

Physik der Wasserflasche:  
Numerische Lösung der Navier-Stokes  
Gleichungen in einem frei rotierenden Zylinder

Marcel Schmittfull

24. Januar 2005\*

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Problembeschreibung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen der Fluidodynamik</b>	<b>2</b>
2.1	Navier-Stokes Gleichungen . . . . .	2
2.2	Zylinderkoordinaten . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Numerische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen in einem frei rotierenden Zylinder</b>	<b>4</b>
3.1	Numerische Lösungsverfahren . . . . .	4
3.2	Finite Differenzen Methode (FDM) . . . . .	5
3.2.1	Gebietsdiskretisierung, versetzte Gitter . . . . .	5
3.2.2	Diskretisierung für das Geschwindigkeitsfeld . . . . .	5
3.2.3	Nachregelung des Druckfelds . . . . .	7
3.2.4	Randbedingungen . . . . .	8
3.2.5	Anfangsbedingungen . . . . .	11
3.2.6	Freies Randwertproblem bei teilweise gefülltem Zylinder . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Implementierung und Visualisierung</b>	<b>12</b>
4.1	Algorithmus . . . . .	12
4.2	Implementierung . . . . .	13
4.3	Visualisierung . . . . .	13
4.4	Beispiel zur Prüfung der Funktionsweise . . . . .	13
<b>5</b>	<b>Danksagung</b>	<b>15</b>

---

\*Die aktuellste Version befindet sich auf <http://japtik.sf.net/flasche/fl.pdf>.

# 1 Einleitung und Problembeschreibung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, das System einer mit einem Fluid, z.B. Wasser, gefüllten Flasche zu untersuchen, wobei die Flasche „quer“ auf einer horizontalen Unterlage frei beweglich liegen soll, d.h. die Flasche kann um ihre Symmetrie- bzw. Längsachse rotieren. Die Rotationsachse selbst kann zudem noch eine Translationsbewegung entlang der horizontalen Unterlage vollziehen. Diese Beschreibung trifft beispielsweise auf eine mit Wasser gefüllte Wasserflasche zu, die auf einem Tisch liegt. Die Wechselwirkung zwischen Fluid und Flasche soll nun durch einen in horizontaler Richtung senkrecht zur Rotationsachse der Flasche gerichteten Stoß untersucht werden. In vielen Unterrichtsstunden entstandene Beobachtungen einer mit Wasser gefüllten rollenden Flasche legen die Vermutung nahe, dass die Flasche je nach Anteil des Fluidvolumens am Innenvolumen der Flasche eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Oszillationsbewegung vollzieht, d.h. die Flasche bewegt sich zunächst in die durch den Anfangsstoß vorgegebene Richtung, wird dann langsamer und kehrt schließlich auf Grund der Wasserbewegung im Innern der Flasche in die entgegengesetzte Richtung um, bis sie sich wieder verlangsamt und wieder in die ursprüngliche Richtung rollt usw.

Diese Beobachtung soll im Folgenden durch die numerische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen (NSG) bestätigt werden. Da die für den Einfluss auf die Bewegung des Zylinders entscheidende Strukturbildung des Fluids hauptsächlich in der  $(r, \varphi)$  Querschnittsebene des Zylinders, d.h. in der Querschnittsebene senkrecht zur Rotationsachse stattfindet, wenn der Anfangszustand unabhängig von  $z$  gewählt und die Flasche idealisierend als Zylinder modelliert wird, wird an Stelle der gesamten lediglich ein Kreis-Querschnitt der Flasche betrachtet. Die NSG müssen demnach nur im zweidimensionalen Fall gelöst werden. Desweiteren soll das Fluid stets als *inkompressibel* angenommen werden, d.h. die Dichte des Fluids ist zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort konstant. Wegen der entscheidenden Bedeutung der Randbedingungen für das zu untersuchende Problem werden die NSG in Zylinderkoordinaten betrachtet, um Schwierigkeiten bei der Randbeschreibung in kartesischen Koordinaten zu vermeiden.

