\rho_0 c_0^2} \quad (6.1)$$

In Gl. 6.1 sind x_+ , t_+ , u_+ und p_+ der Reihe nach die mit der Länge $L = 1 \cdot 10^{-2}$ m des Rechengebiets normierte Ortskoordinate x , die mit dem charakteristischen Zeitmaß L/c_0 normierte physikalische Zeit t , die mit der charakteristischen Geschwindigkeit u_0 normierte Fluidgeschwindigkeit u und der mit dem Vorfaktor der Zustandsgleichung (vgl. Gl. 3.21) normierte Fluiddruck p . Wie in Abb. 6.1 dargestellt ist, ist die Ortskoordinate $x = x_1$ die erste und für diese Testfälle einzig relevante Koordinatenrichtung des Koordinatensystems (x_1, x_2, x_3) . Die Fluidgeschwindigkeit $u = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_x$ ist die der Koordinatenrichtung x zugeordnete Komponente des Fluidgeschwindigkeitsvektors $\mathbf{u}$. Die Referenzwerte der Fluidichte ρ_0 , der Schallgeschwindigkeit c_0 und der Strömungsgeschwindigkeit u_0 sowie der Isentropenkoeffizient γ und die dynamische Viskosität μ sind in Tab. 6.1 zusammengefasst.

Über den Referenzwert c_0 der Schallgeschwindigkeit kann der Referenzwert der Mach-Zahl $\text{Ma} = u_0/c_0$ berechnet werden. Darüber hinaus lässt sich eine charakteristische Reynolds-Zahl

Tabelle 6.1: Fluideigenschaften und weitere charakteristische Größen der Testfälle A und B

Eigenschaft	Wert	Einheit
ρ_0	1	kg/m ³
c_0	100	m/s
u_0	10	m/s
γ	7	–
μ	0,001	kg/(m s)
Ma	0,1	–
Re	100	–
L	0,01	m

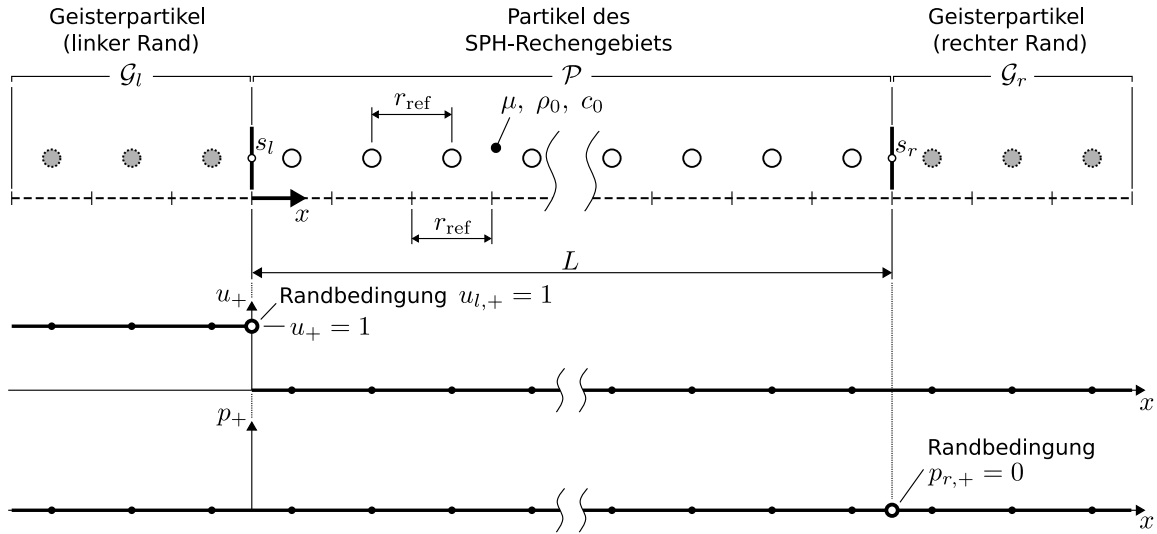


Abbildung 6.1: Rechengebiet und Anfangszustand der Testfälle A und B. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

$Re = \rho_0 u_0 L / \mu$ definieren. Die entsprechenden Werte der Mach-Zahl und der Reynolds-Zahl sind ebenfalls in Tab. 6.1 aufgeführt. Die Viskosität μ ist räumlich und zeitlich konstant.

Das Rechengebiet enthält zwei offene Ränder. Der linke Rand l ist durch das Randsegment s_l und die Menge $\mathcal{G}_l$ der Geisterpartikel charakterisiert. Der rechte Rand r besteht aus dem Randsegment s_r sowie der Menge $\mathcal{G}_r$ der Geisterpartikel. Die Menge der offenen Ränder wird im Folgenden mit der Größe $\mathcal{R}$ bezeichnet. Das Randsegment s_l bzw. s_r ist im Koordinatenursprung $x_+ = 0$ bzw. an der Stelle $x_+ = 1$ positioniert. Am linken Randsegment s_l wird eine Dirichlet-Randbedingung $u_{l,+} = u_+(x_+ = 0) = 1$ für die Fluidgeschwindigkeit u aufgeprägt. Am rechten Rand wird eine Dirichlet-Randbedingung $p_{r,+} = p_+(x_+ = 1) = 0$ für den Fluiddruck aufgeprägt. An beiden Rändern wird ein Reflexionskoeffizient von $|R| = 1$ definiert (vgl. Abschnitt 5.2.4). Am Eintritts- bzw. am Austrittsrand gilt somit die Beziehung $\mathcal{L}_1 = \mathcal{L}_2$ bzw. $\mathcal{L}_1 = -\mathcal{L}_2$ zwischen den Variationen der Wellenamplituden (vgl. Abschnitt 5.2.4).

Die Partikel des Rechengebiets werden in der Partikelmenge $\mathcal{P}$ zusammengefasst. Die Partikel sind entlang der x -Richtung des Koordinatensystems angeordnet. Im Anfangszustand (vgl. Abb. 6.1) sind die Abstände zwischen den Partikeln des Rechengebiets (Menge $\mathcal{P}$) und denen der Geistergebiete (Mengen $\mathcal{G}_l$ und $\mathcal{G}_r$) äquidistant. Der Partikelabstand ist dabei gleich dem Referenzpartikelabstand¹⁵ $r_{\text{ref}} = 1 \cdot 10^{-4}$ m. Damit ergibt sich eine initiale Anzahl von $L/r_{\text{ref}} = 100$ Partikeln der Menge $\mathcal{P}$. Die Glättungslänge des Kernels ist gleich dem Referenzpartikelabstand ($h = r_{\text{ref}}$). Die Zeitschrittweite δt wird gemäß Gl. 4.82 berechnet.

Im Anfangszustand wird an allen Partikeln ein Fluiddruck $p_+ = 0$ aufgeprägt. Außerdem wird eine Fluidgeschwindigkeit $u_+ = 0$ überall mit Ausnahme der Geisterpartikel des linken Rands l gesetzt. Die Anfangswerte der Geisterpartikel des linken Rands l ergeben sich aus der Randbedingung $u_{l,+} = 1$.

¹⁵Der Referenzpartikelabstand r_{ref} ist ein mittlerer Partikelabstand im Rechengebiet und bestimmt damit die räumliche Auflösung des SPH-Rechengebiets.

6.1.1 Testfall mit Impulsquellterm (Testfall A)

Wie zu Beginn dieses Abschnitts bereits erwähnt wurde, unterscheiden sich die beiden Testfälle durch einen Quellterm der Impulsgleichung. Bei dem Testfall A wird auf der rechten Seite der diskretisierten Impulsgleichung (vgl. Gl. 4.80 in Abschnitt 4.6) des Partikels a des SPH-Rechengebiets der folgende Quellterm $\mathbf{S}_a$ hinzuaddiert:

$$\mathbf{S}_a = V_a \mathbf{S}_a^* \quad \text{mit} \quad \mathbf{S}_a^* = \left[-\frac{12\mu u_a}{(H_+ L)^2}, 0, 0 \right]^\top \quad (6.2)$$

In Gl. 6.2 ist die Größe u_a die Fluidgeschwindigkeit des Partikels a in x -Richtung. Unter Anwendung des Quellterms $\mathbf{S}_a$ gemäß Gl. 6.2 in der Impulsgleichung wird mit dem vorliegenden eindimensionalen Rechengebiet eine Poiseuille-Strömung eines zweidimensionalen Kanals mit der Kanalhöhe H und der Kanallänge L nachgebildet. In dem eindimensionalen Rechengebiet stellt sich im stationären Strömungszustand somit ein Druckgradient ein, der gleich dem Druckgradienten in dem äquivalenten zweidimensionalen Kanal mit dem Höhe-Länge-Verhältnis $H_+ = H/L$ ist. Das Höhe-Länge-Verhältnis wird für alle nachfolgend beschriebenen Simulationen zu $H_+ = 0,2$ gesetzt. Die Herleitung des Quellterms $\mathbf{S}_a$ wird von Werdelmann et al. (2021) gezeigt.

Der Testfall A ist besonders geeignet, um mögliche unphysikalische Fluktuationen des Drucks und der Geschwindigkeit im Rechengebiet und insbesondere im randnahen Bereich zu analysieren. Diese Analyse lässt sich besonders gut im Falle eines stationären Strömungsfelds durchführen. Ohne die Anwendung des Quellterms würde sich ein homogener Gleichgewichtszustand mit konstanten Werten der Fluidgeschwindigkeit ($u_+ = 1$) und des Fluiddrucks ($p_+ = 0$) einstellen. Dies würde bedeuten, dass räumliche Ableitungen der Strömungsvariablen und damit alle Terme der Erhaltungsgleichungen im Gleichgewichtszustand null ergäben. In diesem Fall würden keine unphysikalischen Fluktuationen auftreten. Bei diesem homogenen Gleichgewichtszustand ließen sich darüber hinaus die Effekte der Korrekturterme auf Basis der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ sowie der Effekt des Dichtediffusionsterms (vgl. Abschnitt 4.5) nicht untersuchen, da diese Terme ebenfalls null ergeben würden. Der Einfluss der extrapolierten Strömungszustände der Geisterpartikel (vgl. Abschnitt 5.3.1) wäre ebenfalls nicht erkennbar. Durch die Aufprägung des Quellterms gemäß Gl. 6.2 sind die räumlichen Ableitungen aller Terme der Erhaltungsgleichungen im stationären Strömungszustand ungleich null. Die zuvor erläuterten Unzulänglichkeiten werden damit umgangen.

Der dimensionslose Fluiddruck p_+ und die dimensionslose Fluidgeschwindigkeit u_+ im stationären Strömungszustand sind nichtlineare Funktionen der dimensionslosen Ortskoordinate x_+ . Diese Funktionen können analytisch hergeleitet werden (Werdelmann et al., 2021):

$$p_+ = \left[u_{r,+} \left(u_{r,+}^\gamma - \frac{\gamma+1}{\gamma} k x_+ \right) \right]^{\frac{\gamma}{\gamma+1}} - 1 \quad (6.3)$$

$$u_+ = \left[1 - \frac{\gamma+1}{\gamma} k u_{r,+}^{-\gamma} x_+ \right]^{-\frac{1}{\gamma+1}} \quad (6.4)$$

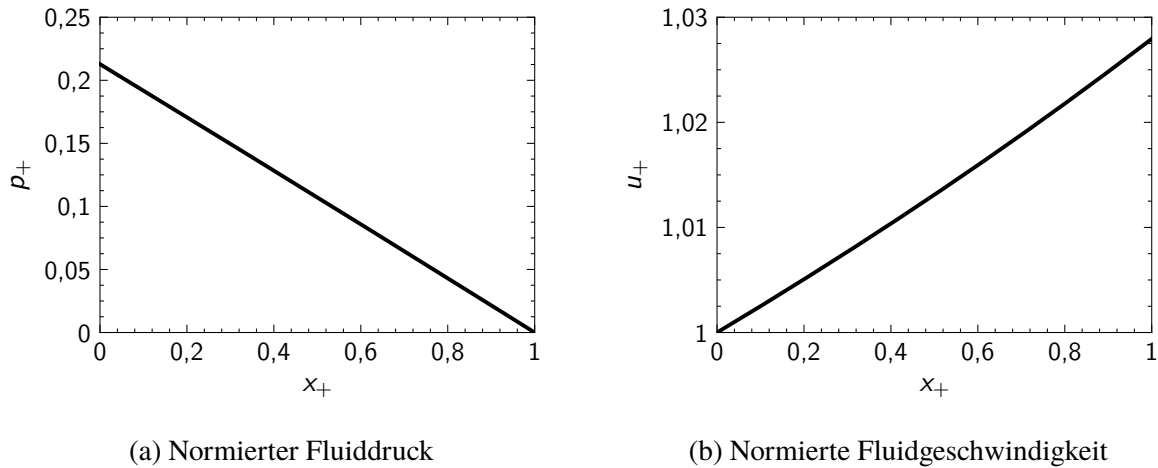


Abbildung 6.2: Räumliche Verläufe der normierten Strömungsgrößen gemäß den analytischen Lösungen. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

Der dimensionslose Parameter k in Gl. 6.3 und Gl. 6.4 ist wie folgt definiert:

$$k = \frac{12}{H_+^2} \frac{\gamma \text{Ma}^2}{\text{Re}} \quad (6.5)$$

In Gl. 6.5 sind die dimensionslosen Kennzahlen $\text{Ma} = u_0/c_0$ und $\text{Re} = \rho_0 u_0 L / \mu$ die Mach-Zahl und die Reynolds-Zahl, die für die in diesem Kapitel verwendeten Randbedingungen in Tab. 6.1 aufgeführt sind. Zur Lösung der Gln. 6.3 und 6.4 ist außerdem die Berechnung der dimensionslosen Geschwindigkeit $u_{r,+}$ am Austrittsrand r notwendig. Diese Geschwindigkeit lässt sich iterativ aus der folgenden Gleichung bestimmen (Werdelmann et al., 2021):

$$1 = u_{r,+} \left(u_{r,+}^\gamma - \frac{\gamma + 1}{\gamma} k \right) \quad (6.6)$$

Die dimensionslose Fluidgeschwindigkeit u_+ gemäß Gl. 6.4 und der dimensionslose Fluiddruck p_+ gemäß Gl. 6.3 sind in Abb. 6.2 über der dimensionslosen Ortskoordinate x_+ dargestellt. Die Abnahme des dimensionslosen Fluiddrucks p_+ vom linken zum rechten Rand in Abb. 6.2a ergibt sich aus dem Druckgradienten der modellierten Poiseuille-Strömung. Aufgrund der (schwachen) Kompressibilität des Fluids resultiert eine geringfügige Abnahme der Fluidichte, die durch eine geringfügige Zunahme der dimensionslosen Fluidgeschwindigkeit u_+ vom linken zum rechten Rand kompensiert wird (vgl. Abb. 6.2b). Das Verhältnis aus den Fluidgeschwindigkeiten am Austritts- und Eintrittsrand entspricht gleichzeitig dem Verhältnis der Fluidichten am Eintritts- und Austrittsrand.

Insgesamt wird ein dimensionsloses physikalisches Zeitintervall von $t_+ = [0; 200]$ durch die Simulationen erfasst. Das Ergebnis der SPH-Simulation für den Fluiddruck p_+ bzw. die Fluidgeschwindigkeit u_+ an den beiden Rändern l und r ist in Abb. 6.3a bzw. Abb. 6.3b über dem genannten Bereich der dimensionslosen physikalischen Zeit t_+ dargestellt. Für diese Simulation wurde die eingangs erläuterte Referenzkonfiguration `sim_ref` des SPH-Verfahrens verwen-

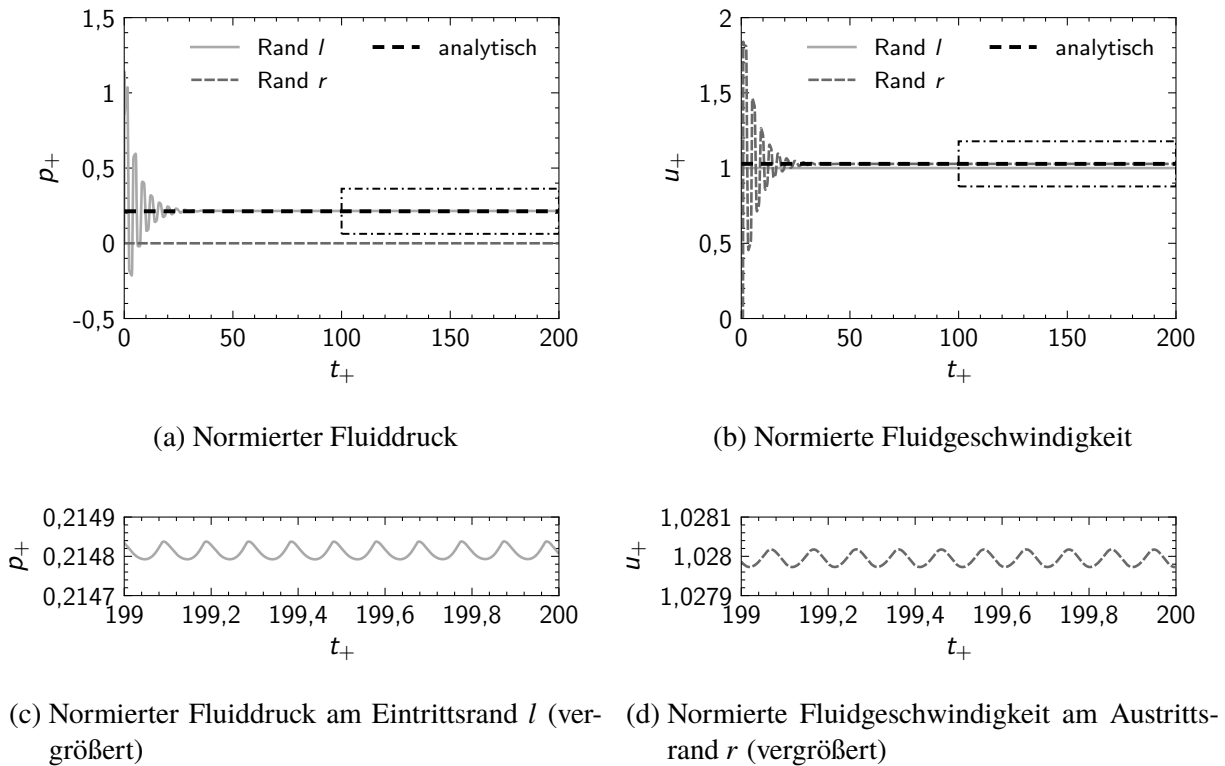


Abbildung 6.3: Zeitliche Verläufe der normierten Strömungsgrößen an den Randsegmenten der Ränder l und r . Die analytischen Lösungen des normierten Fluiddrucks am Eintrittsrand l und der normierten Fluidgeschwindigkeit am Austrittsrand r für den stationären Strömungszustand sind durch die schwarzen horizontalen gestrichelten Linien dargestellt

det. Am Eintritts- bzw. am Austrittsrand ist die Geschwindigkeit bzw. der Druck aufgrund der Dirichlet-Randbedingung zeitlich konstant. In Abb. 6.3a bzw. in Abb. 6.3b ist außerdem die analytische Lösung des Fluiddrucks am Eintrittsrand l bzw. der Fluidgeschwindigkeit am Austrittsrand r als schwarze horizontale gestrichelte Linie dargestellt. Der Beginn der Simulation ist durch einen instationären Zeitraum geprägt. Während dieses Zeitraums wird der Stoß, der aufgrund der zum Anfangszeitpunkt $t_+ = 0$ aufgeprägten Unstetigkeit der Geschwindigkeit am Eintrittsrand entsteht, mehrfach durch das Rechengebiet advektiert und an den Rändern reflektiert. Ab der dimensionslosen Zeit $t_+ = 100$ wird das System als stationär angesehen. Für den Testfall A ist ausschließlich der stationäre Zeitraum $t_+ = [100; 200]$ relevant. Dieser Zeitraum ist in Abb. 6.3a und in Abb. 6.3b durch das Rechteck mit schwarzer Strichpunktlinie gekennzeichnet. Im Folgenden wird die Menge der berechneten Zeitpunkte innerhalb dieses Bereichs mit der Größe N bezeichnet. Die Differenz zwischen der physikalischen Zeit zum Ende und zu Beginn dieses Zeitraums wird mit der Größe T bezeichnet.

Im Folgenden werden mathematische Größen definiert, die zur Bewertung der SPH-Methode herangezogen werden. Die analytischen Lösungen der Strömungsvariablen dienen als Referenz- und Normierungsgrößen. Die Werte der Strömungsvariablen gemäß der analytischen Lösung werden mit dem Index $\mathcal{A}$ gekennzeichnet. Über den Index i wird im Folgenden ein Element

des Rechengebiets gekennzeichnet. Solch ein Element kann entweder ein Teil der Menge $\mathcal{R}$ der offenen Ränder des Rechengebiets darstellen oder eine zusätzliche Stützstelle innerhalb des Rechengebiets repräsentieren. Die Menge dieser zusätzlichen Stützstellen wird im Folgenden mit der Größe $\mathcal{D}$ bezeichnet. Die Positionen der Stützstellen der Menge $\mathcal{D}$ sind an den Anfangspositionen, also an den Positionen zum Anfangszeitpunkt $t_+ = 0$, der Partikel des Rechengebiets (vgl. Abb. 6.1) definiert. Die Stützstellen der Menge $\mathcal{D}$ sind im Gegensatz zu den Partikeln des Rechengebiets statisch. Zu jedem Zeitpunkt werden die Strömungsvariablen von den Partikeln des Rechengebiets und den Geisterpartikeln an diesen Stützstellen über die Partikel-Approximation gemäß Gl. 4.11 interpoliert. Somit lässt sich neben den Randsegmenten an weiteren festen Positionen innerhalb des Rechengebiets eine zeitliche Mittelung der Strömungsvariablen durchführen.

Um die Genauigkeit des SPH-Verfahrens zu bewerten, wird die normierte Abweichung zwischen dem zeitlichen Mittelwert $\bar{\phi}_{i,+}$ einer Strömungsvariablen ϕ_+ und der entsprechenden analytischen Lösung $\phi_{\mathcal{A},i,+} = \phi_{\mathcal{A},+}(x_+ = x_{+,i})$ an einer der zuvor genannten Stützstellen $i \in \mathcal{R} \cup \mathcal{D}$ an der Position $x_{+,i}$ definiert:

$$\mathbf{err}_i(\phi_+) = \frac{\bar{\phi}_{i,+} - \phi_{\mathcal{A},i,+}}{|\phi_{\mathcal{A},l,+} - \phi_{\mathcal{A},r,+}|} \quad \forall i \in \mathcal{R} \cup \mathcal{D} \quad (6.7)$$

Die Größe ϕ in Gl. 6.7 kann stellvertretend für den Fluiddruck p oder die Fluidgeschwindigkeit u stehen. Die Normierung der Abweichung in Gl. 6.7 wird durch den Absolutwert der Differenz der analytischen Lösungen $\phi_{\mathcal{A},l,+}$ und $\phi_{\mathcal{A},r,+}$ an den Positionen des Eintrittsrandes l und des Austrittsrandes r definiert. Der Mittelwert $\bar{\phi}_{i,+}$ ergibt sich aus einer zeitlichen Mittelung der Werte der Strömungsgröße $\phi_{i,+}$ zu den Zeitpunkten der Menge $\mathcal{N}$, zu denen das Strömungsfeld stationär ist:

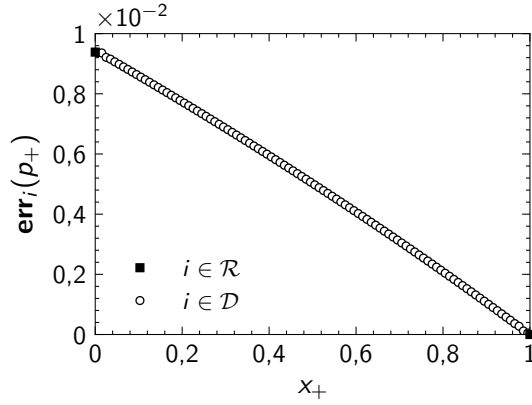
$$\bar{\phi}_{i,+} = \frac{1}{T} \sum_{v \in \mathcal{N}} \phi_{i,+}^v \delta t^v \quad \forall i \in \mathcal{R} \cup \mathcal{D} \quad (6.8)$$

In Gl. 6.8 sind $\phi_{i,+}^v$ und δt^v der Wert der Größe $\phi_{i,+}$ und die Zeitschrittweite δt zum Zeitpunkt $v \in \mathcal{N}$. In Abb. 6.4a und Abb. 6.4b sind die normierten Abweichungen der Strömungsvariablen von den entsprechenden analytischen Lösungen an den Stützstellen $i \in \mathcal{D}$ (Kreise) sowie an den Randsegmenten $i \in \mathcal{R}$ (Rechtecke) gemäß Gl. 6.7 dargestellt. Die Ergebnisse beziehen sich erneut auf die Simulation mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens. Im Falle des Fluiddrucks am Austrittsrand und der Fluidgeschwindigkeit am Eintrittsrand sind die Abweichungen gleich null, da an diesen Stützstellen Dirichlet-Randbedingungen aufgeprägt werden, die den analytischen Lösungen entsprechen.

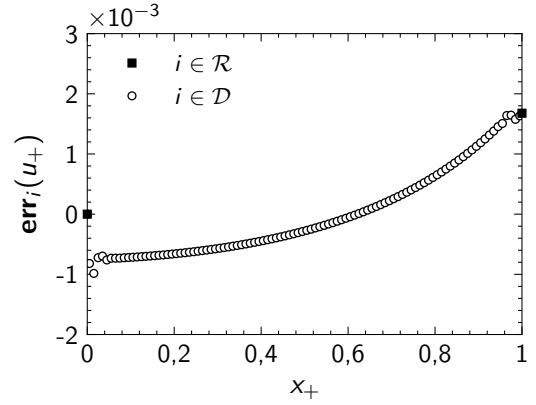
Ein repräsentativer Mittelwert der lokalen Abweichungen $\mathbf{err}_i(\phi_+)$ an den Stützstellen $i \in \mathcal{D}$ wird über die Wurzel der mittleren Quadratsumme dieser Abweichungen berechnet:

$$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(\phi_+) = \sqrt{\frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{i \in \mathcal{D}} [\mathbf{err}_i(\phi_+)]^2} \quad (6.9)$$

In Gl. 6.9 ist die Größe $|\mathcal{D}|$ die Anzahl der Stützstellen der Menge $\mathcal{D}$.



(a) Normierte Abweichung des Fluiddrucks



(b) Normierte Abweichung der Fluidgeschwindigkeit

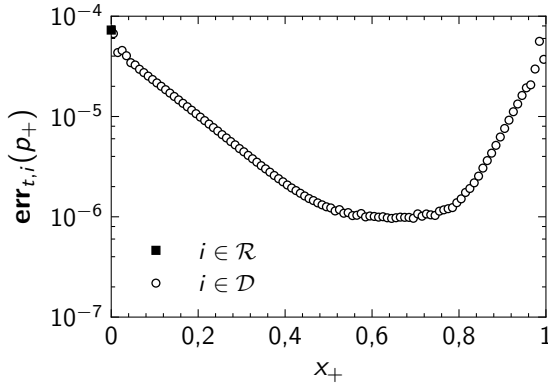
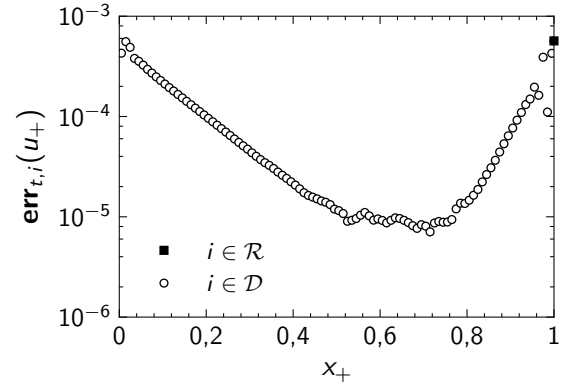
(c) Normierte zeitliche Fluktuationen des Fluid-
drucks(d) Normierte zeitliche Fluktuationen der Fluidge-
schwindigkeit

Abbildung 6.4: Räumliche Verteilungen der normierten Abweichungen der zeitlich gemittelten Strömungsgrößen von den entsprechenden analytischen Lösungen (oben) und räumliche Verteilungen der normierten zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen (unten). In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

In Abb. 6.3c und Abb. 6.3d sind die zeitlichen Verläufe des Fluiddrucks und der Fluidgeschwindigkeit während des stationären Zeitraums im Vergleich zu Abb. 6.3a und Abb. 6.3b deutlich vergrößert dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Strömungsvariablen um einen Mittelwert fluktuieren. Diese zeitlichen Fluktuationen sind unphysikalisch. Zur Quantifizierung der unphysikalischen zeitlichen Fluktuation der Größe $\phi_{i,+}$ an einer Stützstelle $i \in \mathcal{R} \cup \mathcal{D}$ um den an derselben Stützstelle gemäß Gl. 6.8 berechneten Mittelwert $\bar{\phi}_{i,+}$ wird ebenfalls die Wurzel der mittleren Quadratsumme verwendet:

$$\text{err}_{t,i}(\phi_+) = \sqrt{\frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{v \in \mathcal{N}} \left(\frac{\phi_{i,+}^v - \bar{\phi}_{i,+}}{|\phi_{\mathcal{A},l,+} - \phi_{\mathcal{A},r,+}|} \right)^2} \quad \forall i \in \mathcal{R} \cup \mathcal{D} \quad (6.10)$$

In Gl. 6.10 ist die Größe $|\mathcal{N}|$ die Anzahl der Zeitpunkte, die zur Mittelung genutzt werden.

In Abb. 6.4c und Abb. 6.4d sind die gemäß Gl. 6.10 gemittelten zeitlichen Fluktuationen an den Stützstellen $i \in \mathcal{D}$ (Kreise) sowie an den Randsegmenten $i \in \mathcal{R}$ (Rechtecke) dargestellt. Für den Fluiddruck am Austrittsrand und die Fluidgeschwindigkeit am Eintrittsrand ist die zeitliche Fluktuation gleich null, da die entsprechenden Werte der Strömungsvariablen aufgrund der Aufprägung von Dirichlet-Randbedingungen zeitlich konstant sind. Aus Abb. 6.4c und Abb. 6.4d wird ersichtlich, dass die zeitlichen Fluktuationen im Bereich nahe den Rändern größer sind als im Innern des Rechengebiets. Dies liegt an der verhältnismäßig inhomogenen räumlichen Verteilung der Partikel im randnahen Bereich. Allerdings sind die Fluktuationen auch im randnahen Bereich auf einem vergleichsweise niedrigen und für ingenieurmäßige Belange akzeptablen Niveau. Ein repräsentativer Mittelwert der zeitlichen Fluktuationen an den Stützstellen $i \in \mathcal{D}$ wird außerdem wie folgt definiert:

$$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(\phi_+) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{i \in \mathcal{D}} \mathbf{err}_{t,i}(\phi_+) \quad (6.11)$$

Die zuvor eingeführten Kenngrößen werden zur Bewertung der Genauigkeit und der Stabilität der in diesem Kapitel und in Anhang A.5 diskutierten Simulationen angewendet. Für die Simulation mit der Referenzkonfiguration `sim_ref` des SPH-Verfahrens sind diese Kennwerte in Tab. 6.2 dargestellt. Die Tabelle ist folgendermaßen strukturiert: In der ersten Spalte („Feld“) ist die Strömungsvariable genannt, auf die sich die Kenngröße bezieht. Der Typ der Kenngröße (**err_i** für Abweichung und **err_{t,i}** für Fluktuation) ist in der zweiten Spalte („Operator“) aufgeführt. Der dritten Spalte („Element“) kann das Element i des Rechengebiets entnommen werden, an dem der Operator ausgeführt wird. In der vierten Spalte („Größe“) ist schließlich die Kombination aus den ersten drei Spalten aufgeführt, auf die sich die Werte in den nachfolgenden Spalten („Wert“) beziehen. Die Größe **err_l**(p_+) bzw. **err_{t,D}**(u_+) in der Spalte „Größe“ ist beispielsweise die normierte Abweichung des Fluiddrucks am Eintrittsrand l gemäß Gl. 6.7 bzw. die über die

Tabelle 6.2: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen mit der Referenzkonfiguration `sim_ref` und der finalen Konfiguration `sim_mod` des SPH-Verfahrens

Feld	Operator	Element	Größe	Wert	
				<code>sim_ref</code>	<code>sim_mod</code>
p_+	err_i	l	err_l (p_+)	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,41 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	err_D (p_+)	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,63 \cdot 10^{-3}$
	err_{t,i}	l	err_{t,l} (p_+)	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$5,66 \cdot 10^{-5}$
		$\mathcal{D}$	err_{t,D} (p_+)	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$7,74 \cdot 10^{-6}$
u_+	err_i	r	err_r (u_+)	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$2,57 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	err_D (u_+)	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$9,75 \cdot 10^{-4}$
	err_{t,i}	r	err_{t,r} (u_+)	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,95 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	err_{t,D} (u_+)	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$7,21 \cdot 10^{-5}$

Stützstellen der Menge $\mathcal{D}$ gemittelte normierte zeitliche Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit gemäß Gl. 6.11. Tab. 6.2 ist zu entnehmen, dass die Abweichung $\mathbf{err}_l(p_+)$ des Fluiddrucks an dem linken Randsegment l ca. 1 % beträgt. Aufgrund des räumlichen Verlaufs der Abweichung (vgl. Abb. 6.4a) liegt die an den Stützstellen der Menge $\mathcal{D}$ gemittelte Abweichung $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$ unterhalb dieses Werts. Gleiches gilt auch für die Abweichung der Geschwindigkeit, die einen Maximalwert am rechten Randsegment r von ca. 0,1 % erreicht. Die Kennwerte der zeitlichen Fluktuationen liegen in der Größenordnung von 0,001 % bis 0,01 % für den Fluiddruck sowie 0,01 % bis 0,1 % für die Fluidgeschwindigkeit. Für die Referenzsimulation `sim_ref` ist daher ein hohes Maß an Stabilität festzustellen.

Ein weiterer wichtiger Aspekt zur Bewertung der Simulationen ist die Massenbilanz des SPH-Rechengebiets. In Anhang A.4 wird die Massenbilanz eines globalen Rechengebiets erläutert, das in einzelne FV- und SPH-Rechengebiete zerlegt ist. Dabei wird unter anderem die globale unphysikalische Massenänderungsrate $\Delta \dot{m}_j$ eines SPH-Rechengebiets j eingeführt. Dieses Massenstromungleichgewicht $\Delta \dot{m}_j$ ist wie folgt definiert (vgl. Gl. A.53):¹⁶

$$\Delta \dot{m} = -\dot{m}_{p,\Omega} + \sum_{i \in \mathcal{R}} \Delta \dot{m}_i \quad (6.12)$$

Das Ungleichgewicht $\Delta \dot{m}$ setzt sich aus einem Massenquellterm $\dot{m}_{p,\Omega}$ des Rechengebiets Ω und aus den Massenstromungleichgewichten $\Delta \dot{m}_i$ der Ränder $i \in \mathcal{R}$ zusammen. Der Massenquellterm $\dot{m}_{p,\Omega}$ folgt aus nichtreziproken Interaktionen zwischen Partikeln des inneren Rechengebiets. Das Massenstromungleichgewicht $\Delta \dot{m}_i$ entsteht durch die Interaktionen zwischen den Partikeln des inneren Rechengebiets und den Geisterpartikeln sowie aus Abweichungen zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und der Randsegmente am Rand i (vgl. Abschnitt 5.4). Entsprechend den Definitionen in Anhang A.4 lässt sich Gl. 6.12 weiter in einzelne Komponenten zerlegen:

$$\Delta \dot{m} = - \underbrace{\dot{m}_{p,d,\Omega}}_{\text{Dichtediffusion Rechengebiet}} - \underbrace{\dot{m}_{p,dc,\Omega}}_{\text{Dichtekorrektur Rechengebiet}} + \sum_{i \in \mathcal{R}} \left(\underbrace{\Delta \dot{m}_{c,i}}_{\text{Konvektives Ungleichgewicht Rand } i} - \underbrace{\dot{m}_{p,d,i}}_{\text{Dichtediffusion Rand } i} - \underbrace{\dot{m}_{p,dc,i}}_{\text{Dichtekorrektur Rand } i} \right) \quad (6.13)$$

Die einzelnen Terme auf der rechten Seite in Gl. 6.13 stellen von links nach rechts gelesen die Massenquellterme aufgrund von Dichtediffusion und Dichtekorrektur, die Differenz der konvektiven Massenströme der Randsegmente und der Partikel am Rand i sowie die Massenströme aufgrund von Dichtediffusion und Dichtekorrektur am Rand i dar. Der konvektive Massenstrom der Partikel am jeweiligen Rand i ist dabei als Summe der Massenquellterme $\dot{m}^{\mathcal{B}}$ der Partikel definiert (vgl. Gl. 5.22). Der konvektive Massenstrom der Randsegmente am jeweiligen Rand i ist hingegen über die an den Randsegmenten aufgeprägten Fluidichten und Fluidgeschwindigkeiten definiert (vgl. Gl. 5.23). Die übrigen Massenströme sind durch die Summe der Beiträge der Interaktionen zwischen den Partikeln des inneren Rechengebiets untereinander (Massenquellterm) bzw. zwischen den Partikeln des inneren Rechengebiets und den Geisterpartikeln des

¹⁶Der Index j und die Berücksichtigung gekoppelter Ränder entfallen im Gegensatz zu Gl. A.53 nachfolgend.

Rands i (Randbeitrag) bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms und des Dichtekorrekturterms definiert. In Anhang A.4 werden die zuvor genannten Größen detailliert erläutert.

Es ist das Ziel, das Ungleichgewicht $\Delta\dot{m}$ betragsmäßig zu minimieren. Die einzelnen Komponenten des Massenstromungleichgewichts $\Delta\dot{m}$ könnten sich gemäß Gl. 6.13 allerdings gegenseitig ausgleichen. Daher ist es nicht ausreichend, ausschließlich das Ungleichgewicht $\Delta\dot{m}$ zu analysieren. Es ist deshalb auch das Ziel, die auf der rechten Seite in Gl. 6.13 genannten Komponenten betragsmäßig zu minimieren. Für den Fall, dass die einzelnen Komponenten in Gl. 6.13 nicht null ergeben, ist es allerdings notwendig, dass die Komponenten sich gegenseitig aufwiegen, damit die stationäre Lösung konsistent ist. Im stationären Fall soll schließlich die Masse des Rechengebiets konstant sein. Hierfür muss die zeitliche Änderung der Partikelmasse des Rechengebiets null ergeben. Die Änderungsrate $\dot{m}_p$ der Partikelmasse des Rechengebiets ist wie folgt definiert (vgl. Gl. A.50):

$$\dot{m}_p = \dot{m}_{s,c,\partial\Omega} - \Delta\dot{m} \quad (6.14)$$

In Gl. 6.14 ist die Größe $\dot{m}_{s,c,\partial\Omega}$ gleich der Summe der Massenströme aller Randsegmente des gesamten Gebietsrands $\partial\Omega$ des Rechengebiets. Idealerweise ist der Gesamtmassenstrom $\dot{m}_p$ der Partikel und der Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente im stationären Strömungszustand der Simulationen gleich null. Unter dieser Voraussetzung würde gemäß Gl. 6.14 per se kein Ungleichgewicht der Partikelmasse bestehen ($\Delta\dot{m} = 0 \text{ kg/s}$). Um im Falle eines Ungleichgewichts $\Delta\dot{m} \neq 0 \text{ kg/s}$ im stationären Strömungszustand der Simulationen dennoch eine zeitlich konstante Masse des Rechengebiets ($\dot{m}_p = 0 \text{ kg/s}$) zu gewährleisten, muss folglich $\dot{m}_{s,c,\partial\Omega} = \Delta\dot{m}$ gelten. Diese Beziehung ist somit für stationäre Simulationen von besonders großer Bedeutung.

Aufgrund der intrinsischen Instationarität des vorliegenden SPH-Verfahrens kommt es selbst bei stationären Simulationen zu sekundären zeitlichen Fluktuationen des Strömungsfelds. Es ist für die Bewertung daher notwendig, zeitliche Mittelwerte der einzelnen hier und in Anhang A.4 definierten Massenströme anzuwenden. Der mit dem analytischen Wert des Massenstroms

$$\dot{m}_{\mathcal{A}} = u_{\mathcal{A},l} \rho_{\mathcal{A},l} r_{\text{ref}}^2 = u_{\mathcal{A},r} \rho_{\mathcal{A},r} r_{\text{ref}}^2 \quad (6.15)$$

normierte zeitliche Mittelwert eines instantanen Massenstroms $\dot{m}$ wird nachfolgend durch die Größe $\dot{M}$ repräsentiert. Beispielsweise ergibt sich für den Massenstrom $\dot{m}_p$ in Gl. 6.14 der folgende normierte zeitliche Mittelwert $\dot{M}_p$:

$$\dot{M}_p = \frac{1}{\dot{m}_{\mathcal{A}}} \frac{1}{T} \sum_{v \in \mathcal{N}} \dot{m}_p^v \delta t^v \quad (6.16)$$

In Tab. 6.3 sind verschiedene normierte zeitliche Mittelwerte der Massenströme für die Simulation mit der Referenzkonfiguration `sim_ref` des SPH-Verfahrens dargestellt. Anhand dieser Tabelle lassen sich die wesentlichen Zusammenhänge der Massenerhaltung nachvollziehen. Die Tabelle ist in drei Blöcke unterteilt. Die Massenströme im Block „Partikel“ bzw. im Block „Randsegmente“ sind für die Partikel bzw. Randsegmente definiert und mit dem Index „ p “ bzw. „ s “ versehen. Der Block „Global“ enthält Kombinationen der Massenströme der Partikel und Randsegmente. In der ersten Spalte („Kategorie“) ist der Ursprung des Massenstroms aufge-

führt. Der Massenstrom kann entweder aufgrund von Konvektion (Index „c“), Dichtediffusion (Index „d“) oder Dichtekorrektur (Index „dc“) entstehen. Mit dem Eintrag „alle“ in der Spalte „Kategorie“ ist die Summe der Massenströme aller Kategorien gemeint. In der zweiten Spalte („Bereich“) ist der Teil des Rechengebiets genannt, auf den sich der Massenstrom bezieht. Dieser kann entweder den Eintrittsrand (Index „l“), den Austrittsrand (Index „r“), den gesamten Gebietsrand (Index „ $\partial\Omega$ “) oder das innere Rechengebiet (Index „ Ω “) repräsentieren. Mit dem Eintrag „alle“ in der Spalte „Bereich“ ist die Summe der Massenströme des gesamten Rands $\partial\Omega$ und des inneren Rechengebiets Ω gemeint. In der dritten Spalte („Größe“) ist schließlich die Kombination aus den ersten zwei Spalten aufgeführt, auf die sich die Werte in der vierten Spalte („Wert“) beziehen. Die verschiedenen Größen werden in Anhang A.4 detailliert anhand von Abb. A.2 erläutert.

Nachfolgend werden für die Simulation mit der Referenzkonfiguration `sim_ref` des SPH-Verfahrens die wesentlichen Zusammenhänge der Massenerhaltung anhand von Tab. 6.3 erläutert. Die nachfolgend genannten Massenströme sind als zeitlich gemittelt und mit dem analytischen Wert $\dot{m}_{\mathcal{A}}$ des Massenstroms normiert zu verstehen. Der konvektive Massenstrom $\dot{M}_{p,c,l}$ bzw. $\dot{M}_{p,c,r}$ der Partikel am linken Rand l bzw. am rechten Rand r ist betragsmäßig nahezu identisch mit dem analytisch berechneten Massenstrom $\dot{m}_{\mathcal{A}}$. Gleiches ist auch für den konvektiven Massenstrom $\dot{M}_{s,c,l}$ bzw. $\dot{M}_{s,c,r}$ der Randsegmente am linken Rand l bzw. am rechten Rand r festzustellen. Anhand des für den gesamten Rand summierten konvektiven Massenstroms $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ bzw. $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Partikel bzw. der Randsegmente können geringfügige Abweichungen zwischen den Massenströmen der unterschiedlichen Ränder konstatiert werden. Diese Ungleichgewichte liegen in der Größenordnung eines Zehntausendstels und können daher als gering bewertet werden. Auch die Massenströme der Dichtediffusion können insgesamt als gering bewertet werden. Der Massenstrom der Dichtediffusion $\dot{M}_{p,d,l}$ bzw. $\dot{M}_{p,d,r}$ am linken Rand l bzw. am rechten Rand r liegt in der Größenordnung eines Tausendstels. Der Massenstrom $\dot{M}_{p,d,\Omega}$ der Dichtediffusion bezogen auf Interaktionen zwischen Partikeln des inneren Rechengebiets ist um ein Vielfaches geringer. Daher ist der Gesamtmassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion nahezu gleich dem Dichtediffusionsmassenstrom $\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$ des Rands $\partial\Omega$. Diese Massenströme liegen in der Größenordnung eines Zehntausendstels und sind nahezu identisch mit dem konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Das Ungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ lässt sich daher mit der Anwendung des Dichtediffusionsterms erklären. Durch die zwischen den Partikeln übertragenen Massenströme der Dichtediffusion wird ein Nettomassenstrom hervorgerufen, da der am linken Rand übertragene Massenstrom betragsmäßig kleiner ist als der am rechten Rand. Dem Rechengebiet wird über die Dichtediffusion daher Masse entnommen. Um im stationären Strömungszustand eine konstante Masse des Rechengebiets zu gewährleisten, muss daher über die konvektiven Massenströme ein Ausgleich des Nettomassenstroms der Dichtediffusion bewirkt werden. Über eine Anpassung des Geschwindigkeitsfelds wird eine Modifizierung der Divergenz der Geschwindigkeit erreicht, über die die Dichtediffusionsflüsse kompensiert werden. Daher ist der konvektive Massenstrom am linken Rand betragsmäßig größer als am rechten Rand. Die Massenströme der Dichtekorrektur sind im Vergleich zu denen der Dichtediffusion nennenswert größer. Die Massenströme $\dot{M}_{p,dc,l}$ und $\dot{M}_{p,dc,r}$ der einzelnen Ränder liegen in der Größenordnung eines Zehntels. Der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$ des gesamten Rands liegt in

Tabelle 6.3: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen mit der Referenzkonfiguration `sim_ref` und der finalen Konfiguration `sim_mod` des SPH-Verfahrens

Kategorie	Bereich	Größe	Wert	
			sim_ref	sim_mod
Global				
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	l	$\Delta\dot{M}_{c,l}$	$1,77 \cdot 10^{-10}$	$-2,48 \cdot 10^{-11}$
	r	$\Delta\dot{M}_{c,r}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$-1,78 \cdot 10^{-8}$
	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$-1,79 \cdot 10^{-8}$
Partikel				
alle	l	$\dot{M}_{p,l}$	1,14	1,00
	r	$\dot{M}_{p,r}$	-1,13	-1,00
	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$6,00 \cdot 10^{-10}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$3,12 \cdot 10^{-17}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$6,00 \cdot 10^{-10}$
Konvektion	l	$\dot{M}_{p,c,l}$	1,00	1,00
	r	$\dot{M}_{p,c,r}$	-1,00	-1,00
	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$
Dichtediffusion	l	$\dot{M}_{p,d,l}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$1,55 \cdot 10^{-3}$
	r	$\dot{M}_{p,d,r}$	$-1,73 \cdot 10^{-3}$	$-1,72 \cdot 10^{-3}$
	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,66 \cdot 10^{-4}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-1,27 \cdot 10^{-21}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,66 \cdot 10^{-4}$
Dichtekorrektur	l	$\dot{M}_{p,dc,l}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	0,00
	r	$\dot{M}_{p,dc,r}$	$-1,27 \cdot 10^{-1}$	0,00
	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	0,00
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	0,00
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	0,00
Randsegmente				
Konvektion	l	$\dot{M}_{s,c,l}$	1,00	1,00
	r	$\dot{M}_{s,c,r}$	-1,00	-1,00
	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$

der Größenordnung eines Hundertstels. Außerdem ist ein Quellterm $\dot{M}_{p,dc,\Omega}$ derselben Größenordnung, aber mit entgegengesetztem Vorzeichen, zu verzeichnen. Durch einen weitgehenden Ausgleich zwischen dem Quellterm und dem Nettomassenstrom des Rands liegt der Gesamtmas-

senstrom $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtekorrektur lediglich in der Größenordnung eines Hunderttausendstels. Damit die Masse der Partikel im Rechengebiet für den stationären Fall konstant ist, muss über die Summe $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der konvektiven Massenströme der Partikel eine Kompensation der Summe aus den Gesamtmassenströmen der Dichtediffusion ($\dot{M}_{p,d}$) und der Dichtekorrektur ($\dot{M}_{p,dc}$) gewährleistet werden. Die Kompensation ist hinreichend gut gegeben, da der Gesamtmassenstrom $\dot{M}_p$ der Partikel vernachlässigbar klein ist. Die Gesamtmassenströme $\dot{M}_{p,l}$ und $\dot{M}_{p,r}$ der Partikel an den einzelnen Rändern weisen aufgrund der an denselben Rändern definierten Dichtekorrekturmassenströme eine signifikante Abweichung gegenüber dem analytischen Massenstrom auf. Ebenso ergeben sich die Größenordnungen des Massenstroms $\dot{M}_{p,\partial\Omega}$ der Partikel am gesamten Rand $\partial\Omega$ und des Gesamtmassenquellterms $\dot{M}_{p,\Omega}$ der Partikel aufgrund des Einflusses der Dichtekorrektur. Die Differenz $\Delta\dot{M}_{c,l}$ der konvektiven Massenströme der Randsegmente und Partikel am linken Rand l ist vernachlässigbar klein. An diesem Rand wird durch den Algorithmus zur Massenänderung der Partikel (vgl. Abschnitt 5.4) eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den konvektiven Massenströmen erreicht. Am rechten Rand r ist jedoch eine Differenz $\Delta\dot{M}_{c,r}$ in der Größenordnung eines Hunderttausendstels zu konstatieren. Derselbe Wert ist für die Differenz $\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$ des gesamten Rands festzustellen. Aufgrund der eingeführten Ausnahmen bei der Erzwingung eines Gleichgewichts zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und Randsegmente (vgl. Abschnitt 5.4) wird an dem rechten Rand mehr Partikelmasse entnommen, als über die Massenströme der Randsegmente aufgeprägt wird. Das Ungleichgewicht $\Delta\dot{M}_{c,r}$ ist nahezu identisch mit dem Gesamtmassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtekorrektur. Der Dichtekorrekturterm ist physikalisch und korrekt in der Kontinuitätsgleichung berücksichtigt (vgl. Abschnitt 4.5). Demnach wird anders als bei der Dichtediffusion keine Kompensation dieses Massenstroms durch eine Anpassung des Geschwindigkeitsfelds hervorgerufen. Die konvektiven Massenströme der Randsegmente sind daher nicht durch die Dichtekorrektur beeinflusst. Wie bereits erläutert wurde, wird durch die konvektiven Massenströme der Partikel allerdings eine Kompensation des Nettomassenstroms der Dichtekorrektur gewährleistet. Ohne diese Kompensation wäre der Gesamtmassenstrom $\dot{M}_p$ der Partikel um mehrere Größenordnungen größer als bei dem vorliegenden Ergebnis. Da der Gesamtpartikelmassenstrom $\dot{M}_p$ vernachlässigbar ist, ist das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ gemäß Gl. 6.14 gleich dem konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Die Größenordnung des globalen Ungleichgewichts kann als gering bewertet werden. Die Summe $\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$ über den Differenzen zwischen den Gesamtpartikelmassenströmen und den konvektiven Massenströmen der Randsegmente der einzelnen Ränder liegt allerdings in der Größenordnung eines Hundertstels. Dies liegt an den Unterschieden zwischen den Massenströmen der Dichtekorrektur der einzelnen Ränder. Insbesondere die Abweichung von etwa 13 % bis 14 % zwischen dem Partikelmassenstrom der Ränder und dem analytisch berechneten Massenstrom ist hinsichtlich einer Embedded-SPH-Methode als kritisch zu bewerten. Der Massenstrom für ein FV-Rechengebiet am Kopplungsrand ist gleich den Massenströmen der entsprechenden Randsegmente. Diese Massenströme sind nahezu gleich dem analytisch berechneten Massenstrom. Demnach würde ein Ungleichgewicht zwischen den Massenströmen des SPH-Rechengebiets und des FV-Rechengebiets am Kopplungsrand von etwa 13 % bis 14 % vorliegen.

Aufgrund der zuletzt dargelegten Problematik wird in Abschnitt A.5.6 in Anhang A.5 die Eliminierung des Dichtekorrekterterms aus der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79) untersucht. In Abschnitt 6.2 werden unter anderem die Ergebnisse der Anwendung dieser Maßnahme zusammengefasst. Dem vorgehend wird an dieser Stelle erwähnt, dass durch die genannte Maßnahme bei dem vorliegenden Testfall eine deutliche Verbesserung der Massenerhaltung erreicht wird. Hierdurch kann die Massenerhaltung für ingenieurmäßige Belange als hinreichend gut bewertet werden. Insbesondere die Übereinstimmung zwischen dem Partikelmassenstrom an dem jeweiligen Rand und dem Massenstrom des entsprechenden Randsegments wird signifikant verbessert, sodass der entwickelte Ansatz zur Kopplung der SPH- und der FV-Methode geeignet ist. Daher wird die genannte Maßnahme in Abschnitt 6.3 als Teil der finalen Konfiguration des SPH-Verfahrens zur Lösung der aufgezeigten Problematik gewählt.

6.1.2 Testfall ohne Impulsquellterm (Testfall B)

Bei dem Testfall B wird der in Abschnitt 6.1.1 eingeführte Quellterm nicht verwendet. Dieser Testfall eignet sich besonders, um die Genauigkeit des SPH-Verfahrens hinsichtlich des transienten Verhaltens der Druck- und Geschwindigkeitsfelder zu analysieren. Wie in Abb. 6.1 dargestellt ist, sind der Fluiddruck p und die Fluidgeschwindigkeit u im Anfangszustand der Simulation im gesamten Rechengebiet Ω gleich null. Am linken Rand wird eine Fluidgeschwindigkeit $u_+ = 1$ aufgeprägt. Dadurch bildet sich am Eintrittsrand ein Stoß aus. An den offenen Rändern wird der Stoß vollständig reflektiert, sodass die Druck- und Geschwindigkeitswellen mehrfach zwischen den beiden Rändern l und r advektiert werden. Die Wellen werden mit fortschreitender physikalischer Zeit t dissipiert, sodass sich im Gleichgewichtszustand des Systems ($t_+ \rightarrow \infty$) eine homogene Fluidgeschwindigkeit $u_+ = 1$ und ein homogener Fluiddruck $p_+ = 0$ im gesamten Rechengebiet einstellt.

Da keine analytische Lösung der transienten Strömungsfelder verfügbar ist, wird zur Bewertung der SPH-Simulationen eine Simulation mit einem FV-Verfahren als Referenzfall verwendet, die im weiteren Verlauf mit `sim_fvm` bezeichnet wird. Dabei wird am Einlass- bzw. Auslassrand eine Dirichlet-Randbedingung bzw. eine von Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit und eine von Neumann-Randbedingung bzw. eine Dirichlet-Randbedingung für den Druck verwendet. Das FV-Verfahren wurde in Abschnitt 5.5 bereits kurz erläutert. Es wird ein implizites Euler-Zeitschrittverfahren mit der Konsistenzordnung 1 appliziert. Für die räumliche Diskretisierung wird ein Upwind-Verfahren für Divergenzterme sowie ein Zentralkoeffizientenverfahren für Gradienten- und Diffusionsterme verwendet. Bei dem FV-Verfahren werden dieselbe schwach-kompressible Formulierung der Zustandsgleichung gemäß Gl. 3.21 sowie dieselbe Zeitschrittweite gemäß Gl. 4.82 wie bei dem SPH-Verfahren verwendet. Für die Durchführung der FV-Simulation wurde das Software-Paket OpenFOAM (Weller et al., 1998) genutzt. In Abb. 6.5 sind die Ergebnisse der FV-Simulation für den Fluiddruck $p_{l,+}$ am Eintrittsrand l und die Fluidgeschwindigkeit $u_{r,+}$ am Austrittsrand r über der dimensionslosen physikalischen Zeit t_+ für die ersten Perioden der Oszillationen dargestellt.

