

Masterarbeit:
**Implementierung und Validierung einer neuen Flussberechnung
zur Verringerung des numerischen Schlupfs in einem VOF-Code**

Die Benetzung von Festkörpern spielt eine wesentliche Rolle in verschiedene Anwendungen, wie beispielsweise bei der Lackierung oder der Mehrphasenströmung in porösen Medien (CO₂-Speicherung). Hierbei verdrängt eine fluide Phase (z.B. Wasser) eine andere fluide, nicht mischbare Phase (z.B. Luft), was zu einer Bewegung der Kontaktlinie führt. Das Phänomen der bewegten Kontaktlinie ist bisher nicht vollständig verstanden und stellt noch immer eine Herausforderung für numerische Simulationen dar. Ein Problem besteht darin, dass auch für Direkte Numerische Simulationen (DNS) mit Haftbedingung die Diskretisierung einen numerischen Schlupf erzeugt, der gitterabhängig ist und damit nicht konvergiert [1]. Daher bleibt die bewegte Kontaktlinie Gegenstand aktueller Forschung.

In einer vorangegangenen Arbeit [2] wurde eine neue Flussberechnung des Volumenanteils entwickelt, die für die Kontaktwinkelhysterese erforderlich ist. Die neue Flussberechnung (Abbildung 1), in modifizierter Form, hat das Potenzial den numerischen Schlupf zu reduzieren. Eine Flussberechnung, die auf einer ähnlichen Idee basiert, wurde in [3] vorgestellt und positiv bewertet, jedoch nicht weiter untersucht.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, das Potenzial der neuen Flussberechnung zur Verringerung des numerischen Schlupfs zu untersuchen und somit einen Beitrag zur aktuellen Forschung zu leisten. Hierzu soll die neue Flussberechnung in den hauseigenen Mehrphasencode FS3D (Free Surface 3D) des ITLR implementiert werden. Dieser Code wird für die Direkte Numerische Simulation der Interaktion verschiedener fester und fluider Phasen verwendet. Anschließend soll der Einfluss auf den numerischen Schlupf überprüft werden.

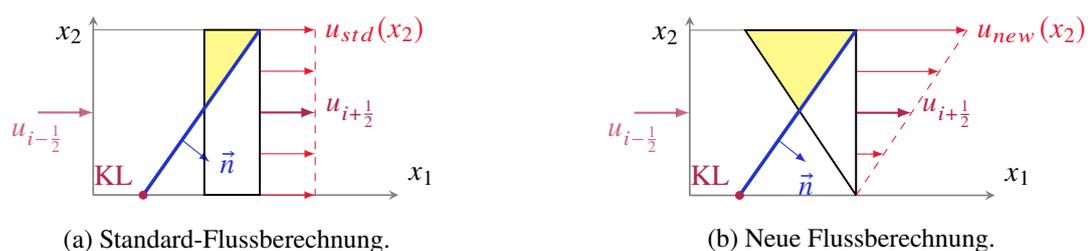


Abbildung 1: Vergleich der Flussberechnungen in einer exemplarischen Zelle. KL ist die Kontaktlinie, die PLIC-Flächen sind in Blau dargestellt, die Geschwindigkeit in Rot, der advectierte Volumenanteil in Gelb. Der Fluss auf der linken Seite der Zelle, in die Zelle hinein (mit $u_{i-\frac{1}{2}}$), ist in beiden Fällen gleich. Bei der neuen Flussberechnung ist der Fluss auf der rechten Seite der Zelle, aus der Zelle heraus (mit $u_{i+\frac{1}{2}}$), jedoch größer. Damit füllt sich die Zelle langsamer und die Kontaktlinie bewegt sich langsamer. Damit ist der numerische Schlupf kleiner.

Arbeitsschritte:

1. Einarbeitung in die Literatur zum numerischen Schlupf
2. Entwurf und Implementierung (Fortran) eines Modells für die neue Flussberechnung
3. Simulation verschiedener Testfälle (Gitterabhängigkeitsstudie) mit Standard- und neuer Flussberechnung
4. Auswertung und Einordnung der Ergebnisse (gegebenenfalls erneute Durchführung von Schritt 3)
5. Schriftliche Ausarbeitung und Präsentation der Ergebnisse in einem Vortrag

Anforderungen:

- Interesse am Programmieren
- Grundlagen in numerischer Strömungssimulation
- Eigenständiges Arbeiten

Betreuung:

- David Gösele, M. Sc. (david.goesele@itlr.uni-stuttgart.de)
- Dr. Mathis Fricke (Mathematical Modeling and Analysis TU Darmstadt)
- Dr.-Ing. Kathrin Schulte

Literatur

- [1] D. Gründing, M. Smuda, T. Anritter u. a., „A comparative study of transient capillary rise using direct numerical simulations,“ *Applied Mathematical Modelling*, Jg. 86, S. 142–165, Okt. 2020. DOI: 10.1016/j.apm.2020.04.020.
- [2] D. Gösele, „Implementierung und Validierung eines Modells zur Beschreibung der Kontaktwinkelhysterese,“ de, 2023. DOI: 10.5281/ZENODO.10069555.
- [3] S. Afkhami, J. Buongiorno, A. Guion u. a., „Transition in a numerical model of contact line dynamics and forced dewetting,“ *Journal of Computational Physics*, Jg. 374, S. 1061–1093, Dez. 2018. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.06.078.
- [4] S. Afkhami, S. Zaleski und M. Bussmann, „A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations,“ *Journal of Computational Physics*, Jg. 228, Nr. 15, S. 5370–5389, Aug. 2009. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.04.027.