Als die für dieses Problem zweckmäßigste numerische Lösungsmethode der NSG wird die Finite-Differenzen-Methode (FDM) verwendet, in der die NSG in Zylinderkoordinaten diskretisiert und die Ableitungen durch Differenzenformeln angenähert werden. Der Druck wird dabei durch ein iteratives Relaxationsverfahren nachgeregelt. Die Anfangsbedingungen unmittelbar nach dem Anfangsstoß lassen sich durch gleiche Anfangsgeschwindigkeiten im gesamten Fluid beschreiben. Die Randbedingungen der Fluidrandschicht wird als Haftbedingung (no-slip) angenommen. Der Einfluss des Fluids auf die Zylinderbewegung wird so genau als möglich untersucht und durch eine teilweise Übertragung von Drehmoment bzw. Translationsbeschleunigung auf den Zylinder beschrieben. Die sich dadurch ändernde Zylinderrotation und Translation der Zylinderrotationsachse führen zu einer Bewegung, d.h. einem Rollen des Zylinders. Zu einer Oszillationsbewegung kommt es dabei jedoch nur, wenn nicht der gesamte Zylinderinnenraum, sondern nur ein bestimmter Anteil mit dem Fluid gefüllt ist. D.h. es entsteht eine freie Oberfläche zwischen Fluid und Luft innerhalb des Zylinders, die durch ein Partikel-Markierungs-Verfahren oder eine Höhenfunktion der Oberflächengrenze gehandhabt werden kann. Unter Einbeziehung aller dieser Punkte soll nun im Programm gezeigt werden, dass die Flasche tatsächlich eine Oszillationsbewegung vollzieht.

## 2 Physikalische Grundlagen der Fluidodynamik

### 2.1 Navier-Stokes Gleichungen

Die Navier-Stokes Gleichungen (NSG) sind zwei Differentialgleichungen, die das Geschwindigkeitsfeld  $\vec{u}(x, y)$  und das Druckfeld  $p(x, y)$  in einem Fluid beschreiben. Es soll im Folgenden nur ein kurzer Einblick in die Herleitung der NSG gegeben werden, für Details sei auf Lehrbücher der Strömungsmechanik und Fluidodynamik verwiesen, beispielsweise [2], [3] oder [12].

Betrachtet man ein Volumenelement  $dV$  eines Fluids, so muss zu jedem Zeitpunkt die Masse des in das Volumenelement hinein fließenden Fluids gleich der Masse des aus dem Volumenelement herausfließenden Fluids sein, d.h. die zeitliche Ableitung der Masse in  $dV$  muss  $\frac{\partial m}{\partial t} = \partial_t m = 0$  sein. Mit Hilfe des Transporttheorems<sup>1</sup> kann aus dieser Bedingung die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1)$$

abgeleitet werden, wobei  $\rho$  für die Dichte des Fluids und  $\nabla$  für den Nabla-Operator  $\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$  steht. Nimmt man die Dichte als konstant bzw. das Fluid als *inkompressibel* an, so vereinfacht sich (2.1) zur Kontinuitätsgleichung für inkompressible Fluide

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.2)$$

Neben der Massenerhaltung gilt für ein Fluid auch die Impulserhaltung  $\partial_t m \vec{u} = 0$ , die dazu führt, dass die an dem Fluid angreifenden Kräfte sich gegenseitig aufheben müssen. Mögliche wirkende Kräfte können dabei z.B. sein:

- Oberflächenkräfte, z.B. Druck oder innere Reibung
- Volumenkräfte, z.B. Corioliskraft, Gravitationskraft oder magnetische Kraft.

Aus der Impulserhaltung lässt sich mit dem Transporttheorem und dem Gaußschen Integralsatz (vgl. z.B. [1]) die Differentialgleichung

$$\partial_t(\rho \vec{u}) + (\vec{u} \cdot \operatorname{grad})(\rho \vec{u}) + (\rho \vec{u}) \nabla \cdot \vec{u} + \nabla p = (\mu + \lambda) \nabla(\nabla \cdot \vec{u}) + \mu \Delta \vec{u} + \rho \vec{g}. \quad (2.3)$$

herleiten, vgl. [2] und [3]. Für inkompressible Fluide  $\rho_0 = \text{const}$ , wie sie im Folgenden betrachtet werden, vereinfacht sich (2.3) zu

$$\partial_t \vec{u} = \frac{\mu}{\rho_0} \Delta \vec{u} - (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \vec{g}, \quad (2.4)$$

wobei  $\Delta = \nabla^2 = (\partial_x^2 + \partial_y^2)$  der Laplace-Operator ist und

$$(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = (u_x \partial_x + u_y \partial_y) \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x \partial_x u_x + u_y \partial_y u_x \\ u_x \partial_x u_y + u_y \partial_y u_y \end{pmatrix}$$

gilt. In (2.3) und (2.4) kommen die Materialkonstanten  $\mu$ , die für die dynamische Viskosität, d.h. Zähigkeit des Fluids steht, und  $\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$ , die sog. kinematische Viskosität vor.