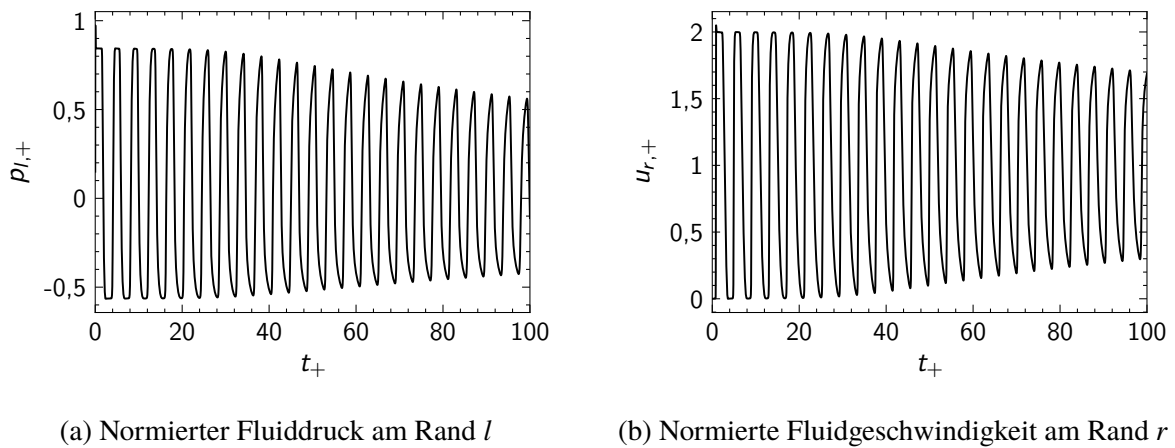


Abbildung 6.5: Ergebnisse der FV-Simulation für die transienten Verläufe der normierten Strömungsvariablen an den offenen Rändern. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

Um einen quantitativen Vergleich zwischen den Ergebnissen der jeweiligen SPH-Simulationen und der Referenzsimulation mit der FV-Methode durchzuführen, werden die Abweichungen zwischen den Lösungen abstrahiert. Dieser Ansatz wird im Folgenden erläutert.

Zum einen lässt sich das Abklingverhalten der Oszillationen der Strömungsgrößen quantifizieren. Hierfür werden die zeitlichen Maxima und Minima der Oszillationen des Fluiddrucks (vgl. Abb. 6.5a) an dem Rand l identifiziert. Beispielhaft sind in Abb. 6.6 die Ergebnisse der FV-Simulation für die Maxima der Oszillationen des Fluiddrucks und den zeitlichen Verlauf des Fluiddrucks am Eintrittsrand l dargestellt. Es ist erkennbar, dass die Amplitude nach einer gewissen Einlaufphase exponentiell mit der Zeit abnimmt. Die Ausgleichskurve einer entsprechenden Exponentialfunktion, die zwischen den dimensionslosen Zeiten $t_+ = 200$ und $t_+ = 600$ an die Maxima der Druckoszillationen angepasst wurde, ist in Abb. 6.6 als gestrichelte schwarze Linie

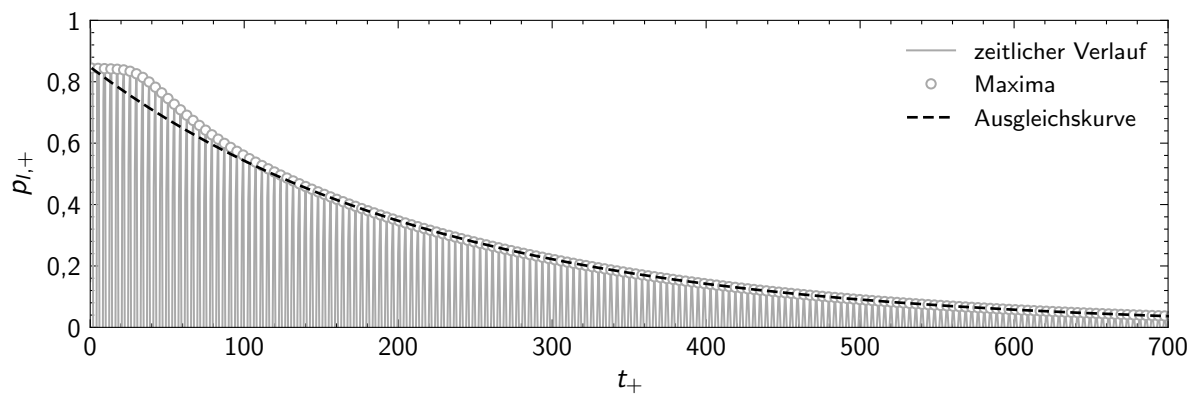


Abbildung 6.6: Oszillationen des normierten Fluiddrucks und deren Maxima am Eintrittsrand

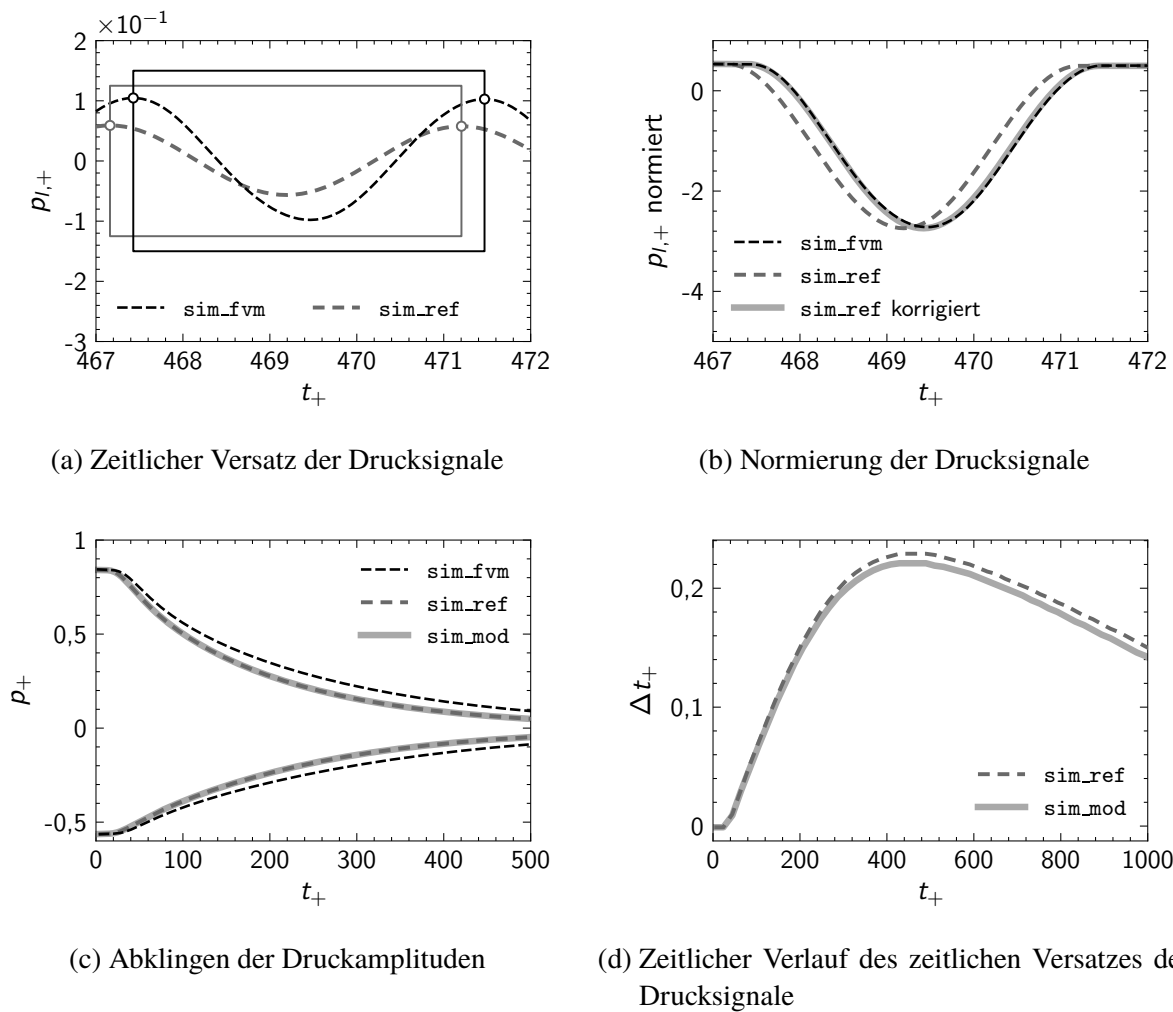


Abbildung 6.7: Charakteristische Größen zum Vergleich des transienten Bereichs der SPH- und der FV-Simulation

gezeigt. Die zeitliche Rate der Abnahme der Amplitude kann als Maß für die Dissipativität des Verfahrens interpretiert werden. Es ist daher sinnvoll, die Ergebnisse der SPH-Simulationen hinsichtlich des zeitlichen Verlaufs der Minima und Maxima mit dem Ergebnis der FV-Simulation zu vergleichen, um die Dissipativität des SPH-Verfahrens relativ zum FV-Verfahren zu bewerten. In Abb. 6.7c ist der zeitliche Verlauf der Maxima und Minima basierend auf den Ergebnissen der FV-Simulation (*sim_fvm*) und der Simulation mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens (*sim_ref*) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass durch die Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens im Vergleich zu dem FV-Verfahren ein schnelleres Abklingen der Oszillationen hervorgerufen wird. Somit ist das SPH-Verfahren im Vergleich zum FV-Verfahren durch eine größere Dissipation charakterisiert.

Neben den Unterschieden des Abklingverhaltens kann zum anderen eine Bewertung des SPH-Verfahrens auch hinsichtlich der zeitlichen Verschiebung der Oszillationen der Strömungsgrößen im Vergleich zu dem Ergebnis der FV-Simulation *sim_fvm* durchgeführt werden. Hierfür ist die Betrachtung des Drucksignals $p_{l,+}$ am Einlassrand l ausreichend. Für die Quantifizierung

eines zeitlichen Versatzes der Lösungen wird entlang des zeitlichen Verlaufs des Drucks am Einlass jeweils der Bereich zwischen benachbarten Druckmaxima extrahiert. Dieses Vorgehen ist in Abb. 6.7a anhand des Ergebnisses der Simulation `sim_ref` mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens dargestellt. Das graue bzw. schwarze Rechteck umfasst dabei den betrachteten Bereich der Lösung des SPH- bzw. des FV-Verfahrens. Es ist das Ziel, den mit der charakteristischen Zeit t_0 normierten zeitlichen Versatz Δt_+ zwischen diesen selektierten Druckverläufen zu bestimmen. Um eine bessere Vergleichbarkeit der beiden Signale zu ermöglichen, werden diese zunächst an denselben äquidistant verteilten Stellen der Zeitachse interpoliert. Danach wird für jedes der beiden Signale der Mittelwert und die Standardabweichung des Drucks innerhalb des selektierten Bereichs des Signals berechnet. Daraufhin werden die Mittelwerte von den entsprechenden Signalen subtrahiert, und die Ergebnisse werden mit der jeweiligen Standardabweichung normiert. In Abb. 6.7b ist das Ergebnis dieser Operationen dargestellt. Durch die Anwendung der zuvor erläuterten Operationen sind die beiden Drucksignale durch dieselbe Auslenkung charakterisiert. Für die Quantifizierung des zeitlichen Versatzes wird das Signal der SPH-Simulation `sim_ref` sukzessiv um ein kleines zeitliches Inkrement entlang der Zeitachse verschoben, und für jede resultierende Position des Signals wird die Kreuzkorrelation zwischen den Signalen der SPH-Simulation `sim_ref` und der FV-Simulation `sim_fvm` berechnet. Die Kreuzkorrelation ist maximal, wenn beide Signale möglichst gut übereinstimmen (vgl. die durchgezogene hellgraue Kurve mit der Bezeichnung „`sim_ref` korrigiert“ in Abb. 6.7b). Die zeitliche Verschiebung des Signals der SPH-Simulation von der ursprünglichen Position zu der Position der maximalen Kreuzkorrelation ist gleich dem gesuchten zeitlichen Versatz Δt_+ zwischen den beiden Drucksignalen der SPH- und der FV-Simulation. Diese Analyse lässt sich für jedes Paar benachbarter Maxima des zeitlichen Druckverlaufs durchführen. Somit lässt sich ein zeitlicher Verlauf des Zeitversatzes Δt_+ bestimmen. Dieser zeitliche Verlauf ist für die Simulation `sim_ref` mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens in Abb. 6.7d dargestellt. In dem betrachteten zeitlichen Bereich erreicht der Zeitversatz Δt_+ einen Maximalwert von etwa 23 % der Durchlaufzeit t_0 einer akustischen Welle vom Einlass zum Auslass. Unter Berücksichtigung der enorm großen Anzahl von Durchläufen der akustischen Welle zwischen den Rändern kann diese Abweichung als gering bewertet werden.

6.2 Zusammenfassung der Analyse verschiedener Variationen des SPH-Verfahrens

In Anhang A.5 werden verschiedene Variationen des SPH-Verfahrens anhand der zwei in Abschnitt 6.1 eingeführten eindimensionalen Testfälle untersucht. In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Erkenntnisse dieser Untersuchung zusammengefasst. Als Bewertungskriterien für diese Variationen dienen die Quantifizierung unphysikalischer Oszillationen der Strömungsvariablen, die Abweichung der Strömungsvariablen von der analytischen Lösung des Testfalls A sowie die zeitliche Übereinstimmung mit dem Simulationsergebnis einer FV-Simulation bei dem Testfall B. Außerdem wird anhand des Testfalls A die Massenerhaltung für den stationären Strömungszustand analysiert.

Unter anderem wird der Einfluss des in dieser Arbeit entwickelten Ansatzes zur linearen Extrapolation der Strömungszustände an den Geisterpartikeln untersucht (vgl. Abschnitt 5.3.1). Diesbezüglich ist festzustellen, dass die Ergebnisse bei Anwendung des hier vorgeschlagenen Ansatzes hinsichtlich aller betrachteten Kriterien signifikant verbessert werden (vgl. Abschnitt A.5.1 in Anhang A.5).

Hinsichtlich der Verfahren zur Verminderung der numerischen Unzulänglichkeiten der SPH-Methode (vgl. Abschnitt 4.4) können die folgenden Schlussfolgerungen gezogen werden: Die Korrektur des Kernel-Gradienten (vgl. Abschnitt 4.4.1 und Abschnitt A.5.2 in Anhang A.5) bei der Berechnung des Druckgradienten ist notwendig, um die Stabilität des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern zu gewährleisten. Die Genauigkeit der Simulationsergebnisse wird durch die Anwendung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Geschwindigkeitsdivergenz und insbesondere bei der Berechnung des Druckgradienten erhöht. Zudem wird die Massenbilanz bei der Anwendung der Korrektur auf die zuvor genannten Terme verbessert. Die Anwendung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Diffusionsterme zeigt hingegen keinen Vorteil. Im Hinblick auf die Verletzung der Massen- und Impulserhaltung bei Anwendung der Korrektur des Kernel-Gradienten sollte diese daher bei der Berechnung der Dichtediffusions- und Viskositätsterme nicht angewendet werden.

Durch die Anwendung der diskreten Approximation zur Dichteberechnung (vgl. Abschnitt 4.4.2 und Abschnitt A.5.3 in Anhang A.5) sind keine Vorteile hinsichtlich der Stabilität, sondern lediglich eine stärkere Dissipativität des Verfahrens festzustellen. Zudem ist eine verringerte Genauigkeit und eine schlechtere Massenbilanz bei Anwendung dieser Ansätze erkennbar. Zur Berechnung der Fluidichte muss somit die Kontinuitätsgleichung appliziert werden.

Ohne die Anwendung des Dichtediffusionsansatzes (vgl. Abschnitt 4.4.3 und Abschnitt A.5.4 in Anhang A.5) können die Simulationen aufgrund von numerischen Instabilitäten nicht durchgeführt werden. Der Absolutwert des entsprechenden Diffusionsterms in der Kontinuitätsgleichung kann allerdings verringert werden, ohne dass Nachteile hinsichtlich der Stabilität des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern bei der Berechnung des Testfalls A zu verzeichnen sind. Hierdurch ließen sich die Massenbilanz und insbesondere die Genauigkeit des Verfahrens weiter verbessern. Bei einer Verringerung des Betrags des Dichtediffusionsterms bei der Berechnung des Testfalls B sind hingegen Überschwinger des Fluidrucks in der Nähe von großen Druckgradienten zu erkennen. Daher wird von einer Verringerung des Betrags des Dichtediffusionsterms abgesehen.

Bei der Anwendung des Partikelverschiebungsansatzes (vgl. Abschnitt 4.4.4 und Abschnitt A.5.5 in Anhang A.5) sind positive Effekte auf die Stabilität und Massenbilanz des Verfahrens zu konstatieren. Die Intensität der Partikelverschiebung sollte daher bei einer gegebenen Zeitschrittweite innerhalb der Stabilitätsgrenzen maximiert werden.

Im Zusammenhang mit der Massenbilanz können darüber hinaus die folgenden Schlussfolgerungen gezogen werden: Wie bereits in Abschnitt 6.1.1 erläutert wurde, wird die Massenbilanz hauptsächlich durch die Dichtediffusions- und Dichtekorrekturterme bestimmt. Der Dichtediffusionsterm wirkt sowohl auf die Massenbilanz der Randsegmente als auch auf die der Partikel. Der Nettomassenstrom, der sich aufgrund der Dichtediffusion zwischen den Einlass- und Aus-

lassrändern ergibt, wird durch Unterschiede der konvektiven Massenströme an den Rändern kompensiert. Dadurch entsteht eine Diskrepanz der konvektiven Massenströme zwischen den Randsegmenten der Eintritts- und Austrittsränder. Dieses Ungleichgewicht lässt sich lediglich durch eine Reduzierung des Betrags des Dichtediffusionsterms in der Kontinuitätsgleichung verringern. Da die Anwendung des Dichtediffusionsterms aus Stabilitätsgründen zwingend erforderlich ist, ist die Reduzierung des Betrags des Dichtediffusionsterms begrenzt. Über die Massenerhaltungsgleichung entsteht zudem eine äquivalente Massenänderung der Partikel aufgrund von Dichtediffusion. Für die Summe der Dichtediffusionsmassenströme aller Partikel des Rechengebiets ist eine gute Übereinstimmung mit der zuvor erläuterten Diskrepanz der konvektiven Massenströme der Randsegmente festzustellen. Auch bei den Partikeln wird der Nettomassenstrom der Dichtediffusion über einen sich entlang des Rechengebiets verändernden konvektiven Massenstrom kompensiert. In diesem Zusammenhang ist eine der wichtigsten Erkenntnisse, dass die Eliminierung des Dichtediffusionsterms aus der Massenerhaltungsgleichung der Partikel des Rechengebiets nicht zweckdienlich ist, um die Massenbilanz zu verbessern (vgl. Abschnitt A.5.6 in Anhang A.5). Stattdessen führt diese Maßnahme zu einer Inkonsistenz zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel des Rechengebiets und der Randsegmente. Daher muss der Dichtediffusionsterm in der Massenerhaltungsgleichung der Partikel zwingend angewendet werden. Um den Massenaustausch über die Rechengebietsränder aufgrund von Dichtediffusion zu unterbinden, wird außerdem eine Eliminierung der Interaktionsterme zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln untersucht. Diese Maßnahme führt ebenfalls zu Diskrepanzen zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und der Randsegmente sowie zusätzlich zu einer Verschlechterung der Stabilität und Genauigkeit des Verfahrens (vgl. Abschnitt A.5.4 in Anhang A.5). Im Gegensatz dazu wird gezeigt, dass aus der Eliminierung des Dichtekorrekterterms aus der Massenerhaltungsgleichung der Partikel eine Verbesserung der Übereinstimmung zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und der Randsegmente resultiert (vgl. Abschnitt A.5.6 in Anhang A.5). Als Begründung kann angeführt werden, dass nur die Massenbilanz der Partikel des Rechengebiets und nicht die der Randsegmente durch den Dichtekorrekterterm beeinflusst wird. Daher sollte dieser Term nicht in der Massenerhaltungsgleichung angewendet werden. Außerdem wird der Ansatz eines vollständigen Erzwingens eines Gleichgewichts zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und Randsegmente (über die in Abschnitt 5.4 erläuterte Vorgehensweise hinaus) untersucht (vgl. Abschnitt A.5.1 in Anhang A.5). Diese Maßnahme ist als nachteilig zu bewerten, da sie zu einer Akkumulation von Partikelmasse im Rechengebiet führt. Ohne ein vollständiges Erzwingen dieses Gleichgewichts bleibt die Masse im Rechengebiet während des stationären Zustands der Simulation im zeitlichen Mittel konstant.

6.3 Auswahl und Bewertung der optimierten Konfiguration

Auf Basis der in Abschnitt 6.2 zusammengefassten Erkenntnisse werden ausgehend von der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens (vgl. Konfiguration `sim_ref`) die folgenden Modifikationen des SPH-Verfahrens definiert:

- Der Dichtekorrekterterm wird nicht in der Massenerhaltungsgleichung angewendet.

- Die Korrektur des Kernel-Gradienten wird nicht auf die diffusiven Terme in der Kontinuitätsgleichung, der Massenerhaltungsgleichung und der Impulsgleichung angewendet.

In Tab. 6.3 werden die Kennwerte der Massenbilanz zwischen der Referenzkonfiguration (`sim_ref`) und der finalen modifizierten Konfiguration (`sim_mod`) verglichen. Durch die Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Dichtediffusionsterme und durch die Eliminierung des Dichtekorrektureterms aus der Massenerhaltungsgleichung sind der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,\Omega}$ auf Basis von Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets sowie alle Dichtekorrekturemassenströme bei der Simulation `sim_mod` gleich null. Der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$, der sich aus den Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln auf Basis von Dichtediffusion ergibt, ist bei der Simulation `sim_mod` der einzige Massenstrom, der durch den konvektiven Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Partikel kompensiert werden muss. Eine nahezu vollständige Kompensation wird erreicht, sodass der Gesamtpartikelmassenstrom $\dot{M}_{p,\partial\Omega}$ durch den Gebietsrand bei der Simulation `sim_mod` nahezu gleich null ist. Der Nettomassenstrom $\dot{M}_p$ der Partikel ist ebenfalls vernachlässigbar, da darüber hinaus kein Nettomassenstrom innerhalb des Rechengebiets erzeugt wird ($\dot{M}_{p,\Omega} = 0$). Aufgrund der Eliminierung der Dichtekorrekturemassenströme am Rand wird die Übereinstimmung der Partikelmassenströme $\dot{M}_{p,l}$ und $\dot{M}_{p,r}$ der einzelnen Ränder mit dem analytischen Massenstrom bei der Simulation `sim_mod` enorm verbessert. Weil die Kompensation des Dichtekorrekturemassenstroms durch den konvektiven Partikelmassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ entfällt, ist auch eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den konvektiven Massenströmen $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ und $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente und der Partikel zu verzeichnen. Insbesondere am Auslassrand r stellt dies eine Verbesserung im Vergleich zur Referenzsimulation dar. Die Differenz $\Delta\dot{M}_{c,r}$ der konvektiven Massenströme an diesem Rand ist nun vernachlässigbar klein. Es ergibt sich eine sehr geringe Differenz $\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$ der konvektiven Massenstromungleichgewichte der Partikel und Randsegmente. Das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ ist wie bei der Simulation `sim_ref` gleich dem Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion. In Tab. 6.2 werden die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zwischen den Simulationen `sim_ref` und `sim_mod` verglichen. Es ist zu erkennen, dass durch die Modifikationen gegenüber der Referenzkonfiguration keine nennenswerten Unterschiede dieser Kenngrößen eingeführt werden. Auch für das Abklingverhalten der Druckmaxima am Eintrittsrand (vgl. Abb. 6.7c) und für den zeitlichen Versatz der Druckoszillationen am Eintrittsrand (vgl. Abb. 6.7d) sind keine nennenswerten Unterschiede im Vergleich zu der Referenzsimulation `sim_ref` zu verzeichnen.

Es lässt sich schlussfolgern, dass das entwickelte Verfahren eine sehr gute Stabilität aufweist. Die Fluktuationen der Strömungsvariablen weisen vernachlässigbare Größenordnungen auf. Darüber hinaus kann die Massenbilanz als sehr gut bewertet werden. Wie zuvor erläutert wurde, ergibt sich ein numerischer Massenstrom aufgrund des Dichtediffusionsterms, durch den sich zwischen den Rändern ein Ungleichgewicht der konvektiven Massenströme einstellt. Unter Anwendung eines Embedded-SPH-Verfahrens wären die Massenströme an den Kopplungsrändern im stationären Strömungszustand daher leicht unterschiedlich. Bei durchströmten geschlossenen Rechengebieten mit einem eingebetteten SPH-Rechengebiet könnte diese Diskrepanz zu einer

Anreicherung oder Reduzierung der Masse der einzelnen Rechengebiete führen. Da das diskutierte Massenstromungleichgewicht in der Größenordnung eines Zehntausendstels des Referenzmassenstroms liegt, wäre allerdings ein extrem großes physikalisches Zeitintervall notwendig, um eine nennenswerte Änderung der Rechengebietsmasse festzustellen. Darüber hinaus sind die Rechengebiete bei der Simulation technisch relevanter Anwendungsfälle in der Verbrennungstechnik stets offen. In diesem Fall hat ein Ungleichgewicht dieser geringen Größenordnung keinen Einfluss auf das Simulationsergebnis. Zudem ist die Übereinstimmung zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und der Randsegmente außerordentlich gut. Daher sollte an einem Kopplungsrand ein sehr gutes Gleichgewicht zwischen den Massenströmen der gekoppelten Rechengebiete sowohl zu jedem Zeitpunkt als auch an jedem Ort erreicht werden. Für das entwickelte Verfahren ist insgesamt eine sehr gute Massenbilanz zu konstatieren.

In diesem Kapitel wurde das SPH-Verfahren mit offenen Rändern erfolgreich anhand eindimensionaler Testfälle validiert und optimiert. In Kapitel 7 wird das Verfahren anhand komplexer zweidimensionaler Testfälle validiert. Mit dieser Validierung soll dargelegt werden, dass das Verfahren zur Simulation technisch relevanter Strömungsphänomene geeignet ist. Darüber hinaus wird in Anhang A.6 die Tauglichkeit des Verfahrens zur Simulation nichtreflektierender offener Ränder demonstriert.

7 Anwendung des SPH-Verfahrens auf zweidimensionale Testfälle

In Kapitel 5 wurde ein neues Verfahren für offene und gekoppelte Randbedingungen entwickelt. Dieses Verfahren wurde unter Anwendung eindimensionaler Testfälle in Kapitel 6 hinsichtlich der Genauigkeit, der Stabilität und der Massenerhaltung optimiert. Auf Basis dieser Optimierung wurde die finale Konfiguration des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern abgeleitet, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit angewendet werden soll. In diesem Kapitel werden zweidimensionale akademische Testfälle untersucht. Es soll gezeigt werden, dass das Verfahren auch für mehrdimensionale Problemstellungen geeignet ist. Daher wird in Abschnitt 7.1 der Testfall einer Poiseuille-Strömung untersucht. Außerdem wurden bisher nur Simulationen mit einfachen offenen Rändern analysiert. In diesem Kapitel wird die Analyse auf Simulationen ausgeweitet, bei denen entsprechend einer Embedded-SPH-Konfiguration ein SPH-Rechengebiet in ein FV-Rechengebiet eingebettet ist. Dieser Ansatz wird in Abschnitt 7.1 ebenfalls für den Testfall einer Poiseuille-Strömung dargestellt. In den darauffolgenden Abschnitten 7.2 und 7.3 wird die Anwendbarkeit des Verfahrens bei Vorliegen zweier wesentlicher, komplexer Eigenschaften von technisch relevanten Strömungen untersucht. In Kapitel 2 wurde herausgestellt, dass bei technisch relevanten Konfigurationen an der Kopplungsschnittstelle zwischen den Rechengebieten der SPH- und der FV-Methode beliebig komplexe Strömungsfelder auftreten können. Zum einen können diese Strömungsfelder Wirbel enthalten, wodurch die Strömung an demselben Kopplungsrand in das SPH-Rechengebiet eintreten und aus dem SPH-Rechengebiet austreten kann. Die Tauglichkeit des vorliegenden Verfahrens zur Behandlung von Wirbeln am Kopplungsrand wird in Abschnitt 7.2 anhand der Simulation einer Kavitätenströmung demonstriert. Zum anderen können die Strömungsfelder am Kopplungsrand hochgradig instationär sein. Die Tauglichkeit des vorliegenden Verfahrens zur Behandlung instationärer Strömungsfelder wird in Abschnitt 7.3 anhand der Simulation einer Strömung um einen Zylinder demonstriert. Die Ergebnisse werden in den folgenden Abschnitten unter anderem mit Referenzergebnissen verglichen, die auf Basis von Simulationen mit der FV-Methode generiert wurden. Das FV-Verfahren wurde in Abschnitt 5.5 bereits kurz erläutert und ist mit Ausnahme der räumlichen Diskretisierung des Geschwindigkeitsdivergenzterms identisch mit dem in Abschnitt 6.1.2 verwendeten Verfahren. Für die Diskretisierung des Geschwindigkeitsdivergenzterms wird hier statt eines Upwind-Verfahrens ein TVD-Verfahren verwendet. Dasselbe FV-Verfahren wird auch bei den nachfolgend dargestellten Embedded-SPH-Simulationen für die FV-Rechengebiete appliziert.

7.1 Poiseuille-Strömung

In diesem Abschnitt wird der Testfall einer Poiseuille-Strömung unter Anwendung von offenen und gekoppelten Rändern untersucht. Dieser Testfall kann als zweidimensionale Erweiterung des Testfalls A, der in Kapitel 6 analysiert wurde, angesehen werden. Anhand dieses Testfalls soll gezeigt werden, dass das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren für offene und gekoppelte Randbedingungen auf zweidimensionale Testfälle angewendet werden kann. Die Ergebnisse werden mit Referenzergebnissen verglichen, die auf Basis von Simulationen mit der FV-Methode gene-

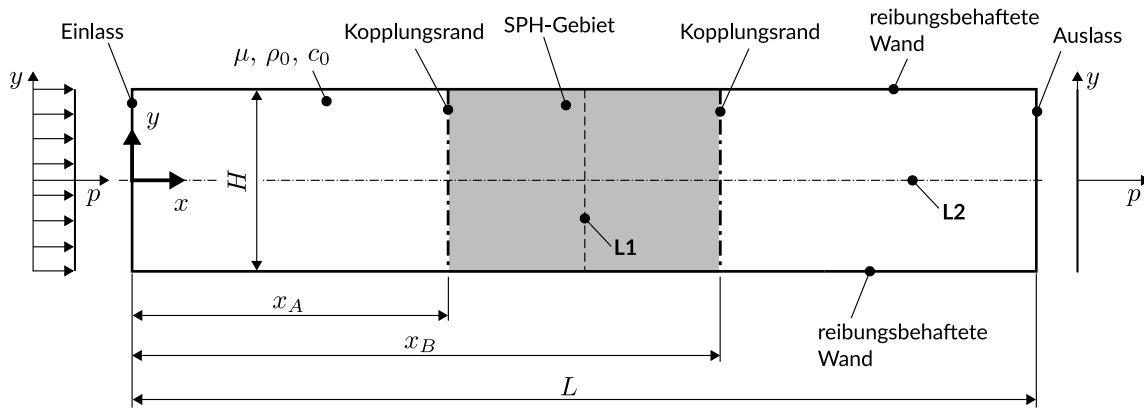


Abbildung 7.1: Rechengebiet des Testfalls der Poiseuille-Strömung. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

riert wurden. Das FV-Verfahren wurde zu Beginn dieses Kapitels kurz dargelegt. In Abschnitt 7.1.1 wird die Konfiguration des Testfalls erläutert. In Abschnitt 7.1.2 werden die Ergebnisse der Simulationen dargestellt.

7.1.1 Beschreibung des Testfalls

Der Testfall der Poiseuille-Strömung ist in Abb. 7.1 veranschaulicht. In Tab. 7.1 sind die geometrischen Parameter sowie die Fluideigenschaften zusammengefasst. Die Geometrie des Testfalls besteht aus einem ebenen Kanal der Länge $L = 0,01$ m. Das Koordinatensystem (x, y) ist am Schnittpunkt zwischen dem linken Rand des Kanals und der Mittelachse des Kanals positioniert. Die Koordinatenrichtung x bzw. y verläuft entlang der Mittelachse bzw. der Höhe des Kanals. Das Verhältnis H_+ der Kanalhöhe H zur Kanallänge L beträgt $H_+ = H/L = 0,2$. Im Falle der Embedded-SPH-Simulation wird das SPH-Rechengebiet in der Mitte des Kanals zwischen den Positionen $x_A/L = 0,35$ und $x_B/L = 0,65$ definiert.

Sowohl der linke als auch der rechte Rand der Geometrie sind als offene Ränder definiert, an denen entlang der Kanalhöhe homogene Fluidruckverteilungen als Dirichlet-Randbedingungen

Tabelle 7.1: Fluideigenschaften und Referenzwerte des Testfalls der Poiseuille-Strömung

Eigenschaft	Wert	Einheit
L	0,01	m
H/L	0,2	–
x_A/L	0,35	–
x_B/L	0,65	–
ρ_0	1	kg/m ³
γ	7	–

aufgeprägt werden. Hierdurch entsteht in dem Rechengebiet ein Druckgefälle, über das eine Strömung vom linken Rand l zum rechten Rand r entsteht. Der Druck am Auslassrand r wird bei allen in diesem Abschnitt dargestellten Simulationen als $p = 0 \text{ N/m}^2$ definiert. Außerdem wird bei allen Simulationen am linken Rand l eine Dirichlet-Randbedingung für die transversale Geschwindigkeitskomponente $u_y = 0 \text{ m/s}$ definiert. Sowohl der obere als auch der untere Rand sind als reibungsbehaftete Wände definiert, an denen Dirichlet-Randbedingungen für die Geschwindigkeitskomponenten $u_x = 0 \text{ m/s}$ (in x -Richtung) und $u_y = 0 \text{ m/s}$ (in y -Richtung) aufgeprägt werden. Bei den Simulationen mit der SPH-Methode wird der NSCBC-Ansatz zur Berechnung des Strömungsfelds am Rand angewendet (vgl. Abschnitt 5.2.3). Genauso wie bei der Modellierung offener Ränder werden Wände mit statischen Geisterpartikeln räumlich diskretisiert. An allen Rändern werden die Strömungszustände der Geisterpartikel durch eine lineare Extrapolation der Strömungszustände der Randsegmente bestimmt (vgl. Abschnitt 5.3). Da keine Implementierung der NSCBC-Randbedingungen für die FV-Methode zur Verfügung steht, werden bei den Simulationen mit der FV-Methode stattdessen von Neumann-Randbedingungen an den offenen Rändern für die axiale Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit sowie an den Wänden für den Fluiddruck aufgeprägt. Alle in diesem Abschnitt dargestellten Simulationen wurden mit einem normierten Referenzpartikelabstand von $r_{\text{ref}}/L = 0,01$ durchgeführt. Zu Beginn der Simulationen werden die Partikel entsprechend eines äquidistanten Gitters angeordnet. Demnach ergibt sich eine Anzahl von 100 Partikeln entlang der x -Richtung und eine Anzahl von 20 Partikeln entlang der y -Richtung. Die Glättungslänge des Kernels wird bei allen Simulationen gleich dem Referenzpartikelabstand definiert ($h = r_{\text{ref}}$). Das Rechengitter der FV-Simulationen hat eine äquivalente räumliche Auflösung und ist kartesisch. Die Zeitschrittweiten werden gemäß Gl. 4.82 für beide Lösungsverfahren identisch gewählt.

Die Randbedingungen der in diesem Abschnitt dargestellten Simulationen werden unter Anwendung von Gl. 6.3, Gl. 6.4 und Gl. 6.6 definiert. Diese Gleichungen wurden im Zusammenhang mit dem Testfall A in Abschnitt 6.1.1 eingeführt, um die über der Kanalhöhe H gemittelten Werte des Fluiddrucks und der Hauptströmungskomponente $\bar{u}_x$ (in Abschnitt 6.1.1 u genannt) der Fluidgeschwindigkeit einer Poiseuille-Strömung in einem eindimensionalen Rechengebiet zu approximieren. Der Parameter k , der in den zuvor genannten Gleichungen vorkommt, ist für den zweidimensionalen Fall wie folgt definiert:

$$k = \frac{12}{H_+} \frac{\gamma \text{Ma}^2}{\text{Re}} \quad (7.1)$$

In Gl. 7.1 sind $\text{Re} = u_0 \rho_0 H / \mu$ und $\text{Ma} = u_0 / c_0$ die Reynolds-Zahl und die Mach-Zahl. Die Referenzgeschwindigkeit $u_0 = \bar{u}_{x,l}$ ist in diesem Fall gleich der am Eintrittsrand l über der Kanalhöhe H gemittelten Hauptströmungskomponente $\bar{u}_{x,l}$ der Fluidgeschwindigkeit. Bei der eindimensionalen Approximation der Poiseuille-Strömung in Kapitel 6 wurde ein Referenzwert der Fluidgeschwindigkeit von $u_0 = 10 \text{ m/s}$, eine dynamische Viskosität von $\mu = 0,001 \text{ kg/(m s)}$ sowie eine Mach-Zahl von $\text{Ma} = 0,1$ angewendet. Daraus resultiert ein Verhältnis der Fluidichten ρ_l und $\rho_r = \rho_0$ der Eintritts- und Austrittsränder des Rechengebiets von $\rho_l / \rho_0 = 1,028$. In diesem Abschnitt soll ausgehend von dieser Konfiguration eine Variation der dynamischen Viskosität μ (zwecks einer Variation der Reynolds-Zahl Re) sowie eine Variation des maximalen

Dichteverhältnisses ρ_l/ρ_0 des Rechengebiets durchgeführt werden. Es soll gezeigt werden, dass das vorliegende Verfahren für laminare Strömungen für einen weiten Bereich der Reynolds-Zahl anwendbar ist. Die Untersuchung turbulenter Strömungen wird Folgearbeiten überlassen. Hierfür wäre die Implementierung eines Turbulenzmodells oder die Applizierung einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) mit einer hinreichend großen Partikelauflösung des Rechengebiets notwendig.

Die homogene Druckrandbedingung p_l am linken Rand l , das maximale Dichteverhältnis ρ_l/ρ_0 , die dynamische Viskosität μ , die mittlere Strömungsgeschwindigkeit $\bar{u}_{x,l}$ am linken Rand l , die Reynolds-Zahl Re , die Euler-Zahl $Eu = p_l/\rho_0 u_0^2$ und die Mach-Zahl Ma sind für die in diesem Abschnitt dargestellten Simulationen in Tab. 7.2 zusammengefasst. Die Simulation `sim_1a` entspricht der im letzten Absatz erläuterten Konfiguration, die bereits in Kapitel 6 untersucht wurde. Für diese Simulation ergibt sich eine Reynolds-Zahl von $Re = 20$. Die Ergebnisse dieser Simulation wurden erstmalig in der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021) gezeigt. Die Simulation `sim_1b` ist im Vergleich zu der Simulation `sim_1a` durch ein auf $\rho_l/\rho_0 = 1,01$ verringertes maximales Dichteverhältnis charakterisiert. Die Simulationen `sim_2a` und `sim_2b` weisen im Vergleich zu den Simulationen `sim_1a` und `sim_1b` eine verringerte dynamische Viskosität von $\mu = 1 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m s)}$ bei jeweils gleichem Dichteverhältnis auf. Dadurch erhöht sich die Reynolds-Zahl für diese Simulationen auf einen Wert von $Re = 200$. Bei der Simulation `sim_2c` wird die Mach-Zahl auf einen Wert von $Ma = 0,1$ verringert, woraus sich eine weitere Verringerung des maximalen Dichteverhältnisses auf einen Wert von $\rho_l/\rho_0 = 1,003$ ergibt. Die Mach-Zahl dieser Simulation entspricht der Mach-Zahl der Simulation `sim_1a`. Die Simulationen `sim_3a` und `sim_3b` sind im Vergleich zu den Simulationen `sim_2a` und `sim_2b` durch eine weitere Verringerung der dynamischen Viskosität auf einen Wert von $\mu = 1 \cdot 10^{-5} \text{ kg/(m s)}$ bei jeweils gleichem Dichteverhältnis charakterisiert. Die Simulation `sim_3c` ist darüber hinaus für denselben Wert der Mach-Zahl ($Ma = 0,1$) wie die Simulationen `sim_1a` und `sim_2c` definiert. Auf Basis der erläuterten Simulationen wird ein Zielbereich der Reynolds-Zahl von $Re = 20$ bis $Re = 2000$ und ein Bereich der Euler-Zahl von $Eu = 0,03$ bis $Eu = 3$ abgedeckt. Die

Tabelle 7.2: Zusammenfassung wichtiger Kenngrößen der Poiseuille-Strömung für die durchgeführten Simulationen

Simulation	p_l [N/m ²]	ρ_l/ρ_0 [–]	μ [kg/(m s)]	$\bar{u}_{x,l} = u_0$ [m/s]	Re [–]	Eu [–]	Ma [–]
<code>sim_1a</code>	304,02	1,027 95	$1 \cdot 10^{-3}$	10	20	3,00	0,10
<code>sim_1b</code>	301,48	1,010 00	$1 \cdot 10^{-3}$	10	20	3,00	0,06
<code>sim_2a</code>	30,40	1,027 95	$1 \cdot 10^{-4}$	10	200	0,30	0,32
<code>sim_2b</code>	30,15	1,010 00	$1 \cdot 10^{-4}$	10	200	0,30	0,18
<code>sim_2c</code>	30,04	1,002 98	$1 \cdot 10^{-4}$	10	200	0,30	0,10
<code>sim_3a</code>	3,04	1,027 95	$1 \cdot 10^{-5}$	10	2000	0,03	1,00
<code>sim_3b</code>	3,01	1,010 00	$1 \cdot 10^{-5}$	10	2000	0,03	0,58
<code>sim_3c</code>	3,00	1,000 30	$1 \cdot 10^{-5}$	10	2000	0,03	0,10

kinematische Viskosität bei den Simulationen `sim_3a`, `sim_3b` und `sim_3c` liegt außerdem im selben Bereich wie die von technisch relevanten Flüssigbrennstoffen und die von Luft bei technisch relevanten thermodynamischen Randbedingungen.

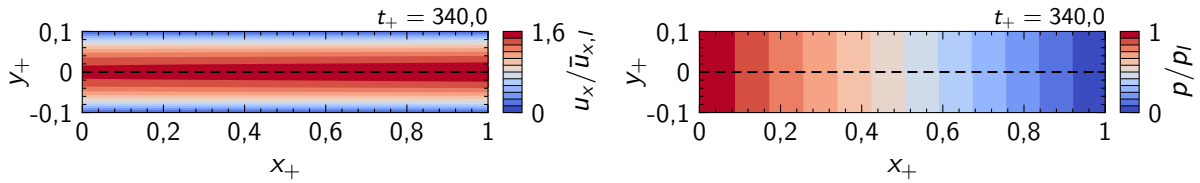
7.1.2 Auswertung

Zunächst werden die Ergebnisse der SPH- und der FV-Simulationen miteinander verglichen. Danach wird der Vergleich auf die Embedded-SPH-Simulation ausgeweitet. Durch das am Rechengebiet vom linken Rand zum rechten Rand aufgeprägte Druckgefälle wird eine Strömung in x -Richtung induziert. Die am linken Gebietsrand l über der Kanalhöhe H gemittelte Hauptströmungskomponente $\bar{u}_{x,l}$ der Fluidgeschwindigkeit ist ein Ergebnis der Simulation. Zur Bewertung der Genauigkeit des SPH-Verfahrens mit offenen Rändern werden die Ergebnisse, die mit der SPH-Methode berechnet wurden, in Tab. 7.3 mit den Ergebnissen der Simulationen, die mit der FV-Methode durchgeführt wurden, verglichen. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der FV- und der SPH-Simulationen festzustellen. Die maximale Diskrepanz der mittleren Geschwindigkeit $\bar{u}_{x,l}$ am Eintrittsrand zwischen den Ergebnissen der FV- und der SPH-Simulationen tritt bei der Simulation `sim_1b` auf und beträgt etwa 1,8 %. Bei den Simulationen `sim_2a`, `sim_3a` und `sim_3b` sind große Diskrepanzen zum Zielwert der mittleren Geschwindigkeit und entsprechend auch zum Zielwert der Reynolds-Zahl erkennbar (vgl. Tab. 7.3). Diese Simulationen sind durch eine vergleichsweise große Mach-Zahl Ma charakterisiert (vgl. Tab. 7.2). In diesem Fall ist die Annahme, dass das Fluid als inkompressibel behandelt werden kann, nicht mehr gegeben (vgl. Abschnitt 3.4). Da die Ergebnisse für diese Fälle zwischen den SPH- und den FV-Simulationen konsistent sind, ist das SPH-Verfahren als Ursache für die genannte Diskrepanz zum Zielwert der mittleren Geschwindigkeit auszuschließen. Bei

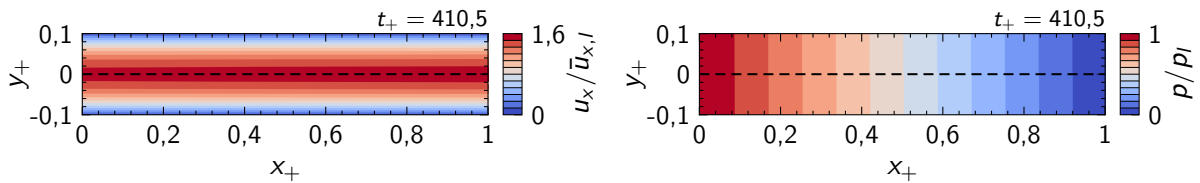
Tabelle 7.3: Vergleich zwischen den stationären Ergebnissen der SPH- und der FV-Simulationen für die entlang der Kanalhöhe H gemittelten Hauptströmungskomponente $\bar{u}_{x,l}$ der Fluidgeschwindigkeit und die entsprechende Reynolds-Zahl Re

Simulation	$\bar{u}_{x,l}$ [m/s]			Re [–]		
	Zielwert	FV	SPH	Zielwert	FV	SPH
<code>sim_1a</code>	10	9,91	10,08	20	19,8	20,2
<code>sim_1b</code>	10	10,00	10,18	20	20,0	20,4
<code>sim_2a</code>	10	8,95	9,05	200	179,0	181,0
<code>sim_2b</code>	10	9,59	9,73	200	191,8	194,6
<code>sim_2c</code>	10	9,90	10,07	200	198,1	201,4
<code>sim_3a</code>	10	5,84	5,76	2000	1168,9	1152,2
<code>sim_3b</code>	10	7,46	7,40	2000	1492,6	1480,4
<code>sim_3c</code>	10	9,91	10,01	2000	1981,1	2001,2

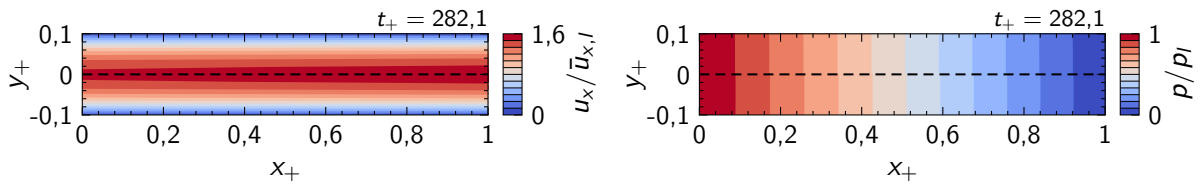
den SPH-Simulationen, die mit einer Mach-Zahl $Ma \leq 0,1$ durchgeführt wurden, liegt die Abweichung zum Zielwert der mittleren Strömungsgeschwindigkeit mit Ausnahme der Simulation `sim_1b` unterhalb 1 %. Die Abweichung bei der Simulation `sim_1b` beträgt 1,8 %.



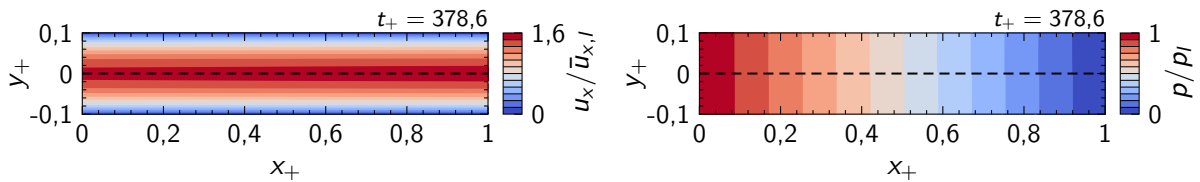
(a) `sim_1a`. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)



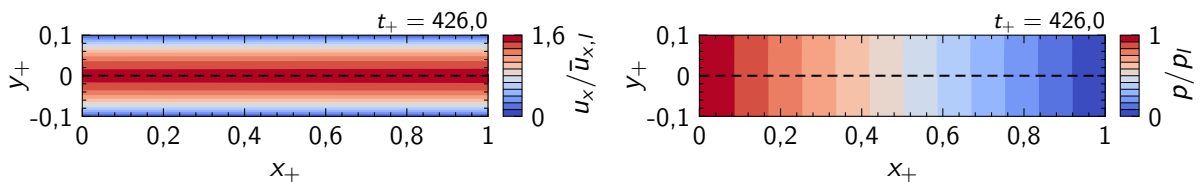
(b) `sim_1b`



(c) `sim_2a`

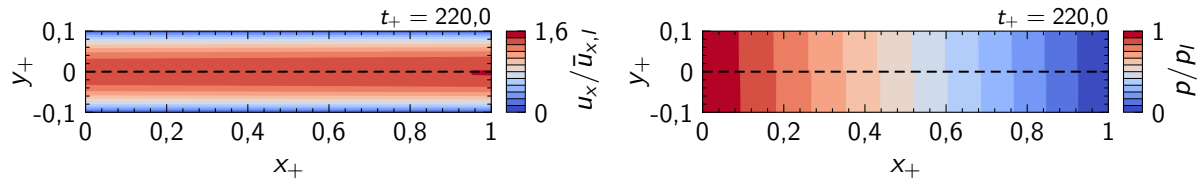


(d) `sim_2b`

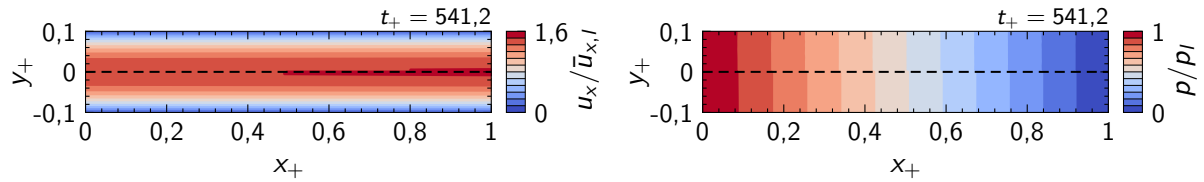


(e) `sim_2c`

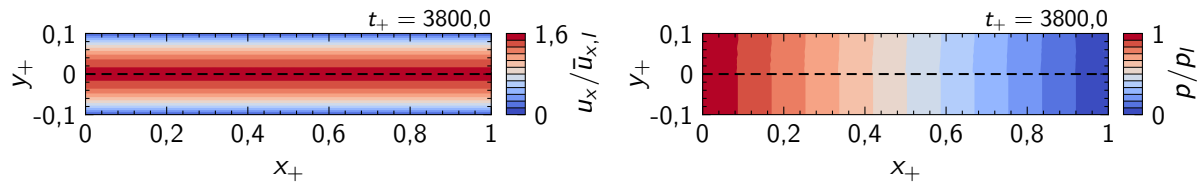
Abbildung 7.2: Normierte stationäre Profile der x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit (links) und des Fluiddrucks p (rechts). Vergleich zwischen den Ergebnissen der SPH-Simulationen (oberhalb der schwarzen gestrichelten Linie) und der FV-Simulationen (unterhalb der schwarzen gestrichelten Linie)



(f) sim_3a



(g) sim_3b



(h) sim_3c

Abbildung 7.2: Normierte stationäre Profile der x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit (links) und des Fluiddrucks p (rechts). Vergleich zwischen den Ergebnissen der SPH-Simulationen (oberhalb der schwarzen gestrichelten Linie) und der FV-Simulationen (unterhalb der schwarzen gestrichelten Linie). (Fortsetzung)

In Abb. 7.2 werden die Strömungsprofile innerhalb des Rechengebiets zwischen den Ergebnissen der SPH- und der FV-Methode miteinander verglichen. Auf der linken Seite ist jeweils das Profil der x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit und auf der rechten Seite das Profil des Fluiddrucks p dargestellt. Der Teil des Profils oberhalb der schwarzen gestrichelten Linie entspricht dem Ergebnis der Simulation mit der SPH-Methode. Der Teil unterhalb dieser Linie ist dem Ergebnis der Simulation mit der FV-Methode zuzuordnen. Die Profile werden für beide Lösungsverfahren durch eine Delaunay-Triangulierung des Rechengebiets auf Basis der Randflächen und Zellen (FV-Methode) bzw. auf Basis der Randsegmente und Partikel des inneren Rechengebiets (SPH-Methode) generiert. Die Strömungsgrößen in Abb. 7.2 sind jeweils mit dem am linken Rand l des Rechengebiets über der Kanalhöhe H gemittelten Wert normiert. Die dimensionslosen Koordinaten $x_+ = x/L$ und $y_+ = y/L$ werden durch eine Normierung der Ortskoordinaten mit der Kanallänge L berechnet. Die Profile werden zu Zeitpunkten entnommen, zu denen die Simulationen stationäre Strömungszustände erreicht haben. Die zugehörige dimensionslose physikalische Zeit $t_+ = t c_0 / L$ ist ebenfalls in Abb. 7.2 gekennzeichnet. Es ist sowohl für die Profile der Fluidgeschwindigkeit als auch für die des Fluiddrucks eine exzellente Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der SPH- und der FV-Simulationen zu konstatieren.

Eine weitere wichtige Überprüfung der Genauigkeit des vorliegenden Verfahrens ist durch den Vergleich der Ergebnisse der SPH- und der FV-Methode für die Profile der x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit entlang der Kanalhöhe H gegeben. Im Falle einer inkompressiblen Poiseuille-Strömung ergibt sich ein parabolisches Strömungsprofil entlang der Kanalhöhe (Stokes, 1880). Wie z. B. in der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021) gezeigt wird, ist daher die x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit durch die folgende Funktion der normierten y -Koordinate am Einlassrand definiert:

$$u_x = \frac{3}{2} \left[1 - \left(\frac{2y_+}{H_+} \right)^2 \right] \bar{u}_{x,l} \quad (7.2)$$

In Abb. 7.3 ist die x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit über der Kanalhöhe H (also für $-0,1 \leq y_+ \leq 0,1$) für die durchgeführten Simulationen aufgetragen. Dabei werden die Ergebnisse der SPH-Methode mit denen der FV-Methode verglichen. Beide Ergebnisse sind auf die jeweils berechnete mittlere Fluidgeschwindigkeit $\bar{u}_{x,l}$ am Eintrittsrand normiert (vgl. Tab. 7.3). Zusätzlich ist das parabolische Strömungsprofil gemäß der analytischen Lösung (vgl. Gl. 7.2) in Abb. 7.3 dargestellt. Im Falle der Simulationen mit verhältnismäßig geringer Mach-Zahl (sim_1a, sim_1b, sim_2b, sim_2c und sim_3c), die als quasi-inkompressibel angesehen werden können, ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem Ergebnis der SPH-Methode und der entsprechenden analytischen Lösung des Geschwindigkeitsprofils einer inkompressiblen Poiseuille-Strömung gemäß Gl. 7.2 festzustellen. Für die weiteren Simulationen, die bei einer verhältnismäßig hohen Mach-Zahl durchgeführt wurden, ist die Annahme eines quasi-inkompressiblen Fluids nicht erfüllt. Bei den Simulationen sim_3a und sim_3b treten daher Abweichungen des Geschwindigkeitsgradienten in der Nähe der festen Wände sowie Abweichungen des Maximalwerts der Fluidgeschwindigkeit in der Mitte des Kanals ($y_+ = 0$) auf. Für diese Fälle lässt sich allerdings eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der SPH- und der FV-Simulationen konstatieren.

In Tab. 7.4 sind analog zu der Analyse in Kapitel 6 die Kennzahlen für die Fluktuationen der Strömungsgrößen gemäß Gl. 6.11 dargestellt. Wie in Abschnitt 6.1.1 erläutert wurde, wird über den Operator $\mathbf{err}_t$ die gemittelte Standardabweichung einer beliebigen Strömungsgröße repräsentiert. Die Standardabweichung wird dabei an bestimmten Stützstellen des Rechengebiets berechnet und über den Ergebnissen an diesen Stützstellen gemittelt. Über den Index an dem Operator $\mathbf{err}_t$ in Tab. 7.4 wird ausgedrückt, welche Stützstellen hierfür verwendet werden. Der Index „ $\mathcal{K}, l$ “ bzw. „ $\mathcal{K}, r$ “ bezieht sich auf die Randsegmente am linken bzw. rechten Rand des Rechengebiets. Der Index „ $\mathcal{D}$ “ bezieht sich auf statische Stützstellen, die entlang eines äquidistanten Gitters auf Basis des mittleren Partikelabstands im Rechengebiet verteilt werden. An diesen Stützstellen werden die Strömungsgrößen mit einer Partikel-Approximation gemäß Gl. 4.11 interpoliert, um die Berechnung der Standardabweichung zu ermöglichen. Diese Werte repräsentieren demnach die Standardabweichung innerhalb des Rechengebiets. Wie in Abschnitt 6.1.1 erläutert wurde, wird bei der Berechnung des Operators $\mathbf{err}_t$ eine Normierung mit der Differenz zwischen den Werten am Einlass und Auslass der jeweiligen Strömungsgröße durchgeführt (vgl. Gl. 6.10). Da sich durch die Verringerung des Dichteverhältnisses ausgehend vom Referenzfall sim_1a sehr kleine Differenzen der Fluidgeschwindigkeit zwischen dem Eintritts- und Austrittsrand ergeben,

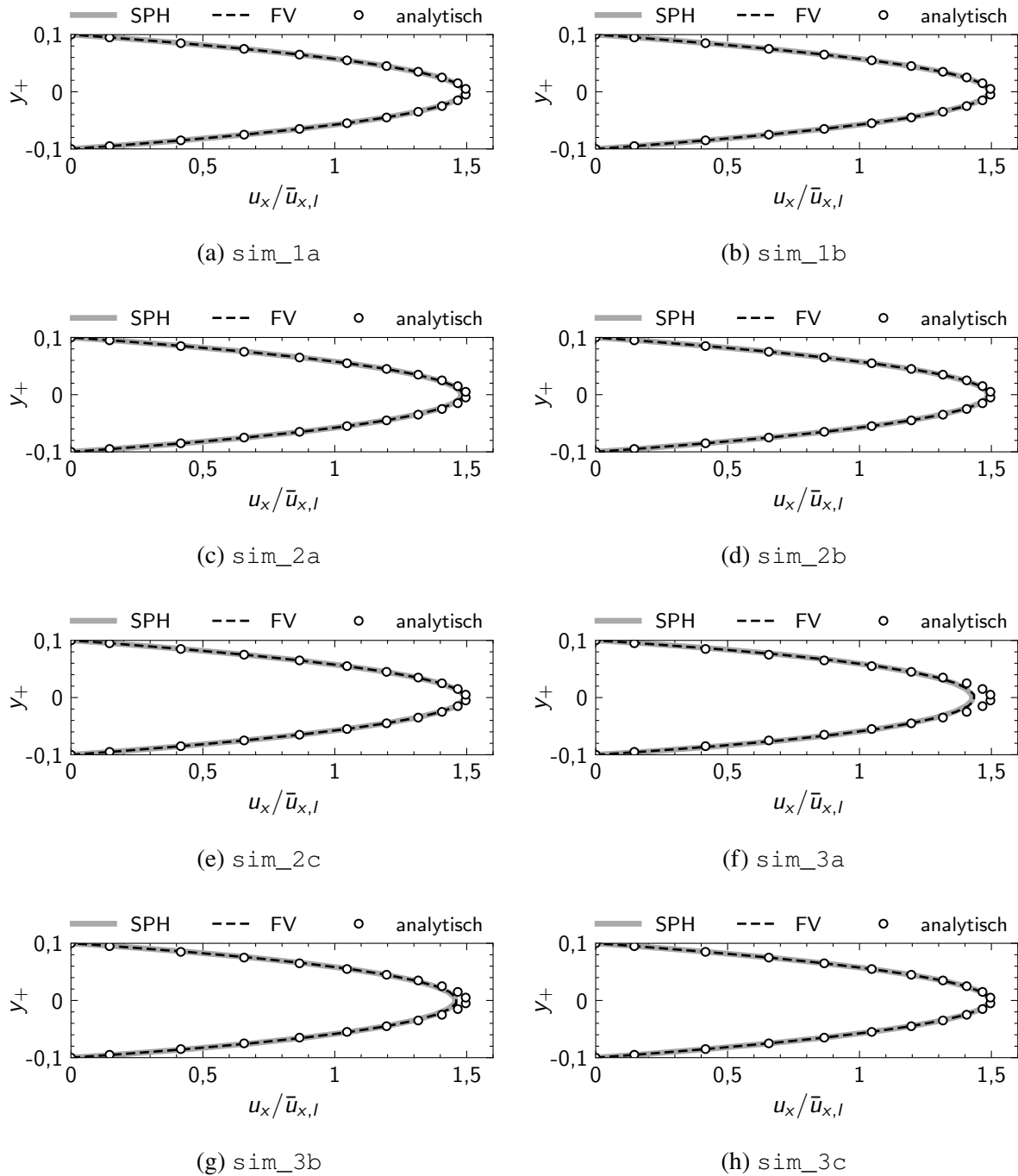


Abbildung 7.3: Vergleich zwischen den Ergebnissen der SPH- und der FV-Simulationen sowie den analytischen Lösungen für das normierte stationäre Profil der Hauptströmungskomponente u_x der Fluidgeschwindigkeit am Eintrittsrand l

wäre diese Art der Normierung zum Vergleich der Simulationen nicht sinnvoll. Daher werden alle Standardabweichungen der Fluidgeschwindigkeit mit der Differenz normiert, die sich für die Simulation `sim_1a` ergibt. Für die Standardabweichung $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p)$ des Drucks innerhalb des Rechengebiets ist mit Ausnahme der Simulation `sim_3c` nur eine geringfügige Variation zwischen den Simulationen zu konstatieren. Mit Verringerung des Dichteverhältnisses nimmt

Tabelle 7.4: Kennwerte für die Fluktuationen der Strömungsgrößen der Simulationen aus Tab. 7.2

Größe	Wert			
	sim_1a	sim_1b	sim_2a	sim_2b
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p)$	$7,98 \cdot 10^{-5}$	$1,34 \cdot 10^{-4}$	$8,16 \cdot 10^{-5}$	$1,11 \cdot 10^{-4}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},l}(u_x)$	$2,80 \cdot 10^{-3}$	$3,39 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^{-3}$	$1,39 \cdot 10^{-3}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},r}(u_x)$	$7,28 \cdot 10^{-3}$	$8,42 \cdot 10^{-3}$	$6,21 \cdot 10^{-3}$	$7,91 \cdot 10^{-3}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_x)$	$2,57 \cdot 10^{-3}$	$3,09 \cdot 10^{-3}$	$1,77 \cdot 10^{-3}$	$1,70 \cdot 10^{-3}$

Größe	Wert			
	sim_2c	sim_3a	sim_3b	sim_3c
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p)$	$3,00 \cdot 10^{-4}$	$8,99 \cdot 10^{-5}$	$1,46 \cdot 10^{-4}$	$2,00 \cdot 10^{-3}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},l}(u_x)$	$1,95 \cdot 10^{-3}$	$1,29 \cdot 10^{-3}$	$1,45 \cdot 10^{-3}$	$5,70 \cdot 10^{-2}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},r}(u_x)$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$5,10 \cdot 10^{-3}$	$5,33 \cdot 10^{-3}$	$5,89 \cdot 10^{-2}$
$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_x)$	$1,99 \cdot 10^{-3}$	$1,16 \cdot 10^{-3}$	$1,31 \cdot 10^{-3}$	$5,39 \cdot 10^{-2}$

die Standardabweichung zu. Bei der Simulation `sim_3c` ist das Dichteverhältnis des Eintritts- und Austrittsrandes sehr viel geringer als bei den übrigen Simulationen. Es besteht daher eine signifikant steifere Kopplung zwischen dem Fluidruck und der Fluidichte. Aus diesem Grund sind die Fluktuationen des Druckfelds bei dieser Simulation verhältnismäßig groß. Im Vergleich zu dem eindimensionalen Testfall in Kapitel 6 (vgl. Tab. 6.2) ist eine Vergrößerung der Standardabweichung um etwa eine Größenordnung (bzw. bei der Simulation `sim_3c` um zwei Größenordnungen) festzustellen. Die Fluktuationen können allerdings weiterhin als gering bewertet werden. Auch für die Standardabweichung $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_x)$ der Fluidgeschwindigkeit innerhalb des Rechengebiets ist erneut mit Ausnahme der Simulation `sim_3c` nur eine geringfügige Variation zwischen den Simulationen zu verzeichnen. Im Vergleich zu dem eindimensionalen Testfall in Kapitel 6 (vgl. Tab. 6.2) ist eine Vergrößerung der Fluktuationen um etwa zwei (bzw. bei der Simulation `sim_3c` um drei) Größenordnungen zu verzeichnen. Durch eine Normierung der Standardabweichung mit der Fluidgeschwindigkeit $\bar{u}_{x,l} \approx 10 \text{ m/s}$ am Eintrittsrand anstatt mit der Geschwindigkeitsdifferenz $\bar{u}_{x,r} - \bar{u}_{x,l} \approx 0,28 \text{ m/s}$ verringert sich die normierte Standardabweichung auf ca. 0,01 % (bzw. ca. 0,1 % bei der Simulation `sim_3c`). Diese Größenordnung ist ebenfalls als hinreichend gering zu bewerten. Es ist außerdem erkennbar, dass die Standardabweichung $\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},r}(u_x)$ am Austrittsrand (erneut mit Ausnahme der Simulation `sim_3c`) größer ist als die Standardabweichung $\mathbf{err}_{t,\mathcal{K},l}(u_x)$ am Eintrittsrand, die in derselben Größenordnung wie die Standardabweichung $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_x)$ innerhalb des Rechengebiets liegt.

Die Simulation `sim_1a` wurde zusätzlich unter Anwendung des Embedded-SPH-Verfahrens durchgeführt. Die Zerlegung des Rechengebiets ist in Abb. 7.1 dargestellt. Ein Anteil von 30 % des globalen Rechengebiets ist in der Mitte des Kanals dem SPH-Verfahren zugeordnet. Das SPH-Rechengebiet ist somit durch die obere und die untere Wand sowie durch die FV-Rechengebiete

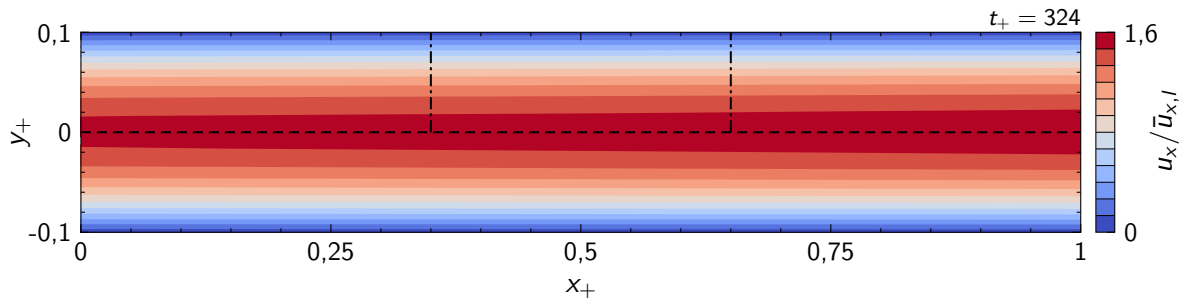
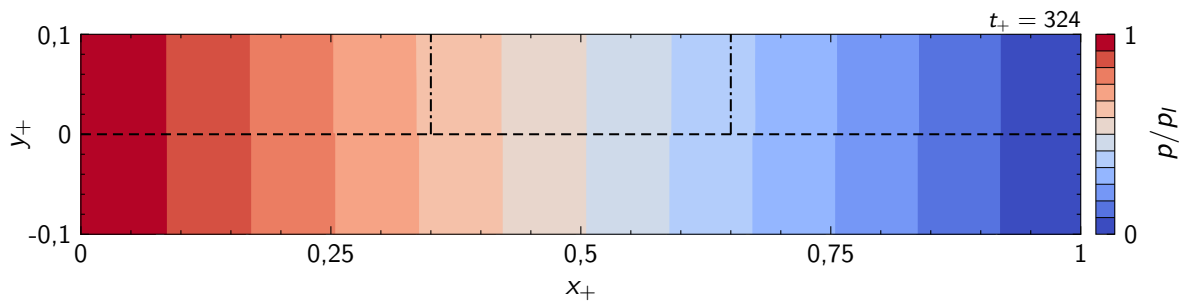
auf der linken und rechten Seite begrenzt. Die Kopplungsränder zwischen den Rechengebieten sind daher zwischen den reibungsbehafteten Wänden positioniert. Dieser Sachverhalt erfordert, dass die Kopplung der SPH- und der FV-Methode mit dem vorliegenden Ansatz auch an festen Wänden funktioniert. Dies ist eine anspruchsvolle Anforderung, da der Einfluss der festen Wände auf die beiden Methoden unterschiedlich sein kann. Es ist daher wichtig, die Wände bei beiden Lösungsverfahren möglichst identisch zu behandeln. Da das NSCBC-Verfahren für die FV-Methode nicht zur Verfügung steht, werden bei dieser Simulation auch für die SPH-Methode von Neumann-Randbedingungen für den Fluiddruck an den festen Wänden aufgeprägt. Hierzu wird der Fluiddruck von den wandnahen Partikeln des Rechengebiets an den Randsegmenten der festen Wände mit einer Partikel-Approximation gemäß Gl. 4.11 interpoliert. Der interpolierte Druck an den Randsegmenten wird dann über das in Abschnitt 5.3.1 erläuterte Verfahren auf die Geisterpartikel übertragen. Im Sinne einer von Neumann-Randbedingung wird allerdings der Gradient des Drucks in Gl. 5.17 zu null gesetzt.

Zur Bewertung der Genauigkeit wird in Tab. 7.5 das mit der Embedded-SPH-Simulation generierte Ergebnis der am Eintrittsrand l entlang der Kanalhöhe H gemittelten x -Komponente $\bar{u}_{x,l}$ der Fluidgeschwindigkeit mit den Ergebnissen der SPH- und der FV-Methode verglichen. Erwartungsgemäß liegt das Ergebnis der Embedded-SPH-Simulation zwischen den Ergebnissen der SPH- und der FV-Simulation. Mit der SPH-Methode wird eine höhere Geschwindigkeit bei einem gegebenen Druckgefälle bestimmt als mit der FV-Methode. Da im Vergleich zur FV-Simulation ein Teil des Rechengebiets mit der SPH-Methode berechnet wird, resultiert für diesen Teil ein geringerer Strömungswiderstand. Die Strömungsgeschwindigkeit steigt somit im Vergleich zu der FV-Simulation an. Ein entsprechender Zusammenhang ist demnach auch für die Reynolds-Zahl festzustellen (vgl. Tab. 7.5).

In Abb. 7.4 werden die Ergebnisse der Embedded-SPH- und der FV-Simulationen für die Strömungsprofile innerhalb des Rechengebiets miteinander verglichen. In Abb. 7.4a bzw. Abb. 7.4b ist die x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit bzw. der Fluiddruck p dargestellt. Der Teil des Profils oberhalb der horizontalen gestrichelten Linie entspricht dem Ergebnis der Simulation mit der Embedded-SPH-Methode. Der Teil des Rechengebiets zwischen den vertikalen Strichpunktlinien ist dem SPH-Gebiet zugeordnet. Der Teil unterhalb der horizontalen

Tabelle 7.5: Vergleich zwischen den stationären Ergebnissen der FV-, der SPH- und der Embedded-SPH-Simulation mit der Konfiguration `sim_1a` für die entlang der Kanalhöhe H gemittelten Hauptströmungskomponente $\bar{u}_{x,l}$ der Fluidgeschwindigkeit und die entsprechende Reynolds-Zahl Re

	$\bar{u}_{x,l}$	Re
	[m/s]	[–]
Zielwert	10	20
FV	9,91	19,82
SPH	10,08	20,15
Embedded-SPH	9,96	19,92

(a) Normierte Fluidgeschwindigkeit in x -Richtung

(b) Normierter Fluiddruck

Abbildung 7.4: Vergleich zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH-Simulation (oberhalb der gestrichelten Linie) und der FV-Simulation (unterhalb der gestrichelten Linie) mit der Konfiguration `sim_1a` für die normierten stationären Strömungsprofile

gestrichelten Linie entspricht dem Ergebnis der Simulation mit der FV-Methode. Es wird erneut eine Delaunay-Triangulierung zur Darstellung der Profile verwendet. Im Falle der Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation wird diese Triangulierung auf Basis der Randflächen (FV), Zellen (FV), Randsegmente (SPH) und Partikel (SPH) generiert. Die Strömungsgrößen in Abb. 7.4 sind jeweils mit dem am linken Rand l des Rechengebiets über der Kanalhöhe H gemittelten Wert normiert. Die Profile repräsentieren erneut Zeitpunkte, zu denen die Simulationen stationäre Strömungszustände erreicht haben. Es ist sowohl für das Profil der Fluidgeschwindigkeit als auch für das des Fluiddrucks eine exzellente Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation zu konstatieren. Selbst in der Nähe der Kopplungsränder sind keine sichtbaren unphysikalischen Unstetigkeiten des Strömungsfelds erkennbar.

In Abb. 7.5 ist die x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit über der Kanalhöhe H (also für $-0,1 \leq y_+ \leq 0,1$) für die Embedded-SPH- und die FV-Simulation aufgetragen. In Abb. 7.5a bzw. Abb. 7.5b werden diese Profile für den Eintrittsrand l bzw. für die Ebene bei $x_+ = 0,5$ in der Mitte des Rechengebiets (vgl. Linie „L1“ in Abb. 7.1) gezeigt. Die Ergebnisse sind wie bei den bisherigen Darstellungen mit der mittleren Fluidgeschwindigkeit $\bar{u}_{x,l}$ am Eintrittsrand der jeweiligen Simulation (vgl. Tab. 7.5) normiert. Es ist an beiden betrachteten Ebenen eine exzellente Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Methode festzustellen. Vor allem durch die Ergebnisse an der sich in der Mitte des Rechengebiets befindenden Ebene ($x_+ = 0,5$) wird gezeigt, dass durch die Kopplungsränder keine unphysikalische

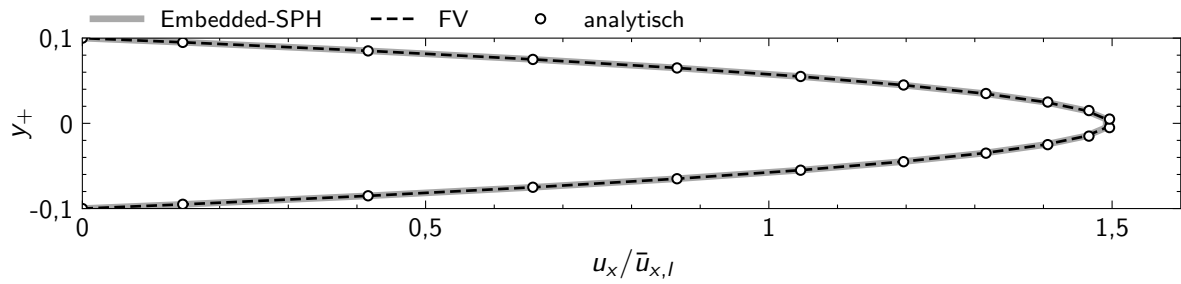
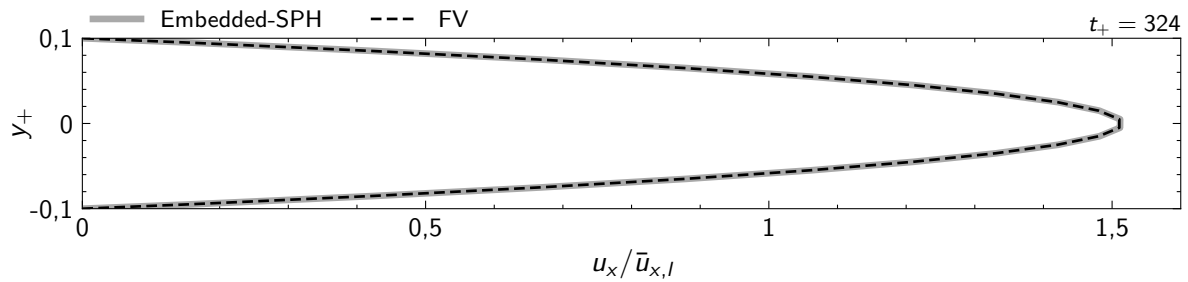
(a) Eintrittsrand l (b) Kanalmitte ($x_+ = 0,5$, Linie „L1“ in Abb. 7.1)

Abbildung 7.5: Vergleich zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation mit der Konfiguration `sim_1a` für das normierte stationäre Profil der Hauptströmungskomponente u_x der Fluidgeschwindigkeit an verschiedenen Positionen

Veränderung des Strömungsprofils erzeugt wird (vgl. Abb. 7.5b). In Abb. 7.5a ist zusätzlich die entsprechende analytische Lösung des Geschwindigkeitsprofils der inkompressiblen Poiseuille-Strömung am Eintrittsrand l gemäß Gl. 7.2 dargestellt. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dieser analytischen Lösung und der Embedded-SPH-Simulation erkennbar.

Darüber hinaus wird das Strömungsfeld während des instationären Zeitraums der Simulation mit Embedded-SPH untersucht. Die Ergebnisse hierzu sind in Abb. 7.6 veranschaulicht. In den Konturdiagrammen auf der linken Seite in Abb. 7.6 ist der Bereich um den linken Kopplungsrand des SPH-Gebiets (also bei $x_+ = 0,35$) dargestellt. Dieser ist durch die vertikale Strichpunktlinie gekennzeichnet. In der linken bzw. rechten Hälfte der Diagramme sind die Werte an den Zellen des FV-Rechengebiets bzw. an den Partikeln des SPH-Rechengebiets dargestellt. Von oben nach unten werden verschiedene physikalische Zeitpunkte gezeigt. Der Zeitpunkt ist in den Diagrammen als normierte Zeit $t_+ = tc_0/L$ gekennzeichnet. Innerhalb einer Zeitspanne von $t_+ = 1$, wird eine akustische Welle somit von dem einem zum anderen offenen Rand des Kanals advektiert. Die ersten beiden Zeilen von oben ($t_+ = 0,4$ bzw. $t_+ = 0,6$) repräsentieren die Zeitpunkte, zu denen die akustische Welle zum ersten Mal den linken bzw. den rechten Kopplungsrand (also die Positionen $x_+ = 0,35$ bzw. $x_+ = 0,65$) durchdringt. Zu diesen Zeitpunkten sind die Gradienten der Strömungsgrößen besonders groß. Die letzte Zeile repräsentiert den stationären Zustand der Strömung. Die linken bzw. die rechten Konturdiagramme repräsentieren die Felder des Fluiddrucks p bzw. der x -Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit.

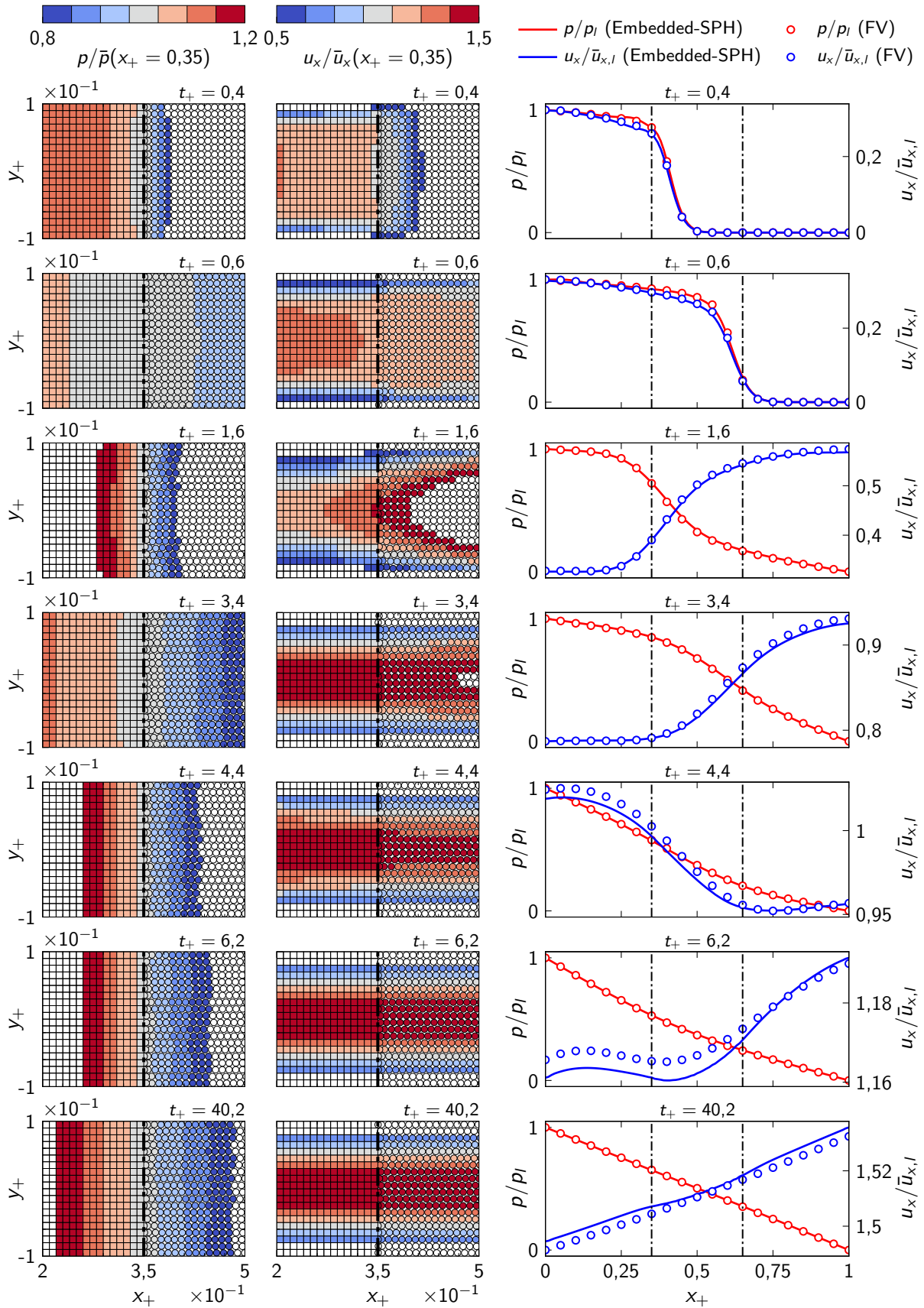


Abbildung 7.6: Zeitreihe der Fluiddruck- und Fluidgeschwindigkeitsprofile der Poiseuille-Strömung. Zellen und Partikel mit Werten außerhalb der Farbskalen sind weiß eingefärbt

Die Werte in den Konturdiagrammen sind zu jedem Zeitpunkt mit dem am linken Kopplungsrand ($x_+ = 0,35$) entlang der Kanalhöhe H gemittelten Wert der jeweiligen Strömungsgröße normiert. Die Farbskala ist bewusst grob gewählt, um den Verlauf der Felder über den Kopplungsrand besser visualisieren zu können. Es wird deutlich, dass die Felder zu jedem Zeitpunkt durch einen kontinuierlichen Übergang am Kopplungsrand geprägt sind. Es sind keine unphysikalischen Unstetigkeiten erkennbar. Auch zu dem ersten Zeitpunkt ist trotz der großen Gradienten der Strömungsvariablen kein unphysikalisches Verhalten festzustellen. In der rechten Spalte in Abb. 7.6 sind zu denselben Zeitpunkten die Verläufe der Strömungsvariablen u_x und p entlang der Mittelachse des Kanals (also bei $y_+ = 0$, vgl. Linie „L2“ in Abb. 7.1) dargestellt. Sowohl der Fluiddruck als auch die Fluidgeschwindigkeit sind mit dem am Eintrittsrand des Kanals entlang der Kanalhöhe gemittelten Wert normiert. In diesen Diagrammen sind beide Kopplungsränder enthalten. Sie sind durch die vertikalen Strichpunktlinien gekennzeichnet. Außerdem werden die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation (Linien) mit denen der FV-Simulation (Symbole) verglichen. Mittels dieser Diagramme wird nochmals untermauert, dass die Übertragung der Strömungsvariablen an den Kopplungsrändern selbst bei Vorliegen großer Strömungsgradienten, die vor allem zu den Zeitpunkten $t_+ = 0,4$ und $t_+ = 0,6$ erkennbar sind, exzellent funktioniert. Zu jedem Zeitpunkt ist außerdem für den Verlauf des Fluiddrucks p eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation zu konstatieren. Auch für den Verlauf der Fluidgeschwindigkeit ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Simulationen festzustellen. Es muss beachtet werden, dass die Skala der Fluidgeschwindigkeit in diesen Diagrammen an den Wertebereich der Strömungsvariable zu dem jeweiligen Zeitpunkt angepasst ist. Bei den letzten dargestellten Zeitpunkten ist dieser Wertebereich sehr klein. Daher sind kleinere Abweichungen zwischen den Simulationen durch die Diagramme räumlich aufgelöst. In dem untersten Diagramm, das den stationären Zustand widerspiegelt, ist bei der gegebenen Achsenauflösung eine kleine Abweichung zwischen den Simulationsergebnissen für den Verlauf der Geschwindigkeitskomponente u_x zwischen den Kopplungsrändern zu verzeichnen. Dieser für ingenieurmäßige Belange als geringfügig zu bewertende Unterschied könnte damit zusammenhängen, dass der Dichtediffusionsterm bei der SPH-Methode und nicht bei der FV-Methode angewendet wird. Durch den Dichtediffusionsterm entsteht ein zusätzlicher Massenstrom, der durch das Geschwindigkeitsfeld kompensiert wird (vgl. Kapitel 6).

In Abb. 7.7 und Abb. 7.8 sind die Ergebnisse der Massenbilanz für die durchgeführten Simulationen der Konfiguration `sim_1a` gezeigt. In Abb. 7.7a ist das Ergebnis der SPH-Simulation für den zeitlichen Verlauf der Summe der konvektiven Massenströme der den offenen Rändern zugeordneten Randsegmente dargestellt (Bezeichnung „Konvektion (Randsegmente)“). Diese Summe entspricht dem in Kapitel 6 eingeführten konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Zudem ist in Abb. 7.7a der Verlauf des Gegenwerts der Summe der Massenströme dargestellt, die aufgrund der Partikel-Interaktionen bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms entstehen. Diese Summe entspricht dem in Kapitel 6 eingeführten Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion. Die Massenströme werden mit dem Referenzmassenstrom $\dot{m}_0 = u_0 \rho_0 H r_{\text{ref}}$ normiert. In dem in Abb. 7.7a dargestellten Zeitraum ist das Strömungsfeld bereits vollständig entwickelt. Die beiden Massenstromungleichgewichte fluktuieren um nahezu

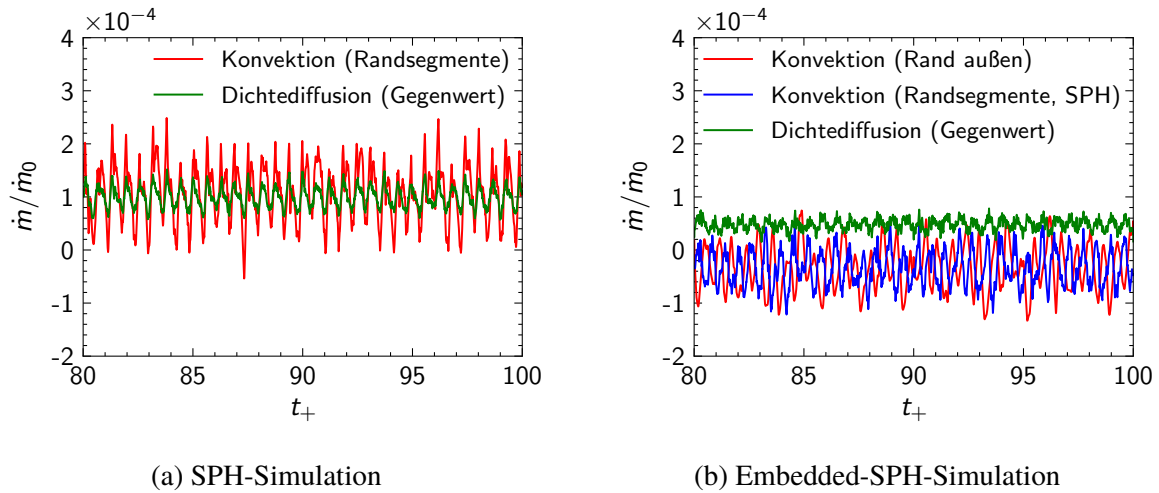


Abbildung 7.7: Zeitliche Verläufe der Massenstromungleichgewichte

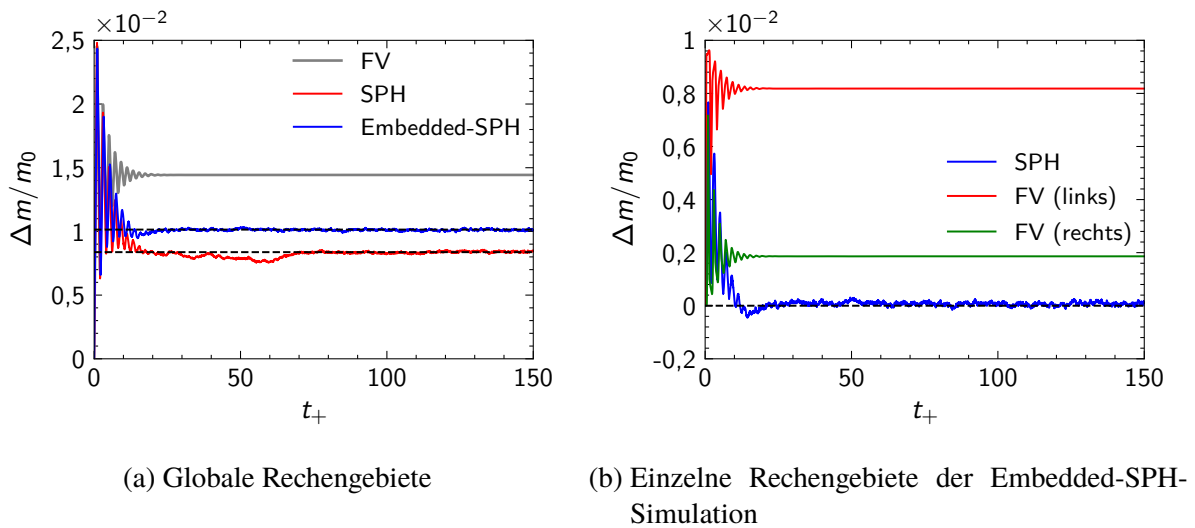


Abbildung 7.8: Zeitliche Verläufe der Massenänderungen der Rechengebiete

gleich große Mittelwerte (ca. $\dot{m}/\dot{m}_0 = 1 \cdot 10^{-4}$). Über diesen Sachverhalt wird die in Kapitel 6 diskutierte Äquivalenz zwischen den beiden Massenströmen und deren Übertragbarkeit auf den zweidimensionalen Fall untermauert. Auch die Größenordnung der genannten Mittelwerte entspricht dem Ergebnis des zur Simulation `sim_1a` äquivalenten eindimensionalen Testfalls A mit Quellterm (vgl. Tab. 6.3).

In Abb. 7.7b sind die Ergebnisse der zeitlichen Verläufe der zuvor diskutierten Massenströme für die Embedded-SPH-Simulation dargestellt. Die Kurve mit der Bezeichnung „Konvektion (Randsegmente, SPH)“ entspricht erneut der Summe $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der konvektiven Massenströme der Randsegmente. Diese beziehen sich auf das SPH-Rechengebiet der Embedded-SPH-Simulation und damit auf die Kopplungsränder. Die Kurve mit der Bezeichnung „Konvektion (Rand außen)“ bezieht sich hingegen auf die den FV-Rechengebieten zugeordneten äußeren Ränder des globalen Rechengebiets und damit auf den Eintritts- und Austrittsrand. Es ist festzustellen, dass die Fluktuationen beider konvektiven Massenstromungleichgewichte nahezu denselben Mittel-

wert (ca. $\dot{m}/\dot{m}_0 = -3 \cdot 10^{-5}$) und ähnliche maximale Ausschläge aufweisen. Das geringe Massenstromungleichgewicht der Kopplungsränder wird somit erwartungsgemäß auf das globale Rechengebiet übertragen. Zudem ist in Abb. 7.7b der Verlauf des Gegenwerts des Massenstroms $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion dargestellt. Es ist erkennbar, dass der Massenstrom der Dichtediffusion der Embedded-SPH-Simulation gegenüber dem entsprechenden Wert der SPH-Simulation verringert ist. Diese Verringerung kann auf Basis der Proportionalität zwischen dem Dichtediffusionsterm und der zweiten räumlichen Ableitung der Fluid-dichte erklärt werden. An den Kopplungsrändern liegen im Vergleich zu den äußeren offenen Rändern des Kanals andere Werte dieser räumlichen Ableitung vor, wodurch auch eine Änderung der Massenströme der Dichtediffusion auftritt. Im Vergleich zur SPH-Simulation ist bei der Embedded-SPH-Simulation keine Identität zwischen dem konvektiven Massenstromungleichgewicht der Randsegmente und dem Nettomassenstrom der Dichtediffusion zu erkennen. In diesem Zuge wurde eine eindimensionale Embedded-SPH-Simulation (entsprechend dem Testfall A mit Quellterm aus Kapitel 6) durchgeführt. Die Aufteilung der Rechengebiete wurde dabei äquivalent zu der zweidimensionalen Simulation gewählt. Dabei wurden positive Werte der konvektiven Massenstromungleichgewichte sowie eine wesentlich bessere Übereinstimmung zwischen den zuletzt diskutierten Massenströmen festgestellt. Der Grund für die in Abb. 7.7b zu verzeichnende Diskrepanz dieser Massenströme sollte daher im Zusammenhang mit dem zweidimensionalen Strömungsfeld an den Kopplungsrändern untersucht werden. Diesbezüglich wurde bereits anhand Abb. 7.3 erläutert, dass innerhalb des SPH-Rechengebiets eine geringfügige Änderung des Strömungsprofils entsteht. Diese Änderung kann auch eine mögliche Erklärung für die Diskrepanz der Massenstromungleichgewichte sein.

Insgesamt ist allerdings festzustellen, dass die Massenstromungleichgewichte sowohl für die SPH-Simulation als auch für die Embedded-SPH-Simulation auf äußerst geringe Werte limitiert sind. Die diskutierten Werte liegen in der Größenordnung eines Zehntausendstels des Referenzmassenstroms. Es wurde bereits in Abschnitt 6.3 erläutert, dass Massenstromungleichgewichte einer solch geringen Größenordnung keinen nennenswerten Einfluss auf technisch relevante Simulationen offener Rechengebiete haben.

Sowohl für die SPH-Simulation als auch die Embedded-SPH-Simulation ist außerdem eine sehr gute Erhaltung der Masse der Rechengebiete zu konstatieren. In diesem Zusammenhang sind in Abb. 7.8 die zeitlichen Verläufe der Differenz Δm zwischen der Masse des Rechengebiets zum Zeitpunkt t_+ und der Masse des Rechengebiets im Anfangszustand ($t_+ = 0$) dargestellt. Diese Massendifferenzen sind mit der Referenzmasse $m_0 = \rho_0 L H r_{\text{ref}}$ des globalen Rechengebiets normiert. In Abb. 7.8a sind die normierten Massendifferenzen der globalen Rechengebiete der FV-Simulation, der SPH-Simulation und der Embedded-SPH-Simulation gezeigt. Nach einer Einschwingphase wird bei der FV-Simulation nach einer physikalischen Zeitdauer von ca. $t_+ = 25$ eine konstante Masse im Rechengebiet erreicht. Die Massendifferenz ist größer als null, da der Fluidruck und somit die Fluid-dichte bei gleichem Fluidvolumen größer als im Anfangszustand sind. Im Vergleich zur FV-Simulation verringert sich die Masse des Rechengebiets sowohl im Falle der SPH-Simulation als auch im Falle der Embedded-SPH-Simulation während der Anfangsphase der Simulationen. Die Massendifferenzen stabilisieren sich bei einem geringeren Wert als bei der FV-Simulation. Die Anwendung einer Kombination aus dem

WCSPH-Ansatz und dem Partikelverschiebungsansatz (vgl. Abschnitt 4.4.4) lässt sich hierfür als Begründung heranziehen. Der WCSPH-Ansatz ist grundsätzlich nicht volumenerhaltend. Darüber hinaus stellen sich auf Basis des Partikelverschiebungsansatzes Partikelabstände ein, über die eine möglichst homogene räumliche Verteilung der Partikel realisiert wird. Während der Anfangsphase der Simulation werden bei dem vorliegenden Testfall Stoßwellen durch das Rechengebiet advektiert, über die die Partikeldichte lokal deutlich verändert wird. Dies begünstigt in diesen lokalen Bereichen eine Änderung der Partikelabstände basierend auf dem Partikelverschiebungsansatz. Hierdurch können temporär vereinzelte Partikel über die offenen Ränder entweichen, wodurch eine Volumenverringerung und eine entsprechende Massenverringern hervorgehoben wird. Es wurde anhand des eindimensionalen Testfalls A, der in Kapitel 6 angewendet wurde, festgestellt, dass bei Deaktivierung des Partikelverschiebungsansatzes eine Volumenerhaltung nahezu gegeben ist. Bei Aktivierung des Partikelverschiebungsansatzes ergibt sich hingegen eine Verringerung des Partikelvolumens um ca. 0,35 % des Volumens des Rechengebiets. Dieser Wert liegt in derselben Größenordnung wie die Diskrepanz zwischen den Massendifferenzen der FV-Simulation und der SPH-Simulation. Dies unterstützt die erläuterte Hypothese auch bei dem vorliegenden Testfall. Darüber hinaus sind die Massendifferenzen desselben physikalischen Zeitraums wie in Abb. 7.8a für die einzelnen SPH- und FV-Rechengebiete der Embedded-SPH-Simulation in Abb. 7.8b dargestellt. Es ist festzustellen, dass sich die anfängliche Verringerung der Masse nur auf das SPH-Rechengebiet bezieht. Die zeitlichen Verläufe der Massendifferenz der einzelnen FV-Rechengebiete sind qualitativ identisch mit dem entsprechenden Verlauf bei der FV-Simulation in Abb. 7.8a. Nach der Einlaufphase der Massendifferenzen fluktuieren diese um einen konstanten Wert. Es ist kein übergeordneter Trend einer Massenänderung der Rechengebiete erkennbar. Daraus ist die Schlussfolgerung zu ziehen, dass sowohl bei der SPH-Simulation mit offenen Rändern als auch bei der Embedded-SPH-Simulation mit gekoppelten Rändern eine Kompensation des Massenstroms der Dichtediffusion über die konvektiven Massenströme der Partikel erreicht wird. Die Fluktuationen der Massendifferenzen weisen außerdem eine Amplitude in der Größenordnung eines Zehntausendstels der Masse des globalen Rechengebiets auf und sind daher als äußerst gering einzustufen. Insgesamt ist die Massenerhaltung bei dem vorliegenden Verfahren daher als sehr gut zu bewerten.

Mit dem vorliegenden Testfall konnte dargelegt werden, dass das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren für mehrdimensionale Testfälle anwendbar ist. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung und den Ergebnissen einer FV-Simulation für das Strömungsprofil entlang der Kanalhöhe zu konstatieren. Die Fluktuationen der Strömungsvariablen an den Rändern und innerhalb des Rechengebiets weisen nur geringe Werte auf. Bei der Übertragung der Strömungsvariablen an den Kopplungsrändern sind keine nennenswerten unphysikalischen Störungen zu verzeichnen. Die Massenbilanz ist ebenfalls als sehr gut zu bewerten.

7.2 Kavitätenströmung

In diesem Abschnitt wird die Embedded-SPH-Simulation einer Kavitätenströmung untersucht. Bei diesem Testfall soll insbesondere dargestellt werden, dass mit dem vorliegenden Embedded-

SPH-Verfahren Strömungszustände behandelt werden können, bei denen das Fluid an demselben Kopplungsrand gleichzeitig ein- und ausströmen kann. Technisch relevante Systeme sind unter anderem durch die Advektion von Wirbeln und durch Rückströmzonen charakterisiert. Aufgrund dieser Merkmale muss das Embedded-SPH-Verfahren für den zuvor genannten Strömungszustand anwendbar sein. Die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation werden zum einen mit Referenzergebnissen verglichen, die auf Basis einer im Zuge dieser Arbeit mit der FV-Methode durchgeführten Simulation generiert wurden. Das FV-Verfahren wurde zu Beginn dieses Kapitels dargelegt. Zum anderen werden bei dem Vergleich Referenzwerte herangezogen, die von Ghia et al. (1982) mit einem Finite-Differenzen-Verfahren berechnet wurden. In Abschnitt 7.2.1 wird die Konfiguration des Testfalls erläutert. In Abschnitt 7.2.2 werden die Ergebnisse der Simulation dargestellt.

7.2.1 Beschreibung des Testfalls

Der Testfall der Kavitätenströmung ist in Abb. 7.9 veranschaulicht. In Tab. 7.6 sind die geometrischen Parameter sowie die Fluideigenschaften zusammengefasst. Die Geometrie des Testfalls besteht aus einem quadratischen Rechengebiet, das von allen Seiten durch undurchlässige Wände der Seitenlänge $L = 1$ m umschlossen ist. Das Koordinatensystem (x, y) ist in der linken unteren Ecke des Rechengebiets positioniert. Die Koordinatenrichtung x bzw. y verläuft horizontal bzw. vertikal. Alle Wände des Rechengebiets sind reibungsbehaftet. Zudem sind mit Ausnahme der oberen Wand alle Wände als feste Wände definiert. Demnach werden an diesen Wänden Dirichlet-Randbedingungen der Geschwindigkeitskomponenten $u_x = 0$ m/s (in x -Richtung) und $u_y = 0$ m/s (in y -Richtung) aufgeprägt. Wie in Abschnitt 7.1 bereits erläutert wurde, steht keine Implementierung der NSCBC-Randbedingungen für die FV-Methode zur Verfügung. Daher werden von Neumann-Randbedingungen für den Druck an allen Wänden aufgeprägt. Der oberen Wand wird neben einer Dirichlet-Randbedingung der zur Wand normalen Geschwindigkeitskomponente $u_y = 0$ m/s eine zur Wand tangentiale Geschwindigkeit $u_x = u_0 = 4$ m/s aufgeprägt. Die obere Wand wird als unendlich lang definiert. Durch die zum Rechengebiet tangentiale Bewegung der oberen Wand von der linken zur rechten oberen Ecke entsteht in dem Rechengebiet eine Kavitätenströmung mit einem rechtsdrehenden zentralen Wirbel. Die Simulation wird mit einem ruhenden Fluid ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) und einem Druck von $p = 0$ N/m² initialisiert. Durch die Referenzdichte $\rho_0 = 1$ kg/m³, die dynamische Viskosität $\mu = 0,01$ kg/(m s) und die Referenzschallgeschwindigkeit $c_0 = 40$ m/s ergeben sich eine Reynolds-Zahl und eine Mach-Zahl von $Re = u_0 \rho_0 L / \mu = 400$ und $Ma = u_0 / c_0 = 0,1$.

Die Zerlegung des Rechengebiets für den Fall der Embedded-SPH-Simulation ist ebenfalls in Abb. 7.9 dargestellt. Ein Anteil von 30 % des Rechengebiets ist in der Mitte des Rechengebiets zwischen den Positionen $y_A/L = 0,35$ und $y_B/L = 0,65$ dem SPH-Verfahren zugeordnet. Das SPH-Rechengebiet ist durch die linke und die rechte Wand sowie durch die FV-Rechengebiete unterhalb und oberhalb des SPH-Rechengebiets begrenzt. Die Kopplungsränder sind wie bei der Embedded-SPH-Simulation der Poiseuille-Strömung (vgl. Abschnitt 7.1) zwischen reibungsbehafteten Wänden positioniert. Wie bereits in Abschnitt 7.1 erläutert wurde, ist eine möglichst identische Behandlung der festen Wände bei beiden Lösungsverfahren notwendig. Daher wird

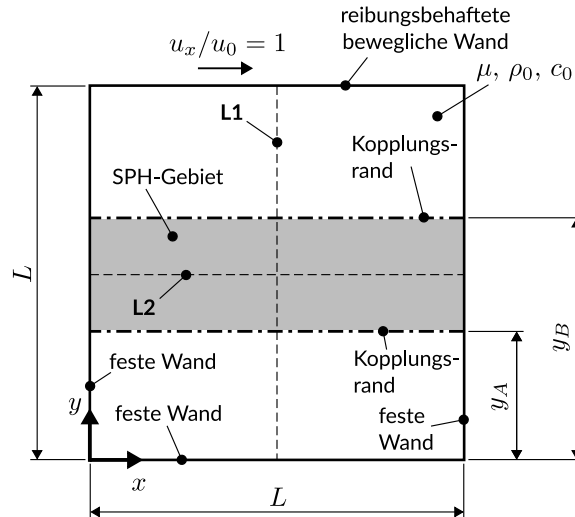


Abbildung 7.9: Rechengebiet des Testfalls der Kavitationsströmung

das NSCBC-Verfahren erneut nicht an den festen Wänden angewendet. Stattdessen wird der in Abschnitt 7.1 für die SPH-Methode erläuterte Ansatz zur Aufprägung von Neumann-Randbedingungen für den Fluidruck an den Wänden appliziert.

Bei der Embedded-SPH-Simulation wird ein normierter mittlerer Partikelabstand von $r_{\text{ref}}/L = 0,01$ angewendet. Zu Beginn der Simulationen werden die Partikel entlang eines äquidistanten Gitters angeordnet. Demnach ergibt sich im Anfangszustand der Simulation eine Anzahl von 100 Partikeln entlang der x -Richtung und eine Anzahl von 30 Partikeln entlang der y -Richtung. Die Glättungslänge des Kernels ist gleich dem mittleren Partikelabstand ($h = r_{\text{ref}}$). Das Rechengitter der FV-Simulation ist kartesisch und durch eine äquivalente räumliche Auflösung charakterisiert. Die Zeitschrittweiten werden gemäß Gl. 4.82 für beide Lösungsverfahren identisch gewählt.

Tabelle 7.6: Fluideigenschaften und Referenzwerte des Testfalls der Kavitationsströmung

Eigenschaft	Wert	Einheit
L	1	m
y_A/L	0,35	–
y_B/L	0,65	–
u_0	4	m/s
c_0	40	m/s
ρ_0	1	kg/m ³
γ	7	–
μ	0,01	kg/(m s)
Re	400	–
Ma	0,1	–

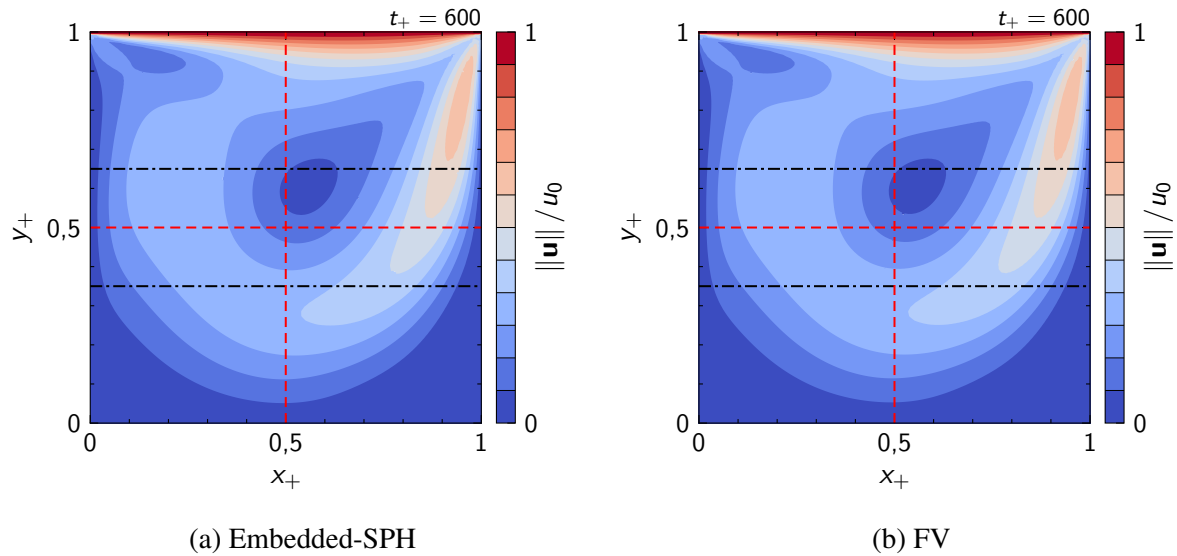


Abbildung 7.10: Normiertes stationäres Profil des Betrags $\|\mathbf{u}\|$ der Fluidgeschwindigkeit der Kavitätenströmung als Ergebnis der Embedded-SPH- und der FV-Simulation

7.2.2 Auswertung

In Abb. 7.10 werden die stationären Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation (Abb. 7.10a) und der FV-Simulation (Abb. 7.10b) für die Profile des mit der Referenzgeschwindigkeit u_0 normierten Betrags $\|\mathbf{u}\|$ der Fluidgeschwindigkeit zur dimensionslosen physikalischen Zeit $t_+ = tc_0/L = 600$ miteinander verglichen. Die dimensionslosen Koordinaten $x_+ = x/L$ und $y_+ = y/L$ werden durch eine Normierung der Ortskoordinaten mit der Seitenlänge L berechnet. Die horizontalen schwarzen Strichpunktlinien kennzeichnen die Kopplungsränder. Zur besseren Vergleichbarkeit sind diese Linien auch in Abb. 7.10b zusammen mit dem Ergebnis der FV-Simulation dargestellt. Die größten Fluidgeschwindigkeiten befinden sich unmittelbar an der oberen Wand, die sich mit der Referenzgeschwindigkeit u_0 bewegt. Wie eingangs erwähnt wurde, bildet sich ein rechtsdrehender Wirbel aus. Die Geschwindigkeit in y -Richtung erreicht einen Maximalwert nahe dem rechten Rand. Das Zentrum des zentralen Wirbels befindet sich nahe dem Zentrum des Rechengebiets. Es ist eine exzellente Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation festzustellen. Darüber hinaus sind an den Kopplungsrändern keine unphysikalischen Unstetigkeiten des Geschwindigkeitsfelds zu erkennen.

In Abb. 7.11a bzw. Abb. 7.11b sind die stationären Ergebnisse der normierten Geschwindigkeitskomponente u_x/u_0 bzw. u_y/u_0 entlang der normierten y -Richtung $y_+ = y/L$ bei $x/L = 0,5$ (Linie „L1“ in Abb. 7.9) bzw. der normierten x -Richtung $x_+ = x/L$ bei $y/L = 0,5$ (Linie „L2“ in Abb. 7.9) zur dimensionslosen physikalischen Zeit $t_+ = 600$ dargestellt. Die Linien sind zum Zwecke des Vergleichs mit den Geschwindigkeitsprofilen ebenfalls in Abb. 7.10 als rot gestrichelte Linien gekennzeichnet. Die schwarzen horizontalen Strichpunktlinien in Abb. 7.11a kennzeichnen die y -Koordinaten der Kopplungsränder. Der in Abb. 7.11b betrachtete Koordinatenbereich liegt bei der Embedded-SPH-Simulation vollständig innerhalb des SPH-

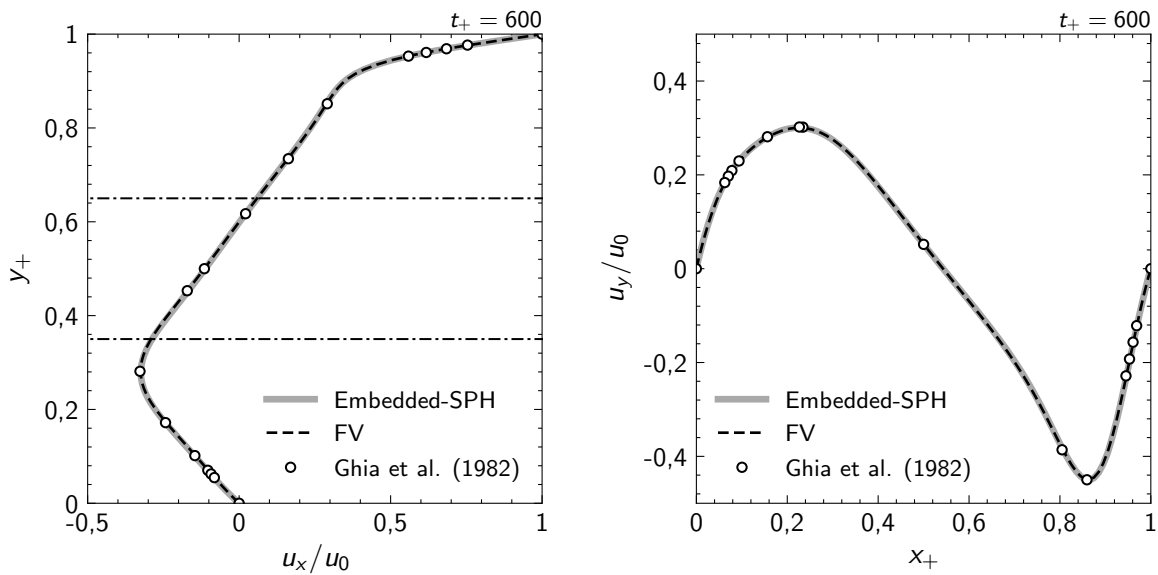
(a) u_x bei $x_+ = 0,5$ (Linie „L1“ in Abb. 7.9)(b) u_y bei $y_+ = 0,5$ (Linie „L2“ in Abb. 7.9)

Abbildung 7.11: Vergleich zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation sowie der Referenzlösung nach Ghia et al. (1982) für normierte stationäre Geschwindigkeitsprofile entlang bestimmter Linien innerhalb des Rechengebiets

Rechengebiets. In Abb. 7.11 werden die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation mit den Ergebnissen der FV-Simulation und den Referenzergebnissen von Ghia et al. (1982) verglichen. Es ist auch für die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten eine exzellente Übereinstimmung der Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation mit den Referenzergebnissen zu konstatieren. Erneut sind keine Unstetigkeiten der Strömungsgrößen an den gekoppelten Rändern erkennbar.