<sup>1</sup>Vgl. [1], [3] und [http://www.eng.fsu.edu/~dommelen/courses/flm/reyn\\_tran/](http://www.eng.fsu.edu/~dommelen/courses/flm/reyn_tran/).

Bei der späteren numerischen Behandlung der NSG ist es wünschenswert die vorkommenden Größen dimensionslos darzustellen. Hierzu wird eine *Entdimensionalisierung* nach einer für das Problem charakteristischen Länge  $d$  und Geschwindigkeit  $U$  durchgeführt. Die Entdimensionalisierung selbst wird dabei in der Literatur oft unterschiedlich angegeben.<sup>2</sup> Für numerische Zwecke ist nach [5] v.a. folgende Entdimensionalisierung sinnvoll:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x} \cdot d, \quad \vec{u} \rightarrow \vec{u} \cdot \frac{\nu}{d}, \quad t \rightarrow t \cdot \frac{d^2}{\nu}, \quad p \rightarrow p \cdot \varrho_0 \frac{\nu^2}{d^2} \quad (2.5)$$

Mit  $\partial_t \rightarrow \partial_t \cdot \frac{\nu}{d^2}$  und  $\partial_x \rightarrow \partial_x \cdot \frac{1}{d}$  wird (2.4) in entdimensionalisierter Form also zu<sup>3</sup>

$$\partial_t \vec{u} = \Delta \vec{u} - (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} - \nabla p + \vec{g}. \quad (2.6)$$

An der Kontinuitätsgleichung (2.2) ändert sich durch die Entdimensionalisierung nichts, da beliebige Vorfaktoren von  $\nabla$  und  $\vec{u}$  wegen 0 auf der rechten Seite gekürzt werden können. Je größer man Rand- und Anfangswerte der entdimensionalisierten Geschwindigkeit  $\vec{u}$  in den folgenden Abschnitten wählt, desto größer ist die kinematische Viskosität  $\nu$  bzw. desto kleiner ist der Zylinderdurchmesser  $d$ .  $\frac{\nu}{d}$  kann also als Kontrollparameter des System verwendet werden.

## 2.2 Zylinderkoordinaten

Es wird sich später als nützlich erweisen, die NSG in ebenen Zylinderkoordinaten mit den Einheitsvektoren  $\hat{e}_r$  und  $\hat{e}_\varphi$  zu formulieren. Für die Differentialoperatoren in (2.6) und (2.2) gilt dabei mit  $\vec{u} = u \cdot \hat{e}_r + v \cdot \hat{e}_\varphi$ :<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \nabla p &= \partial_r p \cdot \hat{e}_r + \frac{1}{r} \partial_\varphi p \cdot \hat{e}_\varphi = \begin{pmatrix} \partial_r p \\ \frac{1}{r} \partial_\varphi p \end{pmatrix} \\ \nabla \cdot \vec{u} &= \nabla \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \partial_r (ru) + \frac{1}{r} \partial_\varphi v \\ \nabla^2 \vec{u} &= \begin{pmatrix} \partial_r^2 u + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 u + \frac{1}{r} \partial_r u - \frac{2}{r^2} \partial_\varphi v - \frac{u}{r^2} \\ \partial_r^2 v + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 v + \frac{1}{r} \partial_r v - \frac{2}{r^2} \partial_\varphi u - \frac{v}{r^2} \end{pmatrix} \\ \vec{g} &= \begin{pmatrix} -|\vec{g}| \cdot \sin \varphi \\ -|\vec{g}| \cdot \cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_r \\ g_\varphi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit Hilfe diesen Gleichungen lassen sich die NSG (2.6) und (2.2) umformen. In [6] werden noch verschiedene höhere Ableitungen und Felder in den Termen miteinander vermischt, um somit den numerischen Fehler etwas zu verkleinern. Die Kontinuitätsgleichung wird zudem implizit in die Impulsgleichung mit einbezogen, sodass sich die beiden Gleichungen zu einer reduzieren. Zuletzt wird noch die Impulserhaltung in den Gleichungen garantiert, sodass man schließlich folgende umgeformte Navier-Stokes Gleichungen in Zylinderkoordinaten für die zeitliche Ableitung der Radialkomponente  $\partial_t u$  und der Azimutalkomponente