Darüber hinaus wird das Strömungsfeld während des instationären Zeitintervalls der Simulation untersucht. Die Ergebnisse hierzu sind in Abb. 7.12 veranschaulicht. Die Darstellung umfasst den gesamten Koordinatenbereich der x -Richtung und einen Ausschnitt des Koordinatenbereichs der y -Richtung, der den oberen Kopplungsrand bei $y_+ = 0,65$ umfasst. Der Kopplungsrand ist durch die horizontale schwarze Strichpunktlinie gekennzeichnet. Oberhalb bzw. unterhalb des Kopplungsrandes sind die Werte an den Zellen des FV-Rechengebiets bzw. an den Partikeln des SPH-Rechengebiets dargestellt. Zusätzlich sind die Stromlinien des Strömungsfelds als weiße durchgängige Linien veranschaulicht. Von oben nach unten sind verschiedene physikalische Zeitpunkte gezeigt. Der Zeitpunkt ist in den Diagrammen als normierte Zeit $t_+ = tc_0/L$ gekennzeichnet. Die dargestellten Zeitpunkte repräsentieren den Zeitraum, während dessen der zentrale Wirbel der Kavitätenströmung den Kopplungsrand bei $y_+ = 0,65$ durchdringt. Die ersten beiden Zeilen von oben ($t_+ = 10$ und $t_+ = 40$) repräsentieren die Zeitpunkte, zu denen der zentrale Wirbel noch oberhalb des Kopplungsrandes liegt. Die dritte Zeile ($t_+ = 80$) repräsentiert den Zeitpunkt, zu dem das Zentrum des Wirbels genau über dem Kopplungsrand liegt. In der letzten Zeile ($t_+ = 600$) ist der stationäre Strömungszustand dargestellt, bei dem der zentrale Wirbel den Kopplungsrand bereits durchdrungen hat.

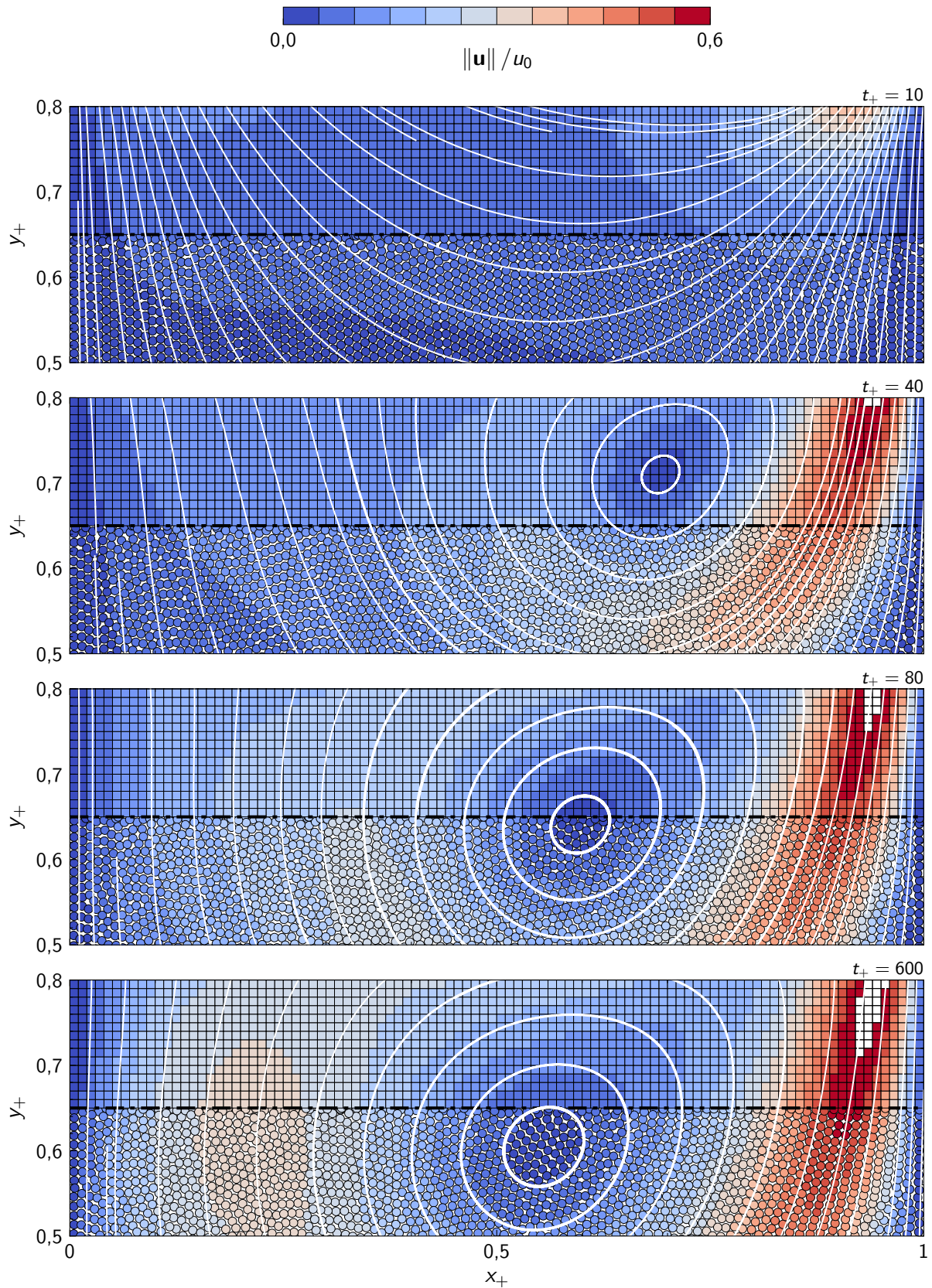


Abbildung 7.12: Zeitreihe der Advektion des zentralen Wirbels der Kavitätenströmung. Die Zellen und Partikel sind gemäß des normierten Betrags $\|\mathbf{u}\|$ der Fluidgeschwindigkeit eingefärbt. Zellen mit Werten außerhalb der Farbskala sind weiß eingefärbt

Es wird deutlich, dass die Felder zu jedem Zeitpunkt durch einen kontinuierlichen Übergang am Kopplungsrand geprägt sind. Es sind keine unphysikalischen Unstetigkeiten der Fluidgeschwindigkeit festzustellen. Auch die dargestellten Stromlinien weisen am Kopplungsrand einen kontinuierlichen Übergang auf.

In Abb. 7.13 sind die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation für die Massenbilanz gezeigt. Dabei ist in Abb. 7.13a der zeitliche Verlauf der Summe der konvektiven Massenströme der Kopplungsränder dargestellt (Bezeichnung „Konvektion (Randsegmente, SPH)“). Diese Summe entspricht dem in Kapitel 6 eingeführten konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Zudem ist in Abb. 7.13a der Verlauf des Gegenwerts der Summe der Massenströme dargestellt, die aufgrund der Partikel-Interaktionen bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms entstehen. Diese Summe entspricht dem in Kapitel 6 eingeführten Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion. Die Massenströme sind mit dem Referenzmassenstrom $\dot{m}_0 = u_0 \rho_0 L r_{\text{ref}}$ normiert. Wie bereits bei der Embedded-SPH-Simulation der Poiseuille-Strömung (vgl. Abschnitt 7.1.2) liegt keine Identität zwischen dem konvektiven Massenstromungleichgewicht der Randsegmente und dem Nettomassenstrom der Dichtediffusion vor. Der Massenstrom der Dichtediffusion wird damit nicht durch die konvektiven Massenströme kompensiert und stellt damit zumindest nicht den einzigen Grund für das Auftreten eines konvektiven Massenstromungleichgewichts dar. Als eine weitere mögliche Begründung können geringfügige Ungenauigkeiten bei der Berechnung des Strömungsfelds herangezogen werden. Insgesamt ist jedoch festzustellen, dass die dargestellten Massenstromungleichgewichte der Embedded-SPH-Simulation auf äußerst geringe Werte limitiert sind. Die diskutierten Größen liegen wie bei der Poiseuille-Strömung in der Größenordnung eines Zehntausendstels des Referenzmassenstroms. Es wurde bereits in Abschnitt 6.3 erläutert, dass Massenstromungleichgewichte einer solch geringen Größenordnung keinen nennenswerten Einfluss auf technisch relevante Simulationen offener Rechengebiete haben.

In Abb. 7.13b sind die zeitlichen Verläufe der Differenz Δm zwischen den Werten der Masse desselben Rechengebiets zum Zeitpunkt t_+ und im Anfangszustand ($t_+ = 0$) dargestellt. Diese Massendifferenzen sind mit der Referenzmasse $m_0 = \rho_0 L^2 r_{\text{ref}}$ des globalen Rechengebiets normiert. In Abb. 7.13b sind sowohl die normierten Massendifferenzen des globalen Rechengebiets als auch der einzelnen SPH- und FV-Rechengebiete gezeigt. Der Zeitbereich zu Beginn der Simulation weist wie bei der Simulation der Poiseuille-Strömung eine vergleichsweise große Verringerung der Masse des SPH-Rechengebiets und demnach auch der Masse des globalen Rechengebiets auf. Als Begründung wurde in Abschnitt 7.1.2 die Anwendung einer Kombination aus dem WCSPH-Ansatz und dem Partikelverschiebungsansatz (vgl. Abschnitt 4.4.4) herangezogen. Nach der Einlaufphase ist eine kontinuierliche Verringerung der Masse der einzelnen Rechengebiete und des globalen Rechengebiets zu erkennen. Im Zuge der Auswertung der Massenbilanz konnten gleiche Beiträge der einzelnen Kopplungsränder zum konvektiven Nettomassenstrom $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente des SPH-Rechengebiets ermittelt werden. Da der konvektive Nettomassenstrom $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ positiv ist (vgl. Abb. 7.13a), liegt ein Massenfluss von den beiden FV-Rechengebieten zu dem SPH-Rechengebiet vor. Daher wird die Masse der FV-Rechengebiete mit zunehmender physikalischer Zeit verringert. Entgegen der Erwartung nimmt auch die Masse des SPH-Rechengebiets zeitlich ab. Als eine mögliche Begründung können auch

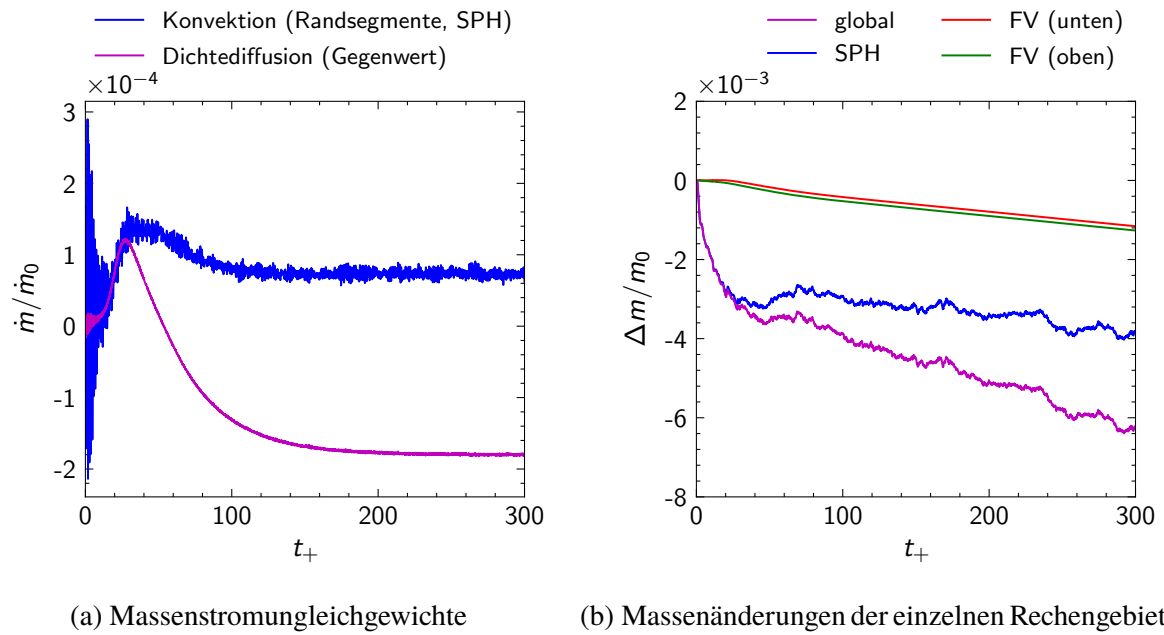


Abbildung 7.13: Zeitliche Verläufe der Massenstromungleichgewichte und der Massenänderungen der Rechengebiete bei der Embedded-SPH-Simulation

hier geringfügige Ungenauigkeiten des Strömungsfelds herangezogen werden. Eine weitere mögliche Erklärung ist eine geringfügige Verringerung des Drucks innerhalb der FV-Rechengebiete, die aufgrund der Massenverringerung bei ansonsten konstantem Volumen auftritt. Durch die leichte Änderung des Druckgradienten zwischen den Rechengebieten kann ebenfalls eine geringfügige Advektion von Partikeln in Richtung der FV-Rechengebiete induziert werden. Am Ende der Simulation (also nach einer physikalischen Zeit von 15 s) ist eine Verringerung der Masse des globalen Rechengebiets von ca. 1 % der Masse des Anfangszustands zu verzeichnen.

Die Ergebnisse für die Massenbilanz müssen an dieser Stelle sinnvoll eingeordnet werden. Der vorliegende Testfall stellt einen Extremfall dar: Das Rechengebiet ist geschlossen und vollständig durch eine zirkulierende Strömung ausgefüllt. Dasselbe Kontinuum unterliegt daher während der gesamten Simulationsdauer dem Einfluss der Kopplungsränder. In Abschnitt 6.3 wurde bereits erläutert, dass bei einem geschlossenen Rechengebiet und einem hinreichend großen simulierten physikalischen Zeitraum selbst geringfügige Ungleichgewichte des Massenstroms an den Kopplungsrändern zu einer Akkumulation eines Massenfehlers führen können. Der simulierte physikalische Zeitraum von insgesamt 15 s ist bei diesem Testfall als groß einzuordnen. Außerdem ist die Änderung des Fluidrucks des Rechengebiets bei dem vorliegenden Testfall nicht durch Dirichlet-Randbedingungen beschränkt. Wie in Abschnitt 6.3 erläutert wurde, werden bei der Simulation von technisch relevanten Systemen der Brennkammer allerdings offene Rechengebiete angewendet. Daher ist der Einfluss der Kopplungsränder auf einen bestimmten Anteil des Kontinuums zeitlich begrenzt. Außerdem ist das Rechengebiet in diesem Fall nicht durch eine einzige große Rezirkulation ausgefüllt. Der Einfluss von Rezirkulationen auf die Massenbilanz ist bei relevanten Simulationen somit um ein Vielfaches geringer als bei dem vorliegenden Testfall. Die Akkumulation der Massenänderung des Kontinuums würde daher

nicht auftreten. Der Fluiddruck kann außerdem nicht beliebig verringert werden, da dieser durch Randwerte des Fluiddrucks beschränkt wird. Daher ist der bei dem vorliegenden Testfall zu verzeichnende Fehler der Masse des Rechengebiets irrelevant für die Simulation technischer Systeme. Bei der Anwendung offener Rechengebiete wurde in Abschnitt 7.1 für die Poiseuille-Strömung eine sehr gute Massenbilanz konstatiert. Dies gilt ebenfalls für instationäre Strömungen in Rechengebieten mit offenen Rändern (vgl. Abschnitt 7.3).

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die in dieser Arbeit entwickelten Kopplungsränder für die Anwendung auf rezirkulierende Strömungen geeignet sind. Es konnte eine sehr gute Übereinstimmung des Geschwindigkeitsfelds zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH-Simulation und den Referenzergebnissen von Ghia et al. (1982) sowie der FV-Simulation ermittelt werden. Weil bei dem vorliegenden Testfall ein geschlossenes Rechengebiet vorliegt, führen geringfügige Ungleichgewichte der Massenströme an den Kopplungsrändern zu einer Akkumulation eines Massenfehlers. Da der Anwendungsbereich des entwickelten Verfahrens allerdings offene Rechengebiete betrifft, ist der genannte Massenfehler irrelevant.

7.3 Instationäre Umströmung eines Zylinders

In diesem Abschnitt wird die Embedded-SPH-Simulation einer instationären Umströmung eines Zylinders untersucht. Bei diesem Testfall soll insbesondere dargestellt werden, dass mit dem vorliegenden Embedded-SPH-Verfahren instationäre Strömungszustände am Kopplungsrand behandelt werden können. Die Strömungsfelder technischer Systeme im Bereich der Verbrennungstechnik sind grundsätzlich turbulent und daher durch hochgradig instationäre Prozesse charakterisiert. Außerdem treten oftmals instationäre Strömungsablösungen in diesen Systemen auf. Aufgrund dieser Eigenschaften muss das Embedded-SPH-Verfahren für instationäre Strömungsfelder anwendbar sein. Da keine Implementierung von Turbulenzmodellen in dem vorliegenden SPH-Verfahren vorhanden ist und der Rechenaufwand für eine direkte Numerische Simulation (DNS) zu hoch wäre, wird die Strömungsinstationarität in diesem Abschnitt auf Basis einer von Kármán'schen Wirbelstraße einer laminaren Strömung erzeugt. Diese Wirbelstraße wird durch die Umströmung eines zylindrischen Strömungswiderstands¹⁷ hervorgerufen. Die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation werden mit Referenzergebnissen verglichen, die auf Basis einer im Zuge dieser Arbeit mit der FV-Methode durchgeführten Simulation generiert wurden. Das FV-Verfahren wurde zu Beginn dieses Kapitels dargelegt. In Abschnitt 7.3.1 wird die Konfiguration des Testfalls erläutert. In Abschnitt 7.3.2 werden die Ergebnisse der Simulation dargestellt. Die Ergebnisse dieses Testfalls wurden in Teilen erstmalig in der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021) gezeigt.

7.3.1 Beschreibung des Testfalls

Der vorliegende Testfall ist in Abb. 7.14 veranschaulicht. In Tab. 7.7 sind die geometrischen Parameter sowie die Fluideigenschaften zusammengefasst. Die Geometrie des Testfalls besteht

¹⁷In dem zweidimensionalen Rechengebiet handelt es sich um einen kreisförmigen Strömungswiderstand.

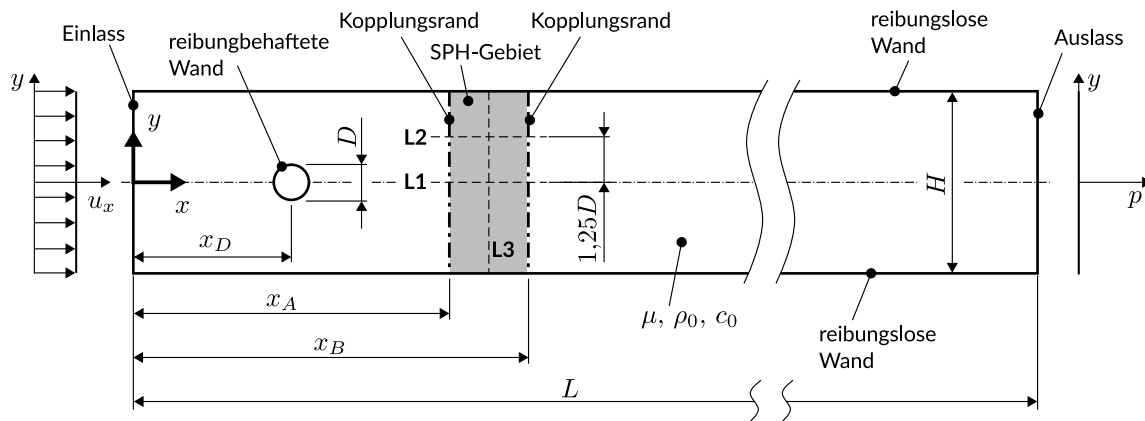


Abbildung 7.14: Rechengebiet des Testfalls der Umströmung eines Zylinders. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

aus einem ebenen Kanal. Das Koordinatensystem (x, y) ist am Schnittpunkt zwischen dem linken Rand des Kanals und der Mittelachse des Kanals positioniert. Die Koordinatenrichtung x bzw. y verläuft entlang der Mittelachse bzw. entlang der Höhe des Kanals. Der Kanal enthält einen kreisförmigen Strömungswiderstand mit dem Durchmesser $D = 0,2$ m. Der Mittelpunkt des Strömungswiderstands ist auf der Mittelachse des Kanals in einem Abstand von $x_D/D = 5$ zum linken Rand des Rechengebiets positioniert. Die Länge und die Höhe des Kanals betragen $L/D = 50$ und $H/D = 5$.

Sowohl der linke als auch der rechte Rand der Geometrie sind als offene Ränder definiert. Am linken bzw. rechten offenen Rand wird entlang der Kanalhöhe H eine homogene Fluidgeschwin-

Tabelle 7.7: Fluideigenschaften und Referenzwerte des Testfalls der instationären Umströmung eines Zylinders

Eigenschaft	Wert	Einheit
D	0,2	m
L/D	50	–
H/D	5	–
x_D/D	5	–
x_A/D	10	–
x_B/D	12,5	–
u_0	10	m/s
c_0	100	m/s
ρ_0	1	kg/m ³
γ	7	–
μ	0,01	kg/(m s)
Re	200	–
Ma	0,1	–

digkeit $u_x = u_0 = 10 \text{ m/s}$ in Randnormalenrichtung bzw. ein homogener Fluiddruck $p = 0 \text{ N/m}^2$ als Dirichlet-Randbedingung aufgeprägt. Hierdurch entsteht in dem Rechengebiet eine Strömung vom linken zum rechten Rand. Für den Fluiddruck p am Eintrittsrand und die Komponente u_x der Fluidgeschwindigkeit am Austrittsrand werden von Neumann-Randbedingungen angewendet. Außerdem wird am linken Rand eine Dirichlet-Randbedingung für die zum Rand transversale Geschwindigkeitskomponente $u_y = 0 \text{ m/s}$ definiert. Der obere und der untere Rand sind als reibungslose Wände definiert. Im Gegensatz zu einer reibungsbehafteten Wand (vgl. Abschnitt 7.1.1) wird statt einer Dirichlet-Randbedingung eine von Neumann-Randbedingung für die zum Rand tangential Geschwindigkeitskomponente u_x angewendet. Der kreisförmige Strömungswiderstand wird als reibungsbehaftete Wand behandelt. Die Simulation wird mit einem ruhenden Fluid ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) und einem Fluiddruck von $p = 0 \text{ N/m}^2$ initialisiert. Durch die Anwendung einer Referenzdichte von $\rho_0 = 1 \text{ kg/m}^3$, einer dynamischen Viskosität von $\mu = 0,01 \text{ kg/(m s)}$ und einer Referenzschallgeschwindigkeit von $c_0 = 100 \text{ m/s}$ ergeben sich eine Reynolds-Zahl von $Re = u_0 \rho_0 D / \mu = 200$ und eine Mach-Zahl von $Ma = u_0 / c_0 = 0,1$.

Die Zerlegung des Rechengebiets für den Fall der Embedded-SPH-Simulation ist ebenfalls in Abb. 7.14 dargestellt. Ein Anteil von 5 % des Rechengebiets ist dem SPH-Verfahren zwischen den Positionen $x_A/D = 10$ und $x_B/D = 12,5$ zugeordnet. Bei der Positionierung des SPH-Rechengebiets ist darauf zu achten, dass der Abstand zum Strömungshindernis möglichst gering ist, um eine möglichst große Strömungsinstationarität am Kopplungsrand zu gewährleisten. Da die räumlichen Diskretisierungen der FV- und SPH-Rechengebiete in der unmittelbaren Nähe der Kopplungsränder allerdings ähnlich sein müssen, sind die Kopplungsränder außerhalb der am Strömungswiderstand definierten Gitterverfeinerungsregionen (vgl. Abb. 7.15) positioniert. Daher wird ein Abstand zwischen dem linken Kopplungsrand und dem Mittelpunkt des Strömungshindernisses von $5D$ gewählt. Das SPH-Rechengebiet ist durch die obere und die untere Wand sowie durch die FV-Rechengebiete links und rechts vom SPH-Rechengebiet begrenzt. Zur Realisierung der von Neumann-Randbedingungen für den Fluiddruck p und die tangential Geschwindigkeitskomponente u_x an den reibungslosen Wänden wird für die SPH-Methode der Ansatz appliziert, der in Abschnitt 7.1 zur Aufprägung von von Neumann-Randbedingungen für den Fluiddruck an festen Wänden erläutert wurde.

Die Ausbildung der von Kármán'schen Wirbelstraße benötigt bei dem vorliegenden Testfall einen signifikanten physikalischen Zeitraum. Dies würde einen beträchtlichen Rechenaufwand unter Anwendung der SPH-Methode bedeuten. Daher wird die Embedded-SPH-Simulation mit dem Strömungsfeld einer FV-Simulation des gleichen Testfalls initialisiert. Die Initialisierung erfolgt zur normierten physikalischen Zeit $t_+ = t c_0 / L = 1000$. Die Strömungsgrößen werden über das in Abschnitt 5.3.2 erläuterte lokale Interpolationsverfahren an den Positionen der Partikel interpoliert. Sowohl mit der Embedded-SPH-Simulation als auch mit der FV-Simulation wird ein weiteres Zeitintervall von $t_+ = 10$ berechnet. Für diesen Zeitbereich wird eine detaillierte Auswertung der Strömungsfelder durchgeführt. Zur Bewertung der Massenerhaltung wird für beide Lösungsverfahren ein größeres Zeitintervall von $t_+ = 150$ untersucht.

Bei der Embedded-SPH-Simulation wird ein normierter mittlerer Partikelabstand von $r_{\text{ref}}/D = 0,1$ angewendet. Bei der Initialisierung der Embedded-SPH-Simulation werden die Partikel entlang eines äquidistanten Gitters angeordnet. Demnach ergibt sich im Initialisierungszustand

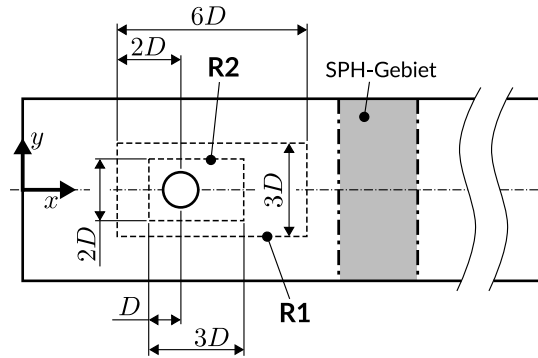


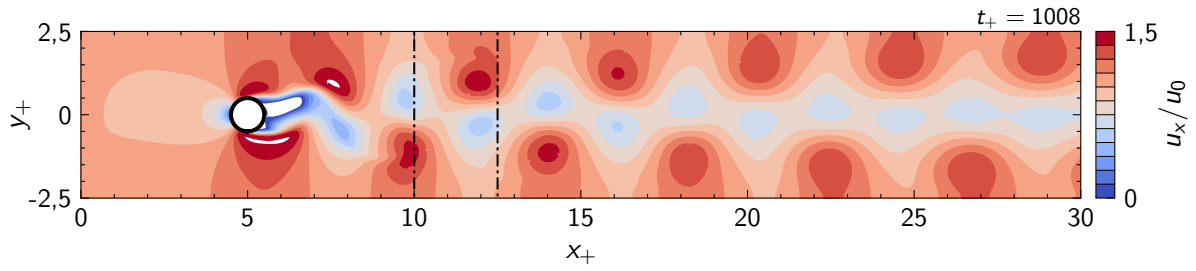
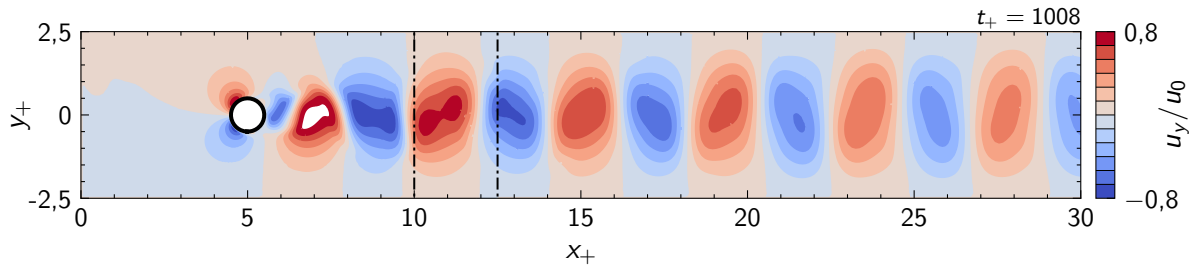
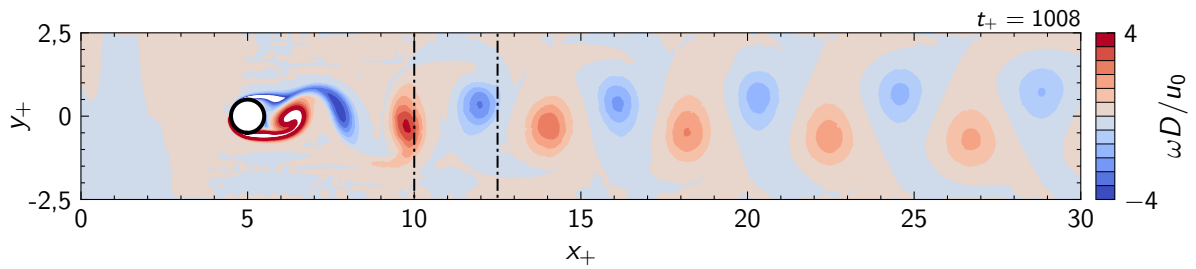
Abbildung 7.15: Dimensionierung der Verfeinerungsregionen um den Bereich des Strömungshindernisses

der Simulation eine Anzahl von 25 Partikeln entlang der x -Richtung und eine Anzahl von 50 Partikeln entlang der y -Richtung. Die Glättungslänge des Kerns ist gleich dem mittleren Partikelabstand ($h = r_{\text{ref}}$). Die Rechengitter der beiden FV-Rechengebiete sind größtenteils durch eine äquivalente räumliche Diskretisierung charakterisiert und als kartesisch anzusehen. Lediglich im Bereich des Strömungshindernisses muss die Gitterauflösung des FV-Rechengebiets verfeinert werden. Die Verfeinerungsregionen sind in Abb. 7.15 veranschaulicht. Innerhalb der ersten Verfeinerungsregion „R1“ wird die Größe der FV-Zellen im Vergleich zu der Gitterauflösung außerhalb dieses Gebiets auf einen Wert von $0,05D$ halbiert. Innerhalb der zweiten Verfeinerungsregion „R2“ wird die Größe der FV-Zellen im Vergleich zur ersten Verfeinerungsregion „R1“ auf einen Wert von $0,025D$ halbiert. Während der Initialisierung mit dem FV-Verfahren (also bis $t_+ = 1000$) wird eine Zeitschrittweite δt basierend auf einer akustischen CFL-Zahl von $\text{CFL} = c_0 \delta t / r_{\text{ref}} = 1$ verwendet. Danach wird die Zeitschrittweite für das FV- und das Embedded-SPH-Verfahren gemäß Gl. 4.82 identisch gewählt. Die Zeitschrittweite nach der Initialisierung entspricht in etwa einem Viertel der Zeitschrittweite während der Initialisierung.

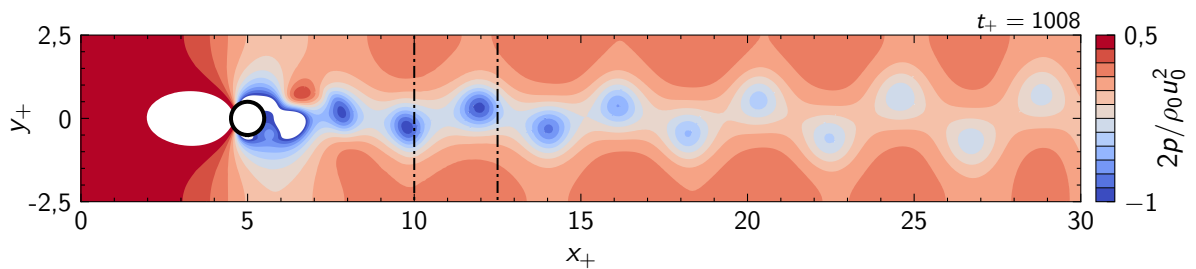
7.3.2 Auswertung

In Abb. 7.16 sind zur physikalischen Zeit $t_+ = 1008$ die Ergebnisse verschiedener Strömungsgrößen der Embedded-SPH-Simulation dargestellt. Die dimensionslosen Koordinaten $x_+ = x/D$ und $y_+ = y/D$ werden durch eine Normierung der Ortskoordinaten mit dem Zylinderdurchmesser D berechnet. Die Darstellung umfasst einen Bereich der normierten x -Koordinate von $0 \leq x_+ \leq 30$ und somit den Bereich des Strömungshindernisses und des Kopplungsgebiets. Die Kopplungsränder sind in Abb. 7.16 durch die vertikalen Strichpunktlinien gekennzeichnet. Durch die Umströmung des Strömungshindernisses werden periodisch abwechselnd links- und rechtsdrehende Wirbel von diesem Strömungshindernis abgelöst. Dadurch entsteht die von Kármán'sche Wirbelstraße. Als Konsequenz sind die Profile der Strömungsgrößen ebenfalls durch periodische Muster charakterisiert. Anhand des Profils der Wirbelstärke

$$\omega = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (7.3)$$

(a) Normierte Fluidgeschwindigkeit in x -Richtung(b) Normierte Fluidgeschwindigkeit in y -Richtung

(c) Normierte Wirbelstärke



(d) Normierter Fluiddruck. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

Abbildung 7.16: Ergebnis der Embedded-SPH-Simulation für die normierten Profile der Strömungsgrößen zur dimensionslosen physikalischen Zeit $t_+ = 1008$. Bereiche mit Werten außerhalb der Farbskalen sind weiß eingefärbt

können die links- und rechtsdrehenden Wirbel visualisiert werden. Die mit der charakteristischen Frequenz u_0/D normierte Wirbelstärke ω ist in Abb. 7.16c dargestellt. An den Stellen der Ma-

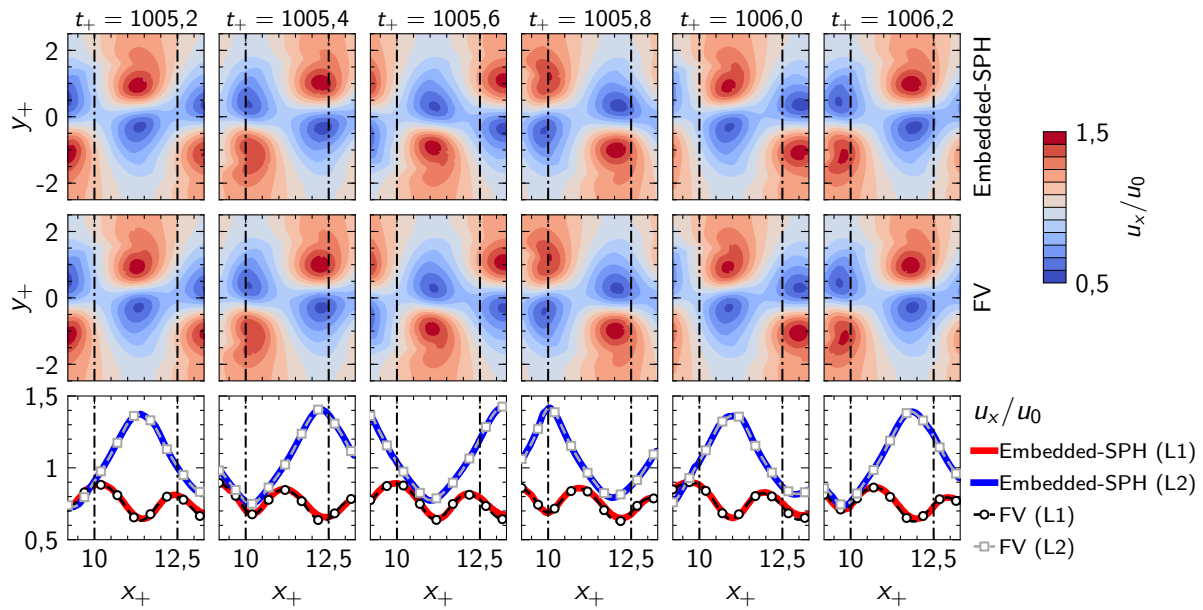
xima und Minima der Wirbelstärke ist das in Abb. 7.16d dargestellte und mit dem dynamischen Druck $\rho_0 u_0^2/2$ normierte Profil des Fluiddrucks p durch Minima charakterisiert. Um die Maxima und Minima der Wirbelstärke herum bilden sich Extremwerte der Komponenten u_x und u_y der Fluidgeschwindigkeit aus, die in Abb. 7.16a und Abb. 7.16b mit der Referenzgeschwindigkeit u_0 normiert dargestellt sind.

Anhand der Strömungsfelder in Abb. 7.16 ist ersichtlich, dass der Testfall eine hohe Komplexität aufweist. Durch die Periodizität der Wirbelablösung wird ebenso der Aspekt der Instationarität der Strömung berücksichtigt. Wie aus Abb. 7.16 erkennbar ist, weist das Strömungsfeld insbesondere im Bereich der Kopplungsränder keine sichtbaren Anzeichen von Unstetigkeiten auf. Wirbelstrukturen können die Kopplungsränder ohne das Hervorrufen unphysikalischer Störungen durchqueren.

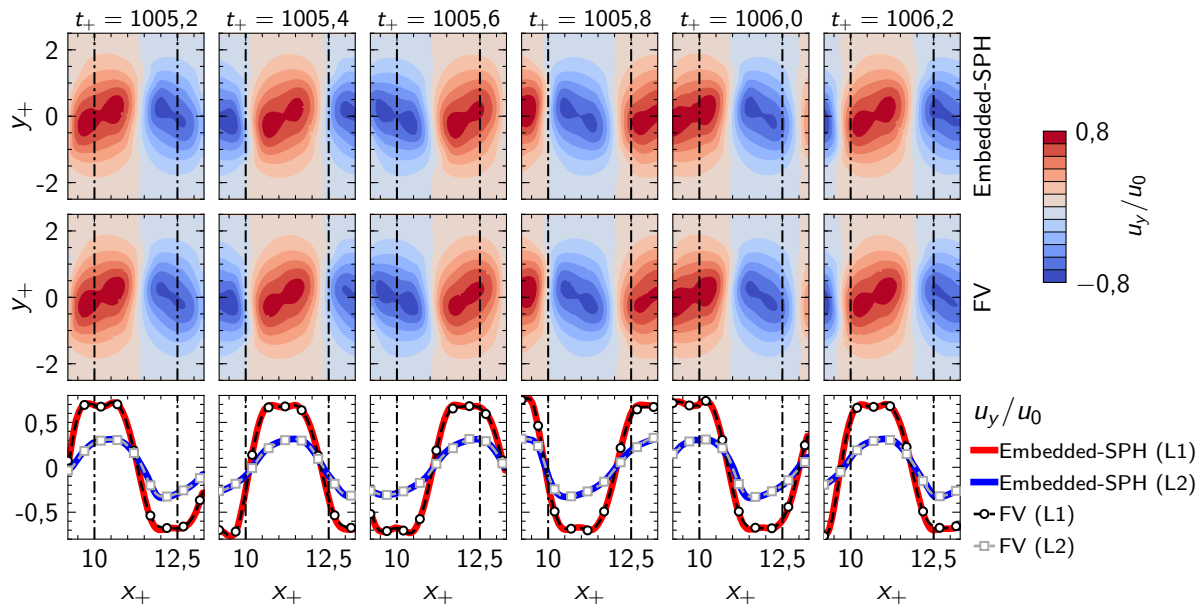
In Abb. 7.17 sind die zuvor eingeführten Strömungsgrößen als Zeitreihen dargestellt. Die Darstellungen umfassen den räumlichen Bereich des SPH-Rechengebiets und jeweils kleine Ausschnitte der links und rechts vom SPH-Rechengebiet befindlichen FV-Rechengebiete. Die Kopplungsränder sind erneut durch die vertikalen Strichpunktlinien gekennzeichnet. Die Zeitreihe umfasst einen Bereich der normierten physikalischen Zeit von $1005,2 \leq t_+ \leq 1006,2$ und ist in Abb. 7.17 mit fortschreitender Zeit von links nach rechts dargestellt. Während dieser Zeitdauer wird ein Wirbel vom linken Rand zum rechten Rand des betrachteten Gebiets advektiert. Die Ergebnisse der Strömungsprofile der Embedded-SPH-Simulation (jeweils oben in Abb. 7.17) werden mit denen der FV-Simulation (jeweils unten in Abb. 7.17) verglichen. Darüber hinaus sind unterhalb der Strömungsprofile für jeden betrachteten Zeitpunkt die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation und der FV-Simulation für die Verläufe der jeweiligen Strömungsgröße entlang der horizontalen Linien „L1“ und „L2“ dargestellt. Die Linie „L1“ bzw. „L2“ ist bei einer normierten y -Koordinate von $y_+ = 0$ bzw. $y_+ = 1,25$ definiert (vgl. Abb. 7.14). Auch hier wird deutlich, dass die Profile zu jedem Zeitpunkt störungsfreie Übergänge an den Kopplungsrändern aufweisen. Dies ist insbesondere zu den Zeitpunkten bemerkenswert, zu denen die Gradienten der Strömungsgrößen an den Kopplungsrändern verhältnismäßig große Werte annehmen. Außerdem ist anhand der Strömungsprofile eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation mit den Ergebnissen der FV-Simulation zu konstatieren. Die Darstellung der Strömungsgrößen entlang der Linien „L1“ und „L2“ ermöglicht einen genaueren Vergleich der Ergebnisse. In diesem Zusammenhang wird deutlich, dass selbst kleine Strukturen der Strömungsgrößen, wie z. B. die kleine Vertiefung im Profil der Fluidgeschwindigkeit u_y zum Zeitpunkt $t_+ = 1005,6$ (vgl. Abb. 7.17b), übertragen werden. Insbesondere anhand der Verläufe entlang der Linie „L1“ sind die signifikanten Gradienten der Strömungsvariablen ersichtlich. Die größten Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beiden Simulationen sind für den Fluiddruck mit zunehmender Entfernung vom linken Kopplungsrand festzustellen (vgl. Abb. 7.17d), wobei diese immer noch sehr gering sind. Insgesamt lässt sich auf Basis dieses Vergleichs eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den beiden Simulationen konstatieren.

Zum weiteren Vergleich der Simulationen wird die Wirbelstärke ω entlang der vertikalen Linie „L3“, die in der Mitte des SPH-Rechengebiets bei einer normierten x -Koordinate von $x_+ = 11,25$ definiert ist (vgl. Abb. 7.14), zu jedem berechneten Zeitpunkt räumlich gemittelt. Der zeitliche Verlauf der räumlich gemittelten Wirbelstärke ist in Abb. 7.18 für die Embedded-

SPH-Simulation und die FV-Simulation dargestellt. Die Zeitpunkte der Minima und Maxima der Wirbelstärke entsprechen den Zeitpunkten, an denen die vom Strömungshindernis abgelösten Wirbel die Linie „L3“ durchqueren. Sowohl der zeitliche Verlauf als auch die Amplitude der Oszillationen zeigen eine exzellente Übereinstimmung. Auf Basis der Frequenz f der dargestellten Oszillationen kann eine charakteristische Strouhal-Zahl $St = fD/u_0$ bestimmt werden. Beide Simulationen weisen einen Wert von $St = 0,225$ auf. Dieser Wert resultiert ebenso auf Basis der



(a) Normierte Fluidgeschwindigkeit in x -Richtung



(b) Normierte Fluidgeschwindigkeit in y -Richtung

Abbildung 7.17: Vergleich zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation für Zeitreihen der normierten Strömungsgrößen. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

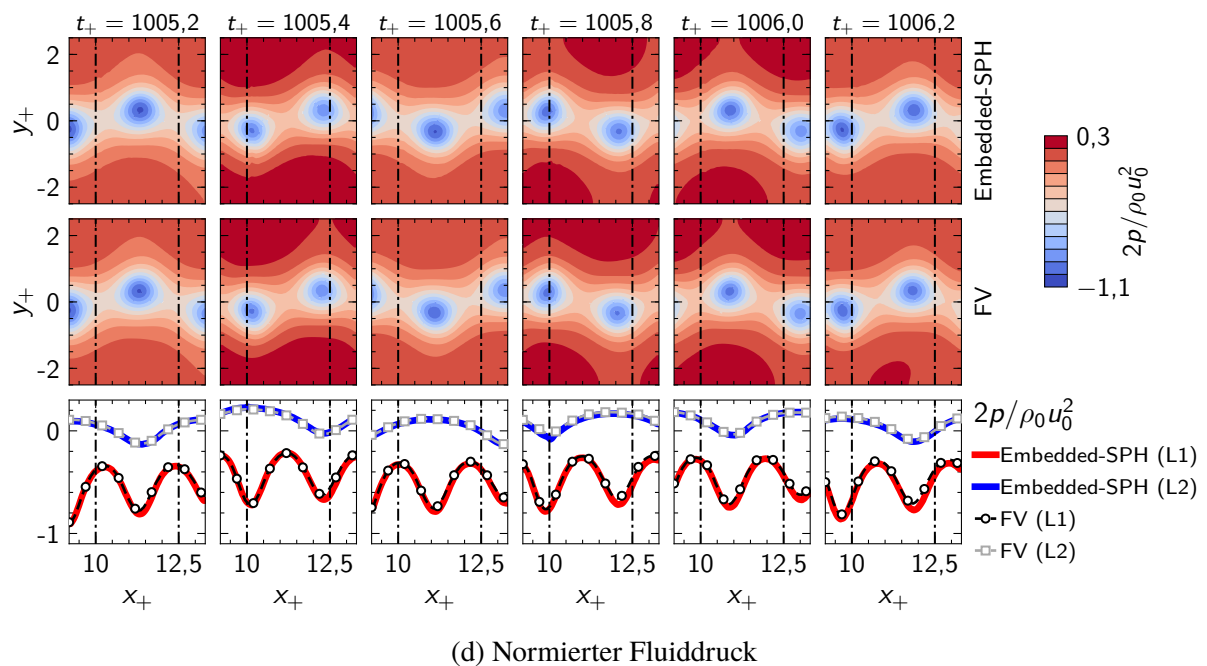
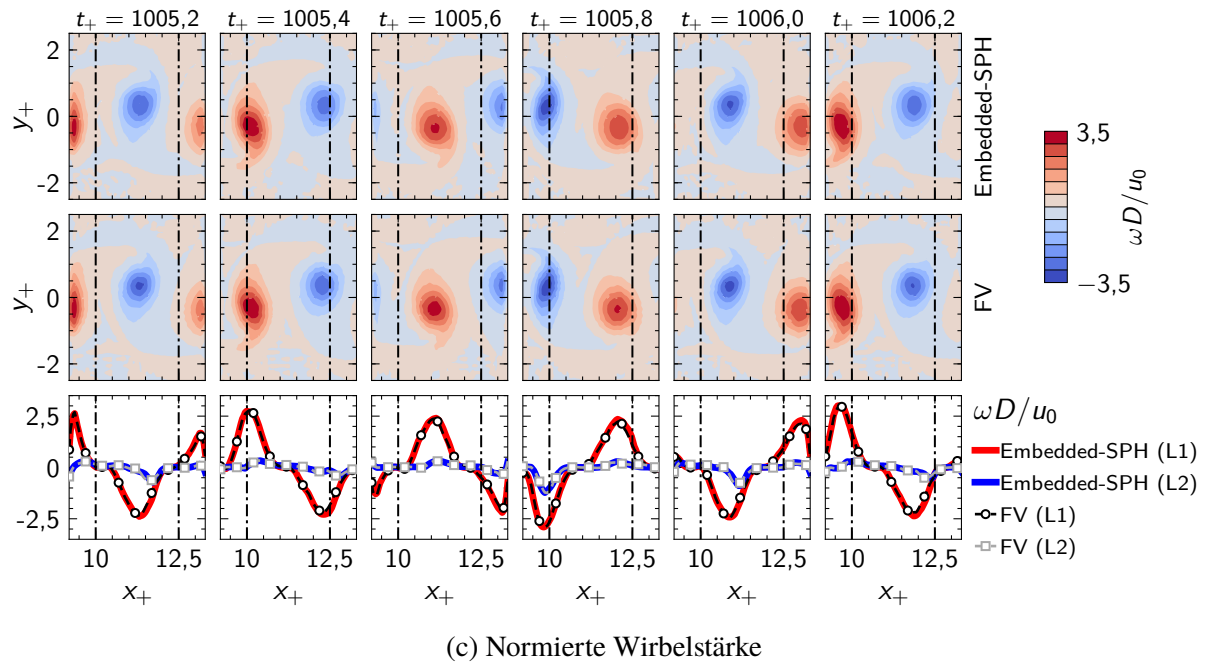


Abbildung 7.17: Vergleich zwischen den Ergebnissen der Embedded-SPH- und der FV-Simulation für Zeitreihen der normierten Strömungsgrößen. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021). (Fortsetzung)

Oszillationen des Auftriebsbeiwerts, der im Zuge dieser Analyse aus einer Kräftebetrachtung am Strömungshindernis berechnet wurde. Er liegt oberhalb des von Roshko (1953) experimentell bestimmten Werts ($St \approx 0,185$). Der Unterschied kann dadurch erklärt werden, dass das Verhältnis des Zylinderdurchmessers zu der Kanalhöhe bei dem vorliegenden Testfall deutlich größer ist als bei dem genannten Experiment. Eine Vergrößerung dieses Verhältnisses geht mit einer Erhöhung der Strouhal-Zahl einher (Griffith et al., 2011). Darüber hinaus kann auch eine

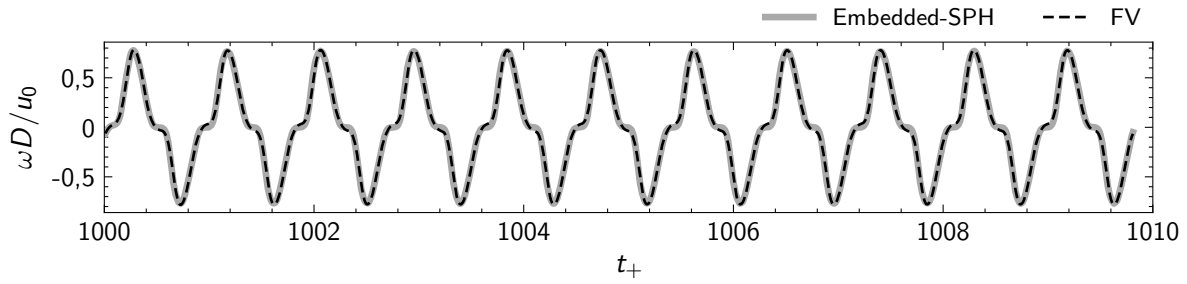


Abbildung 7.18: Zeitlicher Verlauf der über der Linie „L3“ räumlich gemittelten Wirbelstärke ω

unzureichende Auflösung des Rechengitters im Bereich des Zylinders eine Ursache darstellen. Da die Ergebnisse der Embedded-SPH-Simulation und der FV-Simulation nahezu identisch sind, ist das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren als Ursache für die erläuterte Diskrepanz auszuschließen.