<sup>2</sup>Vgl. [2], [3], [6] [12], <http://scienceworld.wolfram.com/physics/Navier-StokesEquations.html>.

<sup>3</sup>Die Vorfaktoren der fünf Terme in (2.4) sind nach (2.5)  $\frac{\nu}{d^2} \frac{\nu}{d} = \frac{\nu^2}{d^3} =: D_0$ ,  $\frac{\mu}{\varrho_0} \frac{1}{d^2} \frac{\nu}{d} = D_0$ ,  $\frac{\nu}{d} \frac{1}{d} \frac{\nu}{d} = D_0$ ,  $\frac{1}{\varrho_0} \frac{1}{d} \varrho_0 \frac{\nu^2}{d^2} = D_0$ ,  $\frac{d\nu^2}{d^4} = D_0$  und können somit gekürzt werden.

<sup>4</sup>Vgl. z.B. <http://mathworld.wolfram.com/CylindricalCoordinates.html>.

$\partial_t v$  erhält,

$$\partial_t u = \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 u - \frac{1}{r^2} \partial_\varphi v - \frac{1}{r} \partial_\varphi \partial_r v + \frac{1}{r} \partial_r r u u + \frac{1}{r} \partial_\varphi u v + \frac{v^2}{r} - \partial_r p + g_r \quad (2.7)$$

$$\partial_t v = \partial_r \left( \frac{1}{r} \partial_r (r v) \right) - \partial_r \left( \frac{1}{r} \partial_\varphi u \right) + \frac{1}{r} \partial_r r u v + \frac{1}{r} \partial_\varphi v v - \frac{u v}{r} - \frac{1}{r} \partial_\varphi p + g_\varphi, \quad (2.8)$$

wobei in den ersten beiden Termen von (2.8) der Operator  $\partial_r$  mit Produktregel in der Klammer wie folgt aufzufassen ist:

$$\begin{aligned} \partial_r \left( \frac{1}{r} \partial_r (r v) \right) &= \left( \partial_r \frac{1}{r} \right) \cdot \partial_r (r v) + \frac{1}{r} \cdot (\partial_r^2 (r v)) = -\frac{1}{r^2} (v + r \partial_r v) + \frac{1}{r} (2 \partial_r v + r \partial_r^2 v) \\ \partial_r \left( \frac{1}{r} \partial_\varphi u \right) &= \partial_r \left( \frac{1}{r} \right) \cdot \partial_\varphi u + \frac{1}{r} \cdot (\partial_r \partial_\varphi u) = -\frac{1}{r^2} \partial_\varphi u + \frac{1}{r} \partial_r \partial_\varphi u. \end{aligned}$$

Diese Gleichungen werden für die Diskretisierung in Abschnitt 3.2.2 verwendet.

### 3 Numerische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen in einem frei rotierenden Zylinder

#### 3.1 Numerische Lösungsverfahren

In diesem Abschnitt sollen die zeitabhängigen inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen für das oben beschriebene Modell numerisch gelöst werden. Prinzipiell bieten sich als numerische Lösungsverfahren hierzu die *Finite-Differenzen-Methode (FDM)*, die *Finite-Volumen-Methode (FVM)* und die *Finite-Elemente-Methode (FEM)* an.