In Abb. 7.19 und Abb. 7.20 sind die Ergebnisse für die Massenbilanz der Simulationen veranschaulicht. Der zeitliche Verlauf der Summe der konvektiven Massenströme an den verschiedenen Rechengebieten ist in Abb. 7.19a dargestellt. Zum einen beinhaltet Abb. 7.19a die Summe der konvektiven Massenströme der Kopplungsränder des SPH-Rechengebiets („Embedded-SPH (Randsegmente, SPH)“ in Abb. 7.19a). Diese Summe entspricht dem in Kapitel 6 eingeführten konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Zum anderen beinhaltet Abb. 7.19a die Ergebnisse der FV-Simulation („FV (Rand außen)“ in Abb. 7.19a) und der Embedded-SPH-Simulation („Embedded-SPH (Rand außen)“ in Abb. 7.19a) für die Summe der konvektiven Massenströme der Randflächen der Einlass- und Auslassränder des globalen Rechengebiets. Die Massenströme sind mit dem Referenzmassenstrom $\dot{m}_0 = \rho_0 u_0 r_{\text{ref}} H$ normiert. Während der Initialisierung mit dem FV-Verfahren (also vor dem Zeitpunkt $t_+ = 1000$) oszilliert die Massenstrombilanz mit konstanter Amplitude um einen Mittelwert von null. Nach der Initialisierung (also nach dem Zeitpunkt $t_+ = 1000$) vergrößert sich die Amplitude mit fortschreitender Zeit. Nach einem Zeitpunkt von ca. $t_+ = 1010$ oszilliert die Amplitude. Der Maximalwert der Amplitude erhöht sich dabei aber nicht weiter. In Abb. 7.19b sind die lokalen Minima und Maxima der zeitlichen Verläufe „FV (Rand außen)“ und „Embedded-SPH (Rand außen)“ aus Abb. 7.19a über einem größeren Zeitraum bis einschließlich $t_+ = 1150$ dargestellt. Der Verlauf zeigt, dass die Oszillation der Amplituden mit fortschreitender Zeit abklingt und sich die Amplituden auf einem höheren Wert als während der Initialisierung stabilisieren. Die in den vorangegangenen Ausführungen geschilderte Transition der Massenstrombilanz wird durch die Verkleinerung der Zeitschrittweite nach der Initialisierung verursacht. Durch eine kleinere Zeitschrittweite verringert sich die numerische Dissipation der Simulation, und damit einhergehend vergrößern sich die Amplituden der Strömungsgrößen im Rechengebiet. Sowohl in Abb. 7.19a als auch in Abb. 7.19b ist zwischen den FV- und den Embedded-SPH-Simulationen eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der Massenstrombilanz über den Randflächen der Einlass- und Auslassränder des globalen Rechengebiets festzustellen. Die Verläufe der Massenströme in Abb. 7.19 werden darüber hinaus über dem dargestellten Zeitintervall gemittelt. Erwartungsge-

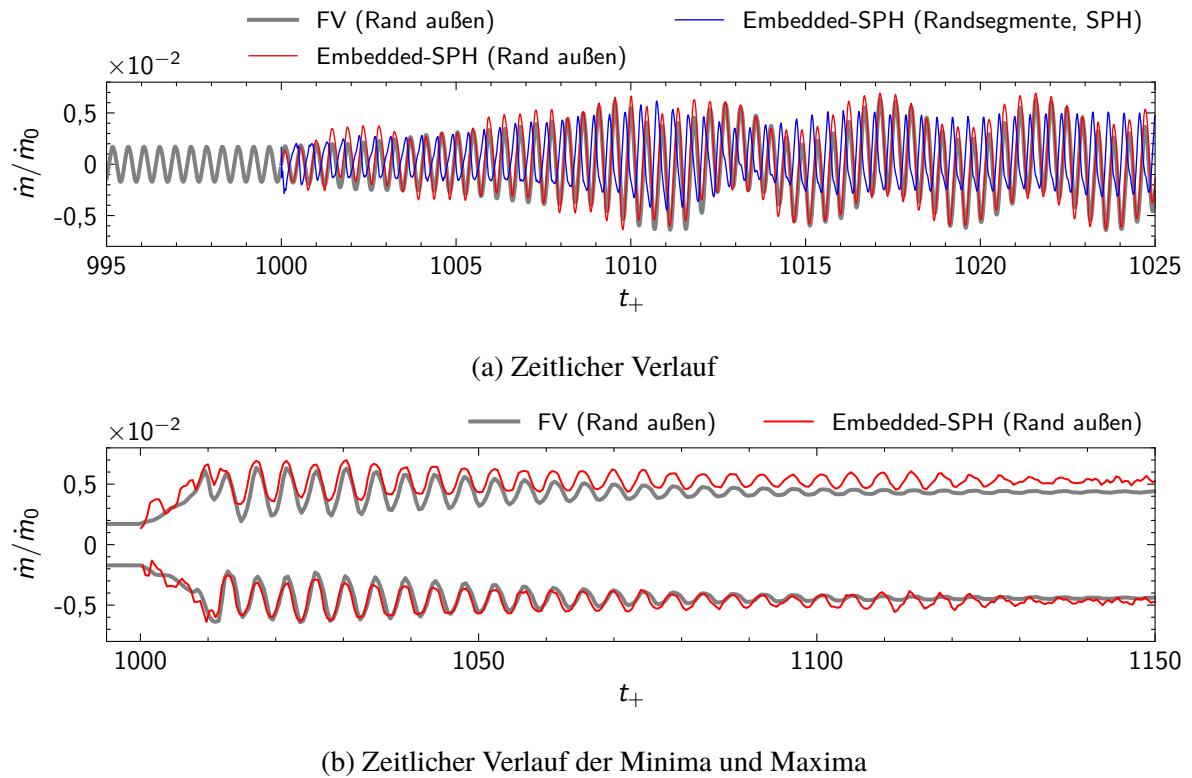
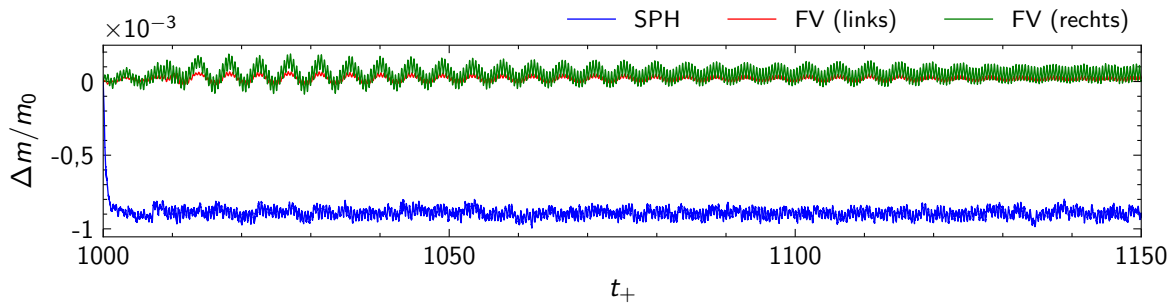


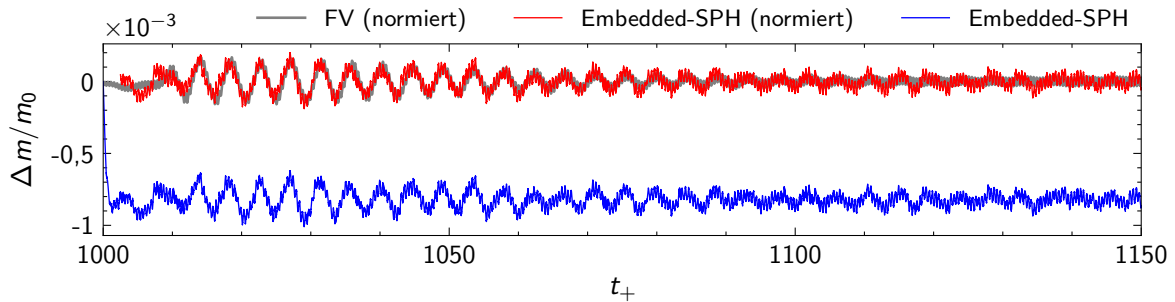
Abbildung 7.19: Zeitliche Verläufe der Massenstromungleichgewichte

mäß ergibt sich für die FV-Simulation ein Mittelwert gleich null. Die zeitlichen Verläufe der Embedded-SPH-Simulation sind im Vergleich zu denen der FV-Simulation zu geringfügig größeren Massenstromwerten verschoben. Infolgedessen liegt der mit dem Referenzmassenstrom $\dot{m}_0$ normierte Mittelwert für das globale Rechengebiet der Embedded-SPH-Simulation mit 0,046 % oberhalb von null. Das konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ des SPH-Rechengebiets (vgl. „Embedded-SPH (Randsegmente, SPH)“ in Abb. 7.19a) weist Oszillationen mit einer geringeren Amplitude als bei denen der zuvor diskutierten Massenstrombilanzen der globalen Rechengebiete auf. Der normierte Mittelwert der Massenstrombilanz für das SPH-Rechengebiet liegt ebenfalls bei 0,046 % des Referenzmassenstroms $\dot{m}_0$. Das geringfügige Ungleichgewicht der konvektiven Massenströme an den Kopplungsrändern wird demnach erwartungsgemäß auf die offenen Ränder des globalen Rechengebiets der Embedded-SPH-Simulation übertragen. Die genannten Ungleichgewichte der Massenströme liegen, wie bereits bei den Testfällen in Abschnitt 7.1 und Abschnitt 7.2, in der Größenordnung eines Zehntausendstels des Referenzmassenstroms und sind daher erneut als sehr gering zu bewerten. Ungleichgewichte dieser Größenordnung haben keinen nennenswerten Einfluss auf technisch relevante Simulationen. Somit ist eine sehr gute Bilanz der Massenströme festzustellen.

Darüber hinaus ist für die Embedded-SPH-Simulation eine sehr gute Erhaltung der Masse des Rechengebiets zu konstatieren. In diesem Zusammenhang sind in Abb. 7.20a die zeitlichen Verläufe der Differenz Δm zwischen der Masse des Rechengebiets zum Zeitpunkt t_+ und der Masse desselben Rechengebiets zum Zeitpunkt $t_+ = 1000$ für die einzelnen Rechengebiete der Embedded-SPH-Simulation dargestellt. Diese Differenzen sind mit der Referenzmasse



(a) Einzelne Rechengebiete der Embedded-SPH-Simulation



(b) Globale Rechengebiete der FV- und der Embedded-SPH-Simulation

Abbildung 7.20: Zeitliche Verläufe der Massenänderungen der Rechengebiete

$m_0 = \rho_0 H L r_{\text{ref}}$ normiert. Aufgrund der physikalischen Fluktuationen der Massenströme (vgl. Abb. 7.19) sind ebenfalls Fluktuationen dieser Massendifferenzen erkennbar. Im Falle der FV-Rechengebiete der Embedded-SPH-Simulation fluktuieren diese um konstante Werte. Im zeitlichen Mittel bleibt die Masse somit erhalten. Die Masse des SPH-Rechengebiets wird nach der Initialisierung um ca. 0,1 % der Referenzmasse m_0 verringert und fluktuiert danach ebenfalls um einen konstanten Mittelwert. Diese Art der Anfangsphase des zeitlichen Verlaufs wurde bereits in Abschnitt 7.1.2 erörtert und kann auf die Anwendung des WCSPH-Ansatzes und des Partikelverschiebungsansatzes zurückgeführt werden. Der Anfangsbereich des zeitlichen Verlaufs der Massendifferenz des SPH-Rechengebiets ist erwartungsgemäß auch bei der Massendifferenz des globalen Rechengebiets der Embedded-SPH-Simulation zu erkennen („Embedded-SPH“ in Abb. 7.20b). Außerdem sind in Abb. 7.20b „normierte“ zeitliche Verläufe der Massendifferenz der globalen Rechengebiete der Embedded-SPH-Simulation und der FV-Simulation dargestellt. Bei dieser Normierung wird der für die jeweilige Simulation zwischen den Zeitpunkten $t_+ = 1002,5$ und $t_+ = 1150$ berechnete zeitliche Mittelwert der Massendifferenz von der Massendifferenz subtrahiert. Ähnlich wie bei den Bilanzen der Massenströme (vgl. Abb. 7.19) ist auch hierbei eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den zeitlichen Verläufen der Embedded-SPH-Simulation und der FV-Simulation festzustellen. Insgesamt ist für die Embedded-SPH-Simulation folglich eine sehr gute Massenbilanz zu konstatieren.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren für die Behandlung komplexer instationärer Strömungszustände im Bereich der Kopplungsränder geeignet ist. Es sind exzellente Übereinstimmungen zwischen der Embedded-SPH-Simulation und der

FV-Simulation für alle relevanten Strömungsgrößen festzustellen. Zudem treten bei der Übertragung dieser Strömungsgrößen an den Kopplungsrändern keine unphysikalischen Störungen auf. Darüber hinaus kann eine sehr gute Massenerhaltung verzeichnet werden.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Um zukünftig Verbesserungen des Wirkungsgrads von Gasturbinen unter Einhaltung strenger Emissionsgrenzwerte zu realisieren, muss die Direkte Numerische Simulation (DNS) des Zerstäubungsvorgangs stärker in den Entwicklungsprozess eingebunden werden. Große Fortschritte bei diesem Simulationsansatz wurden zuletzt mit der gitterfreien Smoothed-Particle-Hydrodynamics (SPH)-Methode erreicht. Um zukünftig effiziente und genaue Simulationen von Verbrennungssystemen zu ermöglichen, muss diese Methode mit gitterbasierten Methoden zur Simulation der Strömung gekoppelt werden.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war es daher, einen hybriden numerischen Ansatz (Embedded-SPH) zu entwickeln und zu validieren. Mit diesem Embedded-SPH-Ansatz sollten gitterfreie SPH-Rechengebiete in Rechengebiete der gitterbasierten Finite-Volumen (FV)-Methode eingebettet werden. Ungeachtet der grundsätzlichen Unterschiede zwischen der SPH- und der FV-Methode musste der Kopplungsansatz stabil und für beliebig komplexe Strömungsfelder geeignet sein sowie eine hinreichend gute Massenerhaltung aufweisen.

Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Kopplungsverfahren grenzt sich insbesondere hinsichtlich eines einheitlichen Ansatzes, wie offene und gekoppelte Randbedingungen aufgeprägt werden, von übrigen Verfahren ab. Über diesen Ansatz können dieselben Kopplungsbedingungen angewendet werden, wie sie bei der Aufprägung von Randbedingungen an den Randflächen des FV-Gitters definiert werden. Die Anwendung verfügbarer Software für die FV-Methode wird ohne die Entwicklung komplizierter und sperriger Sonderlösungen ermöglicht. Als Konsequenz befasste sich diese Arbeit im Kern mit der noch jungen SPH-Methode und deren Weiterentwicklung hinsichtlich offener und gekoppelter Randbedingungen.

In diesem Zusammenhang wurde erstmals eine Kombination aus statischen Geisterpartikeln und einem Algorithmus zur kontinuierlichen Massenänderung randnaher Partikel für offene Ränder entwickelt. Der Rand wird zudem durch Randsegmente diskretisiert, an denen die Strömungsgleichungen auf Basis des Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions (NSCBC)-Ansatzes gelöst werden. Randbedingungen an offenen Rändern und Kopplungsbedingungen unterscheiden sich lediglich hinsichtlich der Berechnung der Strömungszustände der Geisterpartikel. Durch den gewählten Ansatz kann die Gleichheit der Massenströme der gekoppelten Rechengebiete zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort des Kopplungsrandes optimiert werden. Erstmals wurde der NSCBC-Ansatz in der SPH-Methode im Detail validiert. Über diesen Ansatz können zudem nichtreflektierende Randbedingungen appliziert werden, um die Durchlässigkeit für akustische Wellen an offenen Rändern zu ermöglichen.

Durch die zur Realisierung konvektiver Massenströme an offenen Rändern eingeführte kontinuierliche Massenänderung randnaher Partikel wird im randnahen Bereich eine suboptimale Anordnung der Partikel begünstigt. Daraus entstehende unphysikalische Oszillationen der Strömungsvariablen konnten durch die gezielte Auswahl und Validierung geeigneter numerischer Ansätze hinreichend reduziert werden. Insbesondere die Anwendung einer Korrektur des Kernel-Gradienten für eine erhöhte Genauigkeit des Druckgradienten, ein Dichtediffusionsansatz zur Dämpfung von Dichtefluktuationen und ein Partikelverschiebungsansatz zur Homogenisierung der räumlichen Partikelanordnung waren von wesentlicher Bedeutung. Durch die Anwendung

dieser Ansätze resultieren zusätzliche Terme, deren Berücksichtigung in den Erhaltungsgleichungen ausführlich diskutiert und anhand eindimensionaler Testfälle optimiert wurde. Insbesondere die Einbeziehung eines numerischen Massenstroms auf Basis der Dichtediffusion der Partikel erwies sich als enorm wichtig. Es konnte schließlich gezeigt werden, dass das SPH-Verfahren mit offenen Rändern aufgrund dieser Optimierung eine hohe Stabilität und Genauigkeit sowie eine sehr gute Massenbilanz aufweist. Auch für kleine Viskositätswerte, die denen der in der Verbrennungstechnik typischen Fluide ähneln, ist das Verfahren anwendbar.

Mit Embedded-SPH-Simulationen zweidimensionaler akademischer Testfälle konnte die Anwendbarkeit des Verfahrens auf komplexe Strömungsfelder an den Kopplungsrändern demonstriert werden. Stark instationäre Strömungen können mit dem Verfahren berechnet werden. Auch bei Vorliegen großer Gradienten der Strömungsgrößen an den Kopplungsrändern werden keine sichtbaren unphysikalischen Unstetigkeiten des Strömungsfelds generiert. Wirbel können zwischen den Rechengebieten advektiert werden. Darüber hinaus ist ein Wechsel der Strömungsrichtung bei rezirkulierenden Strömungen am Kopplungsrand möglich. Die Übereinstimmung der Strömungsfelder mit denen von analytischen und numerischen Referenzlösungen war sehr gut bis exzellent.

Das entwickelte Verfahren erweist sich insgesamt als ein geeignetes Werkzeug zur Erfüllung wesentlicher Voraussetzungen bei der Simulation von Strömungsprozessen nahe dem Zerstäubungsgebiet. Die eingeführte Kopplung der SPH- und der FV-Methode ist numerisch stabil und flexibel. Die Massenerhaltung ist hinreichend gut gegeben. Geeignete bestehende Softwarelösungen für die SPH- und die FV-Methode können mit diesem Ansatz auf eine einfache Weise adaptiert werden. Um die Anwendung des Verfahrens im Bereich der Simulation von Flüssigbrennstoffsystemen voranzutreiben, sind allerdings weiterführende Untersuchungen und Erweiterungen des Verfahrens notwendig. Hierunter fällt insbesondere die Anwendung auf mehrphasige Fluide. Weitere Anpassungen des Verfahrens im Hinblick auf dreidimensionale Rechengebiete sind ebenfalls notwendig. Darüber hinaus sollte der Algorithmus zur kontinuierlichen Änderung der Partikelmasse an den offenen Rändern für nichtebene Randgeometrien weiterentwickelt werden, wodurch beliebige Geometrien als Embedded-SPH-Rechengebiete definiert werden könnten.

Literaturverzeichnis

- Adami, S., Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2012). „A generalized wall boundary condition for Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 231.21, S. 7057–7075.
- Adami, S., Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2013). „A transport-velocity formulation for Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 241, S. 292–307.
- Aguerre, H. J., Márquez Damián, S. und Nigro, N. M. (2019). „Conservative interpolation on surface interfaces for transport problems in the Finite Volume method“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 395, S. 144–165.
- Alvarado-Rodríguez, C. E., Klapp, J., Sigalotti, L. D. G., Domínguez, J. M. und Cruz Sánchez, E. de la (2017). „Nonreflecting outlet boundary conditions for incompressible flows using SPH“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 159, S. 177–188.
- Antuono, M., Colagrossi, A., Marrone, S. und Molteni, D. (2010). „Free-surface flows solved by means of SPH schemes with numerical diffusive terms“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 181.3, S. 532–549.
- Barcarolo, D. A. (2013). „Improvement of the precision and the efficiency of the SPH method: Theoretical and numerical study“. Dissertation. École Centrale de Nantes (ECN).
- Barcarolo, D. A., Le Touzé, D., Oger, G. und de Vuyst, F. (2014). „Adaptive particle refinement and derefinement applied to the Smoothed Particle Hydrodynamics method“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 273, S. 640–657.
- Benek, J., Buning, P. und Steger, J. (1985). „A 3-D Chimera grid embedding technique“. In: *Proceedings of the 7th Computational Physics Conference*. Cincinnati, USA.
- Benek, J., Steger, J. und Dougherty, F. C. (1983). „A flexible grid embedding technique with application to the Euler equations“. In: *Proceedings of the 6th Computational Fluid Dynamics Conference*. Danvers, USA.
- Berger, M. J. (1987). „On conservation at grid interfaces“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Bd. 24.5, S. 967–984.
- Bonet, J. und Lok, T.-S. L. (1999). „Variational and momentum preservation aspects of Smooth Particle Hydrodynamic formulations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 180.1, S. 97–115.
- Bouscasse, B., Marrone, S., Colagrossi, A. und Di Mascio, A. (2013). „Multi-purpose interfaces for coupling SPH with other solvers“. In: *Proceedings of the 8th SPHERIC International Workshop*. Trondheim, Norwegen.
- Braun, S. (2018). „Zur Simulation der Zerstäubung flüssigen Kraftstoffs mit der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode“. Dissertation. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT).
- Braun, S., Wieth, L., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2015). „A framework for permeable boundary conditions in SPH: Inlet, outlet, periodicity“. In: *Proceedings of the 10th SPHERIC International Workshop*. Parma, Italien.
- Chiron, L., Marrone, S., Di Mascio, A. und Le Touzé, D. (2018a). „Coupled SPH-FV method with net vorticity and mass transfer“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 364, S. 111–136.

- Chiron, L., Oger, G., de Leffe, M. und Le Touzé, D. (2018b). „Analysis and improvements of Adaptive Particle Refinement (APR) through CPU time, accuracy and robustness considerations“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 354, S. 552–575.
- Colagrossi, A., Bouscasse, B., Antuono, M. und Marrone, S. (2012). „Particle packing algorithm for SPH schemes“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 183.8, S. 1641–1653.
- Colagrossi, A. und Landrini, M. (2003). „Numerical simulation of interfacial flows by Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 191.2, S. 448–475.
- Cole, R. H. (1948). *Underwater explosions*. 1. Aufl. Princeton University Press, Princeton, USA.
- Cummins, S. J. und Rudman, M. (1999). „An SPH projection method“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 152.2, S. 584–607.
- Dabonneville, F., Hecht, N., Reveillon, J., Pinon, G. und Demoulin, F. X. (2019). „A zonal grid method for incompressible two-phase flows“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 180, S. 22–40.
- Dabonneville, F. (2018). „Development of a multi-approach and multi-scale numerical method applied to atomization“. Dissertation. Université de Rouen Normandie.
- Dalcin, L. D., Bradshaw, R., Smith, K., Citro, C., Behnel, S. und Seljebotn, D. S. (2011). „Cython: The best of both worlds“. In: *Computing in Science & Engineering*, Bd. 13, S. 31–39.
- Dauch, T. F., Okraschevski, M., Keller, M. C., Braun, S., Wieth, L., Chaussonnet, G., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2017). „Preprocessing workflow for the initialization of SPH predictions based on arbitrary CAD models“. In: *Proceedings of the 12th SPHERIC International Workshop*. Ourense, Spanien.
- de Leffe, M., Le Touzé, D. und Alessandrini, B. (2009). „Normal flux method at the boundary for SPH“. In: *Proceedings of the 4th SPHERIC International Workshop*. Nantes, Frankreich.
- Dehnen, W. und Aly, H. (2012). „Improving convergence in Smoothed Particle Hydrodynamics simulations without pairing instability“. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Bd. 425.2, S. 1068–1082.
- Desjardins, O., McCaslin, J. O., Owkes, M. und Brady, P. T. (2013). „Direct Numerical and Large-Eddy Simulation of primary atomization in complex geometries“. In: *Atomization and Sprays*, Bd. 23.11, S. 1001–1048.
- Donea, J., Huerta, A., Ponthot, J.-P. und Rodríguez-Ferran, A. (2004). „Arbitrary Lagrangian-Eulerian methods“. In: *Encyclopedia of Computational Mechanics*. 1. Aufl. John Wiley & Sons, Ltd, Hoboken, USA. Kap. 14.
- Eitzlmayr, A., Koscher, G. und Khinast, J. (2014). „A novel method for modeling of complex wall geometries in Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 185.10, S. 2436–2448.
- Farrell, P. E. und Maddison, J. R. (2011). „Conservative interpolation between volume meshes by local Galerkin projection“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 200.1, S. 89–100.
- Federico, I., Marrone, S., Colagrossi, A., Aristodemo, F. und Antuono, M. (2012). „Simulating 2D open-channel flows through an SPH model“. In: *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, Bd. 34, S. 35–46.

- Feldman, J. und Bonet, J. (2007). „Dynamic refinement and boundary contact forces in SPH with applications in fluid flow problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 72.3, S. 295–324.
- Ferrand, M., Laurence, D. R., Rogers, B. D., Violeau, D. und Kassiotis, C. (2012). „Unified semi-analytical wall boundary conditions for inviscid, laminar or turbulent flows in the meshless SPH method“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 71.4, S. 446–472.
- Ferrand, M., Joly, A., Kassiotis, C., Violeau, D., Leroy, A., Morel, F.-X. und Rogers, B. D. (2017). „Unsteady open boundaries for SPH using semi-analytical conditions and Riemann solver in 2D“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 210, S. 29–44.
- Ferrari, A., Dumbser, M., Toro, E. F. und Armanini, A. (2009). „A new 3D parallel SPH scheme for free surface flows“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 38.6, S. 1203–1217.
- Ferziger, J. H. und Perić, M. (2002). *Computational methods for fluid dynamics*. 3. Aufl. Springer Berlin, Heidelberg, Deutschland.
- Fourtakas, G. (2014). „Modelling multi-phase flows in nuclear decommissioning using SPH“. Dissertation. The University of Manchester.
- Fourtakas, G., Dominguez, J. M., Vacondio, R. und Rogers, B. D. (2019). „Local uniform stencil (LUST) boundary condition for arbitrary 3-D boundaries in parallel Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) models“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 190, S. 346–361.
- Fourtakas, G., Vacondio, R. und Rogers, B. D. (2015). „On the approximate zeroth and first-order consistency in the presence of 2-D irregular boundaries in SPH obtained by the virtual boundary particle methods“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 78.8, S. 475–501.
- Fries, T.-P. und Matthies, H.-G. (2004). *Classification and overview of meshfree methods*. Informatikbericht. Nr. 2003-03. Institut für Wissenschaftliches Rechnen, Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Deutschland.
- Gabriel, E., Fagg, G. E., Bosilca, G., Angskun, T., Dongarra, J. J., Squyres, J. M., Sahay, V., Kambadur, P., Barrett, B., Lumsdaine, A., Castain, R. H., Daniel, D. J., Graham, R. L. und Woodall, T. S. (2004). „Open MPI: Goals, concept, and design of a next generation MPI implementation“. In: *Proceedings of the 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting*. Budapest, Ungarn.
- Ghia, U., Ghia, K. N. und Shin, C. T. (1982). „High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 48.3, S. 387–411.
- Giles, M. B. (1990). „Nonreflecting boundary conditions for Euler equation calculations“. In: *AIAA Journal*, Bd. 28.12, S. 2050–2058.
- Gingold, R. A. und Monaghan, J. J. (1977). „Smoothed Particle Hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars“. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Bd. 181, S. 375–389.
- Godunov, S. K. und Bohachevsky, I. (1959). „Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics“. In: *Matematičeskij sbornik*, Bd. 47(89).3, S. 271–306.

- Griffith, M. D., Leontini, J., Thompson, M. C. und Hourigan, K. (2011). „Vortex shedding and three-dimensional behaviour of flow past a cylinder confined in a channel“. In: *Journal of Fluids and Structures*, Bd. 27.5, S. 855–860.
- Herrmann, M. (2010). „Detailed numerical simulations of the primary atomization of a turbulent liquid jet in crossflow“. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Bd. 132.6, Artikel 061506-10.
- Hirschler, M., Kunz, P., Huber, M., Hahn, F. und Nieken, U. (2016). „Open boundary conditions for ISPH and their application to micro-flow“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 307, S. 614–633.
- Hirt, C. W. und Nichols, B. D. (1981). „Volume of Fluid (VoF) method for the dynamics of free boundaries“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 39.1, S. 201–225.
- Höfler, C. (2013). „Entwicklung eines Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Codes zur numerischen Vorhersage des Primärzerfalls an Brennstoffeinspritzdüsen“. Dissertation. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT).
- Hosseini, S. M. und Feng, J. J. (2011). „Pressure boundary conditions for computing incompressible flows with SPH“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 230.19, S. 7473–7487.
- Issa, R. I. (1986). „Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 62, S. 40–65.
- Jin, G. und Braza, M. (1993). „A nonreflecting outlet boundary condition for incompressible unsteady Navier-Stokes calculations“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 107.2, S. 239–253.
- Kassiotis, C., Violeau, D. und Ferrand, M. (2013). „Semi-analytical conditions for open boundaries in Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Proceedings of the 8th SPHERIC International Workshop*. Trondheim, Norwegen.
- Kulasegaram, S., Bonet, J., Lewis, R. W. und Profit, M. (2004). „A variational formulation based contact algorithm for rigid boundaries in two-dimensional SPH applications“. In: *Computational Mechanics*, Bd. 33, S. 316–325.
- Kunz, P., Hirschler, M., Huber, M. und Nieken, U. (2016). „Inflow/outflow with Dirichlet boundary conditions for pressure in ISPH“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 326, S. 171–187.
- Lastiwka, M., Basa, M. und Quinlan, N. J. (2008). „Permeable and non-reflecting boundary conditions in SPH“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 61.7, S. 709–724.
- Leroy, A., Violeau, D., Ferrand, M., Fratter, L. und Joly, A. (2016). „A new open boundary formulation for incompressible SPH“. In: *Computers & Mathematics with Applications*, Bd. 72.9, S. 2417–2432.
- LeVeque, R. J. (2002). *Finite Volume methods for hyperbolic problems*. 1. Aufl. Cambridge University Press, Cambridge, England.
- Lind, S. J., Xu, R., Stansby, P. K. und Rogers, B. D. (2012). „Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics for free-surface flows: A generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 231.4, S. 1499–1523.

- Liu, M. B. und Liu, G. R. (2010). „Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): An overview and recent developments“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering*, Bd. 17, S. 25–76.
- Lucy, L. B. (1977). „A numerical approach to the testing of the fission hypothesis“. In: *Astronomical Journal*, Bd. 82, S. 1013–1024.
- Mancip, M. (2003). „Couplage de méthodes numériques pour les lois de conservation. Application au cas de l’injection“. Dissertation. Institut National des Sciences Appliquées (INSA) de Toulouse.
- Marrone, S., Antuono, M., Colagrossi, A., Colicchio, G., Le Touzé, D. und Graziani, G. (2011). „ δ -SPH model for simulating violent impact flows“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 200.13, S. 1526–1542.
- Marrone, S., Di Mascio, A. und Le Touzé, D. (2016). „Coupling of Smoothed Particle Hydrodynamics with Finite Volume method for free-surface flows“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 310, S. 161–180.
- Ménard, T., Tanguy, S. und Berlemont, A. (2007). „Coupling Level Set/VoF/Ghost Fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet“. In: *International Journal of Multiphase Flow*, Bd. 33.5, S. 510–524.
- Möbius, A. F. (1827). *Der barycentrische Calcul*. 1. Aufl. Johann Ambrosius Barth Verlag, Leipzig, Deutschland.
- Molteni, D. und Colagrossi, A. (2009). „A simple procedure to improve the pressure evaluation in hydrodynamic context using the SPH“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 180.6, S. 861–872.
- Monaghan, J. J. (1992). „Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, Bd. 30, S. 543–574.
- Monaghan, J. J. (1994). „Simulating free surface flows with SPH“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 110.2, S. 399–406.
- Monaghan, J. J. (2000). „SPH without a tensile instability“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 159.2, S. 290–311.
- Monaghan, J. J. (2005). „Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Reports on Progress in Physics*, Bd. 68.8, S. 1703–1759.
- Monaghan, J. J. und Kajtar, J. B. (2009). „SPH particle boundary forces for arbitrary boundaries“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 180.10, S. 1811–1820.
- Monaghan, J. J. und Kocharyan, A. (1995). „SPH simulation of multi-phase flow“. In: *Computer Physics Communications*, Bd. 87.1, S. 225–235.
- Monteleone, A., De Marchis, M., Milici, B. und Napoli, E. (2018). „A multi-domain approach for Smoothed Particle Hydrodynamics simulations of highly complex flows“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 340, S. 956–977.
- Monteleone, A., Monteforte, M. und Napoli, E. (2017). „Inflow/outflow pressure boundary conditions for Smoothed Particle Hydrodynamics simulations of incompressible flows“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 159, S. 9–22.
- Monteleone, A., Napoli, E. und Gianguzzi, C. (2015). „An hybrid Finite Volume-SPH method for incompressible flows“. In: *Proceedings of the 10th SPHERIC International Workshop*. Parma, Italien.

- Morris, J. P., Fox, P. J. und Zhu, Y. (1997). „Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 136.1, S. 214–226.
- Napoli, E., De Marchis, M., Gianguzzi, C., Milici, B. und Monteleone, A. (2016). „A coupled Finite Volume-Smoothed Particle Hydrodynamics method for incompressible flows“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 310, S. 674–693.
- Negi, P., Ramachandran, P. und Haftu, A. (2020). „An improved non-reflecting outlet boundary condition for weakly-compressible SPH“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 367, Artikel 113119.
- Neuhauser, M. (2014). „Development of a coupled SPH-ALE/Finite Volume method for the simulation of transient flows in hydraulic machines“. Dissertation. École Centrale de Lyon.
- Neuhauser, M., Marongiu, J.-C. und Leboeuf, F. (2013). „Coupling of the meshless SPH-ALE method with a Finite Volume method“. In: *Proceedings of the III International Conference on Particle-based Methods: Fundamentals and Applications*, S. 939–948.
- Oger, G., Marrone, S., Le Touzé, D. und de Leffe, M. (2016). „SPH accuracy improvement through the combination of a quasi-Lagrangian shifting transport velocity and consistent ALE formalisms“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 313, S. 76–98.
- Osher, S. und Sethian, J. A. (1988). „Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 79.1, S. 12–49.
- Pärt-Enander, E. und Sjögreen, B. (1994). „Conservative and non-conservative interpolation between overlapping grids for Finite Volume solutions of hyperbolic problems“. In: *Computers & Fluids*, Bd. 23.3, S. 551–574.
- Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. 1. Aufl. CRC Press, Boca Raton, USA.
- Poinsot, T. J. und Lelef, S. K. (1992). „Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 101.1, S. 104–129.
- Poinsot, T. J. und Veynante, D. (2011). *Theoretical and numerical combustion*. 3. Aufl. R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, USA.
- Quinlan, N. J., Basa, M. und Lastiwka, M. (2006). „Truncation error in mesh-free particle methods“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 66.13, S. 2064–2085.
- Rai, M. M. (1986). „A conservative treatment of zonal boundaries for Euler equation calculations“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 62.2, S. 472–503.
- Rogers, B. D., Kassiotis, C., Violeau, D., Ferrand, M. und Mahmood, O. (2012). „Absorbing inlet/outlet boundary conditions for 2D SPH turbulent free-surface flows“. In: *Proceedings of the 7th SPHERIC International Workshop*. Prato, Italien.
- Roshko, A. (1953). *On the development of turbulent wakes from vortex streets*. Technischer Bericht. Nr. 1191. National Advisory Committee for Aeronautics (NACA), Washington, USA.
- Selle, L., Nicoud, F. und Poinso, T. J. (2004). „Actual impedance of nonreflecting boundary conditions: Implications for computation of resonators“. In: *AIAA Journal*, Bd. 42.5, S. 958–964.
- Shepard, D. (1968). „A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data“. In: *Proceedings of the 1968 23rd ACM National Conference*. New York, USA, S. 517–524.

- Stokes, G. G. (1880). „On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids“. In: *Mathematical and Physical Papers*. 1. Aufl. Cambridge University Press, Cambridge, England, S. 75–129.
- Sun, P. N., Colagrossi, A., Marrone, S., Antuono, M. und Zhang, A.-M. (2019). „A consistent approach to particle shifting in the δ -Plus-SPH model“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 348, S. 912–934.
- Swegle, J. W., Hicks, D. L. und Attaway, S. W. (1995). „Smoothed Particle Hydrodynamics stability analysis“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 116.1, S. 123–134.
- Tafuni, A., Domínguez, J. M., Vacondio, R. und Crespo, A. J. C. (2018). „A versatile algorithm for the treatment of open boundary conditions in Smoothed Particle Hydrodynamics GPU models“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 342, S. 604–624.
- Tafuni, A., Domínguez, J. M., Vacondio, R., Sahin, I. und Crespo, A. J. C. (2016). „Open boundary conditions for large-scale SPH simulations“. In: *Proceedings of the 11th SPHERIC International Workshop*. München, Deutschland.
- Tang, H. S., Haynes, R. D. und Houzeaux, G. (2021). „A review of domain decomposition methods for simulation of fluid flows: Concepts, algorithms, and applications“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering*, Bd. 28, S. 841–873.
- Thompson, K. W. (1987). „Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 68.1, S. 1–24.
- Toro, E. F. (2009). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: A practical introduction*. 3. Aufl. Springer Berlin, Heidelberg.
- Ulrich, C. (2013). „Smoothed-Particle-Hydrodynamics simulation of port hydrodynamic problems“. Dissertation. Technische Universität Hamburg.
- Vacondio, R. (2010). „Shallow Water and Navier-Stokes SPH-like numerical modelling of rapidly varying free-surface flows“. Dissertation. Università degli Studi di Parma.
- Vacondio, R., Rogers, B. D. und Stansby, P. K. (2012). „Smoothed Particle Hydrodynamics: Approximate zero-consistent 2-D boundary conditions and still shallow-water tests“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Bd. 69.1, S. 226–253.
- van Leer, B. (1979). „Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 32, S. 101–136.
- Vila, J. P. (1999). „On particle weighted methods and Smooth Particle Hydrodynamics“. In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, Bd. 9.2, S. 161–209.
- Violeau, D. (2012). *Fluid mechanics and the SPH method: Theory and applications*. 1. Aufl. Oxford University Press, Oxford, England.
- Violeau, D. und Rogers, B. D. (2016). „Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) for free-surface flows: Past, present and future“. In: *Journal of Hydraulic Research*, Bd. 54.1, S. 1–26.
- Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H. und Fureby, C. (1998). „A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques“. In: *Computers in Physics*, Bd. 12.6, S. 620–631.
- Xu, R., Stansby, P. und Laurence, D. (2009). „Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 228.18, S. 6703–6725.

- Yildiz, M., Rook, R. A. und Suleman, A. (2009). „SPH with the multiple boundary tangent method“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 77.10, S. 1416–1438.
- Zhang, C., Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2017). „A generalized transport-velocity formulation for Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 337, S. 216–232.

Eigene Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge

- Werdelmann, B., Koch, R., Krebs, W. und Bauer, H.-J. (2021). „An approach for permeable boundary conditions in SPH“. In: *Journal of Computational Physics*, Bd. 444, Artikel 110562.
- Werdelmann, B., Krebs, W., Portillo-Bilbao, E., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2014). „Open boundary conditions using the mirror ghost particle approach in OpenFOAM SPH“. In: *Proceedings of the 9th SPHERIC International Workshop*. Paris, Frankreich.

Anhang

A.1 Herleitung der NSCBC-Gleichung

In diesem Abschnitt wird die Herleitung von Gl. 5.1 zur Beschreibung der Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}_s = [p_s, \mathbf{u}_s^\top]^\top$ des Randsegments s gemäß des in Abschnitt 5.2 angewendeten Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions(NSCBC)-Verfahrens (Poinsot und Lelef, 1992) erläutert. Der Zustandsvektor $\mathbf{X}_s$ besteht aus dem Fluiddruck p_s und der Fluidgeschwindigkeit $\mathbf{u}_s$ und ist an der Position $\mathbf{r}_s$ definiert. Zum Zwecke der besseren Lesbarkeit der nachfolgenden Gleichungen wird der Index s im Folgenden nicht mehr aufgeführt. Alle nachfolgend genutzten Variablen beziehen sich aber auf das Randsegment s . Um den Informationseintrag und -austrag für das Rechengebiet Ω entlang der Richtung des Normaleneinheitsvektors $\mathbf{n}$ des Randsegments s zu erfassen, müssen die Erhaltungsgleichungen in dem bereits eingeführten lokalen Koordinatensystem R' mit den Komponenten (ξ, η_1, η_2) (vgl. Abb. 5.3) formuliert werden. Die Komponente ξ ist dabei für den Informationstransfer über das Randsegment relevant. Der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{u}$ wird ebenfalls in das lokale Koordinatensystem R' transformiert. Der transformierte Geschwindigkeitsvektor wird als $\mathbf{u}' = [u_\xi, u_{\eta,1}, u_{\eta,2}]^\top$ bezeichnet (vgl. Abb. 5.3). Damit ergibt sich auch der im lokalen Koordinatensystem R' definierte Zustandsvektor $\mathbf{X}' = [p, \mathbf{u}'^\top]^\top$. Ziel der nachfolgenden Ausführungen ist, zuerst eine charakteristische Formulierung der Erhaltungsgleichungen für den Zustandsvektor $\mathbf{X}'$ zu entwickeln, in der nur nichtdiffusive Terme und Ortsableitungen nach der zum Rand orthogonalen Raumrichtung einbezogen werden. Über diese Formulierung können Rand- und Kopplungsbedingungen gemäß Abschnitt 5.2.4 und Abschnitt 5.2.5 auf konsistente Weise aufgeprägt werden. Anschließend muss die zeitliche Änderungsrate des im lokalen Koordinatensystem definierten Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ unter Berücksichtigung der in den charakteristischen Gleichungen vernachlässigten Terme in eine zeitliche Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ umgerechnet werden. Die nachfolgende Herleitung orientiert sich dabei an den Arbeiten von Poinsot und Lelef (1992) und Thompson (1987).

Für die Berechnung der zeitlichen Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ des Randsegments s werden die Erhaltungsgleichungen in differentieller Form herangezogen. Es ist zur Herleitung dieser Gleichungen vorteilhaft, die Erhaltungsgleichungen der Masse und des Impulses als System partieller Differentialgleichungen in Matrizenschreibweise darzustellen. Dazu wird in Gl. 3.7 der Ausdruck $\rho\Phi$ durch den konservativen Zustandsvektor $\mathbf{Z} = [\rho, \rho\mathbf{u}^\top]^\top$ ersetzt:

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{Z}) - \nabla \cdot \mathbf{F}_{c,\mathbf{Z}} - \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}} \quad (\text{A.1})$$

In Gl. A.1 beschreibt $\mathbf{F}_{c,\mathbf{Z}}$ bzw. $\mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}}$ eine Matrix, die spaltenweise aus den nichtdiffusiven bzw. diffusiven Flussvektoren der einzelnen Erhaltungsgleichungen zusammengesetzt ist (vgl. Abschnitt 3.1):

$$\mathbf{F}_{c,\mathbf{Z}} = [\mathbf{F}_{c,\phi=1}, \mathbf{F}_{c,\Phi=\mathbf{u}}] \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}} = [\mathbf{F}_{d,\phi=1}, \mathbf{F}_{d,\Phi=\mathbf{u}}] \quad (\text{A.3})$$

Gl. A.1 kann durch Multiplikation mit der Jacobi-Matrix $\mathbf{A}$ umformuliert werden, um die zeitliche Änderungsrate eines primitiven Zustandsvektors $\mathbf{X} = [p, \mathbf{u}^\top]^\top$ durch das Differentialgleichungssystem zu beschreiben:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = -\mathbf{A} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{Z} + \mathbf{F}_{c,\mathbf{Z}}) - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{Z}} = \begin{bmatrix} c^2 & \mathbf{0}_{1,n} \\ -\mathbf{u}/\rho & \mathbf{I}_n/\rho \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Die Matrix $\mathbf{0}$ bzw. $\mathbf{I}$ ist die Nullmatrix bzw. die (quadratische) Einheitsmatrix mit der in den Indizes deklarierten Anzahl an Zeilen und Spalten, wobei n die Anzahl der räumlichen Dimensionen repräsentiert. Der erste Term auf der rechten Seite der Gl. A.4 bezieht sich auf die nichtdiffusiven Flüsse. Ausschließlich dieser Anteil soll in den charakteristischen Gleichungen berücksichtigt werden. Darüber hinaus müssen die charakteristischen Gleichungen, wie eingangs erläutert wurde, auf Basis des am Randsegment definierten lokalen Koordinatensystems R' formuliert werden. Es wird daher der Term $\partial \mathbf{X}' / \partial t|_c$ eingeführt, über den die zeitliche Änderungsrate des im lokalen Koordinatensystem R' definierten Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ basierend auf nichtdiffusiven Flüssen repräsentiert wird. Diese Änderungsrate kann daher wie folgt in Gl. A.4 eingesetzt werden:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \mathbf{T} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \Big|_c - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,\mathbf{Z}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}_{1,n} \\ \mathbf{0}_{n,1} & \mathfrak{R} \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Die $n \times n$ -Matrix $\mathfrak{R}$ ist die Rotationsmatrix, über die ein Vektor (hier: $\mathbf{u}'$) aus dem lokalen Koordinatensystem R' in das globale Koordinatensystem R transformiert wird. Im Folgenden werden alle Vektoren und räumlichen Ableitungen, die im lokalen kartesischen Koordinatensystem R' definiert sind, durch das Hinzufügen eines Apostrophs (') zu den entsprechenden Symbolen indiziert. Die Änderungsrate $\partial \mathbf{X}' / \partial t|_c$ ist analog zu Gl. A.4 wie folgt definiert:

$$\frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \Big|_c = -\mathbf{A}' \cdot \nabla' \cdot (\mathbf{u}' \otimes \mathbf{Z}' + \mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z}}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}' = \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \mathbf{Z}'} = \begin{bmatrix} c^2 & \mathbf{0}_{1,n} \\ -\mathbf{u}'/\rho & \mathbf{I}_n/\rho \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Der Differentialoperator ∇' ist auf Basis der räumlichen Ableitungen nach den Komponenten (ξ, η_1, η_2) des lokalen Koordinatensystems R' definiert. Als nächstes wird die sogenannte quasilineare Form des Differentialgleichungssystems A.6 entwickelt, die dadurch charakterisiert ist, dass nur Ableitungen des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ in dem Gleichungssystem auftreten. Hierfür wird zuerst die Divergenz in Gl. A.6 in die Komponenten (ξ, η_1, η_2) des Koordinatensystems R' zerlegt:

$$\frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \Big|_c = -\mathbf{A}' \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} (u_\xi \mathbf{Z}' + \mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z},\xi}) - \mathbf{A}' \cdot \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial}{\partial \eta_i} (u_{\eta,i} \mathbf{Z}' + \mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z},\eta,i}) \quad (\text{A.7})$$

In Gl. A.7 ist $\mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z},k}$ der Zeilenvektor der Matrix $\mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z}}$, der zu der Komponente k des Koordinatensystems R' gehört. Für $k = \xi$ bzw. $k = \eta_1$ würde sich entsprechend der erste bzw. der zweite Zeilenvektor der Matrix $\mathbf{F}'_{c,\mathbf{Z}}$ ergeben. Die Ortsableitungen des Differentialgleichungssystems

A.7 können unter Anwendung entsprechender Jacobi-Matrizen in Ableitungen des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ umgeformt werden. Die Jacobi-Matrizen sind dabei spezifisch für jede Raumrichtung. Die quasilineare Form des Differentialgleichungssystems lautet wie folgt:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_c = -\mathbf{D}'_\xi \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} - \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{D}'_{\eta,i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \eta_i} \quad (\text{A.8})$$

Die für die jeweiligen Raumrichtungen spezifischen Matrizen $\mathbf{D}'_\xi$ und $\mathbf{D}'_{\eta,i}$ enthalten die zuvor genannten Jacobi-Matrizen und sind wie folgt definiert:

$$\mathbf{D}'_\xi = \mathbf{A}' \cdot \left(\frac{\partial (u_\xi \mathbf{Z}')}{\partial \mathbf{X}'} + \frac{\partial \mathbf{F}'_{c,Z,\xi}}{\partial \mathbf{X}'} \right) = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{D}}_\xi & \mathbf{0}_{2,n-1} \\ \mathbf{0}_{n-1,2} & u_\xi \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{D}'_{\eta,i} = \mathbf{A}' \cdot \left(\frac{\partial (u_{\eta,i} \mathbf{Z}')}{\partial \mathbf{X}'} + \frac{\partial \mathbf{F}'_{c,Z,\eta,i}}{\partial \mathbf{X}'} \right) = \begin{bmatrix} u_{\eta,i} \mathbf{I}_2 & \tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,r} \\ \tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,l} & u_{\eta,i} \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Die Matrizen $\tilde{\mathbf{D}}_\xi$, $\tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,l}$ und $\tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,r}$ in den Gln. A.9 und A.10 sind unter Berücksichtigung der Definitionen der Flussvektoren (vgl. Gl. 3.12 und Gl. 3.19) wie folgt definiert:

$$\tilde{\mathbf{D}}_\xi = \begin{bmatrix} u_\xi & \rho c^2 \\ 1/\rho & u_\xi \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

$$\tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,l,ab} = \begin{cases} 1/\rho, & \text{für } a = i \text{ und } b = 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

$$\tilde{\mathbf{D}}_{\eta,i,r,ab} = \begin{cases} \rho c^2, & \text{für } a = 1 \text{ und } b = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Wie bereits erläutert wurde, werden bei der charakteristischen Formulierung des Differentialgleichungssystems nur die Ortsableitungen nach der Koordinatenrichtung ξ , die normal zum Randsegment ausgerichtet ist, berücksichtigt. Es wird daher der Term $\partial \mathbf{X}' / \partial t|_{c,\xi}$ eingeführt, über den die zeitliche Änderungsrate des im lokalen Koordinatensystem R' definierten Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ ausschließlich basierend auf nichtdiffusiven Flüssen und Ortsableitungen nach der Koordinatenrichtung ξ repräsentiert wird. Diese zeitliche Änderungsrate ist demnach gemäß Gl. A.8 wie folgt definiert:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\mathbf{D}'_\xi \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \quad (\text{A.14})$$

Die zeitliche Änderungsrate $\partial \mathbf{X}' / \partial t|_{c,\xi}$ kann entsprechend in Gl. A.8 eingesetzt werden:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_c = \left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} - \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{D}'_{\eta,i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \eta_i} \quad (\text{A.15})$$

Nachfolgend wird das Differentialgleichungssystem A.14 umformuliert, um eine Zerlegung in die über das Randsegment ein- und austretenden Wellen zu erhalten. Über diese Wellen werden

gewisse Ausdrücke der Strömungsvariablen transportiert. Die Ausbreitungsgeschwindigkeiten dieser Wellen sind durch die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{D}'_\xi$ definiert. Die Diagonalmatrix $\mathbf{\Lambda}$ dieser Eigenwerte sowie die zugehörigen Matrizen $\mathbf{L}$ bzw. $\mathbf{R}$ der linken bzw. rechten Eigenvektoren können zu folgenden Ausdrücken bestimmt werden:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{n+1}) = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{\Lambda}} & \mathbf{0}_{2,n-1} \\ \mathbf{0}_{n-1,2} & u_\xi \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{\Lambda}} = \begin{bmatrix} u_\xi + c & 0 \\ 0 & u_\xi - c \end{bmatrix} \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{L} = [\mathbf{l}_1, \dots, \mathbf{l}_{n+1}]^\top = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{L}} & \mathbf{0}_{2,n-1} \\ \mathbf{0}_{n-1,2} & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{L}} = \begin{bmatrix} 1 & \rho c \\ 1 & -\rho c \end{bmatrix} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{n+1}] = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{R}} & \mathbf{0}_{2,n-1} \\ \mathbf{0}_{n-1,2} & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/(2\rho c) & -1/(2\rho c) \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Die ersten zwei Eigenwerte sind $\lambda_1 = u_\xi + c$ und $\lambda_2 = u_\xi - c$. Für jede transversale Geschwindigkeitskomponente $u_{\eta,l}$ ergibt sich ein weiterer Eigenwert $\lambda_{2+l} = u_\xi$ mit $l \in \{1, \dots, n-1\}$. Gleiches würde für etwaige weitere Skalare gelten, die gemäß einer reinen Advektionstransportgleichung definiert sind. Die Matrix $\mathbf{L}$ entspricht dem Spaltenvektor der einzelnen linken Eigenvektoren. Die Matrix $\mathbf{R}$ entspricht dem Zeilenvektor der einzelnen rechten Eigenvektoren. Zwischen den Matrizen $\mathbf{D}'_\xi$, $\mathbf{\Lambda}$ und $\mathbf{L}$ herrscht der Zusammenhang $\mathbf{L} \cdot \mathbf{D}'_\xi = \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{L}$. Durch Multiplikation von Gl. A.14 mit der Matrix $\mathbf{L}$ der linken Eigenvektoren ergibt sich die folgende Gleichung:

$$\mathbf{L} \cdot \left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} + \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{L} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} = \mathbf{0} \quad (\text{A.19})$$

Der zweite Term auf der linken Seite von Gl. A.19 wird zu dem Vektor $\mathcal{L}$ zusammengefasst:

$$\mathcal{L} = [\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_{n+1}]^\top = \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{L} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \quad \text{mit} \quad \mathcal{L}_i = \lambda_i \mathbf{l}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \quad (\text{A.20})$$

Gl. A.19 lässt sich somit in $n + 1$ charakteristische Differentialgleichungen zerlegen:

$$\mathbf{l}_i \cdot \left(\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} + \lambda_i \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \xi} \right) = 0 \quad \text{mit} \quad i \in \{1, \dots, n+1\} \quad (\text{A.21})$$

Über Gl. A.21 wird ausgedrückt, dass entlang der charakteristischen Kurve $d\xi/dt = \lambda_i$, die durch den Eigenwert λ_i vorgeschrieben wird, das Skalarprodukt $\mathbf{l}_i \cdot d\mathbf{X}'/dt$ aus dem zum Eigenwert λ_i zugehörigen linken Eigenvektor $\mathbf{l}_i$ und der substantiellen Ableitung des Zustandsvektors konstant ist.

Durch die erfolgte Zerlegung wird somit eindeutig zwischen Informationen (Ausdrücke des Zustandsvektors), die in das Rechengebiet eintreten (positiver Eigenwert $\lambda_i > 0$) und aus dem Rechengebiet austreten (negativer Eigenwert $\lambda_i < 0$), unterschieden. Aufgrund der Einschränkung auf subsonische Strömungen ist die Schallgeschwindigkeit c stets größer als die Komponente u_ξ der Fluidgeschwindigkeit. Daher ist der Eigenwert $\lambda_1 = u_\xi + c$ stets größer als null und somit einer in das Rechengebiet eintretenden Welle zugeordnet. Im Gegensatz dazu ist der Eigenwert

$\lambda_2 = u_\xi - c$ stets kleiner als null und somit einer aus dem Rechengebiet austretenden Welle zugeordnet. Die Wellen, die den Eigenwerten $\lambda_{2+l} = u_\xi$ mit $l \in \{1, \dots, n-1\}$ zugeordnet sind, können je nach Vorzeichen der Komponente u_ξ der Fluidgeschwindigkeit entweder in das Rechengebiet ein- ($u_\xi > 0$, Einströmrand) oder austreten ($u_\xi < 0$, Ausströmrand).

Im Falle einer zeitlich invarianten Matrix $\mathbf{D}'_\xi$ kann Gl. A.19 außerdem in eine reine Advektionsgleichung der charakteristischen Variablen $\mathbf{Y}' = \mathbf{L} \cdot \mathbf{X}'$ überführt werden:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{Y}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} + \mathbf{A} \cdot \frac{\partial \mathbf{Y}'}{\partial \xi} = \left. \frac{\partial \mathbf{Y}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} + \mathcal{L} = \mathbf{0} \quad (\text{A.22})$$

Unter dieser Annahme wären somit die charakteristischen Variablen $Y'_i = \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{X}'$, die Komponenten des Zustandsvektors $\mathbf{Y}'$, entlang den charakteristischen Richtungen, die durch die Eigenwerte λ_i vorgeschrieben werden, konstant. Des Weiteren ist aus der Formulierung in Gl. A.22 ersichtlich, dass die Komponente $\mathcal{L}_i$ des Vektors $\mathcal{L}$ als der Gegenwert der zeitlichen Variation der charakteristischen Variable Y'_i definiert ist. Daher wird die Komponente $\mathcal{L}_i$ auch als Variation der Wellenamplitude bezeichnet.

Um die zeitliche Variation des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$ zu bestimmen, wird Gl. A.19 mit der Matrix $\mathbf{R}$ der rechten Eigenvektoren (vgl. Gl. A.18) multipliziert. Unter Beachtung des Zusammenhangs $\mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{I}$ und nach Einsetzen des Vektors $\mathcal{L}$ entsprechend Gl. A.20 ergibt sich die folgende Differentialgleichung des Zustandsvektors $\mathbf{X}'$:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial t} \right|_{c,\xi} = -\mathbf{R} \cdot \mathcal{L} \quad (\text{A.23})$$

Die gesamte zeitliche Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ wird definiert, indem Gl. A.23 in Gl. A.15 und die resultierende Gleichung in Gl. A.5 eingesetzt wird:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = -\mathbf{T} \cdot \left(\mathbf{R} \cdot \mathcal{L} + \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{D}'_{\eta,i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}'}{\partial \eta_i} \right) - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{F}_{d,Z} \quad (\text{A.24})$$

Wie bereits erläutert wurde, ergibt sich die gesamte zeitliche Änderungsrate des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ somit aus zwei Anteilen. Ein Anteil ist durch die charakteristischen Gleichungen gegeben (erster Term in der Klammer in Gl. A.24). Der andere Anteil folgt aus den Korrekturen für die Ortsableitungen nach den räumlichen Komponenten innerhalb der Ebene des Randsegments (zweiter Term in der Klammer in Gl. A.24) und die diffusiven Flüsse (letzter Term in Gl. A.24).

A.2 Konsistenz der Kernel-Approximation im randnahen Bereich

Die Kernel-Approximation der in dieser Arbeit verwendeten SPH-Methode hat eine Konsistenzordnung 1 (vgl. Abschnitt 4.4). Über eine Konsistenzordnung 1 wird sichergestellt, dass der Funktionswert einer linearen Funktion sowie der Gradient dieser Funktion durch diese Approximation exakt reproduziert werden können. In Abschnitt 5.3.1 wurde ein Verfahren eingeführt, bei dem die Strömungszustände der Geisterpartikel durch eine lineare Extrapolation von den

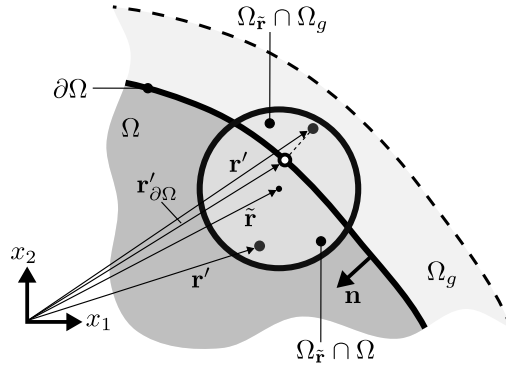


Abbildung A.1: Kernel-Einflussgebiet $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$, das sowohl das Rechengebiet Ω als auch das Geistergebiet Ω_g überlappt

Strömungszuständen der Randsegmente bestimmt werden. An dieser Stelle soll gezeigt werden, dass die zuvor erwähnte Konsistenz durch diese lineare Extrapolation bewahrt werden kann. Dies bedeutet, dass der tatsächliche Gradient $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) = \nabla X_i(\tilde{\mathbf{r}})$ einer beliebigen Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ an der Position $\tilde{\mathbf{r}}$ innerhalb des SPH-Rechengebiets Ω auf Basis der Kernel-Approximation des Gradienten und einer linearen Extrapolation des Strömungsfelds an den Positionen der Geisterpartikel des Gebiets Ω_g reproduziert werden kann.

In Abb. A.1 ist die Kernel-Approximation an einer randnahen Position $\tilde{\mathbf{r}}$ veranschaulicht. Das Einflussgebiet $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Kernels an der Position $\tilde{\mathbf{r}}$ überlappt sowohl das Rechengebiet Ω als auch das Geistergebiet Ω_g . Die Kernel-Approximation des Gradienten der beliebigen Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ ist an der Position $\tilde{\mathbf{r}}$ wie folgt definiert (vgl. Abschnitt 4.1):

$$\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle = \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} X_i(\mathbf{r}') \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' = \underbrace{\int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega} X_i(\mathbf{r}') \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}'}_{\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega}} + \underbrace{\int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega_g} X_i(\mathbf{r}') \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}'}_{\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega,g}} \quad (\text{A.25})$$

Zum Zwecke der besseren Lesbarkeit der Gl. A.25 ist das Argument $(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}')$ des Kernel-Gradienten nicht aufgeführt. In Gl. A.25 sowie in den folgenden Ausführungen gilt stets $\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w = \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w(\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}')$. Der erste Term $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega}$ auf der rechten Seite in Gl. A.25 berücksichtigt die Schnittmenge des Einflussgebiets $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}$ des Kernels mit dem Rechengebiet Ω . Der zweite Term $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega,g}$ berücksichtigt die entsprechende Schnittmenge mit dem Geistergebiet Ω_g . Um zu zeigen, dass der tatsächliche Gradient $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}})$ auch an einer randnahen Position $\tilde{\mathbf{r}}$ über die Approximation $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle$ reproduziert werden kann, wird der Funktionswert $X_i(\mathbf{r}')$ in Gl. A.25 nachfolgend in Abhängigkeit des an der Position $\tilde{\mathbf{r}}$ definierten Funktionswerts $X_i(\tilde{\mathbf{r}})$ und des zugehörigen Gradienten $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}})$ formuliert. Unter der Annahme, dass die Funktion X_i innerhalb des Rechengebiets Ω stetig ist, kann der Funktionswert $(X_i(\mathbf{r}'))_{\Omega}$ für Ortsvektoren $\mathbf{r}'$, die innerhalb des Rechengebiets Ω liegen, über eine Taylor-Reihe erster Ordnung um die Position $\tilde{\mathbf{r}}$ ausgedrückt werden (Liu und Liu, 2010):

$$(X_i(\mathbf{r}'))_{\Omega} = X_i(\tilde{\mathbf{r}}) + (\mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(\|\mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}\|^2) \quad (\text{A.26})$$

In Gl. A.26 ist $O(\|\mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}\|^2)$ ein Fehler, der sich proportional zum Quadrat des Abstands der Ortsvektoren $\mathbf{r}'$ und $\tilde{\mathbf{r}}$ verhält.

Bei der Definition des Funktionswerts $X_i(\mathbf{r}')$ für Ortsvektoren $\mathbf{r}'$, die innerhalb des Geistergebiets Ω_g liegen, muss die eingangs genannte Extrapolation der Funktionswerte berücksichtigt werden. Es wird nachfolgend angenommen, dass ein innerhalb des Geistergebiets Ω_g definierter Ortsvektor $\mathbf{r}'$ eindeutig auf einen am Rand $\partial\Omega$ definierten Ortsvektor $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ projiziert werden kann ($\mathbf{r}' \mapsto \mathbf{r}'_{\partial\Omega}$). Da die in dieser Arbeit behandelten offenen Ränder stets eben sind, ist diese Annahme erfüllt. Der Verbindungsvektor $\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ dieser Ortsvektoren ist entgegengesetzt zu dem an der Position $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ definierten Normaleneinheitsvektor $\mathbf{n}(\mathbf{r}'_{\partial\Omega})$ des Rands $\partial\Omega$ orientiert. Der erläuterte Zusammenhang ist in Abb. A.1 veranschaulicht. Wie eingangs dargelegt wurde, soll innerhalb des Geistergebiets eine lineare Extrapolation der Funktionswerte durchgeführt werden. Daher wird der Funktionswert $(X_i(\mathbf{r}'))_{\Omega,g}$ an der Position $\mathbf{r}'$ innerhalb des Geistergebiets Ω_g auf Basis des Funktionswerts $X_i(\mathbf{r}'_{\partial\Omega})$ an der Randposition $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$, also der Randbedingung, und eines Gradienten $\hat{\mathbf{G}}_i$, der noch bestimmt werden muss, folgendermaßen definiert:

$$(X_i(\mathbf{r}'))_{\Omega,g} = X_i(\mathbf{r}'_{\partial\Omega}) + (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_{\partial\Omega}) \cdot \hat{\mathbf{G}}_i \quad (\text{A.27})$$

Der Funktionswert $X_i(\mathbf{r}'_{\partial\Omega})$ lässt sich für $\mathbf{r}' = \mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ gemäß der Taylor-Reihe in Gl. A.26 ausdrücken. Durch Einsetzen dieser Taylor-Reihe für den Funktionswert $X_i(\mathbf{r}'_{\partial\Omega})$ in Gl. A.27 ergibt sich die folgende Gleichung:

$$(X_i(\mathbf{r}'))_{\Omega,g} = X_i(\tilde{\mathbf{r}}) + \mathbf{r}'_{\partial\Omega} \cdot (\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) - \hat{\mathbf{G}}_i) + \mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{G}}_i - \tilde{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(\|\mathbf{r}'_{\partial\Omega} - \tilde{\mathbf{r}}\|^2) \quad (\text{A.28})$$

In Form von Gl. A.26 und Gl. A.28 stehen nun für beide Gebiete, Ω und Ω_g , die Formulierungen des Funktionswerts $X_i(\mathbf{r}')$ in Abhängigkeit des Funktionswerts $X_i(\tilde{\mathbf{r}})$ zur Verfügung. In Gl. A.25 wird daher nachfolgend Gl. A.26 im Term $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega}$ und Gl. A.28 im Term $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle_{\Omega,g}$ für den Funktionswert $X_i(\mathbf{r}')$ eingesetzt:

$$\begin{aligned} \langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle &= (X_i(\tilde{\mathbf{r}}) - \tilde{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}})) \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' + \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega_g} \mathbf{r}'_{\partial\Omega} \cdot (\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) - \hat{\mathbf{G}}_i) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' \\ &\quad + \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega} \mathbf{r}' \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' + \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega_g} \mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{G}}_i \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' + O(h^2) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Das erste Integral in Gl. A.29 ist das Ergebnis einer Umformung, bei der die Integrale über den Schnittmengen $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega$ und $\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega_g$ aufgrund der Definition

$$\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} = (\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega) \cup (\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}} \cap \Omega_g) \quad (\text{A.30})$$

zusammengefasst werden. Außerdem werden die Fehler $O(\|\mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}\|^2)$ und $O(\|\mathbf{r}'_{\partial\Omega} - \tilde{\mathbf{r}}\|^2)$ zu dem Fehler $O(h^2)$ auf Basis der Glättungslänge h kombiniert. Im Folgenden muss der Gradient $\hat{\mathbf{G}}_i$ bestimmt werden. Wie eingangs erläutert wurde, ist das Ziel, die Konsistenzordnung 1 bei der Kernel-Approximation des Gradienten der Funktion X_i an der Position $\tilde{\mathbf{r}}$ nicht zu verletzen. Das erste Integral in Gl. A.29 ist per Definition aufgrund der Kompaktheit des Kerns gleich dem Nullvektor (Violeau, 2012). Anhand Gl. A.29 ist demnach erkennbar, dass die

Approximation $\langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle$ in erster Näherung dem tatsächlichen Gradienten $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}})$ entspricht, wenn die Gradienten $\hat{\mathbf{G}}_i$ und $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}})$ in erster Näherung gleich sind. In diesem Fall sind nur die letzten zwei Integrale in Gl. A.29 ungleich dem Nullvektor, und es ergibt sich gemäß Gl. A.30 der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{G}}_i = \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(h^2) \quad \Rightarrow \quad \langle \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} X_i(\tilde{\mathbf{r}}) \rangle &= \int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \mathbf{r}' \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \, d\mathbf{r}' + O(h^2) \\
 &= \left(\int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w \otimes \mathbf{r}' \, d\mathbf{r}' \right) \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(h^2) \\
 &= - \underbrace{\left(\int_{\Omega_{\tilde{\mathbf{r}}}} \nabla_{\mathbf{r}'} w \otimes \mathbf{r}' \, d\mathbf{r}' \right)}_{-\mathbf{I}_n} \cdot \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(h^2) \quad (\text{A.31}) \\
 &= \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(h^2)
 \end{aligned}$$

In Gl. A.31 wird bei dem Schritt von der zweiten Zeile zur dritten Zeile die Identität $\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} w = -\nabla_{\mathbf{r}'} w$ (Violeau, 2012) genutzt. Die Identität zwischen dem Integral in der dritten Zeile und der Einheitsmatrix¹⁸ $\mathbf{I}_n$ kann z. B. in der Arbeit von Violeau (2012) nachvollzogen werden.

Aufgrund der zuvor definierten Anforderung $\hat{\mathbf{G}}_i = \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(h^2)$ müssten die Funktionswerte X_i der Geisterpartikel zur Berechnung der Partikel-Approximation des Gradienten $\nabla X_i(\tilde{\mathbf{r}})$ für jedes Partikel des Rechengebiets individuell bestimmt werden. Weniger rechenintensiv wäre eine universelle Bestimmung dieser Funktionswerte, sodass für die Interaktionen aller Partikel des Rechengebiets dieselben Funktionswerte der Geisterpartikel verwendet werden können. Wie zuvor dargestellt wurde, gibt es eine eindeutige Zuordnung zwischen einer Position innerhalb des Geistergebiets und einer Position am Rand ($\mathbf{r}' \mapsto \mathbf{r}'_{\partial\Omega}$). Ein universeller Funktionswert an der Position $\mathbf{r}'$ sollte daher auf Basis der Randinformationen an der Position $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ berechnet werden. Auf Basis der Taylor-Reihe erster Ordnung gilt die Beziehung $\mathbf{G}_{i,\Omega}(\mathbf{r}'_{\partial\Omega}) = \mathbf{G}_{i,\Omega}(\tilde{\mathbf{r}}) + O(\|\mathbf{r}'_{\partial\Omega} - \tilde{\mathbf{r}}\|^2)$ zwischen den Gradienten an den Positionen $\tilde{\mathbf{r}}$ und $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$. Somit kann in Gl. A.27 der Ausdruck $\hat{\mathbf{G}}_i = \mathbf{G}_{i,\Omega}(\mathbf{r}'_{\partial\Omega})$ eingesetzt werden, ohne dass Gl. A.31 verletzt wird. Der Funktionswert an der Position $\mathbf{r}'$ innerhalb des Geistergebiets darf also gemäß einer linearen Extrapolation, die auf dem Funktionswert und dem entsprechenden Gradienten an der zugehörigen Randposition $\mathbf{r}'_{\partial\Omega}$ basiert, berechnet werden.

A.3 Relaxation eines Gradienten am Gebietsrand

Wie in Abschnitt 5.3.1 erläutert wurde, wäre für die Berechnung des Gradienten einer Komponente X_i des Zustandsvektors $\mathbf{X}$ an einem Randsegment s über Gl. 5.18 die Lösung eines linearen Gleichungssystems notwendig. Die Lösung dieses Gleichungssystems soll vermieden werden, indem bei der Berechnung des Gradienten die Strömungszustände der Geisterpartikel vom vorherigen Zeitschritt angewendet werden (vgl. Gl. 5.19). Dadurch kommt es zu einer zeitlichen Relaxation des Gradienten. Zur Bewertung der Relaxation soll an dieser Stelle unter

¹⁸Die Anzahl der Zeilen und Spalten der Einheitsmatrix ist gleich der Anzahl der räumlichen Dimensionen n .

Anwendung vereinfachter Randbedingungen untersucht werden, nach wie vielen Zeitschritten ein durch Ungenauigkeiten der Strömungsgrößen vorliegender anfänglicher Fehler des am Randsegment berechneten Gradienten reduziert wird. Die Herleitung in diesem Kapitel orientiert sich an der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021).

Bei nur einer räumlichen Dimension lässt sich der Einfluss der Relaxation leicht bewerten. In diesem Fall besteht der Rand nur aus einem Randsegment s . Somit entfällt die Summe über k in Gl. 5.19, und der Index k wird zum Index s . Außerdem gilt unter dieser Voraussetzung in Gl. 5.19 für alle Geisterpartikel $g \in \mathcal{G}$ das Verhältnis $V_{\cap,gs}/V_{c,g} = 1$, da die Einflussgebiete der Geisterpartikel nur durch das Einflussgebiet des Randsegments s überlappt werden. Es wird an dieser Stelle angenommen, dass die Funktionswerte $X_{i,b}$ der Partikel $b \in C$ des SPH-Rechengebiets und der Funktionswert $X_{i,s}$ des Randsegments s entsprechend einer zeitlich invarianten linearen Funktion X_i mit dem Gradienten $\mathbf{G}_{i,\Omega}$ definiert sind. Der Gradient $G_{i,\Omega,s,\xi}$ ist entsprechend die Komponente des Gradienten $\mathbf{G}_{i,\Omega}$ in Normalenrichtung ξ_s des Randsegments s . Diese Komponente des Gradienten soll über die Partikel-Approximation $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ berechnet werden. Unter Berücksichtigung der zuvor erläuterten Zusammenhänge ergibt sich aus Gl. 5.19 die folgende Gleichung:

$$[\nabla X_i]_{s,\xi}^{v+1} = \sum_{b \in C} V_b (X_{i,s} + r_{bs,\xi} G_{i,\Omega,s,\xi}) \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w + \sum_{g \in \mathcal{G}} V_g (X_{i,s} + r_{gs,\xi} [\nabla X_i]_{s,\xi}^v) \mathbf{n}_s \cdot \nabla_s w \quad (\text{A.32})$$

In Gl. A.32 wird der Funktionswert $X_{i,b}$ des Partikels $b \in C$ durch eine Extrapolation des Funktionswerts $X_{i,s}$ des Randsegments s unter Anwendung des Gradienten $G_{i,\Omega,s,\xi}$ und des Abstands $r_{bs,\xi} = \mathbf{r}_{bs} \cdot \mathbf{n}_s$ zwischen dem Partikel b und dem Randsegment s ersetzt. Über die zu Gl. A.32 entsprechende Kernel-Approximation lässt sich zeigen, dass Gl. A.32 unter den zuvor eingeführten Bedingungen näherungsweise dem folgenden Ausdruck entspricht (Werdelmann et al., 2021):

$$[\nabla X_i]_{s,\xi}^{v+1} \approx \frac{1}{2} \left(G_{i,\Omega,s,\xi} + [\nabla X_i]_{s,\xi}^v \right) \quad (\text{A.33})$$

Im Falle eines zeitlich invarianten Gradienten $G_{i,\Omega,s,\xi}$ entspricht Gl. A.33 einer inhomogenen linearen Rekursionsgleichung erster Ordnung. Für diese Rekursion kann der Gradient $[\nabla X_i]_{s,\xi}^v$ zum Zeitpunkt v wie folgt als Funktion des Gradienten $[\nabla X_i]_{s,\xi}^0$ zum Zeitpunkt 0 ausgedrückt werden:

$$[\nabla X_i]_{s,\xi}^v = \frac{1}{2^v} \left([\nabla X_i]_{s,\xi}^0 - G_{i,\Omega,s,\xi} \right) + G_{i,\Omega,s,\xi} \quad (\text{A.34})$$

Gl. A.34 lässt sich auch mit normierten Abweichungen ε zwischen dem approximierten Gradienten $[\nabla X_i]_{s,\xi}$ und dem tatsächlichen Gradienten $G_{i,\Omega,s,\xi}$ formulieren:

$$\varepsilon_v = \frac{\varepsilon_0}{2^v} \quad \text{mit} \quad \varepsilon_v = \frac{[\nabla X_i]_{s,\xi}^v - G_{i,\Omega,s,\xi}}{G_{i,\Omega,s,\xi}}, \quad \varepsilon_0 = \frac{[\nabla X_i]_{s,\xi}^0 - G_{i,\Omega,s,\xi}}{G_{i,\Omega,s,\xi}} \quad (\text{A.35})$$

Die normierte Abweichung ε_v nimmt demnach exponentiell mit Fortschreiten des Zeitpunkts v ab. Gemäß Gl. A.35 kann berechnet werden, dass für einen anfänglichen Fehler von 100 % ($\varepsilon_0 = 1$) ca. drei ($v = 3$) bzw. sieben ($v = 7$) Zeitschritte benötigt werden, um den Fehler

auf 10 % ($\varepsilon_{v=3} = 0,1$) bzw. 1 % ($\varepsilon_{v=7} = 0,01$) zu reduzieren. Die Relaxation wird daher als akzeptabel bewertet.

A.4 Massenstrombilanz des Rechengebiets

Ein wichtiger Aspekt des in dieser Arbeit entwickelten Verfahrens für offene und gekoppelte Randbedingungen ist die Massenstrombilanz im Rechengebiet. Bei dem vorliegenden Verfahren werden Massenströme auf Basis der Strömungszustände der Randsegmente (vgl. Abschnitt 5.2) berechnet. Diese Massenströme können aufgrund der festen Topologie zwischen Randsegmenten des SPH-Rechengebiets und Flächenelementen des FV-Rechengebiets direkt an dem Rand des FV-Rechengebiets aufgeprägt werden. Über den in Abschnitt 5.4 eingeführten Algorithmus zur Anpassung der Masse randnaher Partikel wird ein bestmögliches Gleichgewicht zwischen den Massenströmen an dem SPH- und dem FV-Rechengebiet angestrebt. In diesem Abschnitt wird die Massenbilanz eines globalen Rechengebiets aufgestellt, das in einzelne FV- und SPH-Rechengebiete zerlegt ist. Außerdem werden die verschiedenen Massenströme eines SPH-Rechengebiets zusammengefasst. Die resultierenden Massenstromdefinitionen dienen in Kapitel 6 als Grundlage bei der Bewertung der Massenerhaltung für das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren.

Zunächst wird zusammengefasst, welche Einflüsse zu der Massenstrombilanz beitragen. Prinzipiell kann das Rechengebiet Ω in eine beliebig große Anzahl an FV- und SPH-Rechengebieten zerlegt werden. Für jedes der FV-Rechengebiete j lässt sich die folgende Massenbilanz definieren:

$$\frac{dm_j}{dt} = \underbrace{\sum_{i \in \mathcal{R}_j} \dot{m}_{f,c,i}}_{\text{Offene Ränder}} - \underbrace{\sum_{k \in \mathcal{Z}_{\text{SPH}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_{jk}} \dot{m}_{s,c,i}}_{\text{Gekoppelte Ränder}} \quad \forall j \in \mathcal{Z}_{\text{FV}} \quad (\text{A.36})$$

In Gl. A.36 ist $\mathcal{Z}_{\text{FV}}$ die Menge der FV-Rechengebiete, $\mathcal{Z}_{\text{SPH}}$ die Menge der SPH-Rechengebiete, $\mathcal{R}_j$ die Menge der offenen (nichtgekoppelten) Ränder des FV-Rechengebiets j und $\mathcal{R}_{jk}$ die Menge der Ränder, über die das FV-Rechengebiet j und das SPH-Rechengebiet k miteinander gekoppelt werden. Die Masse m_j repräsentiert die integrale Masse der Zellen des FV-Rechengebiets j . Der Massenstrom $\dot{m}_{f,c,i}$ (der Index c steht für „convective“) ist der integrale Massenstrom an dem offenen Rand i des FV-Rechengebiets j . Dieser ist positiv, wenn in Summe Masse an dem Rand in das FV-Rechengebiet eintritt. Der Massenstrom $\dot{m}_{s,c,i}$ hingegen ist der integrale Massenstrom an dem gekoppelten Rand i . Dieser ist positiv, wenn in Summe Masse an dem Rand aus dem FV-Rechengebiet austritt bzw. in das SPH-Rechengebiet eintritt. In Gl. A.36 wird angenommen, dass das FV-Verfahren konservativ ist.

Für ein SPH-Rechengebiet j kann eine ähnliche Massenbilanz auf Basis der integralen Masse m_j aller Partikel dieses Rechengebiets aufgestellt werden. Diese Bilanz ist nicht gleichermaßen trivial wie im Falle des FV-Rechengebiets. Dies hat im Wesentlichen zwei Gründe: Zum einen ergeben sich auf Basis des in Abschnitt 4.5 erläuterten numerischen Ansatzes für die Erhaltungsgleichungen neben den physikalischen konvektiven Massenströmen gewisse sekundäre numerische Massenströme, die zudem teilweise nicht konservativ sind. Zum anderen wird, wie

in Abschnitt 5.4 dargestellt wurde, nicht immer ein perfektes Gleichgewicht zwischen der Änderung der Partikelmasse an offenen Rändern und den an den entsprechenden Randsegmenten definierten Massenströmen erreicht.

In Abb. A.2 sind die Beziehungen der im Folgenden eingeführten Definitionen zur Massenänderung veranschaulicht. Das Diagramm stellt die Massenströme eines einzelnen Rechengebiets j dar. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird auf den Index j in der Abbildung und in den folgenden Ausführungen verzichtet. In Abb. A.2 sowie im folgenden Text werden verschiedene Arten von Klassifizierungen der Massenströme angewendet. Die Rahmen mit durchgezogener Kontur in Abb. A.2 umfassen Massenströme, die sich auf die gleichen Diskretisierungselemente beziehen. Der unterste Block („Partikel (Rechengebiet)“) bezieht sich auf die Partikel des internen Rechengebiets. Diese Massenströme werden mit dem Index p (für „particle“) gekennzeichnet. Der mittlere Block („Randsegmente“) bezieht sich auf die Randsegmente. Diese Massenströme werden mit dem Index s (für „segments“) gekennzeichnet. In dem obersten Block „Global“ sind gewisse Ungleichgewichte zwischen Massenströmen der Partikel und der Randsegmente definiert. Diese Massenstromdifferenzen werden über das Δ -Symbol gekennzeichnet. Außerdem werden die Massenströme in Abb. A.2 spaltenweise nach gewissen geometrischen Gruppen klassifiziert. Von links nach rechts in Abb. A.2 repräsentieren die Spalten die Mas-

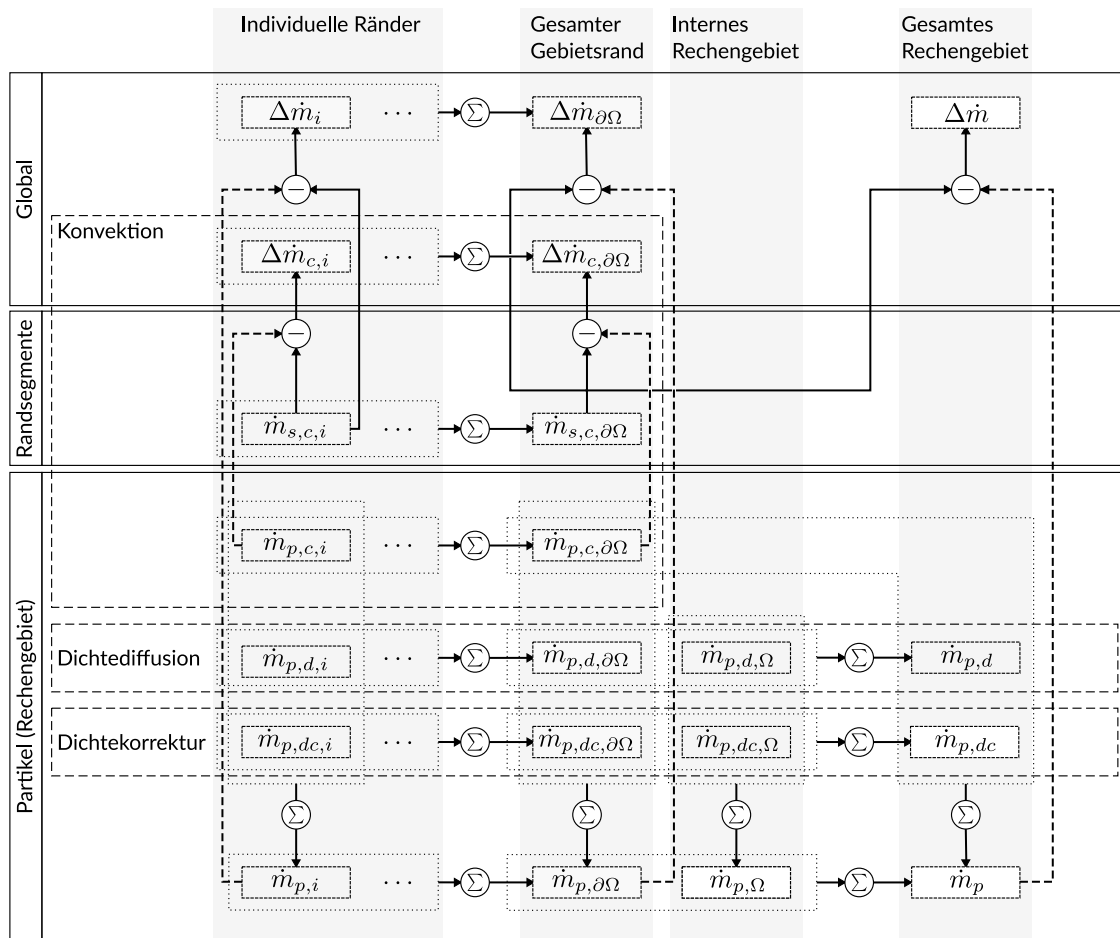


Abbildung A.2: Beziehungen zwischen den Massenströmen eines SPH-Rechengebiets

senströme, die einem bestimmten Randteil i des Gebietsrands $\partial\Omega$, dem gesamten Gebietsrand $\partial\Omega$, dem internen Rechengebiet Ω oder dem gesamten Gebiet (internes Gebiet und Ränder) zugeordnet werden können. Entsprechend werden zur Unterscheidung dieser Massenströme die Indizes i , $\partial\Omega$ und Ω bzw. kein Index verwendet. Die dritte Klassifizierung erfolgt nach der Art des Massenstroms. Die Blöcke mit gestrichelter Kontur umfassen Massenströme der gleichen Art. Massenströme auf Basis von Dichtediffusion bzw. Dichtekorrektur werden mit dem Index d (für „diffusion“) bzw. dc (für „density correction“) gekennzeichnet. Diese Massenströme sind nur auf Basis der Partikel definiert. Konvektive Massenströme werden mit dem Index c (für „convective“) gekennzeichnet und sind sowohl auf Basis der Partikel als auch der Randsegmente definiert. In Abb. A.2 ist anhand der Summenzeichen dargestellt, welche Massenströme sich als Summe bestimmter anderer Massenströme, die durch die Rahmen mit gepunkteter Kontur gruppiert werden, ergeben. Die Massenströme, die nach einem Minuszeichen in Abb. A.2 folgen, ergeben sich aus einer Subtraktion des Massenstroms, der dem gestrichelten Pfeil folgt, von dem Massenstrom, der dem durchgezogenen Pfeil folgt. Entsprechend sind die Mehrheit der dargestellten Massenströme nur abhängige Größen (Summen oder Differenzen).

In Abb. A.2 sind sechs unabhängige Massenströme enthalten. Unter anderem sind dies die Massenströme $\dot{m}_{p,d,\Omega}$ und $\dot{m}_{p,dc,\Omega}$, die aufgrund von Dichtediffusion und Dichtekorrektur (vgl. Gl. 4.79) durch Interaktionen zwischen den Partikeln des Rechengebiets entstehen:

$$\dot{m}_{p,d,\Omega} = \sum_{a \in \mathcal{P}} V_a \left[\nabla \cdot (d_\rho \nabla \rho) \right]_{a,\mathcal{P}}^{\mathcal{F}} \quad (\text{A.37})$$

$$\dot{m}_{p,dc,\Omega} = \sum_{a \in \mathcal{P}} V_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_{a,\mathcal{P}} \quad (\text{A.38})$$

Die Partikel-Approximation in Gl. A.37 repräsentiert den Dichtediffusionsterm. Dieser Operator ist gemäß Gl. 4.42 definiert. Der Dichtekorrekturterm in Gl. A.38 ist, wie in Abschnitt 4.5 erläutert wurde, ein Teil des konvektiven Flusses. Die Partikelmenge $\mathcal{P}$ umfasst alle Partikel des internen Rechengebiets. Über den Index $\mathcal{P}$ der Operatoren wird ausgedrückt, dass über diese Operatoren nur Partikel dieser Menge $\mathcal{P}$ für Interaktionen mit dem Partikel a herangezogen werden. Der Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{p,\Omega}$, der sich durch Interaktionen zwischen Partikeln des internen Rechengebiets ergibt, ist wie folgt definiert:

$$\dot{m}_{p,\Omega} = \dot{m}_{p,d,\Omega} + \dot{m}_{p,dc,\Omega} \quad (\text{A.39})$$

Der Massenstrom $\dot{m}_{p,d,\Omega}$ hat einen rein numerischen Hintergrund, und der Massenstrom $\dot{m}_{p,dc,\Omega}$ ist nicht konservativ. Die Definitionen in Gl. A.37, Gl. A.38 und Gl. A.39 sind daher erforderlich, um ein aus diesen Sachverhalten resultierendes Massenungleichgewicht zu quantifizieren.

Zu den sechs unabhängigen Größen gehören auch die am individuellen Rand i definierten Massenströme $\dot{m}_{p,d,i}$, $\dot{m}_{p,dc,i}$ und $\dot{m}_{p,c,i}$. Die beiden zuerst genannten Massenströme ergeben sich analog zu Gl. A.37 und Gl. A.38 als Ergebnis der Interaktionen zwischen den Partikeln des

Rechengebiets und den Geisterpartikeln des Rands i :

$$\dot{m}_{p,d,i} = \sum_{a \in \mathcal{P}} V_a [\nabla \cdot (d_\rho \nabla \rho)]_{a, \mathcal{G}_i}^{\mathcal{F}} \quad (\text{A.40})$$

$$\dot{m}_{p,dc,i} = \sum_{a \in \mathcal{P}} V_a \delta \hat{\mathbf{u}}_a \cdot [\nabla \rho]_{a, \mathcal{G}_i} \quad (\text{A.41})$$

Die Partikelmenge $\mathcal{G}_i$ umfasst alle Geisterpartikel des Rands i . Der dritte dem Rand i zugehörige Massenstrom $\dot{m}_{p,c,i}$ betrifft die Konvektion von Partikelmasse an dem Rand i und ergibt sich aus dem in Abschnitt 5.4 erläuterten Ansatz:

$$\dot{m}_{p,c,i} = \frac{1}{\delta t} \sum_{a \in \mathcal{P}} \delta m_{a,i} = \sum_{a \in \mathcal{P}} \dot{m}_{a,i}^{\mathcal{B}} \quad (\text{A.42})$$

In Gl. A.42 ist δt die aktuelle Zeitschrittweite, $\delta m_{a,i}$ das in Abschnitt 5.4 definierte Masseninkrement des Partikels a (vgl. Gl. 5.33) und $\dot{m}_{a,i}^{\mathcal{B}}$ der Massenquellterm des Partikels a (vgl. Gl. 5.22), der in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79) integriert ist. Der konvektive Massenstrom auf Basis der Strömungszustände der Randsegmente eines Rands i ist als weitere unabhängige Größe wie folgt definiert:

$$\dot{m}_{s,c,i} = \frac{1}{\delta t} \sum_{k \in \mathcal{K}_i} \delta m_k = \sum_{k \in \mathcal{K}_i} \dot{m}_k \quad (\text{A.43})$$

In Gl. A.43 ist $\mathcal{K}_i$ die Menge aller Randsegmente des Rands i , δm_k das in Abschnitt 5.4 definierte Masseninkrement des Randsegments k (vgl. Gl. 5.24) und $\dot{m}_k$ der entsprechende Massenstrom am Randsegment k (vgl. Gl. 5.23). Wie bereits erwähnt wurde, ist ein Ziel in dieser Arbeit, ein Gleichgewicht zwischen den konvektiven Massenströmen $\dot{m}_{p,c,i}$ und $\dot{m}_{s,c,i}$ herzustellen. In Abschnitt 5.4 wurde bereits erläutert, dass es bei dem gewählten Ansatz allerdings wenige Ausnahmen gibt, für die dieses Gleichgewicht nicht erreicht werden kann. Daher wird eine Massenstromdifferenz $\Delta \dot{m}_{c,i}$ des Rands i definiert, über die dieses Ungleichgewicht und damit die Effizienz des in Abschnitt 5.4 entwickelten Ansatzes bewertet werden kann:

$$\Delta \dot{m}_{c,i} = \dot{m}_{s,c,i} - \dot{m}_{p,c,i} \quad (\text{A.44})$$

Für jeden Rand i lässt sich außerdem ein Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{p,i}$ der Partikel zuordnen:

$$\dot{m}_{p,i} = \dot{m}_{p,c,i} + \dot{m}_{p,d,i} + \dot{m}_{p,dc,i} \quad (\text{A.45})$$

Über die Massenstromdifferenz $\Delta \dot{m}_i$ wird die Diskrepanz an dem Rand i zwischen dem Zielwert $\dot{m}_{s,c,i}$ des Massenstroms auf Basis der Randsegmente und dem tatsächlich über die Partikel übertragenen Massenstrom $\dot{m}_{p,i}$ quantifiziert:

$$\Delta \dot{m}_i = \dot{m}_{s,c,i} - \dot{m}_{p,i} \quad (\text{A.46})$$

Analog zu den Massenströmen des Rands i lassen sich die Massenströme für den gesamten Gebietsrand definieren (vgl. Abb. A.2). Diese Massenströme sind mit dem Index $\partial \Omega$ versehen und ergeben sich aus einer Addition der Massenströme desselben Typs aller Ränder. Exempla-

risch ergibt sich für den über die Partikel am Gebietsrand $\partial\Omega$ übertragenen Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{p,\partial\Omega}$ die folgende Gleichung:

$$\dot{m}_{p,\partial\Omega} = \sum_{i \in \mathcal{R}} \dot{m}_{p,i} + \sum_{k \in \mathcal{Z}_{\text{FV}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_k} \dot{m}_{p,i} \quad (\text{A.47})$$

In Gl. A.47 wird wie bereits im Falle der Massenbilanz des FV-Rechengebiets zwischen offenen und gekoppelten Rändern unterschieden. In Gl. A.47 ist $\mathcal{R}$ die Menge der offenen (nichtgekoppelten) Ränder und $\mathcal{R}_k$ die Menge der Ränder, über die das betrachtete SPH-Rechengebiet und das FV-Rechengebiet k miteinander gekoppelt werden. Analog zu dem Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{p,i}$ des Rands i (vgl. Gl. A.45) lässt sich auch der Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{p,\partial\Omega}$ des Gebietsrands als Summe aus dem konvektiven Anteil und den Dichtediffusions- und Dichtekorrekturanteilen ausdrücken:

$$\dot{m}_{p,\partial\Omega} = \dot{m}_{p,c,\partial\Omega} + \dot{m}_{p,d,\partial\Omega} + \dot{m}_{p,dc,\partial\Omega} \quad (\text{A.48})$$

Für alle Typen von Massenströmen, die sowohl im internen Rechengebiet (Index Ω) als auch am Gebietsrand (Index $\partial\Omega$) definiert sind, wird in Abb. A.2 ein Gesamtmassenstrom (ohne entsprechendem Index) definiert. Exemplarisch ergibt sich für den Gesamtmassenstrom $\dot{m}_p$ der Partikel die folgende Gleichung:

$$\dot{m}_p = \frac{dm}{dt} = \dot{m}_{p,\Omega} + \dot{m}_{p,\partial\Omega} \quad (\text{A.49})$$

Über Gl. A.49 wird die Änderungsrate der Masse der Gesamtheit aller Partikel des internen Rechengebiets ausgedrückt. Diese Änderung ist analog zu der Änderungsrate der Masse der Zellen eines FV-Rechengebiets (linke Seite in Gl. A.36) zu verstehen. Die Massenstromdifferenz $\Delta\dot{m}$ ist eine wichtige Größe, um die Diskrepanz zwischen der Gesamtänderungsrate der Partikelmasse und der Summe $\dot{m}_{s,c,\partial\Omega}$ der an den Randsegmenten des Gebietsrands definierten Massenströmen zu quantifizieren:

$$\Delta\dot{m} = \dot{m}_{s,c,\partial\Omega} - \dot{m}_p \quad (\text{A.50})$$

Analog zu der Massenbilanz des FV-Rechengebiets gemäß Gl. A.36 lässt sich aus den zuvor eingeführten Gleichungen eine Massenbilanz des SPH-Rechengebiets formulieren:

$$\dot{m}_p = \frac{dm}{dt} = \dot{m}_{p,\Omega} + \sum_{i \in \mathcal{R}} (\dot{m}_{s,c,i} - \Delta\dot{m}_i) + \sum_{k \in \mathcal{Z}_{\text{FV}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_k} (\dot{m}_{s,c,i} - \Delta\dot{m}_i) \quad (\text{A.51})$$

Durch Summation von Gl. A.36 und Gl. A.51 über alle FV- und SPH-Rechengebiete und anschließende Addition der resultierenden Summen ergibt sich die folgende globale Massenbilanz:

$$\underbrace{\sum_{j \in \mathcal{Z}_{\text{SPH}} \cup \mathcal{Z}_{\text{FV}}} \frac{dm_j}{dt}}_{\text{Massenänderung im Rechengebiet}} = \underbrace{\sum_{j \in \mathcal{Z}_{\text{SPH}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_j} \dot{m}_{s,c,i} + \sum_{j \in \mathcal{Z}_{\text{FV}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_j} \dot{m}_{f,c,i}}_{\text{Konvektive Massenströme an Gebietsrändern}} - \underbrace{\sum_{j \in \mathcal{Z}_{\text{SPH}}} \Delta\dot{m}_j}_{\text{Numerische Massenströme}} \quad (\text{A.52})$$

Bei einem idealen Verfahren entspräche die Massenänderung (Gruppe auf der linken Seite in Gl. A.52) den konvektiven (physikalischen) Massenströmen (erste Gruppe auf der rechten Seite in Gl. A.52). Damit müssen die in Gl. A.52 als zweite Gruppe der rechten Seite auftretenden numerischen (unphysikalischen) Massenströme

$$\Delta \dot{m}_j = -\dot{m}_{p,\Omega,j} + \sum_{i \in \mathcal{R}_j} \Delta \dot{m}_i + \sum_{k \in \mathcal{Z}_{\text{FV}}} \sum_{i \in \mathcal{R}_{kj}} \Delta \dot{m}_i \quad (\text{A.53})$$

jedes SPH-Rechengebiets j idealerweise null ergeben. Das Massenstromungleichgewicht $\Delta \dot{m}_j$ bezieht sich lediglich auf SPH- und nicht auf FV-Rechengebiete. Außerdem ist der Ursprung der Massenungleichgewichte an den Gebietsrändern im Falle von offenen und gekoppelten Rändern derselbe. Aus diesen Gründen ist eine Analyse der Genauigkeit des vorliegenden Verfahrens hinsichtlich der Massenerhaltung an Konfigurationen mit einfachen offenen Rändern und einem einzigen SPH-Rechengebiet ausreichend. Dieser Ansatz wird daher in Kapitel 6 verfolgt.

A.5 Analyse verschiedener Variationen des SPH-Verfahrens

In den nachfolgenden Abschnitten werden Variationen des SPH-Verfahrens anhand der in Abschnitt 6.1 dargelegten Testfälle untersucht. Dabei werden die in Abschnitt 6.1 eingeführten Definitionen und Bewertungsmethoden angewendet. Die im Folgenden bewerteten Konfigurationen des SPH-Verfahrens werden stets mit der in Kapitel 6 eingeführten Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens verglichen. Den Simulationen der einzelnen Konfigurationen werden zu Beginn jedes folgenden Abschnitts Abkürzungen zugeordnet, die in den nachfolgenden Diagrammen und Tabellen verwendet werden. Der Simulation mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens bzw. mit dem FV-Verfahren wird die Abkürzung `sim_ref` bzw. `sim_fvm` zugewiesen. Die Ergebnisse dieses Abschnitts werden in Abschnitt 6.2 zusammengefasst und dienen in Abschnitt 6.3 der Auswahl einer modifizierten Konfiguration des SPH-Verfahrens, die im restlichen Teil der Arbeit angewendet wird.

A.5.1 Aspekte des Verfahrens für offene Randbedingungen

In diesem Abschnitt werden zwei besondere Aspekte des in dieser Arbeit entwickelten Verfahrens für offene Randbedingungen bewertet. In Tab. A.1 sind diese zwei Variationen des SPH-Verfahrens deren im Folgenden verwendeten Bezeichnungen zugeordnet. Die Simulation `sim_1a` bezieht sich auf einen Aspekt des Algorithmus zur Änderung der Partikelmasse an offenen Rändern. In Abschnitt 5.4.6 wurde erläutert, dass ein über den Algorithmus realisiertes Erzwingen eines Gleichgewichts zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und eines Randsegments s an einem Ausströmrand ($\delta m_s < 0$) problematisch ist, wenn die anfängliche Massendifferenz Δm_s (vgl. Gl. 5.36) des Randsegments s größer null ist. Dieser Fall tritt an einem Ausströmrand ein, wenn die über das Randsegment austretende Partikelmasse betragsmäßig größer ist als die Massenänderung δm_s , die auf Basis des Strömungszustands des

Tabelle A.1: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses besonderer Aspekte des Verfahrens für offene Randbedingungen

Name	Beschreibung
sim_1a	Erzwingen des Gleichgewichts der konvektiven Massenströme der Partikel und Randsegmente.
sim_1b	Homogene Strömungszustände der Geisterpartikel.

Randsegments s berechnet wird. Um diese Problematik aufzuzeigen, wird bei der Simulation sim_1a das zuvor geschilderte Erzwingen eines Gleichgewichts ($\Delta m_s = 0$ kg) berücksichtigt.

In Tab. A.3 werden die normierten und gemittelten Massenstromkennwerte zwischen der Referenzsimulation sim_ref und der Simulation sim_1a verglichen. Auf die wichtigsten Kenngrößen wird an dieser Stelle eingegangen. Wie bereits bei der Beschreibung des Testfalls A (vgl. Abschnitt 6.1.1) dargelegt wurde, werden bei dem Referenzfall die Nettomassenströme $\dot{M}_{p,d}$ und $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtediffusion und -korrektur durch den konvektiven Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ kompensiert, sodass sich ein vernachlässigbarer Gesamtpartikelmassenstrom $\dot{M}_p$ ergibt. Bei der Simulation sim_1a funktioniert dieses Prinzip nicht. Der konvektive Nettomassenstrom $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente wird hauptsächlich durch den Dichtediffusionsterm bestimmt (vgl. Größenordnungen der Massenströme $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ und $\dot{M}_{p,d}$). Der Ursprung des Dichtekorrektureterms liegt hingegen im Konvektionsterm der Kontinuitätsgleichung (vgl. Abschnitt 4.5). Daher wird über diesen Term im Gegensatz zum Dichtediffusionsterm die Konsistenz der Kontinuitätsgleichung nicht verletzt und kein Ungleichgewicht für die über die Randsegmente ein- und austretenden Massenströme eingeführt. Für die Partikel wird der Dichtekorrektureterm allerdings explizit in der Massenerhaltungsgleichung verwendet, wodurch der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtekorrektur entsteht. Da im Falle der Simulation sim_1a ein Gleichgewicht der konvektiven Massenströme der Partikel und der Randsegmente erzwungen wird ($\dot{M}_{p,c,\partial\Omega} = \dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$), kann der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ auf Basis der Dichtekorrektur nicht durch den Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ auf Basis der Konvektion kompensiert werden. Daher entsteht ein verhältnismäßig großes Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_p$, das in der gleichen Größenordnung wie der Massenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ liegt. Nach einer physikalischen Zeit von $t_+ = 200$ führt dieses Ungleichgewicht im Vergleich zur Referenzsimulation bereits zu einer Vergrößerung der Partikelmasse des Rechengebiets von 1 %. Die am Austrittsrand akkumulierende Partikelmasse bewirkt außerdem Änderungen weiterer Kenngrößen. Es ist unter anderem festzustellen, dass der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ auf Basis der Dichtekorrektur im Vergleich zur Referenzsimulation deutlich größer ist.

In Tab. A.2 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zusammengefasst. Das Druckfeld ist von der Variation bei der Simulation sim_1a unbeeinflusst. Es ist allerdings eine Verbesserung der Genauigkeit des Geschwindigkeitsfelds am rechten Gebietsrand r erkennbar. Der Grund hierfür ist unklar. Für die zeitlichen Fluktuationen kön-

nen zwischen den Simulationen `sim_1a` und `sim_ref` nur vernachlässigbare Unterschiede verzeichnet werden.

Das transiente Verhalten des Strömungsfelds der Simulation `sim_1a`, das mit dem Testfall B untersucht wird, ist in Abb. A.3 und Abb. A.4 dargestellt. Es sind weder für das Abklingverhalten der Druckmaxima am Eintrittsrand (vgl. Abb. A.3) noch für den zeitlichen Versatz der Druckoszillationen am Eintrittsrand (vgl. Abb. A.4) nennenswerte Unterschiede im Vergleich zu der Referenzsimulation `sim_ref` zu verzeichnen. In Abb. A.5 werden für die Simulation `sim_1a` des Testfalls B zu drei verschiedenen Zeitpunkten die instantanen räumlichen Profile des Fluiddrucks p_+ über der Länge des Rechengebiets dargestellt und mit der Referenzsimulation `sim_ref` und der FV-Simulation `sim_fvm` verglichen. Zwischen den Ergebnissen der Simulation `sim_1a` und der Referenzsimulation `sim_ref` sind in diesem Zusammenhang keine Unterschiede festzustellen, sodass auch die Abweichungen zu der FV-Simulation `sim_fvm` im Vergleich zu denen der Referenzsimulation unverändert sind.

Eine weitere Variation des SPH-Verfahrens, die das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren für offene Randbedingungen betrifft, wird mittels der Simulation `sim_1b` untersucht. Dabei wird die Art der Aufprägung der Strömungszustände an den Geisterpartikeln verändert. Bei der Referenzsimulation `sim_ref` wird der in dieser Arbeit vorgeschlagene Ansatz einer linearen Extrapolation der Strömungszustände der Partikel an den Geisterpartikeln appliziert. Bei der Simulation `sim_1b` werden hingegen homogene Strömungszustände an den Geisterpartikeln aufgeprägt, die dem Strömungszustand des den Geisterpartikeln zugeordneten Randsegments entsprechen. Die Simulationen `sim_ref` und `sim_1b` wurden erstmals von Werdelmann et al. (2021) miteinander verglichen. In Tab. A.2 ist dargestellt, dass diese Vereinfachung eine erhebliche Verschlechterung sowohl bei der Genauigkeit als auch bei der Stabilität des Verfahrens hervorruft. Insbesondere vergrößert sich die Abweichung $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$ des Geschwindigkeitsfelds der Partikel des Rechengebiets im Vergleich zur Abweichung der Referenzsimulation um ca. zwei Größenordnungen.

Bei der Massenstrombilanz (vgl. Tab. A.3) ist festzustellen, dass die globalen Ungleichgewichte $\Delta \dot{M}$ und $\Delta \dot{M}_{c,\partial\Omega}$ im Vergleich zum Referenzfall deutlich größer ausfallen. Der Grund hierfür ist eine Veränderung des Beitrags des Dichtediffusionsterms zur Massenbilanz. Diese Änderung entsteht durch die Modifikation der Strömungszustände der Geisterpartikel, die zu einer Veränderung der Beiträge der Geisterpartikel bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms führt. Im Vergleich zu der Referenzsimulation ändert sich bei der Simulation `sim_1b` das durch den Dichtediffusionsterm bestimmte konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente deutlich mehr als der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$ der Dichtediffusion.

Das transiente Verhalten des Strömungsfelds der Simulation `sim_1b` ist in Abb. A.3, Abb. A.4 und Abb. A.5 dargestellt. Das Abklingverhalten der Druckmaxima am Eintrittsrand (vgl. Abb. A.3) weist keinen Unterschied zu dem Abklingverhalten der Referenzsimulation auf. Jedoch entsteht durch die homogenen Strömungszustände der Geisterpartikel im Vergleich zu der Referenzsimulation ein erheblicher zeitlicher Versatz der Druckoszillationen am Eintrittsrand (vgl. Abb. A.4). Nach 1000 Durchlaufzeiten der akustischen Welle durch das Rechengebiet entsteht bereits ein zeitlicher Versatz zu den Oszillationen der FV-Simulation von mehr als

10 akustischen Durchlaufzeiten. Dieser zeitliche Versatz wird auch anhand der instantanen räumlichen Druckverteilungen in Abb. A.5 deutlich.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion wird die Schlussfolgerung gezogen, dass die für das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren für offene Randbedingungen gewählten Modellansätze, also die lineare Extrapolation des Strömungszustands an den Geisterpartikeln und die Ausnahmen beim Erzwingen des konvektiven Massenstromgleichgewichts zwischen Partikeln und Randsegmenten, berechtigt sind.

Tabelle A.2: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_1a` und `sim_1b`

Typ	Größe		Wert		
			<code>sim_ref</code>	<code>sim_1a</code>	<code>sim_1b</code>
p_+	$\mathbf{err}_i$	l $\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,37 \cdot 10^{-3}$	$1,83 \cdot 10^{-2}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,61 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-2}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l $\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$7,25 \cdot 10^{-5}$	$2,11 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$9,19 \cdot 10^{-6}$	$3,50 \cdot 10^{-5}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r $\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$2,52 \cdot 10^{-4}$	$-5,78 \cdot 10^{-2}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$4,92 \cdot 10^{-4}$	$5,07 \cdot 10^{-2}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r $\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,02 \cdot 10^{-4}$	$5,23 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$3,36 \cdot 10^{-4}$

Tabelle A.3: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_1a` und `sim_1b`

Typ	Größe		Wert		
			sim_ref	sim_1a	sim_1b
Global					
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$8,13 \cdot 10^{-3}$	$-1,00 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,06 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-3}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$1,13 \cdot 10^{-11}$	$1,30 \cdot 10^{-3}$
Partikel					
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$-7,90 \cdot 10^{-3}$	$1,20 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$8,12 \cdot 10^{-3}$	$-1,20 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$2,17 \cdot 10^{-4}$	$1,28 \cdot 10^{-8}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$2,28 \cdot 10^{-4}$	$7,27 \cdot 10^{-4}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-2,23 \cdot 10^{-4}$	$-7,57 \cdot 10^{-4}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-1,32 \cdot 10^{-6}$	$3,11 \cdot 10^{-6}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-2,25 \cdot 10^{-4}$	$-7,54 \cdot 10^{-4}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$-7,90 \cdot 10^{-3}$	$1,21 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$8,12 \cdot 10^{-3}$	$-1,20 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$2,14 \cdot 10^{-4}$	$2,66 \cdot 10^{-5}$
Randsegmente					
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$2,28 \cdot 10^{-4}$	$2,03 \cdot 10^{-3}$

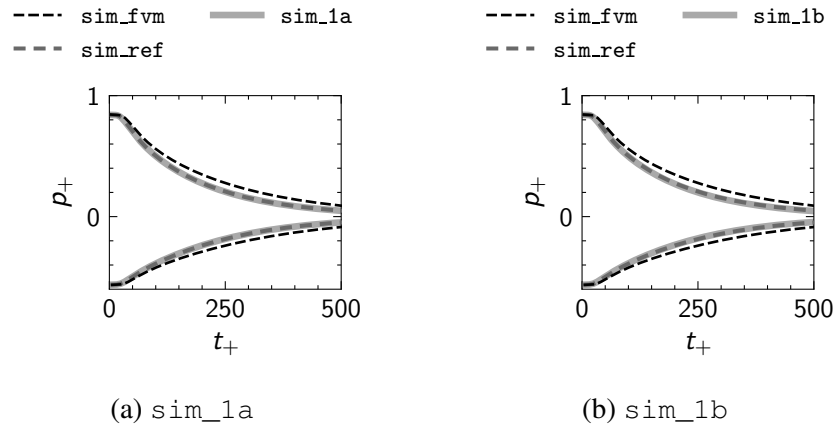


Abbildung A.3: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_1a und sim_1b . In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

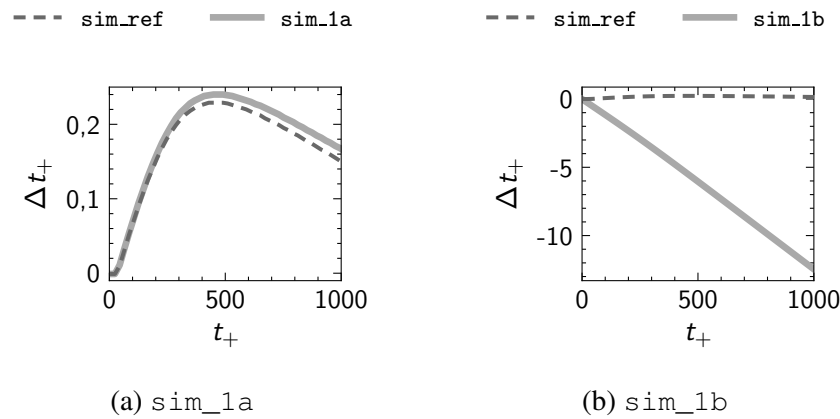


Abbildung A.4: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_1a und sim_1b

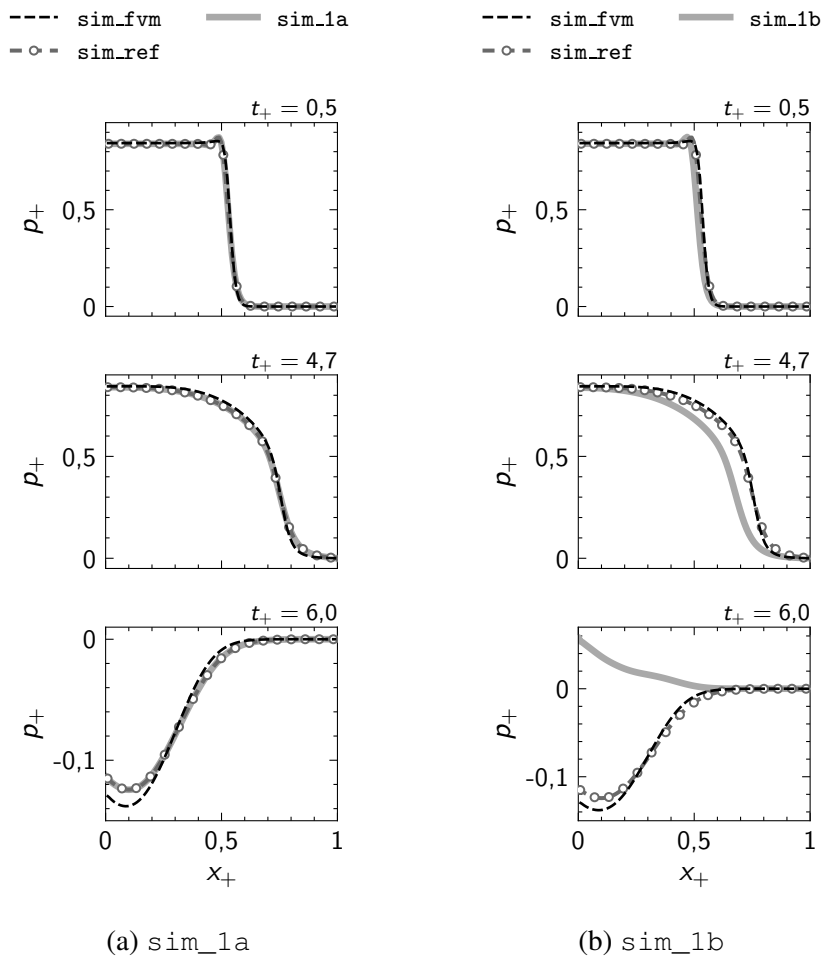


Abbildung A.5: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen `sim_1a` und `sim_1b`. In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

A.5.2 Korrektur des Kernel-Gradienten

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Korrektur des Kernel-Gradienten analysiert. In Abschnitt 4.4.1 wurde der Ansatz zur Korrektur des Kernel-Gradienten eingeführt. Durch diesen Ansatz wird eine Konsistenzordnung 1 bei der Partikel-Approximation garantiert. Insbesondere im Falle von inhomogenen räumlichen Verteilungen der Partikel im randnahen Bereich kann dieser Ansatz zur Verbesserung der Genauigkeit und der Stabilität des SPH-Verfahrens beitragen. Über die Anwendung des korrigierten Kernel-Gradienten gemäß Gl. 4.21 wird allerdings auch bewirkt, dass die Partikel-Interaktionen der entsprechenden Partikel-Approximationen nicht reziprok sind. Damit sind diese Partikel-Approximationen nicht konservativ. Außerdem erfordert die Berechnung des korrigierten Kernel-Gradienten die Invertierung einer $n \times n$ Matrix für jedes Partikel (vgl. Gl. 4.22), wobei n die Anzahl der räumlichen Dimensionen repräsentiert. Zusätzlich werden im Vergleich zum unkorrigierten Kernel-Gradienten weitere Rechenschritte benötigt. Hierdurch entsteht eine signifikante Erhöhung der Rechenzeit bei der Berechnung der

Tabelle A.4: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses der Korrektur des Kernel-Gradienten

Name	Beschreibung
sim_2a	Keine Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Druckgradienten.
sim_2b	Keine Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Geschwindigkeitsdivergenz.
sim_2c	Keine Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Diffusionsterme.