Bei der *FEM* handelt es sich um heutzutage eine Standardmethode für Probleme in den Ingenieurwissenschaften, da sie wegen der Diskretisierung des Gebiets  $\Omega$  in finite Elemente mit nahezu beliebiger Form auch mit sehr komplizierten Strukturen umgehen können. Die Lösung der Differentialgleichung wird zunächst durch Ansatzfunktionen „erraten“ und kann anschließend durch eine Umformulierung der jeweiligen Differentialgleichung in ein Variationsproblem optimiert werden. Die Flexibilität des aus finiten Elementen bestehenden Gitters findet jedoch zum einen auf Kosten der Genauigkeit der Lösung statt (vgl. [10]), zum anderen ist nicht garantiert, dass es sich um eine konservative, d.h. Energie erhaltende Lösung handelt.

Die *FVM* stellt eine Spezialisierung der FEM dar, in der die Ansatzfunktionen stückweise linear sind. Da die Lösungen der FVM konservativ sind und zudem eine der FEM ähnlich hohe Flexibilität besitzt, findet sie oft in kommerzieller Fluidodynamik-Software insbesondere für praxisorientierte Ingenieure Gebrauch.

Bei *FDM* wird das Gebiet  $\Omega$  in ein äquidistantes Gitter zerlegt. Die (partiellen) Ableitungen der Differentialgleichung werden durch Finite-Differenzen-Formeln auf den diskreten Gitterpunkten angenähert. Die Lösung dabei zum einen konservativ und zum anderen ist ihre Genauigkeit höher als bei FVM und FEM (vgl. [10]). Da das oben beschriebene Modell des rotierenden Zylinders eine sehr einfache Geometrie besitzt und somit auf eine hohe Flexibilität des Gitters verzichtet werden kann, wird bei den Simulationen im Folgenden auf die FDM zurückgegriffen werden. Um die notwendigerweise sehr komplizierte Formulierung der Randbedingungen der Flasche in kartesischen Koordinaten hierbei zu vermeiden<sup>1</sup>, soll das Problem in Zylinderkoordinaten bzw. im Zweidimensionalen in ebenen Polarkoordinaten beschrieben werden.

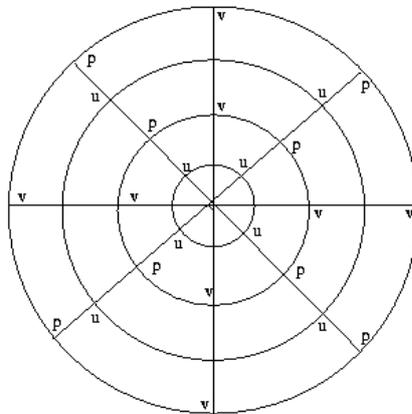
<sup>1</sup>Vgl. [9], Abschnitte *gerade Ränder* und *runde Ränder* unter *Randbedingungen*.

### 3.2 Finite Differenzen Methode (FDM)

Bei der Finite Differenzen Methode (FDM) wird zunächst das zu betrachtende Gebiet durch ein Gitter diskretisiert und anschließend auf diesem Gitter die zu lösende Differentialgleichung durch Annäherung der Ableitungen mittels finiter Differenzen schrittweise gelöst. Die Lösungen der einzelnen Zeitschritte sollen dabei mittels eines *Forward-Time-Centered-Space* (FTCS) Verfahrens ermittelt werden.

#### 3.2.1 Gebietsdiskretisierung, versetzte Gitter

Zunächst muss eine Diskretisierung des Flaschengebiets erfolgen, d.h. im Fall der FDM muss ein Gitter erzeugt werden. Für das Flaschenmodell in ebenen Polarkoordinaten sieht das Gitter wie in Abb. 1 gezeigt aus.



**Abb. 1:** Versetztes Gitter in Polarkoordinaten.

Wie zu erkennen ist haben die Radialkomponente  $u(r, \varphi)$  der Geschwindigkeit, die Azimutalkomponente  $v(r, \varphi)$  der Geschwindigkeit und der Druck  $p$  nur an bestimmten Knotenpunkten im Gitter Werte, anders ausgedrückt, es gibt drei zueinander *versetzte Gitter* (*staggered grid*) für die verschiedenen Größen. Dies erweist sich als sinnvoll bei der Berechnung der diskretisierten Formeln, da hier meist auf benachbarte  $u$ - und  $v$ -Werte für die finiten Differenzen zurückgegriffen werden muss und somit durch versetzte Gitter die örtliche Schrittweite halbiert werden kann. Dadurch kann ein versetztes Gitter möglicherweise entstehende Instabilitäten, d.h. Oszillationen der Lösung unterbinden.

#### 3.2.2 Diskretisierung für das Geschwindigkeitsfeld

In diesem Abschnitt werden die Navier-Stokes Gleichungen in ebenen Zylinderkoordinaten (2.7) für  $u$  und (2.8) für  $v$  diskretisiert.

Eine 1. Ableitung nach der Zeit wird per Rückwärtsdifferenz

$$\frac{\partial f(x, y, t)}{\partial t} = \frac{f(x, y, t) - f(x, y, t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (3.1)$$

eine 1. Ableitung nach dem Ort per zentraler Differenzenformel

$$\frac{\partial f(x, y, t)}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x, y, t) - f(x - \Delta x, y, t)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (3.2)$$

und eine 2. Ableitung nach dem Ort per zwei Mal angewandter zentraler Differenzenformel (mit  $\Delta x/2$ ), d.h.

$$\frac{\partial f(x, y, t)^2}{\partial^2 x} = \frac{f(x + \Delta x, y, t) - 2f(x, y, t) + f(x - \Delta x, y, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (3.3)$$

angenähert, vgl. [8], [1].

Gleichung (2.7) für die Radialkomponente  $u$  der Geschwindigkeit wird damit zu

$$\begin{aligned} \partial_t u(r, \varphi) &= \frac{u'(r, \varphi) - u(r, \varphi)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{u(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - 2u(r, \varphi) + u(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\frac{\Delta \varphi^2}{4}} \\ &\quad - \frac{1}{r^2} \frac{v(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - v(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta \varphi} \\ &\quad - \frac{1}{r} \frac{v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2}) - v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) + v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta r \Delta \varphi} \\ &\quad + \frac{u^2(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - u^2(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} + \frac{1}{r} u^2(r, \varphi) \\ &\quad + \frac{1}{r} \frac{u(r, \varphi) \cdot [v(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - v(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})] + v(r, \varphi) \cdot [u(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - u(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})]}{\Delta \varphi} \\ &\quad + \frac{v^2(r, \varphi)}{r} - \frac{p(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - p(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} + g_r. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Aus Gleichung (2.8) erhält man für die Azimutalkomponente  $v$  der Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} \partial_t v(r, \varphi) &= \frac{v'(r, \varphi) - v(r, \varphi)}{\Delta t} \\ &\quad - \frac{1}{r^2} \left( v(r, \varphi) + r \frac{v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} \right) \\ &\quad + \frac{1}{r} \left( 2 \frac{v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} + r \frac{v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - 2v(r, \varphi) + v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r^2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{r^2} \frac{u(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - u(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta \varphi} \\ &\quad - \frac{1}{r} \frac{u(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - u(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2}) - u(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) + u(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta r \Delta \varphi} \\ &\quad + \left( \frac{1}{r} u(r, \varphi) v(r, \varphi) + u(r, \varphi) \frac{v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - v(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} \right. \\ &\quad \quad \left. + v(r, \varphi) \frac{u(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - u(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} \right) \\ &\quad + \frac{1}{r} \frac{v^2(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - v^2(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta \varphi} \\ &\quad - \frac{u(r, \varphi) v(r, \varphi)}{r} - \frac{1}{r} \frac{p(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - p(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta \varphi} + g_\varphi. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Falls Werte von  $u$  bzw.  $v$  an Gitterpunkten benötigt werden, an denen  $u$  bzw.  $v$  keinen Wert hat, werden die fehlenden Werte linear approximiert, z.B.

$$u(r, \varphi) = \frac{u(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi) + v(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{2}.$$

Löst man die obigen beiden Gleichungen nach  $u'(r, \varphi) = u(r, \varphi, t + \Delta t)$  bzw.  $v'(r, \varphi) = v(r, \varphi, t + \Delta t)$  auf, so sind diese beiden Größen zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  nur von Größen des vorherigen Zeitpunkts  $t$  abhängig – bis auf das Druckfeld  $p$ . Dieses wird zunächst einfach beibehalten, muss jedoch nun jedoch noch „nachgeregelt“ werden.