Partikel-Interaktionen. Es ist daher wichtig, den Einfluss der Korrektur des Kernel-Gradienten auf die einzelnen Partikel-Approximationen zu bewerten. Es ist das Ziel, die Korrektur auf die Partikel-Approximationen zu beschränken, bei denen die Korrektur eine signifikante Verbesserung bei der Stabilität und Genauigkeit des Verfahrens bewirkt. Der Dichtekorrekturterm (zweiter Term der rechten Seite in Gl. 4.77) und der Geschwindigkeitskorrekturterm (erster Term der rechten Seite in Gl. 4.80) werden von dieser Betrachtung ausgeschlossen, da diese Terme ohnehin nicht konservativ sind und eine optimale Approximation des lokalen Gradienten der Strömungsgrößen bei diesen Korrekturtermen zwingend notwendig ist. Daher ist die Applizierung der Korrektur des Kernel-Gradienten für diese Terme obligatorisch. Die Terme, die in diesem Abschnitt bewertet werden, sind der Druckgradient in der Impulsgleichung (zweiter Term der rechten Seite in Gl. 4.80), die Geschwindigkeitsdivergenz in der Kontinuitätsgleichung (erster Term der rechten Seite in Gl. 4.77) sowie die Diffusionsterme in der Kontinuitäts- und Impulsgleichung (dritter Term der rechten Seite in Gl. 4.77 und dritter Term der rechten Seite in Gl. 4.80). Bei der Simulation `sim_ref` mit der Referenzkonfiguration des SPH-Verfahrens wird die Korrektur des Kernel-Gradienten auf alle zuvor genannten Terme angewendet. Der Reihe nach wird bei den Simulationen `sim_2a`, `sim_2b` und `sim_2c` die Korrektur bei der Berechnung der Partikel-Approximationen des Druckgradienten, der Geschwindigkeitsdivergenz und der Diffusionsterme deaktiviert (vgl. Tab. A.4).

In Tab. A.5 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zusammengefasst. Es ist festzustellen, dass die Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei den Simulationen `sim_2b` und `sim_2c` keine signifikante Veränderung der betrachteten Kenngrößen hervorruft. Lediglich für das Fluidgeschwindigkeitsfeld ist bei Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Geschwindigkeitsdivergenz (`sim_2b`) im Vergleich zur Referenzsimulation eine nicht vernachlässigbare Vergrößerung der Abweichung von der analytischen Lösung zu verzeichnen. Eine signifikante Verschlechterung der Simulationsergebnisse ist jedoch im Falle der Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Druckgradiententerms (`sim_2a`) erkennbar. Die relative Abweichung von der analytischen Lösung bei der Fluidgeschwindigkeit am rechten Randsegment bzw. an den Partikeln des Rechengebiets vergrößert sich um eine bzw. um nahezu zwei Größenordnungen im Vergleich zu der Referenzsimulation. Außerdem ist eine Vergrößerung der Kenngrößen für die unphysikalischen Fluktuationen festzustellen. Diese vergrößern sich um nahezu zwei Größenordnungen gegenüber der Referenzkonfiguration. Insbesondere die relative Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit an den Partikeln weist ein inakzeptables mittleres Niveau von etwa 0,5 %

auf. Die Korrektur des Kernel-Gradienten ist bei der Berechnung des Druckgradiententerms der Impulsgleichung daher zwingend erforderlich.

In Tab. A.6 werden die normierten und gemittelten Massenstromkennwerte zwischen der Referenzsimulation `sim_ref` und den in diesem Abschnitt eingeführten Simulationen verglichen. Es ist zu konstatieren, dass die Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung der Diffusionsterme (`sim_2c`) keine signifikanten Unterschiede im Vergleich zur Referenzsimulation hervorruft. Aufgrund der konservativen Diskretisierung des Dichtediffusionsterms bei der Simulation `sim_2c` ist der Massenstrom $\dot{M}_{p,d,\Omega}$ gleich null. Daraus folgt eine geringe Verbesserung des globalen Massenstromungleichgewichts $\Delta \dot{M}$. Im Falle der Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Druckgradienten (`sim_2a`) ist erneut eine inakzeptable Verschlechterung des Ergebnisses im Vergleich zu der Referenzsimulation erkennbar. Durch die signifikanten Ungenauigkeiten bei der Berechnung des Geschwindigkeitsfelds (vgl. Tab. A.5) kommt es im Vergleich zur Referenzsimulation zu einer Vergrößerung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Eine gleichwertige Vergrößerung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Partikel ist nicht zu verzeichnen. Dadurch vergrößert sich der Absolutwert des globalen konvektiven Massenstromungleichgewichts $\Delta \dot{M}_{c,\partial\Omega}$ um mehr als eine Größenordnung gegenüber der Referenzsimulation. Auch im Falle der Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Geschwindigkeitsdivergenzterms (`sim_2b`) ist eine sichtbare Verschlechterung der wesentlichen Massenstromkennwerte zu verzeichnen. Insbesondere ist eine Vergrößerung des Gesamtpartikelmassenstroms $\dot{M}_p$ um ca. eine Größenordnung ersichtlich.

Das transiente Verhalten des Strömungsfelds der Simulationen `sim_2a`, `sim_2b` und `sim_2c` ist in Abb. A.6, Abb. A.7 und Abb. A.8 dargestellt. Im Falle der Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Geschwindigkeitsdivergenzterms (`sim_2b`) und der Diffusionsterme (`sim_2c`) ist für das Abklingverhalten der Druckmaxima am Eintrittsrand (vgl. Abb. A.6) kein Unterschied im Vergleich zu der Referenzsimulation festzustellen. Das Abklingverhalten bei der Simulation `sim_2a` deutet auf eine geringere Dissipation im Vergleich zu der Referenzsimulation hin (vgl. Abb. A.6). Für den zeitlichen Versatz der Druckoszillationen zu den Oszillationen bei der FV-Simulation ist im Falle der Simulationen `sim_2a` und `sim_2b` eine Vergrößerung im Vergleich zu der Referenzsimulation zu konstatieren (vgl. Abb. A.7). Die Simulation `sim_2c` weist im Vergleich zu der Referenzsimulation in dieser Hinsicht keine nennenswerten Unterschiede auf. Auch anhand der instantanen räumlichen Profile des Fluiddrucks (vgl. Abb. A.8) sind keine Unterschiede zwischen der Simulation `sim_2c` und der Referenzsimulation zu verzeichnen.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion wird die Schlussfolgerung gezogen, dass die Korrektur des Kernel-Gradienten lediglich für die Diffusionsterme (Dichtediffusionsterm und Viskositätsterm) nicht angewendet werden muss. Bis auf eine Verbesserung bei der Massenbilanz sind durch diese Änderung ansonsten keine nennenswerten Unterschiede zu der Referenzsimulation festzustellen. Die Deaktivierung der Korrektur des Kernel-Gradienten bei der Berechnung des Druckgradienten und der Geschwindigkeitsdivergenz führt hingegen zu teilweise signifikant schlechteren Ergebnissen im Vergleich zu der Referenzsimulation.

Tabelle A.5: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_2a`, `sim_2b` und `sim_2c`

Typ	Größe		Wert			
			<code>sim_ref</code>	<code>sim_2a</code>	<code>sim_2b</code>	<code>sim_2c</code>
p_+	$\mathbf{err}_i$	l	$\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$7,55 \cdot 10^{-3}$	$9,45 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$4,52 \cdot 10^{-3}$	$5,67 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l	$\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$2,77 \cdot 10^{-3}$	$7,19 \cdot 10^{-5}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$5,43 \cdot 10^{-4}$	$9,55 \cdot 10^{-6}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r	$\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$2,23 \cdot 10^{-2}$	$5,59 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$2,21 \cdot 10^{-2}$	$1,90 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r	$\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$1,34 \cdot 10^{-3}$	$5,97 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$5,14 \cdot 10^{-3}$	$9,08 \cdot 10^{-5}$

Tabelle A.6: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_2a`, `sim_2b` und `sim_2c`

Typ	Größe		Wert			
			sim_ref	sim_2a	sim_2b	sim_2c
Global						
alle	$\partial\Omega$	$\Delta \dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$-1,29 \cdot 10^{-2}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\Delta \dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$-4,18 \cdot 10^{-4}$	$8,48 \cdot 10^{-5}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta \dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$-5,31 \cdot 10^{-4}$	$-6,65 \cdot 10^{-5}$	$3,38 \cdot 10^{-5}$
Partikel						
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$6,34 \cdot 10^{-8}$	$-2,21 \cdot 10^{-7}$	$-2,78 \cdot 10^{-8}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$1,51 \cdot 10^{-4}$	$1,32 \cdot 10^{-4}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,39 \cdot 10^{-4}$	$-1,84 \cdot 10^{-4}$	$-1,66 \cdot 10^{-4}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-1,27 \cdot 10^{-5}$	$-1,19 \cdot 10^{-6}$	$1,31 \cdot 10^{-20}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,51 \cdot 10^{-4}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,66 \cdot 10^{-4}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$3,81 \cdot 10^{-5}$	$3,40 \cdot 10^{-5}$	$3,38 \cdot 10^{-5}$
Randsegmente						
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$-4,18 \cdot 10^{-4}$	$8,45 \cdot 10^{-5}$	$1,66 \cdot 10^{-4}$

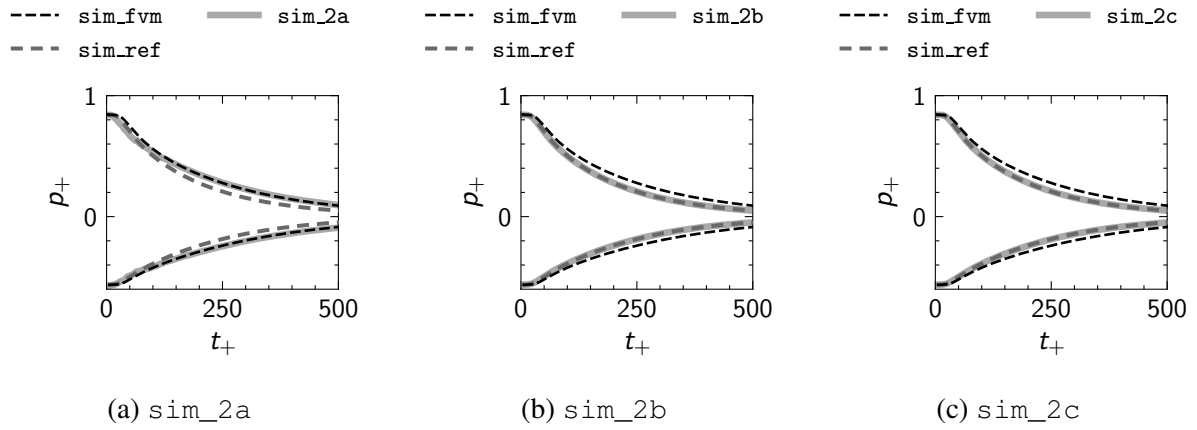


Abbildung A.6: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_2a , sim_2b und sim_2c

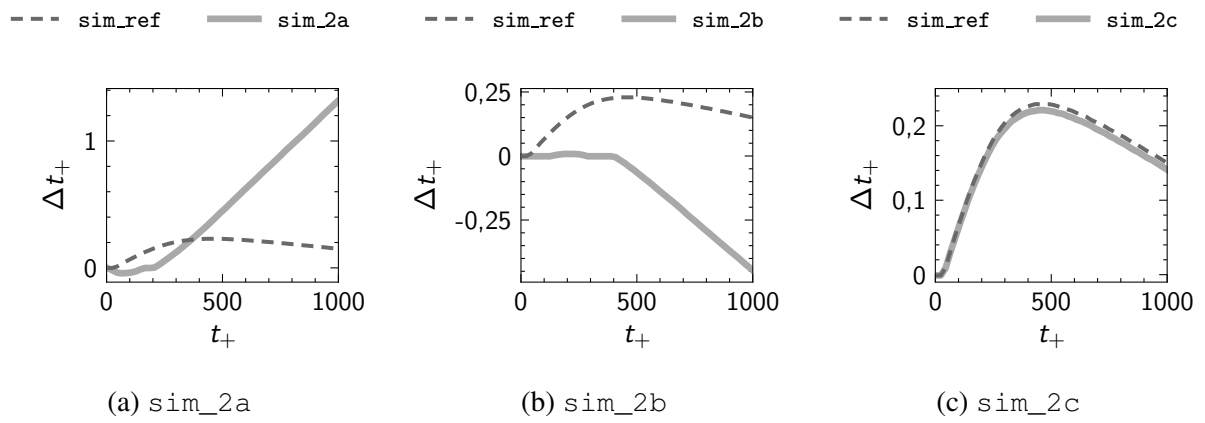


Abbildung A.7: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_2a , sim_2b und sim_2c

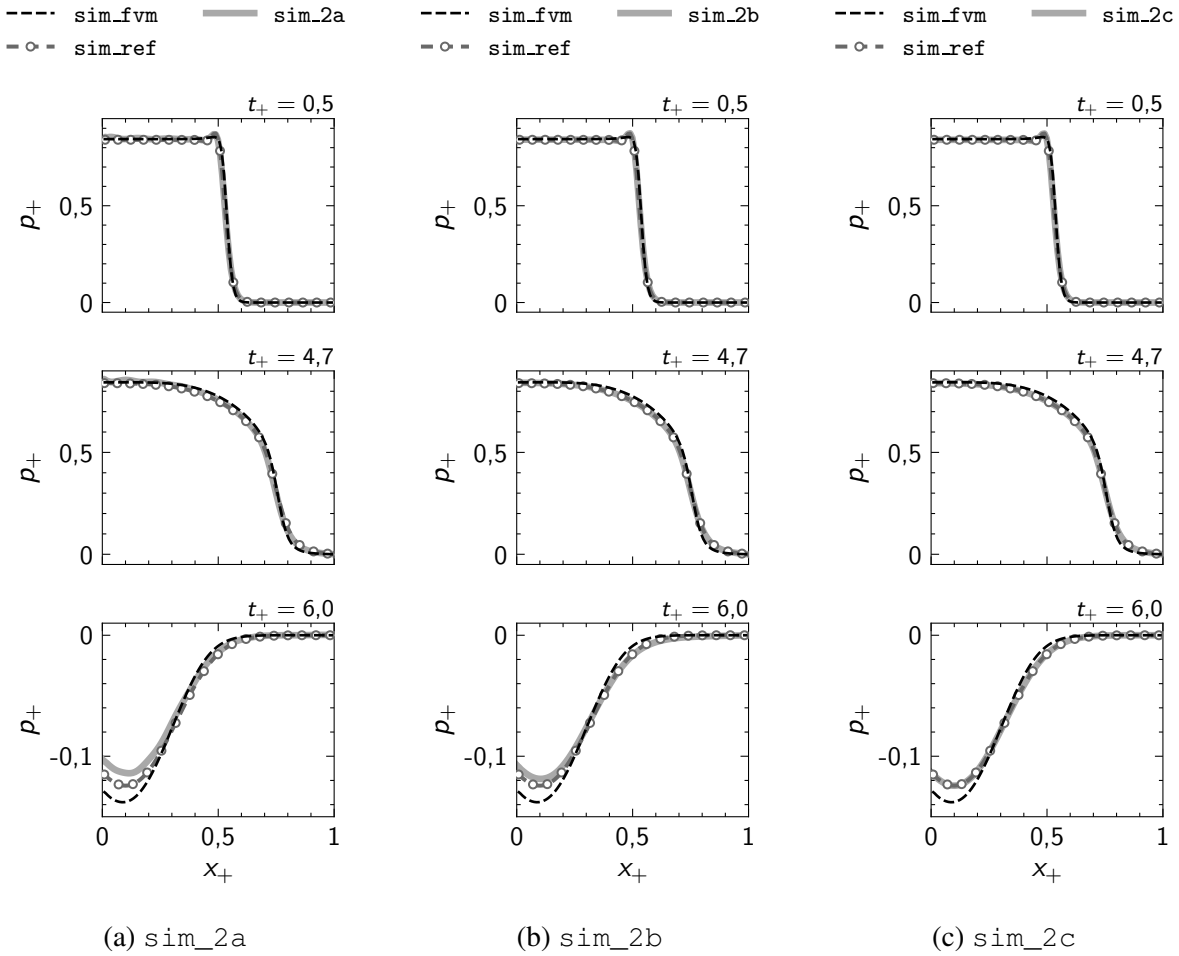


Abbildung A.8: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen `sim_2a`, `sim_2b` und `sim_2c`

A.5.3 Dichteberechnung über die diskrete Approximation

Der bei der Simulation `sim_ref` verwendete Ansatz zur Berechnung der Fluidichte ρ_a eines Partikels a basiert auf der zeitlichen Integration der Kontinuitätsgleichung (vgl. Gl. 4.77). In Abschnitt 4.4.2 wurden alternative Ansätze zur Berechnung der Fluidichte ρ_a eingeführt. Bei diesen Ansätzen erfolgt nach der Advektion des Partikels a mit der Partikelgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{u}}_a$ eine diskrete Approximation der Dichte ρ_a basierend auf den Werten der Masse der Nachbarpartikel des Partikels a (vgl. Gl. 4.23). Aufgrund der Berechnung der Dichte nach der Partikelverschiebung ähneln diese Ansätze einer impliziten zeitlichen Diskretisierung (Vila, 1999). Vila (1999) argumentiert, dass diese Art der zeitlichen Diskretisierung einen positiven Einfluss auf die Stabilität des SPH-Verfahrens hat. Da insbesondere im randnahen Bereich eine signifikante Geschwindigkeitsdifferenz $\delta\hat{\mathbf{u}}_a$ auftritt (vgl. Abschnitt 5.4), musste der ursprüngliche Ansatz zur Berechnung der Dichte ρ_a auf Basis der diskreten Approximation (vgl. Gl. 4.23) in Abschnitt 4.4.2 unter Berücksichtigung einer Korrektur dieser Geschwindigkeitsdifferenz modifiziert werden. Aufgrund dieser Korrektur muss ein zusätzlicher Divergenzterm der

Tabelle A.7: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses der alternativen Ansätze zur Berechnung der Fluidddichte

Name	Beschreibung
sim_3a	Berechnung der Fluidddichte über eine diskrete Approximation gemäß dem Ansatz nach Ferrand et al. (2017). Die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz wird über zwei diskrete Approximationen berechnet (vgl. Gl. 4.34).
sim_3b	Berechnung der Fluidddichte über eine diskrete Approximation gemäß dem in dieser Arbeit eingeführten Ansatz. Die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz wird in der Zeit diskretisiert und integriert (vgl. Gl. 4.35).

Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ berücksichtigt werden. Eine exakte Berechnung dieses Divergenzterms wird von Ferrand et al. (2017) eingeführt (vgl. Gl. 4.34). Bei diesem Ansatz wird der Divergenzterm als Differenz zweier diskreter Approximationen der Dichte bestimmt. Eine dieser Approximationen erfordert, dass die Partikel in einem Zwischenschritt während eines Zeitschritts zu intermediären Positionen verschoben werden. Auf Basis dieser intermediären räumlichen Verteilung der Partikel muss eine zusätzliche Nachbarsuche der Partikel durchgeführt werden. Die erneute Nachbarsuche zieht eine signifikant erhöhte Rechenzeit nach sich. Daher sollte dieser Ansatz nur angewendet werden, wenn diese Erhöhung des Rechenaufwands durch eine signifikante Verbesserung der Stabilität des Verfahrens gerechtfertigt werden kann. Der Ansatz nach Ferrand et al. (2017) wird in diesem Abschnitt bei der Simulation `sim_3a` angewendet (vgl. Tab. A.7). Der zweite Ansatz zur Berechnung des zuvor genannten Divergenzterms der Geschwindigkeitsdifferenz wurde im Zuge dieser Arbeit vorgeschlagen (vgl. Gl. 4.35). Bei diesem Ansatz wird der Divergenzterm nicht exakt berechnet, sondern in der Zeit diskretisiert und integriert. Dies führt zwar zu Diskretisierungsfehlern, jedoch wird eine zweite Nachbarsuche während eines Zeitschritts vermieden. Dieser Ansatz wird in diesem Abschnitt bei der Simulation `sim_3b` angewendet (vgl. Tab. A.7).

In Tab. A.8 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zusammengefasst. Es muss festgestellt werden, dass die zeitlichen Fluktuationen durch die Anwendung der alternativen Ansätze zur Berechnung der Fluidddichte nicht nennenswert verringert werden können. Im Falle des zweiten Ansatzes (Simulation `sim_3b`) wird sogar eine deutliche Vergrößerung der zeitlichen Fluktuationen bewirkt. Diese entsteht aufgrund der zeitlichen Diskretisierung des Divergenzterms der Geschwindigkeitsdifferenz, die bei der gegebenen Zeitschrittweite zu ungenau ist. Eine signifikante Verringerung der Zeitschrittweite wäre notwendig, um ähnlich geringe Fluktuationen wie bei der Referenzsimulation `sim_ref` oder dem Ansatz nach Ferrand et al. (2017) (Simulation `sim_3a`) zu erreichen. Die Abweichungen der Simulationen `sim_3a` und `sim_3b` von der analytischen Lösung sind bei dem Fluiddruck nahezu unverändert im Vergleich zur Referenzsimulation. Die entsprechende Abweichung der Fluidgeschwindigkeit erhöht sich bei der Simulation `sim_3a` bzw. bei der Simulation `sim_3b` ca. um das Dreifache bzw. um eine Größenordnung im Vergleich zur Referenzsimulation.

In Tab. A.9 werden die normierten und gemittelten Massenstromkennwerte zwischen der Referenzsimulation sim_ref und den in diesem Abschnitt eingeführten Simulationen verglichen. Im Falle der Simulation sim_3b ist keine nennenswerte Veränderung des Nettopartikelmassenstroms $\dot{M}_p$ gegenüber der Referenzsimulation erkennbar. Bei der Simulation sim_3a hingegen erhöht sich diese Kenngröße um zwei Größenordnungen im Vergleich zur Referenzsimulation. Durch die großen unphysikalischen Oszillationen in Randnähe im Falle der Simulation sim_3b sind die Nettomassenströme $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion im Vergleich zur Referenzsimulation betragsmäßig deutlich vergrößert. Im Falle beider Simulationen, sim_3a und sim_3b , kommt es aufgrund der gegenüber der Referenzsimulation erhöhten Abweichung der Fluidgeschwindigkeit am Auslassrand zu einer deutlichen Änderung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente. Anders als bei der Referenzsimulation wird der Massenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion dadurch nicht durch das konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente kompensiert. Demnach entsteht bei den Simulationen sim_3a und sim_3b eine erhöhte Inkonsistenz zwischen den Beiträgen der Dichtediffusion zu den Massenströmen der Randsegmente und der Partikel.

Das transiente Verhalten des Strömungsfelds der Simulationen sim_3a und sim_3b ist in Abb. A.9, Abb. A.10 und Abb. A.11 dargestellt. Es ist festzustellen, dass die Druckmaxima in Abb. A.9 im Falle der Simulationen sim_3a und sim_3b im Vergleich zu den Druckmaxima der Referenzsimulation sim_ref mit einer deutlich höheren zeitlichen Rate abklingen. Dies weist auf ein signifikant dissipativeres Verhalten dieser Ansätze hin. Auch der zeitliche Versatz zwischen den Oszillationen des Fluiddrucks (vgl. Abb. A.10) der SPH-Simulationen und der FV-Simulation vergrößert sich nach einer Einlaufphase mit einer deutlich höheren zeitlichen Rate im Vergleich zur Referenzsimulation sim_ref . Hierbei ist anzumerken, dass im Falle der Simulation sim_3b die Auswertung gemäß dem in Abschnitt 6.1.2 eingeführten Verfahren zur Bewertung des zeitlichen Versatzes aufgrund von Oszillationen des Fluiddrucks nur bis zu einer physikalischen Zeit von ca. $t_+ = 400$ durchgeführt werden konnte (vgl. Abb. A.10b). Anhand der instantanen räumlichen Druckverteilungen in Abb. A.11 wird der dissipative Charakter der Simulationen sim_3a und sim_3b untermauert.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion wird die Schlussfolgerung gezogen, dass die Berechnung der Fluidichte über die alternativen Ansätze auf Basis der diskreten Approximation gegenüber der Anwendung der Kontinuitätsgleichung bei allen hier untersuchten Aspekten als nachteilig zu bewerten ist. Die Ansätze weisen keinerlei Vorteile hinsichtlich der Stabilität des SPH-Verfahrens auf. Daher werden diese Ansätze in dieser Arbeit nicht weiterverfolgt.

Tabelle A.8: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_3a` und `sim_3b`

Typ	Größe		Wert		
			<code>sim_ref</code>	<code>sim_3a</code>	<code>sim_3b</code>
p_+	$\mathbf{err}_i$	l $\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,45 \cdot 10^{-3}$	$9,97 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,67 \cdot 10^{-3}$	$6,53 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l $\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$7,61 \cdot 10^{-5}$	$1,08 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$7,92 \cdot 10^{-6}$	$1,48 \cdot 10^{-4}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r $\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$5,78 \cdot 10^{-3}$	$1,40 \cdot 10^{-2}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$2,00 \cdot 10^{-3}$	$9,01 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r $\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,68 \cdot 10^{-4}$	$1,43 \cdot 10^{-2}$
		$\mathcal{D}$ $\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$	$1,31 \cdot 10^{-3}$

Tabelle A.9: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_3a` und `sim_3b`

Typ	Größe		Wert		
			sim_ref	sim_3a	sim_3b
Global					
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$-1,30 \cdot 10^{-2}$	$-1,29 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$7,68 \cdot 10^{-5}$	$-1,32 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$-7,92 \cdot 10^{-5}$	$-1,27 \cdot 10^{-3}$
Partikel					
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,31 \cdot 10^{-2}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,31 \cdot 10^{-2}$	$-1,27 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$2,97 \cdot 10^{-6}$	$-2,33 \cdot 10^{-8}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,59 \cdot 10^{-4}$	$1,14 \cdot 10^{-3}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,83 \cdot 10^{-4}$	$-1,21 \cdot 10^{-3}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-1,18 \cdot 10^{-6}$	$3,03 \cdot 10^{-5}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,84 \cdot 10^{-4}$	$-1,18 \cdot 10^{-3}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,31 \cdot 10^{-2}$	$1,28 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,31 \cdot 10^{-2}$	$-1,28 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$2,78 \cdot 10^{-5}$	$3,80 \cdot 10^{-5}$
Randsegmente					
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$7,97 \cdot 10^{-5}$	$-1,32 \cdot 10^{-4}$

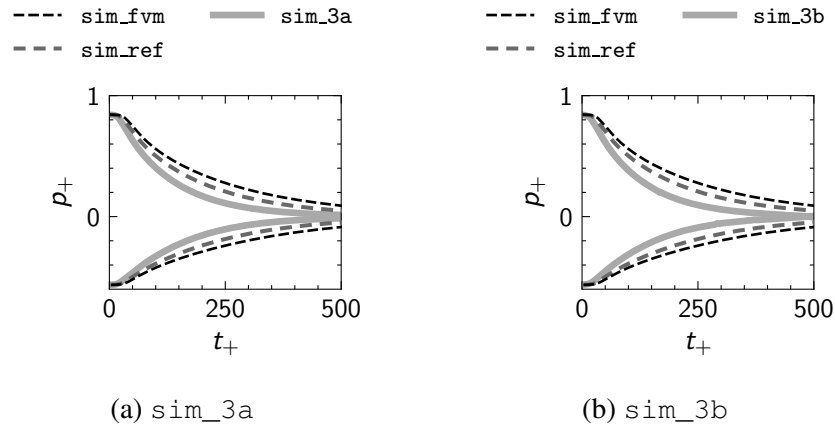


Abbildung A.9: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_3a und sim_3b

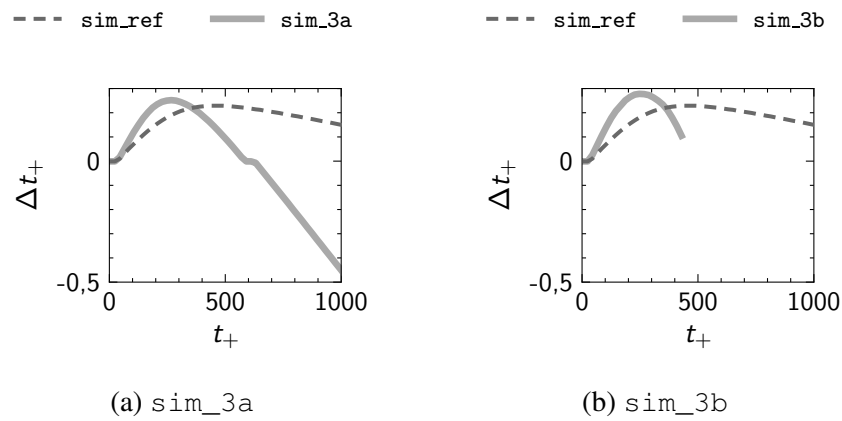


Abbildung A.10: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_3a und sim_3b

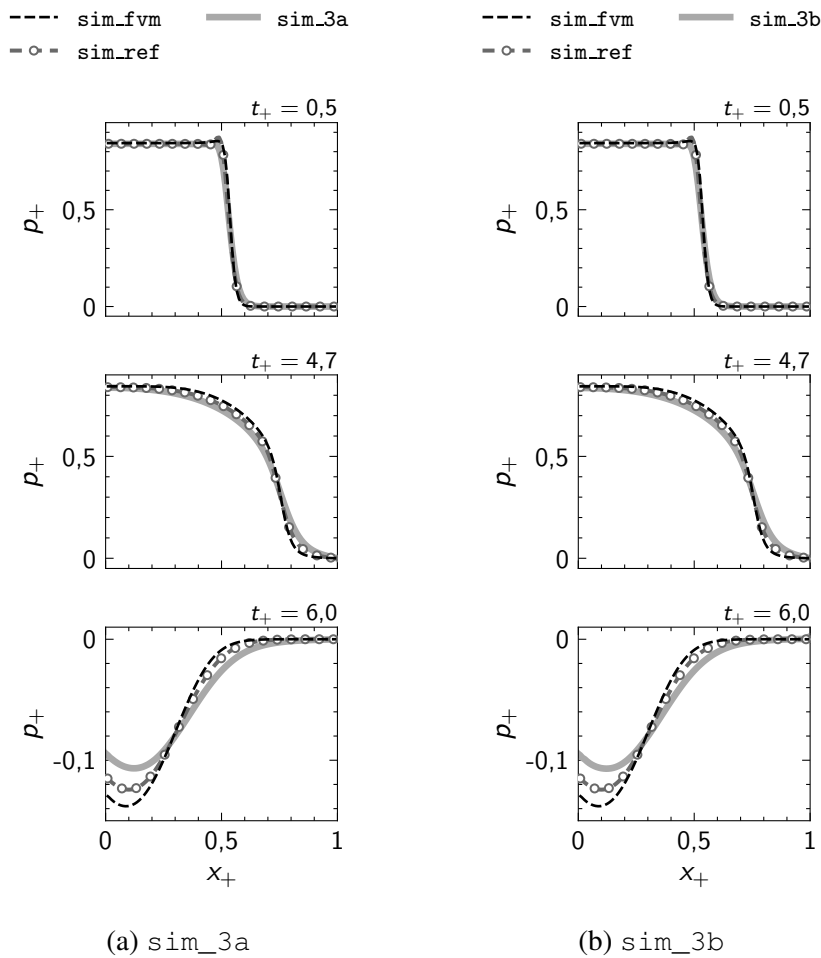


Abbildung A.11: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen `sim_3a` und `sim_3b`

A.5.4 Dichtediffusion

Wie in den vorangegangenen Abschnitten verdeutlicht wurde, ist der Dichtediffusionsterm für die Massenerhaltung bei dem numerischen Verfahren von großer Bedeutung. Der Dichtediffusionsterm wurde in Abschnitt 4.4.3 eingeführt. Der Grund für die Verwendung dieses Terms ist, kleinskalige Fluktuationen des Dichtefelds zu glätten, um die Stabilität des SPH-Verfahrens zu verbessern. Die Diskussion zur Integration dieses Terms in den Erhaltungsgleichungen wurde in Abschnitt 4.5 geführt. Es wurde erläutert, dass die Integration des Dichtediffusionsterms in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79) konsistent ist. Durch die Integration des Terms in der Massenerhaltungsgleichung hat dieser Term einen Einfluss auf die Massenerhaltung. In Abschnitt A.5.2 wurde bereits festgelegt, dass die Korrektur des Kernel-Gradienten nicht auf diesen Term angewendet wird. Folglich sind die zur Berechnung dieses Terms erforderlichen Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets reziprok und demnach neutral für die Massenerhaltung der Partikel des Rechengebiets. Die Interaktionen der Partikel des Rechengebiets mit den Geisterpartikeln der einzelnen Ränder des Rechengebiets sind allerdings nicht neutral

Tabelle A.10: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses des Dichtediffusionsterms

Name	Beschreibung
sim_4a	Multiplikation des Dichtediffusionsterms mit einem Vorfaktor von 0,8.
sim_4b	Multiplikation des Dichtediffusionsterms mit einem Vorfaktor von 0,6.
sim_4c	Keine Berücksichtigung von Geisterpartikeln bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms.

für die Massenerhaltung. Aufgrund dieser Interaktionen entsteht der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion. In den vorangegangenen Abschnitten wurde bereits darauf hingewiesen, dass dieser Nettomassenstrom durch das Fluidgeschwindigkeitsfeld innerhalb des Rechengebiets kompensiert werden muss, damit die Masse des Rechengebiets im stationären Strömungszustand konstant ist. Dies führt folglich zu einem konvektiven Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente und trägt entsprechend auch zu dem Ungleichgewicht $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der konvektiven Massenströme der Partikel bei. Besonders bei der Kopplung der SPH- und der FV-Methode ist dies ein kritischer Aspekt, da der Massenaustausch zwischen den Rechengebieten über die an den Randsegmenten vorliegenden konvektiven Massenströme realisiert wird. Es muss demnach untersucht werden, ob der Dichtediffusionsterm notwendig ist bzw. ob Maßnahmen ergriffen werden können, um den Einfluss dieses Terms auf die Massenerhaltung zu verringern.

In diesem Abschnitt werden zwei Ansätze verfolgt, um den Einfluss des Dichtediffusionsterms zu verringern. Einer dieser Ansätze ist, einen Vorfaktor kleiner eins zu definieren, mit dem der Dichtediffusionsterm multipliziert wird. Hierdurch wird der Absolutwert des Massenstroms der Dichtediffusion für jedes Partikel reduziert. Es wurde im Zuge dieser Arbeit festgestellt, dass bereits die Verwendung eines Vorfaktors kleiner oder gleich 0,4 bei den vorliegenden Testfällen zu einem Simulationsabbruch führt. Ein vollständiger Verzicht auf den Dichtediffusionsterm ist daher nicht möglich. Die Simulation `sim_4a` bzw. `sim_4b` wurde mit einem Vorfaktor von 0,8 bzw. 0,6 durchgeführt (vgl. Tab. A.10). Die Referenzsimulation `sim_ref` entspricht der Anwendung eines Vorfaktors von 1,0.

In Tab. A.11 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zusammengefasst. Entgegen der Erwartung verringern sich die Fluktuationen sowohl des Fluiddrucks als auch der Fluidgeschwindigkeit mit einer Verringerung des zuvor eingeführten Vorfaktors und folglich mit einer Verringerung des Einflusses des Dichtediffusionsterms. Die Abweichungen des Fluiddrucks zwischen den Simulationsergebnissen und der analytischen Lösung sind von dem Wert des Vorfaktors unbeeinflusst. Die entsprechende Abweichung der Fluidgeschwindigkeit erhöht sich allerdings deutlich mit einer Verringerung des Vorfaktors.

In Tab. A.12 werden die normierten und gemittelten Massenstromkennwerte zwischen der Referenzsimulation `sim_ref` und den in diesem Abschnitt eingeführten Simulationen verglichen. Bei Verringerung des eingeführten Vorfaktors wird erwartungsgemäß der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion verringert. Diese Änderung spiegelt sich auf konsistente Weise in einer Änderung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente wieder:

Da mit einer Verringerung des Vorfaktors ein geringerer Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion kompensiert werden muss, verringert sich das konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$. Der Nettomassenstrom $\dot{M}_p$ der Partikel bleibt nahezu unbeeinflusst von der Änderung des Vorfaktors. Das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ verringert sich aufgrund der Verringerung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ mit einer Reduzierung des Vorfaktors. Über die Verringerung des Vorfaktors wird demnach eine Verbesserung der Massenbilanz bewirkt.

Das transiente Verhalten des Strömungsfelds der Simulationen `sim_4a` und `sim_4b` ist in Abb. A.12, Abb. A.13 und Abb. A.14 dargestellt. Anhand des in Abb. A.12 gezeigten Abklingverhaltens der Druckmaxima am Eintrittsrand ist festzustellen, dass durch eine Verringerung des eingeführten Vorfaktors des Dichtediffusionsterms eine Verringerung der Dissipativität des SPH-Verfahrens bewirkt wird. Bei einem Vorfaktor von 0,8 resultiert ein nahezu identisches Abklingverhalten im Vergleich zum FV-Verfahren (vgl. Abb. A.12a), bei dem eine Upwind-Diskretisierung der Divergenzterme angewendet wird. Mit einer weiteren Verringerung des Vorfaktors auf einen Wert von 0,6 ist das SPH-Verfahren bereits sichtbar weniger dissipativ als das genannte FV-Verfahren (vgl. Abb. A.12b). Im Zusammenhang mit dem zeitlichen Versatz zwischen den Oszillationen des Fluiddrucks (vgl. Abb. A.13) der SPH-Simulationen `sim_4a` und `sim_4b` und der FV-Simulation ist zu konstatieren, dass nach einer deutlich unterschiedlichen Einlaufphase ($0 \leq t_+ \leq 600$) keine sichtbaren Änderungen der zeitlichen Rate des zeitlichen Versatzes Δt_+ im Vergleich zur Referenzsimulation `sim_ref` bestehen. Anhand der instantanen räumlichen Profile des Fluiddrucks in Abb. A.14 ist erkennbar, dass der Überschwinger des Druckprofils an der Wellenfront insbesondere während des ersten Durchlaufs ($t_+ = 0,5$) der akustischen Welle durch das Rechengebiet deutlich mit einer Verringerung des eingeführten Vorfaktors erhöht wird. Im Falle eines Vorfaktors von 0,6 (vgl. Abb. A.14b) sind nach mehrfachen Durchläufen ($t_+ = 4,7$) der akustischen Welle noch Überschwinger an der Wellenfront erkennbar.

Ein weiterer Ansatz, ein neutrales Verhalten des Dichtediffusionsterms bei der Massenerhaltung der Partikel des Rechengebiets zu bewirken, ist die Unterbindung von Interaktionen zwischen den Partikeln des Rechengebiets und den Geisterpartikeln bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms. Auf diese Weise erfolgt durch den Dichtediffusionsterm kein direkter Massentransfer über die offenen Ränder. Die Simulation, bei der dieser Ansatz verfolgt wird, wird im Folgenden `sim_4c` genannt (vgl. Tab. A.10). In Tab. A.11 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen für die Simulation `sim_4c` dargestellt. Es wird deutlich, dass die zeitlichen Fluktuationen aller Strömungsgrößen durch die eingeführte Änderung des SPH-Verfahrens signifikant vergrößert werden. Außerdem ist bei der Fluidgeschwindigkeit und insbesondere innerhalb des Rechengebiets eine deutliche Vergrößerung der Abweichung zur analytischen Lösung zu verzeichnen.

Die Kennwerte der Massenbilanz der Simulation `sim_4c` sind in Tab. A.12 dargestellt. Aufgrund der Unterbindung der Interaktionen zwischen den Partikeln des Rechengebiets und den Geisterpartikeln bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms ist der Massenstrom $\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$ gleich null. Dies bedeutet allerdings nicht, dass kein Massenfluss infolge der Dichtediffusion

innerhalb des Rechengebiets entsteht. Es wird wie bei der Referenzsimulation Masse vom Eintrittsrand zum Austrittsrand transportiert. Diese Masse muss das Rechengebiet am Austrittsrand verlassen können. Da dies im Falle der Simulation `sim_4c` nicht über die Interaktion zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln realisiert werden kann, kommt es zu einer Vergrößerung des konvektiven Massenstroms der Partikel am Austrittsrand. Aus diesem Grund ist das konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Partikel im Falle der Simulation `sim_4c` negativ. Außerdem führt dies zu einer erhöhten Inkonsistenz zwischen den konvektiven Massenströmen der Randsegmente und der Partikel. Diese Inkonsistenz spiegelt sich in einer Vergrößerung um nahezu eine Größenordnung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$ wider. Außerdem erhöht sich der Absolutwert des Nettopartikelmassenstroms $\dot{M}_p$ um mehr als zwei Größenordnungen.

Auch für das dynamische Verhalten der Simulation `sim_4c` ist eine Verschlechterung der Ergebnisse gegenüber der Referenzsimulation zu konstatieren. Während für das Abklingverhalten der Druckmaxima (vgl. Abb. A.12c) kein Unterschied zu der Referenzsimulation festzustellen ist, entsteht ein deutlich größerer zeitlicher Versatz der Oszillationen des Fluiddrucks zwischen der Simulation `sim_4c` und der FV-Simulation (vgl. Abb. A.13c). Dies spiegelt sich auch in größeren Abweichungen der instantanen räumlichen Druckverteilungen von den Ergebnissen der FV-Simulation wider (vgl. Abb. A.14c).

Auf Basis der in diesem Abschnitt geführten Diskussion ist die Einführung eines Vorfaktors für den Dichtediffusionsterm durchaus eine Option, um eine Verringerung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ und einhergehend eine Verringerung des globalen Massenstromungleichgewichts $\Delta\dot{M}$ zu bewirken. Es wurde allerdings festgestellt, dass der Vorfaktor nur geringfügig reduziert werden kann, ohne eine Verschlechterung der Stabilität des Verfahrens bis hin zu Simulationsabbrüchen zu generieren. Bei dem betrachteten Testfall wäre die Anwendung eines Vorfaktors von 0,8 ohne die zuvor erwähnten Unzulänglichkeiten möglich. Daraus ergäbe sich eine Reduzierung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ von 0,019 % auf 0,015 %. Dies wird an dieser Stelle als nicht signifikant bewertet. Daher wird von der Einführung eines Vorfaktors in dieser Arbeit abgesehen. Die Unterbindung der Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms führt zu einer Vergrößerung der Ungenauigkeiten und der unphysikalischen Oszillationen der Strömungsgrößen sowie zu einer Verschlechterung der Massenstrombilanz. Dieser Ansatz wird demnach ebenfalls nicht weiterverfolgt.

Tabelle A.11: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_4a`, `sim_4b` und `sim_4c`

Typ		Größe		Wert			
				sim_ref	sim_4a	sim_4b	sim_4c
p_+	$\mathbf{err}_i$	l	$\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,43 \cdot 10^{-3}$	$9,47 \cdot 10^{-3}$	$8,31 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,65 \cdot 10^{-3}$	$5,67 \cdot 10^{-3}$	$6,50 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l	$\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$5,43 \cdot 10^{-5}$	$3,79 \cdot 10^{-5}$	$6,76 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$8,52 \cdot 10^{-6}$	$7,87 \cdot 10^{-6}$	$4,38 \cdot 10^{-5}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r	$\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$3,18 \cdot 10^{-3}$	$4,70 \cdot 10^{-3}$	$-8,39 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$1,34 \cdot 10^{-3}$	$2,19 \cdot 10^{-3}$	$8,85 \cdot 10^{-2}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r	$\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$4,95 \cdot 10^{-4}$	$4,10 \cdot 10^{-4}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$8,01 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$	$4,60 \cdot 10^{-4}$

Tabelle A.12: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_4a`, `sim_4b` und `sim_4c`

Typ	Größe		Wert			
			sim_ref	sim_4a	sim_4b	sim_4c
Global						
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$-1,29 \cdot 10^{-2}$	$-1,15 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,50 \cdot 10^{-4}$	$1,10 \cdot 10^{-4}$	$4,40 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$3,62 \cdot 10^{-5}$	$2,91 \cdot 10^{-5}$	$5,81 \cdot 10^{-4}$
Partikel						
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,30 \cdot 10^{-2}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,30 \cdot 10^{-2}$	$-1,19 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$-2,18 \cdot 10^{-8}$	$-2,88 \cdot 10^{-8}$	$-3,90 \cdot 10^{-6}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,14 \cdot 10^{-4}$	$8,05 \cdot 10^{-5}$	$-1,44 \cdot 10^{-4}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,47 \cdot 10^{-4}$	$-1,09 \cdot 10^{-4}$	0,00
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-6,90 \cdot 10^{-7}$	$-5,05 \cdot 10^{-7}$	$8,64 \cdot 10^{-5}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,48 \cdot 10^{-4}$	$-1,09 \cdot 10^{-4}$	$8,64 \cdot 10^{-5}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,31 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,30 \cdot 10^{-2}$	$-1,20 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$3,42 \cdot 10^{-5}$	$2,86 \cdot 10^{-5}$	$5,41 \cdot 10^{-5}$
Randsegmente						
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,50 \cdot 10^{-4}$	$1,10 \cdot 10^{-4}$	$4,36 \cdot 10^{-4}$

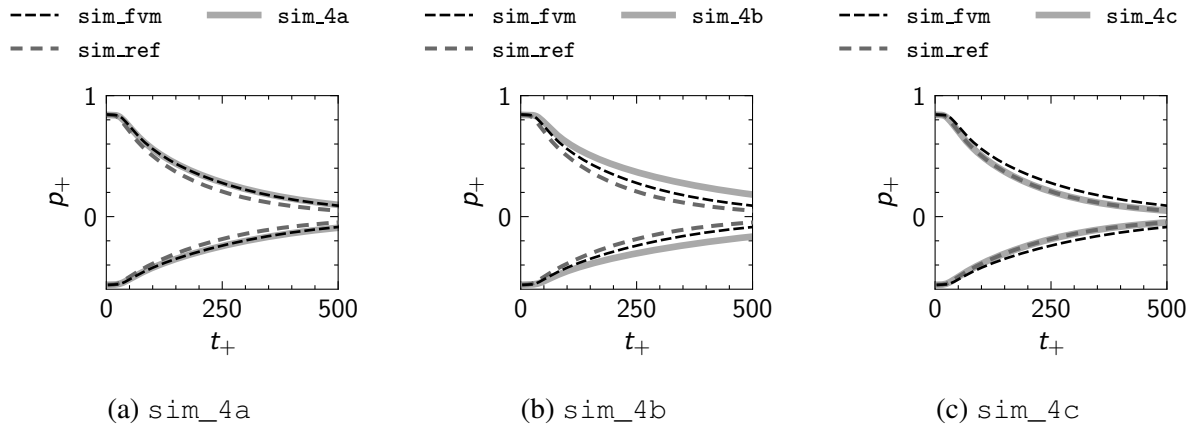


Abbildung A.12: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_4a , sim_4b und sim_4c

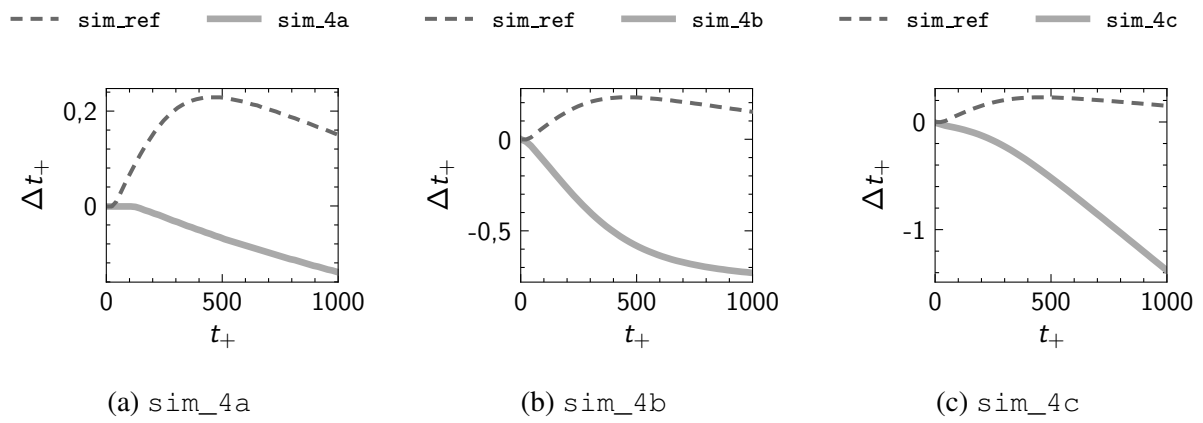


Abbildung A.13: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_4a , sim_4b und sim_4c

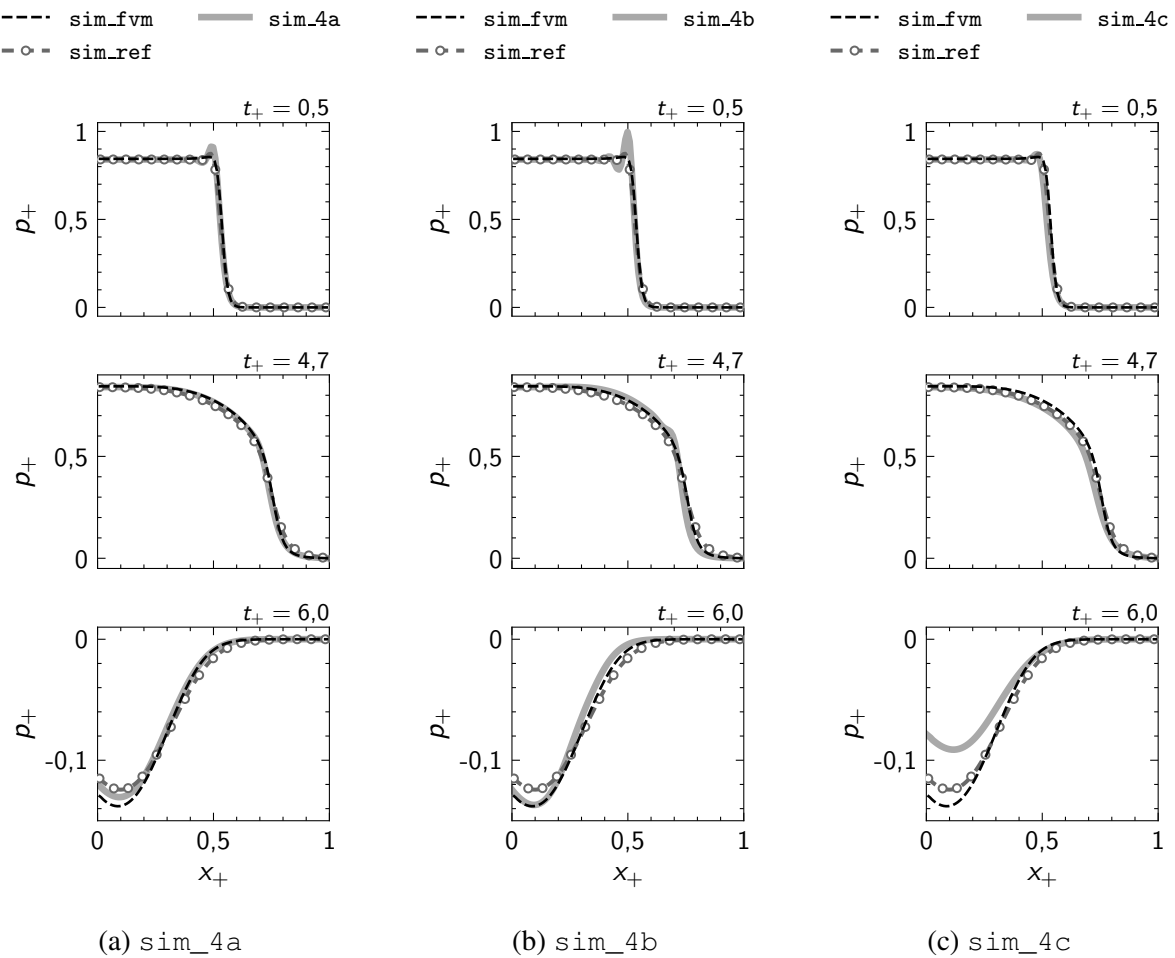


Abbildung A.14: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen `sim_4a`, `sim_4b` und `sim_4c`

A.5.5 Partikelverschiebung

Der Partikelverschiebungsansatz wurde in Abschnitt 4.4.4 als eine weitere Methode zur Reduzierung der numerischen Unzulänglichkeiten der SPH-Methode eingeführt. Insbesondere im Bereich der offenen Ränder kommt es bei dem vorliegenden Verfahren zu verhältnismäßig großen Ungleichmäßigkeiten der räumlichen Verteilung der Partikel, da die Partikel in unmittelbarer Randnähe eine Massenänderung erfahren. Aufgrund dieser Massenänderung entstehen in Randnähe räumliche Konstellationen von Partikeln, bei denen Partikel mit einer sehr geringen Masse von Partikeln umgeben sind, deren Masse gleich der Referenzmasse eines Partikels ist. Die Konsequenz ist eine inhomogene räumliche Verteilung der Partikelabstände in diesen Bereichen. Bei der Berechnung der SPH-Operatoren eines Partikels, in dessen Einflussbereich eine solche ungleichmäßige räumliche Konstellation von Partikeln vorliegt, können verhältnismäßig große Ungenauigkeiten auftreten. Über den Partikelverschiebungsansatz wird die räumliche Verteilung der Partikel verbessert, um diese Ungenauigkeiten zu reduzieren. Bei diesem Ansatz wird eine zusätzliche Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ für das Partikel a des Rechengebiets de-

Tabelle A.13: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses des Partikelverschiebungsansatzes

Name	Beschreibung
sim_5a	Multiplikation der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ gemäß Gl. 4.54 mit einem Vorfaktor von 0,1.
sim_5b	Multiplikation der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ gemäß Gl. 4.54 mit einem Vorfaktor von 0,01.
sim_5c	Multiplikation der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ gemäß Gl. 4.54 mit einem Vorfaktor von 0,001.

finiert (vgl. Gl. 4.54 und Gl. 4.53). Diese Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ repräsentiert gemäß Gl. 4.69 einen Anteil der gesamten Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a$ des Partikels a . Über die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ kann das Partikel a abweichend von den Stromlinien des Strömungsfelds in die Richtung des größten Partikeldefizits verschoben werden. Hierdurch kann die zuvor genannte Verbesserung der räumlichen Verteilung der Partikel bewirkt werden. Ein Nachteil dieses Ansatzes ist allerdings, dass sich in den Erhaltungsgleichungen im Vergleich zur Lagrange'schen Betrachtungsweise zusätzliche konvektive Terme basierend auf der Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}$ ergeben (vgl. Abschnitt 4.5). Wie in Abschnitt 4.5 erläutert wurde, kann dieser konvektive Term in drei Anteile zerlegt werden (vgl. Gl. 4.57). Einer dieser Anteile repräsentiert die Divergenz der Geschwindigkeitsdifferenz, die eine zusätzliche Volumenänderung des Partikels a repräsentiert. In Abschnitt 4.5 wurde festgelegt, die durch die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}^S$ hervorgerufene Volumenänderung des Partikels a zu vernachlässigen. Dadurch entsteht ein Fehler bei der Berechnung des Partikelvolumens. Als weitere Anteile der genannten Zerlegung des konvektiven Terms ergeben sich Korrekturterme der Strömungsgrößen.¹⁹ Diese Korrekturterme können nicht konservativ diskretisiert werden und stellen daher eine potentielle Unzulänglichkeit des in dieser Arbeit verwendeten numerischen Verfahrens dar. Vor diesem Hintergrund wird in diesem Abschnitt der Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes auf die in diesem Kapitel verwendeten Bewertungskenngrößen untersucht. Zu dem Zweck wird ein Vorfaktor kleiner eins definiert, mit dem die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$, die sich gemäß Gl. 4.54 ergibt, multipliziert wird. Hierdurch werden der Betrag und damit der Einfluss der Geschwindigkeitsdifferenz reduziert. Bei der Simulation `sim_5a`, `sim_5b` bzw. `sim_5c` wird die Geschwindigkeitsdifferenz $\delta \hat{\mathbf{u}}_a^S$ mit einem Vorfaktor von 0,1, 0,01 bzw. 0,001 multipliziert (vgl. Tab. A.13). Die Referenzsimulation `sim_ref` entspricht der Anwendung eines Vorfaktors von 1,0.

Die statistische Verteilung der normierten x -Komponente $\delta \hat{u}_{+,x}^S = \delta \hat{\mathbf{u}}^S \cdot \mathbf{e}_x / u_0$ der Geschwindigkeitsdifferenz ist für die verschiedenen Simulationen in Abb. A.15 veranschaulicht. Für diese Darstellung wurde das Rechengebiet entlang der x -Richtung in 25 Abschnitte unterteilt. Für jeden dieser Abschnitte ist die relative Häufigkeit der Geschwindigkeitsdifferenz innerhalb eines diskretisierten Wertebereichs als Falschfarbe dargestellt. Für die Referenzsimulation (Simula-

¹⁹Es handelt sich um den zweiten Term auf der rechten Seite in Gl. 4.77 und den jeweils ersten Term auf der rechten Seite in Gl. 4.79 und Gl. 4.80.