### 3.2.3 Nachregelung des Druckfelds

Im vorherigen Kapitel wird  $\vec{u}(t + \Delta t)$  aus der Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichung

$$\partial_t \vec{u} = -(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u} - \nabla p \quad (3.6)$$

berechnet. Dabei wird für  $\nabla p$  der alte Druckwert  $p(t)$  zum Zeitpunkt  $t$  verwendet. Im Allgemeinen genügt das so errechnete  $\vec{u}(t + \Delta t)$  nicht der Divergenzfreiheit von  $\vec{u}$ .<sup>2</sup> Um diese zu erreichen, wird der Druck  $p$  nachgeregelt, d.h.  $p(t + \Delta t)$  wird so bestimmt, dass zum einen die obige Navier-Stokes Gleichung (3.6) erfüllt wird und zum anderen  $\vec{u}(t + \Delta t)$  divergenzfrei wird.

Für das zu bestimmende  $p(t + \Delta t)$  erhält man durch Anwenden der Divergenz auf beiden Seiten von Gleichung (3.6)

$$\partial_t (\nabla \cdot \vec{u}) = -\nabla \cdot (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \nabla^2 \vec{u} - \nabla^2 p.$$

Mit  $\text{div } \vec{u} = 0$  folgt daraus

$$\nabla^2 p = \frac{1}{Re} \nabla \cdot \nabla^2 \vec{u} = f(\vec{u}).$$

D.h. der Druck  $p(t + \Delta t)$  muss einer Poisson-Gleichung genügen. Diese ist eine gewöhnliche Differentialgleichung und kann über verschiedene Methoden gelöst werden:

- Crank-Nicolson Verfahren, vgl. [9], [11].
- Finite Differenzen und Gleichungssystem, vgl. [13].
- Relaxationsverfahren, vgl. [5], [6].

Da im Prinzip alle Verfahren mit akzeptablem Aufwand die Lösung beliebig genau annähern können, soll im Folgenden insbesondere auf das am leichtesten zu implementierende *Relaxationsverfahren* eingegangen werden.

Das Relaxationsverfahren ist ein Iterationsverfahren zur schrittweisen Annäherung des nächsten Zeitschritts. Seien also  $\vec{u} = (u, v)$  und  $p$  zum Zeitpunkt  $t$  bekannt. Gesucht sind dann  $\vec{u}' = (u', v')$  und  $p'$  zum Zeitpunkt  $t'$ , die die Navier-Stokes Gleichungen erfüllen. Hierzu wird zunächst  $p'_0 = p$  gesetzt und  $u'_0$  und  $v'_0$  werden gemäß obiger diskretisierter Gleichungen berechnet; die Indizes  $n$  weisen dabei auf den jeweiligen Iterationsschritt hin. Durch Anpassung des Druckterms  $\nabla p'_n$  in Gleichung (3.6) sollen  $u'_n$  und  $v'_n$  möglichst

<sup>2</sup> $\vec{u}(t + \Delta t)$  wird also vor der Druckiteration als kompressibel betrachtet. Man spricht dabei von einer *künstlichen Kompressibilität* von  $\vec{u}$ .

divergenzfrei gemacht werden. Hierzu wird der Druck proportional zur Größe des Fehlers  $\text{div}(u'_n, v'_n)$  angepasst:

$$p'_{n+1} = p'_n - \lambda \nabla \cdot (u'_n, v'_n) \quad \text{mit } 0 < \lambda < 2.$$

Für  $u'_{n+1}$  und  $v'_{n+1}$  ergibt sich dann (vgl. (3.4) bzw. (3.5) umgestellt nach  $u'$  bzw.  $v'$ )

$$u'_{n+1} = u'_n - \Delta t \lambda \nabla \cdot (u'_n, v'_n)^T, \quad (3.7)$$

$$v'_{n+1} = v'_n - \Delta t \lambda \nabla \cdot (u'_n, v'_n)^T. \quad (3.8)$$

Diese Iteration für  $p'_{n+1}$ ,  $u'_{n+1}$  und  $v'_{n+1}$  wird nun solange fortgeführt, bis

$$0 = \nabla \cdot \begin{pmatrix} u'_{n+1}(r, \varphi) \\ v'_{n+1}(r, \varphi) \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \left( u'_{n+1}(r, \varphi) + r \frac{u'_{n+1}(r + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - u'_{n+1}(r - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{\Delta r} \right. \\ \left. + \frac{v'_{n+1}(r, \varphi + \frac{\Delta \varphi}{2}) - v'_{n+1}(r, \varphi - \frac{\Delta \varphi}{2})}{\Delta \varphi} \right)$$

für alle  $0 \leq r \leq R$  und  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  hinreichend genau erfüllt wird.