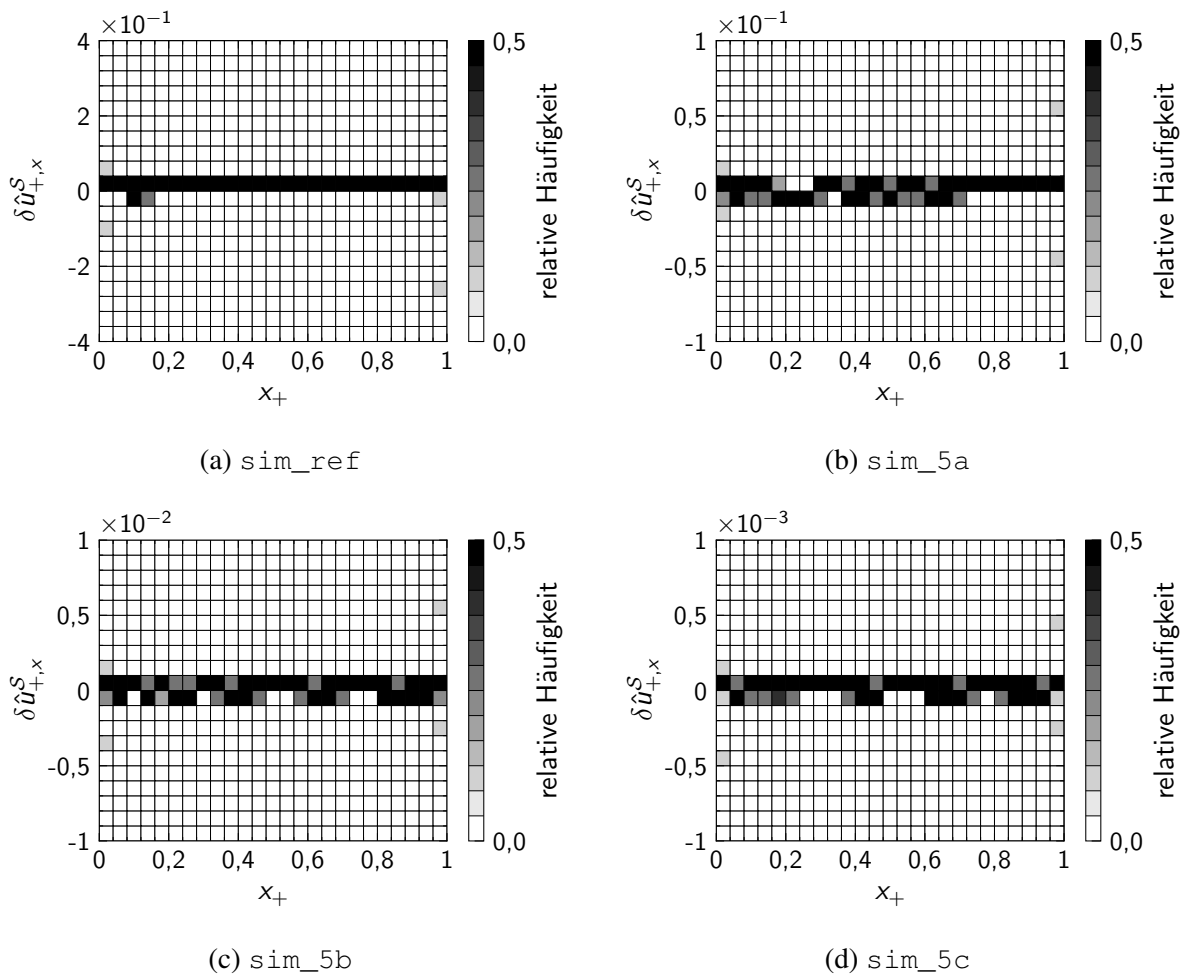


Abbildung A.15: Statistische Verteilung der normierten x -Komponente der Geschwindigkeitsdifferenz ($\delta \hat{u}_{+,x}^S = \delta \hat{\mathbf{u}}^S \cdot \mathbf{e}_x / u_0$) entlang der x -Richtung des Rechengebiets als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_5a`, `sim_5b` und `sim_5c`

tion `sim_ref`) ist festzustellen, dass die Geschwindigkeitsdifferenz hauptsächlich in direkter Nähe der offenen Ränder vergleichsweise große Werte annimmt (vgl. Abb. A.15a). Dabei ist die Geschwindigkeitsdifferenz am Austrittsrand deutlich größer als am Eintrittsrand. Etwa 10 % aller Partikel, die während der Simulation in der Nähe des Austrittsrands positioniert waren, erfuhren eine Geschwindigkeitsdifferenz von etwa 30 % der Referenzgeschwindigkeit u_0 . Bei einem Vorfaktor von 0,1 (Simulation `sim_5a`) sind Maximalwerte der Geschwindigkeitsdifferenz von ca. 5 % der Referenzgeschwindigkeit u_0 in der Nähe des Austrittsrand zu verzeichnen (vgl. Abb. A.15b). Bei einer Reduzierung des Vorfaktors auf 0,001 (Simulation `sim_5c`) liegt die Geschwindigkeitsdifferenz unterhalb von 0,05 % der Referenzgeschwindigkeit u_0 (vgl. Abb. A.15d). In diesem Fall ist der Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes auf das SPH-Verfahren als irrelevant anzusehen.

In Tab. A.14 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen

zusammengefasst. Der positive Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes auf die Stabilität des Verfahrens soll an dieser Stelle herausgestellt werden. Durch eine Verringerung des eingeführten Vorfaktors vergrößern sich die normierten Fluktuationen aller Strömungsgrößen. Bei der Simulation `sim_5c`, bei der der Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes als nicht mehr relevant einzustufen ist, ist innerhalb des Rechengebiets im Vergleich zur Referenzsimulation ca. eine Verdopplung der normierten Fluktuationen der Strömungsgrößen zu verzeichnen.

In Tab. A.15 werden die normierten und gemittelten Massenstromkennwerte zwischen der Referenzsimulation `sim_ref` und den in diesem Abschnitt eingeführten Simulationen verglichen. Es sind gegenüber der Referenzsimulation erhebliche Veränderungen der die Partikel betreffenden Kennwerte erkennbar. Bei einem vernachlässigbaren Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes (Simulation `sim_5c`) vergrößert sich der Nettomassenstrom $\dot{M}_p$ der Partikel um etwa drei Größenordnungen im Vergleich zur Referenzsimulation. Es ist demnach ein positiver Einfluss des Partikelverschiebungsansatzes auf die Massenbilanz der Partikel zu konstatieren. Entgegen der Erwartung vergrößert sich der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtekorrektur bei einer Verringerung des eingeführten Vorfaktors. Die Vergrößerung ist insbesondere bei dem ersten Reduzierungsschritt des Vorfaktors (Simulation `sim_5a`) signifikant. Für den Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion sind nur geringfügige Änderungen zu verzeichnen. Aus diesem Grund sind für das Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente sowie für das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ ebenfalls nur geringfügige Änderungen zu konstatieren.

Das dynamische Verhalten der in diesem Abschnitt diskutierten Simulationen ist in Abb. A.16, Abb. A.17 und Abb. A.18 dargestellt. Für das Abklingverhalten der Druckmaxima (vgl. Abb. A.16), den zeitlichen Versatz der Druckoszillationen zu dem Ergebnis der FV-Simulation (vgl. Abb. A.17) sowie die instantanen Profile des Fluiddrucks (vgl. Abb. A.18) sind keine nennenswerten Unterschiede zu dem Ergebnis der Referenzsimulation festzustellen.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion wird die Schlussfolgerung gezogen, dass der Partikelverschiebungsansatz sowohl im Zusammenhang mit der Stabilität als auch der Massenbilanz der Simulationen einen positiven Einfluss aufweist. Der Ansatz weist keinerlei Nachteile auf. Daher wird dieser Ansatz, wie in Abschnitt 4.4.4 eingeführt, in dieser Arbeit weiterverfolgt.

Tabelle A.14: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_5a`, `sim_5b` und `sim_5c`

Typ		Größe		Wert			
				sim_ref	sim_5a	sim_5b	sim_5c
p_+	$\mathbf{err}_i$	l	$\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,38 \cdot 10^{-3}$	$9,38 \cdot 10^{-3}$	$9,37 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,63 \cdot 10^{-3}$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,62 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l	$\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$8,95 \cdot 10^{-5}$	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$1,15 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$1,29 \cdot 10^{-5}$	$1,57 \cdot 10^{-5}$	$1,76 \cdot 10^{-5}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r	$\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,98 \cdot 10^{-3}$	$1,28 \cdot 10^{-3}$	$9,40 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$7,53 \cdot 10^{-4}$	$1,01 \cdot 10^{-3}$	$1,06 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r	$\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$6,59 \cdot 10^{-4}$	$6,32 \cdot 10^{-4}$	$6,46 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$1,17 \cdot 10^{-4}$	$1,42 \cdot 10^{-4}$	$1,69 \cdot 10^{-4}$

Tabelle A.15: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_5a`, `sim_5b` und `sim_5c`

Typ	Größe		Wert			
			sim_ref	sim_5a	sim_5b	sim_5c
Global						
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$-1,77 \cdot 10^{-2}$	$-1,35 \cdot 10^{-2}$	$-9,20 \cdot 10^{-3}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,85 \cdot 10^{-4}$	$2,04 \cdot 10^{-4}$	$1,92 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$1,31 \cdot 10^{-4}$	$1,48 \cdot 10^{-4}$	$1,29 \cdot 10^{-4}$
Partikel						
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$1,78 \cdot 10^{-2}$	$1,37 \cdot 10^{-2}$	$9,41 \cdot 10^{-3}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,78 \cdot 10^{-2}$	$-1,37 \cdot 10^{-2}$	$-9,39 \cdot 10^{-3}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$-3,97 \cdot 10^{-6}$	$-3,96 \cdot 10^{-6}$	$1,72 \cdot 10^{-5}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$5,06 \cdot 10^{-5}$	$5,24 \cdot 10^{-5}$	$8,04 \cdot 10^{-5}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,66 \cdot 10^{-4}$	$-1,82 \cdot 10^{-4}$	$-1,94 \cdot 10^{-4}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-7,92 \cdot 10^{-6}$	$-7,04 \cdot 10^{-6}$	$-4,05 \cdot 10^{-6}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,74 \cdot 10^{-4}$	$-1,89 \cdot 10^{-4}$	$-1,98 \cdot 10^{-4}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,80 \cdot 10^{-2}$	$1,38 \cdot 10^{-2}$	$9,52 \cdot 10^{-3}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-1,78 \cdot 10^{-2}$	$-1,37 \cdot 10^{-2}$	$-9,39 \cdot 10^{-3}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$1,33 \cdot 10^{-4}$	$1,35 \cdot 10^{-4}$
Randsegmente						
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,81 \cdot 10^{-4}$	$2,00 \cdot 10^{-4}$	$2,09 \cdot 10^{-4}$

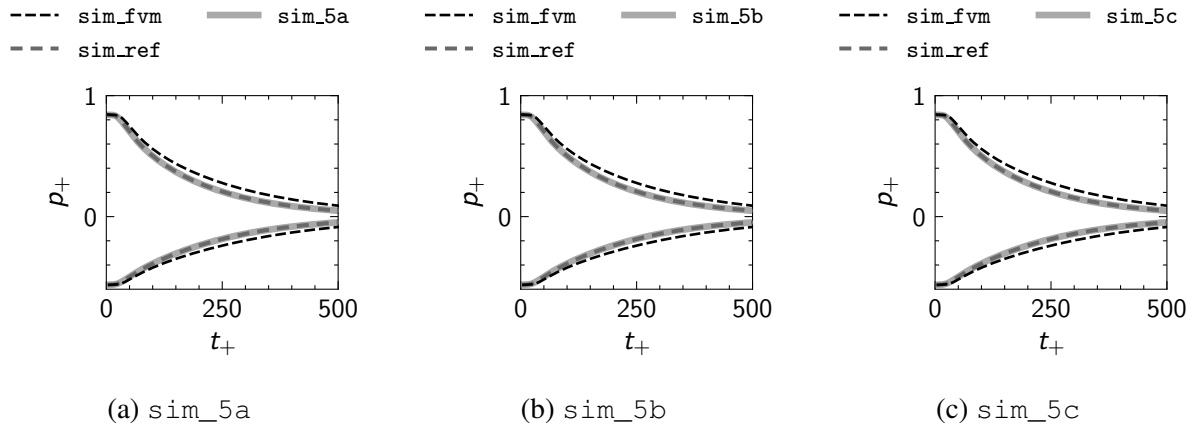


Abbildung A.16: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_5a , sim_5b und sim_5c

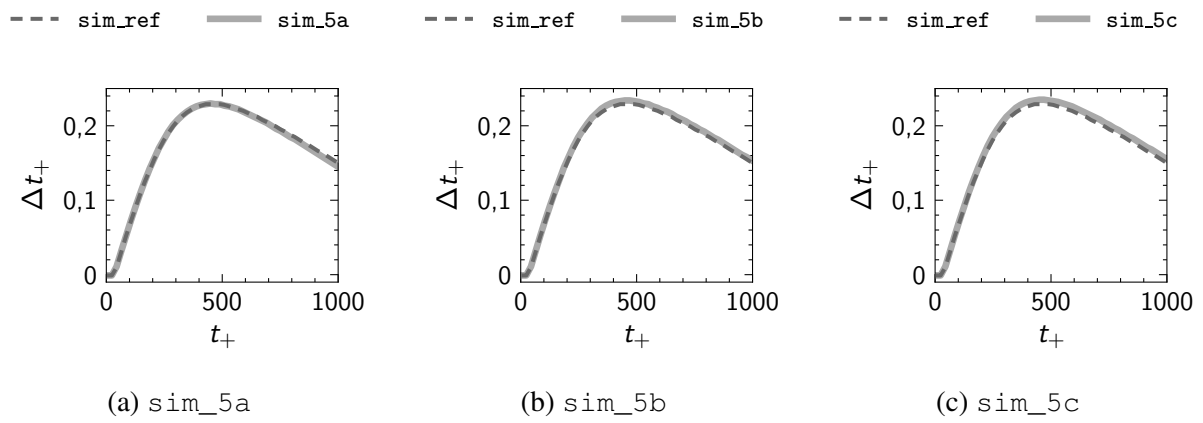


Abbildung A.17: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_5a , sim_5b und sim_5c

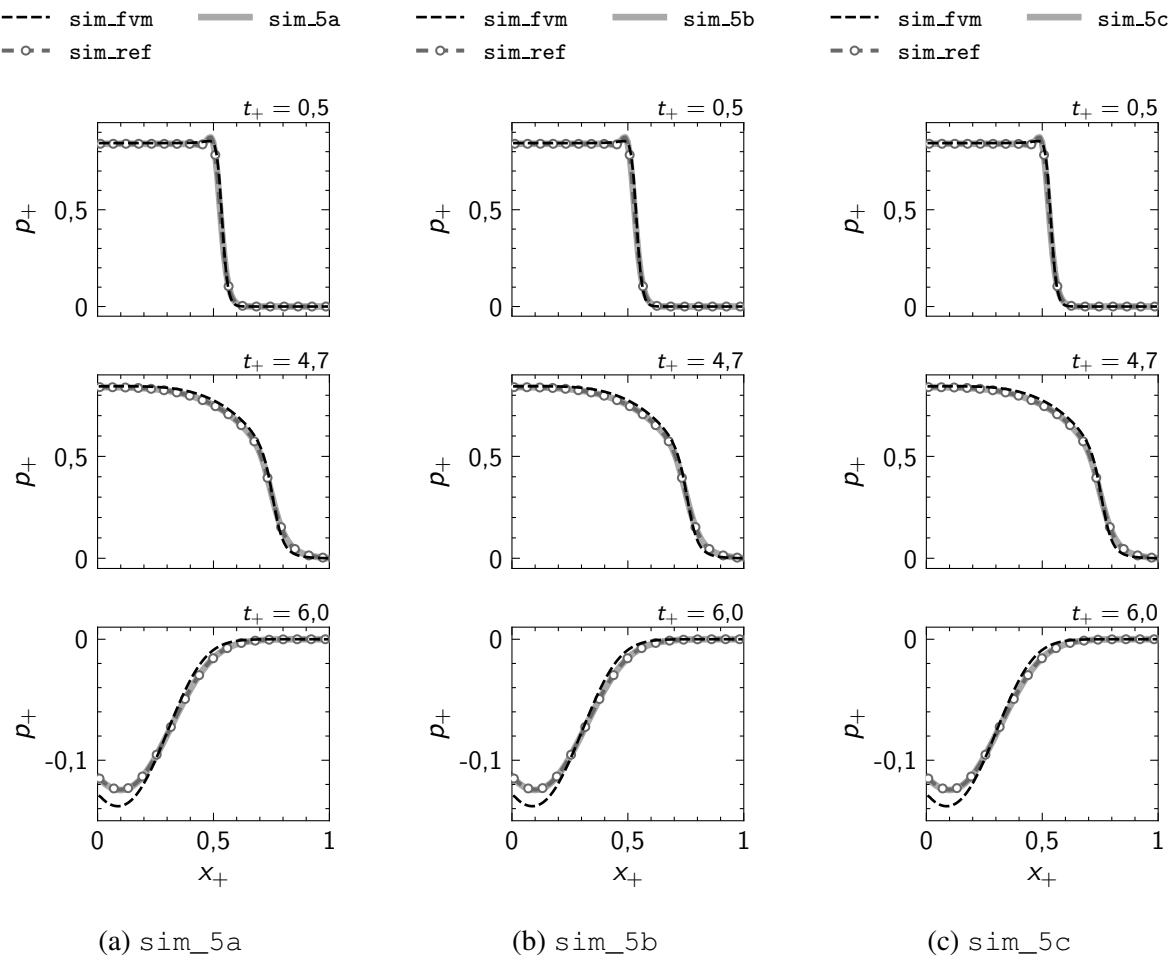


Abbildung A.18: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen sim_5a , sim_5b und sim_5c

A.5.6 Aspekte der Erhaltungsgleichungen

In diesem Abschnitt werden besondere Aspekte der Erhaltungsgleichungen untersucht. In Abschnitt 4.5 wurden die Besonderheiten der in dieser Arbeit verwendeten Formulierung der Erhaltungsgleichungen ausführlich diskutiert. Diese Besonderheiten beziehen sich auf den Dichtediffusionsterm und den Dichtekorrekterterm. Dem Dichtediffusionsterm ist keine physikalische Bedeutung beizumessen. Dieser Term dient der Stabilisierung des numerischen Verfahrens (vgl. Abschnitt 4.4.3). Über den Dichtekorrekterterm wird eine Korrektur der Fluidichte eines Partikels hinsichtlich der Abweichung der Partikeladvektion von den Stromlinien des Strömungsfelds eingeführt. Anhand der Herleitung der Erhaltungsgleichungen (vgl. Abschnitt 4.5) wurde dargelegt, dass beide Terme sowohl in der Kontinuitätsgleichung als auch in der Massenerhaltungsgleichung berücksichtigt werden.²⁰ Außerdem wurde in Abschnitt 4.5 gezeigt, dass aufgrund des Dichtediffusionsterms ein zusätzlicher Term in der Impulserhaltungsgleichung entsteht.²¹

²⁰Es handelt sich um den zweiten und den dritten Term der rechten Seite in Gl. 4.77 sowie den ersten und zweiten Term der rechten Seite in Gl. 4.79.

²¹Es handelt sich um den vierten Term der rechten Seite in Gl. 4.80.

Die Berücksichtigung der zuvor genannten Terme in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79) und in der Impulserhaltungsgleichung (Gl. 4.80) ist problematisch. Es wurde in den vorangegangenen Abschnitten bereits dargelegt, dass der Dichtekorrekturterm nicht konservativ ist und daher ein Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,dc}$ der Dichtekorrektur auftritt, der ungleich null ist. Auch auf Basis des Dichtediffusionsterms entsteht ein Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$, der ungleich null ist. Zwar ließen sich reziproke Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets bei der Berechnung des Dichtediffusionsterms realisieren. Jedoch sind die Absolutwerte der Massenströme, die sich aufgrund von Interaktionen zwischen Partikeln des Rechengebiets und Geisterpartikeln ergeben, an den verschiedenen Rändern nicht identisch. Bei dem vorliegenden Testfall wird dadurch ein Nettomassenstrom vom Einström- zum Ausströmrand hervorgerufen. Dieser Nettomassenstrom der Dichtediffusion wird durch konvektive Massenströme kompensiert. Dadurch ergeben sich an den verschiedenen Rändern auch im stationären Strömungszustand sowohl für die Partikel als auch für die Randsegmente unterschiedlich große Absolutwerte der konvektiven Massenströme. Im Hinblick auf eine Kopplung der SPH- und der FV-Methode ist dieser Sachverhalt problematisch, da zwischen einem SPH- und einem FV-Rechengebiet nur konvektive Massenströme transferiert werden. Über die Nettomassenströme aufgrund von Dichtekorrektur und Dichtediffusion würde somit ein Massenstromungleichgewicht für das globale Rechengebiet generiert werden. Darüber hinaus kann der Dichtediffusionsterm in der Impulserhaltungsgleichung nicht konservativ diskretisiert werden.

Um diese Unzulänglichkeiten zu umgehen, werden die genannten Terme in der Literatur oftmals vernachlässigt. Üblicherweise wird, wie z. B. in den Arbeiten von Lind et al. (2012) und Sun et al. (2019), auch bei der Anwendung eines Partikelverschiebungsansatzes die Annahme eines vernachlässigbaren konvektiven Massenaustauschs zwischen den Partikeln getroffen. Demnach wird der Dichtekorrekturterm zur Korrektur der Dichte in der Kontinuitätsgleichung allerdings nicht in der Massenerhaltungsgleichung angewendet. Dieser Ansatz wird in diesem Abschnitt bei der Simulation `sim_6a` verfolgt. Auch der Dichtediffusionsterm wird, wie z. B. in den Arbeiten von Ferrari et al. (2009) und Marrone et al. (2011), üblicherweise nur in der Kontinuitätsgleichung, nicht aber in der Massenerhaltungsgleichung berücksichtigt. Dieser Ansatz wird in diesem Abschnitt bei der Simulation `sim_6b` verfolgt. Durch die Vernachlässigung der zuvor genannten Terme in der Massenerhaltungsgleichung wirken diese implizit als Volumenänderungsterme, da sie weiterhin in der Kontinuitätsgleichung verwendet werden. Um den Einfluss des Dichtediffusionsterms in der Impulserhaltungsgleichung zu quantifizieren, wird dieser Term bei der Simulation `sim_6c` berücksichtigt. Bei der Referenzsimulation `sim_ref` wird dieser Term nicht berücksichtigt. In Tab. A.16 sind die genannten Simulationen zusammengefasst.

In Tab. A.17 sind die relativen Abweichungen der Strömungsgrößen von der analytischen Lösung sowie die Kenngrößen zur Bewertung der zeitlichen Fluktuationen der Strömungsgrößen zusammengefasst. Es sind für keine der Simulationen nennenswerte Unterschiede zu den Ergebnissen der Referenzsimulation erkennbar. Im Falle der Simulationen `sim_6a` und `sim_6b` liegt dies daran, dass durch die eingeführten Änderungen in der Massenerhaltungsgleichung lediglich die Partikelmasse beeinflusst wird. Die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen werden durch diese Änderungen nicht beeinflusst, sodass keine nennenswerten Änderungen bei der Fluid-dichte und der Fluidgeschwindigkeit zu verzeichnen sind. Auch für das dynamische Verhalten der

Tabelle A.16: Definition der Simulationen zur Untersuchung des Einflusses besonderer Aspekte der Erhaltungsgleichungen

Name	Beschreibung
sim_6a	Keine Berücksichtigung des Dichtekorrekturterms in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79). Der Dichtekorrekturterm wird weiterhin in der Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.77) angewendet und wirkt somit als Volumenänderungsterm.
sim_6b	Keine Berücksichtigung des Dichtediffusionsterms in der Massenerhaltungsgleichung (Gl. 4.79). Der Dichtediffusionsterm wird weiterhin in der Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.77) angewendet und wirkt somit als Volumenänderungsterm.
sim_6c	Berücksichtigung des Dichtediffusionsterms in der Impulserhaltungsgleichung (Gl. 4.80).

Strömungsgrößen, das in Abb. A.19, Abb. A.20 und Abb. A.21 dargestellt ist, sind keine signifikanten Änderungen festzustellen. Lediglich die Simulation `sim_6c` weist eine Veränderung des zeitlichen Verlaufs des zeitlichen Versatzes der Druckoszillationen am Eintrittsrand zu dem Ergebnis der FV-Simulation auf. Jedoch ist die zeitliche Rate des Versatzes nach einer unterschiedlichen Einlaufphase im Vergleich zu dem Ergebnis der Referenzsimulation betragsmäßig ähnlich.

Grundlegende Unterschiede zu der Referenzsimulation sind für die Kennzahlen der Massenbilanz zu konstatieren. In Tab. A.18 werden die Kennwerte der in diesem Abschnitt eingeführten Simulationen mit denen der Referenzsimulation verglichen. Bei der Simulation `sim_6a`, bei der der Dichtekorrekturterm in der Massenerhaltungsgleichung nicht berücksichtigt wird, sind alle die Dichtekorrektur betreffenden Massenströme gleich null. Folglich muss nur der Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,d}$ der Dichtediffusion durch den konvektiven Nettomassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Partikel kompensiert werden. Dadurch lässt sich im Vergleich zur Referenzsimulation eine deutlich verbesserte Übereinstimmung zwischen den konvektiven Nettomassenströmen $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ und $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente und der Partikel sowie folglich eine Reduzierung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$ verzeichnen. Das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ bleibt von der Änderung des SPH-Verfahrens bei der Simulation `sim_6a` unbeeinflusst, da dieses Ungleichgewicht hauptsächlich durch den Dichtediffusionsterm definiert wird.

Bei der Simulation `sim_6b`, bei der der Dichtediffusionsterm in der Massenerhaltungsgleichung nicht berücksichtigt wird, sind alle die Dichtediffusion betreffenden Massenströme gleich null. Da der Dichtediffusionsterm weiterhin in der Kontinuitätsgleichung angewendet wird, ist auch weiterhin eine Kompensation dieses Terms in der Kontinuitätsgleichung durch das Fluidgeschwindigkeitsfeld notwendig. Um die zuvor genannte Kompensation zu gewährleisten, bleibt das konvektive Massenstromungleichgewicht $\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$ der Randsegmente im Vergleich zur Referenzsimulation unverändert. Da der Dichtediffusionsterm nicht in der Massenerhaltungsgleichung angewendet wird, muss dieser Term nicht über den konvektiven Partikelmassenstrom $\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$ kompensiert werden. Daraus resultiert eine Vergrößerung des konvektiven Massenstromungleichgewichts $\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$ der Partikel und Randsegmente. Das globale Massenstromungleichgewicht $\Delta\dot{M}$ bleibt von der Änderung des SPH-Verfahrens bei der Simulation `sim_6b` unbeeinflusst. Bei der Simulation `sim_6c`, bei der der Dichtediffusionsterm im Gegensatz zur

Referenzsimulation in der Impulserhaltungsgleichung berücksichtigt wird, ist eine Vergrößerung des Nettopartikelmassenstroms $\dot{M}_p$ festzustellen.

Basierend auf der in diesem Abschnitt geführten Diskussion können die folgenden Schlussfolgerungen gezogen werden. Durch die Vernachlässigung des Dichtekorrekturterms in der Massenerhaltungsgleichung wird die Übereinstimmung zwischen den konvektiven Massenströmen der Partikel und Randsegmente im Vergleich zur Referenzsimulation verbessert. Da im Zusammenhang mit einem Embedded-SPH-Verfahren eine möglichst gute Übereinstimmung der konvektiven Massenströme vorteilhaft ist, wird dieser Ansatz nachfolgend angewendet. Die Vernachlässigung des Dichtediffusionsterms in der Massenerhaltungsgleichung führt hingegen zu einer Verschlechterung der Übereinstimmung zwischen den genannten konvektiven Massenströmen. Daher wird dieser Ansatz nicht weiterverfolgt. Darüber hinaus führt die Anwendung des Dichtediffusionsterms in der Impulsgleichung zu einer Vergrößerung des Nettopartikelmassenstroms. Folglich wird auch dieser Ansatz nicht weiter berücksichtigt.

Tabelle A.17: Kennwerte für die Genauigkeit und die Fluktuationen der Strömungsgrößen als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_6a`, `sim_6b` und `sim_6c`

Typ		Größe		Wert			
				sim_ref	sim_6a	sim_6b	sim_6c
p_+	$\mathbf{err}_i$	l	$\mathbf{err}_l(p_+)$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$9,33 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(p_+)$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$5,59 \cdot 10^{-3}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	l	$\mathbf{err}_{t,l}(p_+)$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$7,27 \cdot 10^{-5}$	$7,14 \cdot 10^{-5}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(p_+)$	$9,29 \cdot 10^{-6}$	$9,28 \cdot 10^{-6}$	$9,33 \cdot 10^{-6}$	$9,45 \cdot 10^{-6}$
u_+	$\mathbf{err}_i$	r	$\mathbf{err}_r(u_+)$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,57 \cdot 10^{-3}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{\mathcal{D}}(u_+)$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$7,10 \cdot 10^{-4}$	$7,11 \cdot 10^{-4}$
	$\mathbf{err}_{t,i}$	r	$\mathbf{err}_{t,r}(u_+)$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,68 \cdot 10^{-4}$	$4,54 \cdot 10^{-4}$
		$\mathcal{D}$	$\mathbf{err}_{t,\mathcal{D}}(u_+)$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$8,72 \cdot 10^{-5}$	$8,76 \cdot 10^{-5}$	$8,84 \cdot 10^{-5}$

Tabelle A.18: Kennwerte für die Massenbilanz als Ergebnis der Simulationen `sim_ref`, `sim_6a`, `sim_6b` und `sim_6c`

Typ	Größe		Wert			
			sim_ref	sim_6a	sim_6b	sim_6c
Global						
alle	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{\partial\Omega}$	$-1,24 \cdot 10^{-2}$	$1,89 \cdot 10^{-4}$	$-1,25 \cdot 10^{-2}$	$-1,30 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\Delta\dot{M}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,89 \cdot 10^{-4}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,89 \cdot 10^{-4}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\Delta\dot{M}_{c,\partial\Omega}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$3,41 \cdot 10^{-6}$	$2,23 \cdot 10^{-4}$	$2,91 \cdot 10^{-5}$
Partikel						
alle	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,\partial\Omega}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$9,01 \cdot 10^{-7}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,32 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	$-8,90 \cdot 10^{-7}$	$-1,27 \cdot 10^{-2}$	$-1,32 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_p$	$-2,82 \cdot 10^{-8}$	$1,07 \cdot 10^{-8}$	$-2,38 \cdot 10^{-8}$	$1,86 \cdot 10^{-6}$
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,c,\partial\Omega}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,86 \cdot 10^{-4}$	$-3,35 \cdot 10^{-5}$	$1,62 \cdot 10^{-4}$
Dichte- diffusion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,d,\partial\Omega}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	$-1,85 \cdot 10^{-4}$	0,00	$-1,86 \cdot 10^{-4}$
	Ω	$\dot{M}_{p,d,\Omega}$	$-8,95 \cdot 10^{-7}$	$-8,90 \cdot 10^{-7}$	0,00	$-9,25 \cdot 10^{-7}$
	alle	$\dot{M}_{p,d}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	$-1,86 \cdot 10^{-4}$	0,00	$-1,87 \cdot 10^{-4}$
Dichte- korrektur	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{p,dc,\partial\Omega}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	0,00	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,32 \cdot 10^{-2}$
	Ω	$\dot{M}_{p,dc,\Omega}$	$-1,26 \cdot 10^{-2}$	0,00	$-1,27 \cdot 10^{-2}$	$-1,32 \cdot 10^{-2}$
	alle	$\dot{M}_{p,dc}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	0,00	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$2,71 \cdot 10^{-5}$
Randsegmente						
Konvektion	$\partial\Omega$	$\dot{M}_{s,c,\partial\Omega}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$	$1,91 \cdot 10^{-4}$

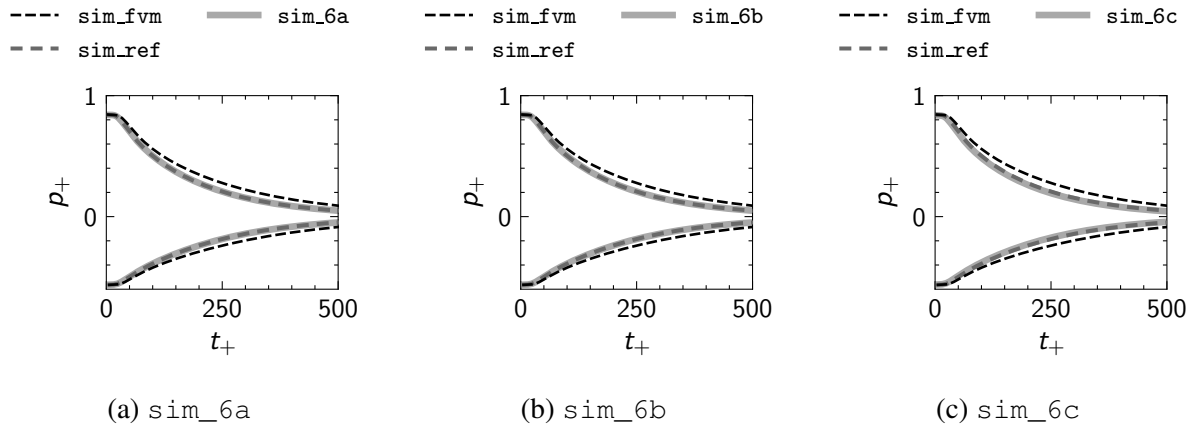


Abbildung A.19: Zeitliches Abklingverhalten der Druckmaxima als Ergebnis der Simulationen sim_6a, sim_6b und sim_6c

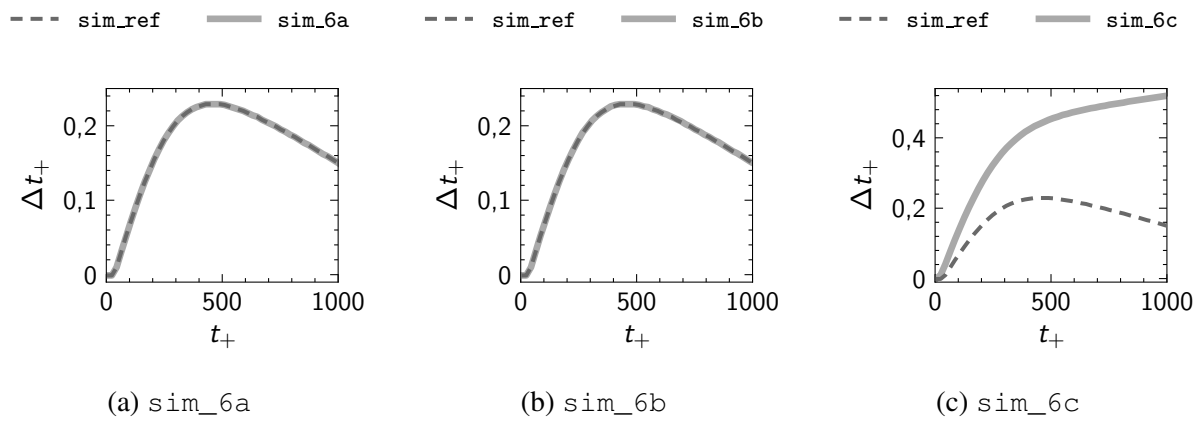


Abbildung A.20: Zeitlicher Versatz des Drucksignals als Ergebnis der Simulationen sim_6a, sim_6b und sim_6c

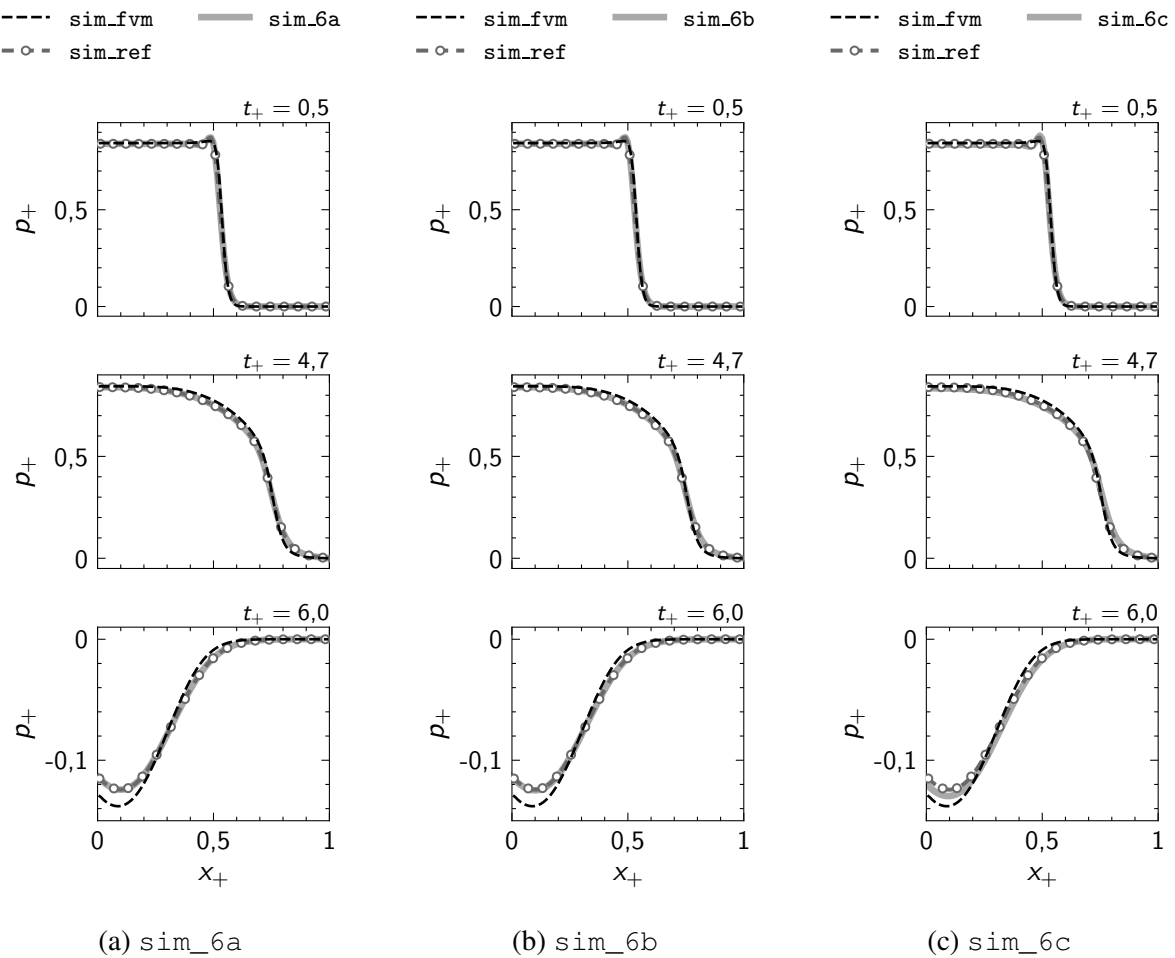


Abbildung A.21: Räumliche Verläufe des Drucks zu verschiedenen Zeitpunkten als Ergebnis der Simulationen `sim_6a`, `sim_6b` und `sim_6c`

A.6 Anwendung nichtreflektierender Randbedingungen

Bei technisch relevanten Simulationen wird häufig ein homogenes Strömungsfeld eines ruhenden Fluids als Anfangsbedingung des Rechengebiets aufgebracht. Bei den eindimensionalen Testfällen in Kapitel 6 wurde dieser Ansatz ebenfalls gewählt. Durch die Aufprägung von Randbedingungen, die von den Werten der Strömungsvariablen dieses Anfangszustands abweichen, werden Stoßwellen an diesen Rändern generiert. In den meisten Fällen sind offene Ränder an Orten definiert, an denen diese akustischen Wellen das Rechengebiet verlassen. Allerdings wird durch die Aufprägung von Dirichlet-Randbedingungen an den offenen Rändern eine vollständige Reflexion der akustischen Wellen bewirkt. Dadurch werden akustische Wellen mehrfach zwischen den offenen Rändern advektiert, bis sie schließlich durch physikalische und numerische Dissipation vollständig abgeklungen sind. Wie an dem Testfall B in Abschnitt 6.1.2 dargelegt wurde, kann dieser Vorgang einen enormen physikalischen Zeitraum umfassen (vgl. Abb. 6.6). Bei technisch relevanten Simulationen wird durch diesen Einschwingvorgang des Strömungsfelds ein signifikanter Rechenaufwand generiert. Der Einschwingvorgang

ist allerdings in den meisten Fällen irrelevant für die Auswertung der Simulationen. Daher ist der genannte Rechenaufwand meist unnötig. Durch die Anwendung einer nichtreflektierenden Randbedingung am Austritt des Rechengebiets können akustische Wellen am Austrittsrand gedämpft werden. Dadurch kann der Rechenaufwand signifikant reduziert werden. Durch den in Abschnitt 5.2 eingeführten und in dieser Arbeit auf die SPH-Methode angewendeten Navier-Stokes-Characteristic-Boundary-Conditions(NSCBC)-Ansatz (Poinsot und Lele, 1992) können nichtreflektierende Randbedingungen in der SPH-Methode appliziert werden. In diesem Kapitel wird die Dämpfung der akustischen Wellen durch die Anwendung einer nichtreflektierenden Randbedingung am Austrittsrand des Rechengebiets anhand des Beispiels des Testfalls B (vgl. Abschnitt 6.1.2) untersucht. Die Ergebnisse dieses Kapitels wurden erstmalig in der Veröffentlichung von Werdelmann et al. (2021) gezeigt.

In Abschnitt 5.2.4 wurden verschiedene Arten von Randbedingungen im Kontext des NSCBC-Ansatzes erläutert. Diese unterscheiden sich hauptsächlich durch die Definition der Wellenamplitudenvariation $\mathcal{L}_1$. Die Wellenamplitudenvariation $\mathcal{L}_2$ hingegen wird stets über Informationen des inneren Rechengebiets bestimmt (vgl. Gl. 5.9). Im Falle eines reflektierenden Rands wird entweder eine Dirichlet-Randbedingung für den Fluiddruck oder für die Fluidgeschwindigkeit vorgegeben, sodass entweder über Gl. 5.5 oder über Gl. 5.6 eine Beziehung zwischen den Wellenamplitudenvariationen $\mathcal{L}_1$ und $\mathcal{L}_2$ hergestellt werden kann. Diese Art der Randbedingung wurde in Kapitel 6 angewendet.

Für den Fall eines nichtreflektierenden Rands ist das Randsegment nur für Wellen oberhalb einer Grenzfrequenz f_c permeabel. Eine hierfür geeignete Formulierung der Komponente $\mathcal{L}_1$ wird von Selle et al. (2004) vorgeschlagen:

$$\mathcal{L}_1 = K (p - p_\infty) \quad \text{mit} \quad K = \sigma \left(1 - \text{Ma}^2\right) \frac{c}{L} \quad (\text{A.54})$$

In Gl. A.54 ist L eine charakteristische Länge des Rechengebiets, Ma eine charakteristische Machzahl und σ ein Regelparаметer. Durch Gl. A.54 wird eine Relaxation des Drucks erreicht. Der Druck wird nicht als Dirichlet-Randbedingung vorgegeben. Stattdessen wird die Komponente $\mathcal{L}_1$ mit der Differenz aus dem Fluiddruck und dem Zielwert p_∞ des Drucks skaliert. Dies verhindert bei geeigneter Wahl des Regelparameters σ , dass der Rand vollständig reflektierend ist und dass der Druck signifikant von dem Zielwert p_∞ abweicht. Selle et al. (2004) zeigen außerdem, dass sich der komplexe Reflexionskoeffizient R unter Anwendung der Definition der Variation der Wellenamplitude $\mathcal{L}_1$ gemäß Gl. A.54 wie folgt ausdrücken lässt:

$$R = -\frac{1}{1 - i\frac{2\omega}{K}} \quad \text{mit} \quad \omega = 2\pi f \quad (\text{A.55})$$

In Gl. A.55 ist ω die Kreisfrequenz und f die Frequenz. Über den Betrag des komplexen Reflexionskoeffizienten R lässt sich zeigen, dass Wellen mit einer Frequenz oberhalb einer Grenzfrequenz $f_c = K/4\pi$ nur unwesentlich am Randsegment reflektiert werden (Selle et al., 2004). Durch Einsetzen der Definition der Variablen K (vgl. Gl. A.54) in die Definition dieser Grenzfrequenz f_c lässt sich ein Maximalwert für den Regelparаметer σ definieren, unterhalb dessen keine Wellen mit einer Frequenz größer der Grenzfrequenz f_c signifikant am Randseg-

ment reflektiert werden:

$$\sigma = \frac{4\pi f_c L}{(1 - \text{Ma}^2) c} \quad (\text{A.56})$$

Wird die Grenzfrequenz f_c als die minimale im Rechengebiet vorhandene Frequenz f_0 definiert, werden alle akustischen Wellen im Rechengebiet signifikant gedämpft. Für die Konfiguration des Testfalls B in Kapitel 6 ist die minimale Frequenz f_0 nach Selle et al. (2004) wie folgt definiert:

$$f_0 = \left(1 - \text{Ma}^2\right) \frac{c}{4L}$$

Die Größe L entspricht der Länge des eindimensionalen Rechengebiets des Testfalls B. Durch Gleichsetzen der Grenzfrequenz f_c mit der minimalen Frequenz f_0 ergibt sich für den Regelparame-ter σ gemäß Gl. A.56 ein Wert von $\sigma = \pi$. Diese Definition garantiert eine ausreichende Reflexion des Rands, um eine Drift des Drucks p von dem Zielwert p_∞ des Fluiddrucks am Austrittsrand zu vermeiden (Selle et al., 2004). Für die beim Testfall B in Kapitel 6 angewendete Kombination von Randbedingungen definieren Selle et al. (2004) ein Optimum des Regelpa-rameters σ von $\sigma = 0,58$, bei dem die Abklingzeit der Oszillationen der Strömungsgrößen minimiert wird, ohne eine Drift des Drucks am Auslassrand zu generieren. Die in Abschnitt 6.3 bereits diskutierte Simulation `sim_mod` entspricht dem Fall mit einem vollständig reflek-tierenden Austrittsrand. Der Modellparameter σ nimmt in diesem Fall einen unendlich großen Wert an ($\sigma = \infty$). Mit der sonst zu der Simulation `sim_mod` identischen Konfiguration wer-den in diesem Abschnitt zwei weitere Simulationen des Testfalls B eingeführt, bei denen eine nichtreflektierende Randbedingung am Austrittsrand definiert wird und der Regelparame-ter σ die zuvor diskutierten Werte von $\sigma = \pi$ bzw. $\sigma = 0,58$ annimmt.

In Abb. A.22a bzw. Abb. A.22b ist der normierte zeitliche Verlauf des Fluiddrucks $p_{l,+}$ am linken Rand l bzw. der Fluidgeschwindigkeit $u_{r,+}$ am rechten Rand r für die drei verschiedenen Werte des Regelparameters σ dargestellt. Es ist festzustellen, dass die Oszillationen beider

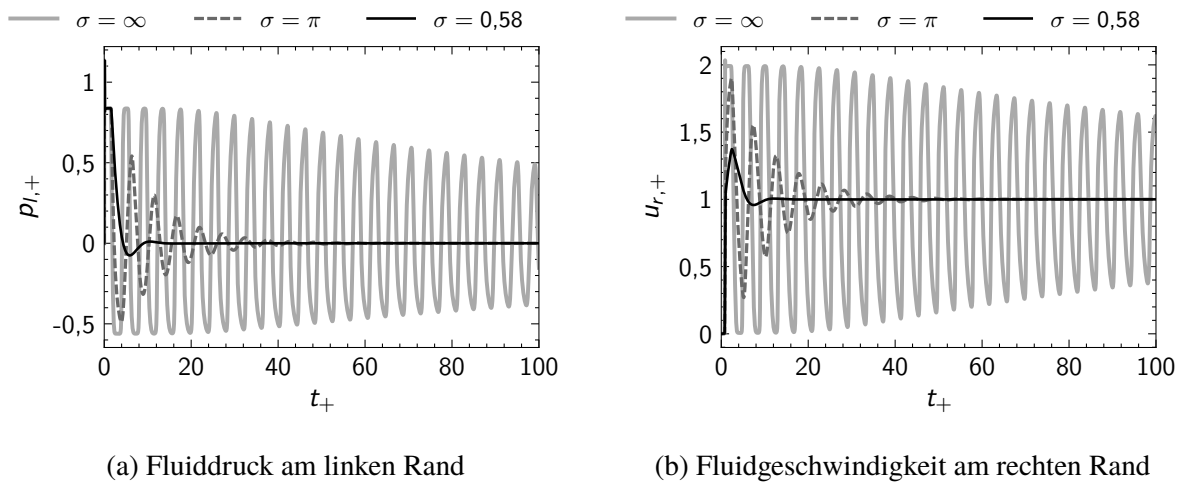


Abbildung A.22: Zeitlicher Verlauf der normierten Strömungsgrößen an den offenen Rändern für verschiedene Werte des Regelparameters σ . In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

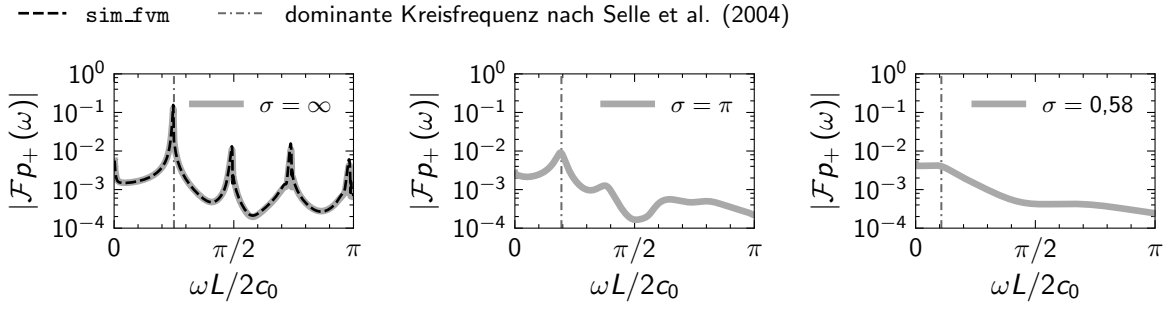


Abbildung A.23: Frequenzspektrum des normierten Fluiddrucks am Eintrittsrand für verschiedene Werte des Regelparameters σ . In Anlehnung an Werdelmann et al. (2021)

Strömungsgrößen bereits bei einem Wert des Regelparameters von $\sigma = \pi$ signifikant gedämpft werden. Nach etwa 10 Perioden sind keine Oszillationen mehr erkennbar. Durch eine weitere Reduzierung des Regelparameters auf einen Wert von $\sigma = 0,58$ ist nur noch eine Periode zu verzeichnen. Dies deutet darauf hin, dass dieser Wert des Regelparameters σ ein Optimum darstellt. Darüber hinaus weist keine der beiden Strömungsgrößen eine Drift vom Zielwert auf.

In Abb. A.23 sind die Beträge der Fourier-Transformierten $|\mathcal{F} p_+(\omega)|$ des zeitlichen Drucksignals am Eintrittsrand als Frequenzspektren über einem normierten Ausdruck der Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$ von links nach rechts für die Regelparameter $\sigma = \infty$, $\sigma = \pi$ und $\sigma = 0,58$ dargestellt. Für die Berechnung der Fourier-Transformierten wurde das Signal des Fluiddrucks zwischen den dimensionslosen Zeiten $t_+ = 0$ und $t_+ = 1000$ verwendet. Für den Fall reflektierender Randbedingungen ($\sigma = \infty$) ist neben dem Frequenzspektrum der Simulation `sim_mod` auch das der Simulation `sim_fvm` mit dem FV-Verfahren (vgl. Kapitel 6) dargestellt. Es ist zu konstatieren, dass die beiden Spektren eine sehr gute Übereinstimmung aufweisen. Bei einer Reduzierung des Regelparameters σ können die Amplituden der dominanten Frequenzen erheblich verringert werden. Bei einem Regelparameter von $\sigma = 0,58$ sind die dominanten Frequenzen nicht mehr erkennbar. Um die Genauigkeit des Verfahrens zur Aufprägung nichtreflektierender Randbedingungen zu bewerten, wird die dominante Frequenz der Frequenzspektren in Abb. A.23 mit der analytischen Lösung der Eigenfrequenz nach Selle et al. (2004) verglichen. Die komplexen Eigenfrequenzen des betrachteten Testfalls können mittels der folgenden Gleichung bestimmt werden (Selle et al., 2004):

$$e^{i\omega \frac{2L}{c}} + \left(1 - i \frac{2\omega}{K}\right) = 0 \quad (\text{A.57})$$

Die Lösung für die erste Eigenfrequenz gemäß Gl. A.57 ist in Abb. A.23 für die verschiedenen Regelparameter σ als vertikale Strichpunktlinie dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die erste Eigenfrequenz sehr gut mit der dominanten Frequenz des simulativ generierten Frequenzspektrums übereinstimmt.

Im Zuge dieser Arbeit wurden nichtreflektierende Randbedingungen auf Basis des NSCBC-Ansatzes in das vorliegende Verfahren für offene Randbedingungen eingeführt. Es konnte in diesem Abschnitt gezeigt werden, dass die Simulationsergebnisse unter Anwendung dieser Randbedingungen mit der Theorie nach Selle et al. (2004) übereinstimmen. Über die Verwen-

dung der nichtreflektierenden Randbedingungen lässt sich die Rechenzeit bis zum Erreichen eines eingeschwungenen Zustands des Strömungsfelds gegenüber dem Fall mit reflektierenden Randbedingungen ($\sigma = \infty$) signifikant verkürzen.

Lebenslauf

Persönliches

Name	Bastian Werdelmann
Geburtsdatum	17. April 1985
Geburtsort	Herne

Schul- und Berufsausbildung

2005–2007	Ausbildung zum Technischen Zeichner bei der Siemens AG, Mülheim an der Ruhr Fachrichtung: Maschinen- und Anlagentechnik Abschluss: Technischer Zeichner
1995–2004	Pestalozzi-Gymnasium, Herne Abschluss: Abitur
1991–1995	Katholische Grundschule an der Bergstraße, Herne

Studium

2009–2011	Duales Studium der Energiesystemtechnik an der Westfälischen Hochschule (ehem. FH Gelsenkirchen), Gelsenkirchen Abschluss: Master of Engineering
2005–2009	Duales Studium des Maschinenbaus an der Westfälischen Hochschule (ehem. FH Gelsenkirchen), Gelsenkirchen Abschluss: Bachelor of Engineering

Beruflicher Werdegang

Seit 2015	Entwicklungsingenieur für Verbrennungstechnologien bei der Siemens Energy Global GmbH & Co. KG, Mülheim an der Ruhr
2011–2015	Doktorand unter Betreuung der Siemens AG, Mülheim an der Ruhr und des Instituts für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT), Karlsruhe
2005–2011	Dualer Student bei der Siemens AG, Mülheim an der Ruhr
2010	Wissenschaftliche Hilfskraft im Fachbereich Elektrotechnik der Westfälischen Hochschule (ehemals FH Gelsenkirchen), Gelsenkirchen

Praktika und Zivildienst

2008	Siemens Energy, Inc., Orlando
2004–2005	Zivildienstleistender im Willi-Pohlmann-Seniorenzentrum, Herne

Beim Einsatz flüssigen Kraftstoffs in Gasturbinen sind der Verbrennung komplexe zweiphasige Strömungsprozesse vorgelagert. Hier ist insbesondere die Primärzerstäubung des Kraftstoffs zu nennen. Mit der Smoothed-Particle-Hydrodynamics (SPH)-Methode kann die Primärzerstäubung detailliert simuliert werden. Dieser Ansatz ist aufgrund seines hohen Berechnungsaufwands zurzeit jedoch auf kleine räumliche Bereiche begrenzt, wodurch die Kopplung mit den umgebenden Strömungsprozessen, die ohnehin effizienter und genauer mit der Finite-Volumen (FV)-Methode zu berechnen sind, eingeschränkt ist. Es ist daher erstrebenswert, detaillierte SPH-basierte Zerstäubungssimulationen in FV-Simulationen der umgebenden Strömung einzubetten.

Dieser Forschungsbericht befasst sich mit der Entwicklung eines solchen hybriden Ansatzes zur direkten Kopplung von SPH- und FV-Rechengebieten. Der Ansatz wird hinsichtlich grundlegender numerischer Aspekte, wie der Massenerhaltung, sorgfältig beleuchtet und optimiert. Die Aufprägung von Rand- und Kopplungsbedingungen wird vereinheitlicht, wobei auch weitere Verbesserungen für Randbedingungen eingeführt werden. Durch geeignete Testfälle wird die Anwendbarkeit der Kopplungsschnittstelle auf brennkammertypische Strömungseigenschaften, wie Rezirkulation und signifikante Instationarität, demonstriert. Hierdurch werden somit wichtige Voraussetzungen zur Weiterentwicklung des Verfahrens für turbulente und mehrphasige Strömungen sowie technische Geometrien geschaffen.

Logos Verlag Berlin

ISBN 978-3-8325-5689-1

ISSN 1615-4983