### 3.2.4 Randbedingungen

Bei dem oben beschriebenen FTCS-Verfahren werden Geschwindigkeitswerte am Rand der Flasche benötigt. Der Einfluss des rotierenden Zylinderrandes auf die äußeren Geschwindigkeiten des Wassers soll durch eine *Haft-* bzw. *no-slip-Randbedingung* modelliert werden. D.h. den benötigten Randwerten wird schlichtweg die Geschwindigkeit des Zylinderrandes zugewiesen. Im äußersten Kreis des Diskretisierungsgebiets (d.h.  $r_R = R \cdot \hat{e}_r$ ) befinden sich Gitterpunkte für die Azimutalkomponenten  $v(r_R)$ , denen wegen der no-slip Bedingung die Werte der Azimutalkomponenten der Zylinderbewegung zugewiesen wird. Da für die Radialkomponenten  $u$  auf diesem äußersten Kreis keine Gitterpunkte existieren, wird für die  $u(r_R)$  das arithmetische Mittel vom bekannten  $u(r_{R-1})$  und von der Radialkomponente der Zylindergeschwindigkeit am jeweiligen Randpunkt gebildet.

Der Einfluss des Fluids im Inneren des Zylinders auf die Bewegung des Zylinders ist etwas schwieriger zu modellieren. Im Falle von free-slip-Randbedingungen könnte das Fluid den Zylinder nicht beeinflussen. Bei reinen no-slip-Randbedingungen würde der Zylinder die gleiche Geschwindigkeit wie die Randschicht des Fluids besitzen. Bei dem hier zu behandelnden Problem liegt jedoch eine Mischung beider Randbedingungen vor, denn in der Realität kann ein Einfluss des Fluids im Innern auf die Zylinderbewegung festgestellt werden, der jedoch von der Trägheit des Zylinders, dessen Reibung auf der horizontalen Unterlage und von der Reibung zwischen der Fluidrandschicht und dem Zylinder abhängig ist. Diese drei Faktoren werden in einem Faktor  $\kappa$  zusammengefasst, der angibt wie groß der Einfluss des Drehmoments der Fluidrandschicht auf das Drehmoment des Zylinders ist. D.h. die neue Azimutalgeschwindigkeit des Zylinders ergibt sich also aus einer mit  $\kappa$  gewichteten Mittelung aus seinem vorherigen Drehmoment und dem von der Fluidrandschicht übertragenen Drehmoment.

Das Drehmoment  $M$  des Fluids auf die zylinderförmige Oberfläche  $A(r = R, \varphi = 0..2\pi, z = 0..z_{max})$  der Fluidrandschicht lässt sich wie folgt berechnen. Wegen  $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F}$  ist die  $z$ -Komponente des Drehmoments  $dM_z(r = R)$

$$dM_z(r = R) = R \cdot dF_\varphi, \quad (3.9)$$

wobei  $R$  der Zylinderdurchmesser und  $dF_\varphi$  die Azimutalkomponente der Kraft des Fluids auf ein Oberflächenelement  $dA_R = R d\varphi dz$  sind. Mit dem Druck  $\sigma_{R\varphi}$  lässt sich  $dF_\varphi$  durch

$$dF_\varphi = \sigma_{R\varphi} dA_R = \sigma_{R\varphi} R d\varphi dz \quad (3.10)$$

ausdrücken. Für das Drehmoment  $dM_z$  ergibt sich aus (3.9) und (3.10)

$$dM_z = R \cdot dF_\varphi = R^2 \sigma_{R\varphi} d\varphi dz. \quad (3.11)$$

Das Drehmoment  $M_z$  der gesamten Fluidrandschicht ist also

$$M_z = R^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{z_{max}} dz \sigma_{R\varphi}(\varphi, z). \quad (3.12)$$

Für den Spannungstensor  $\sigma_{R\varphi}(\varphi, z)$  gilt (vgl. [7])

$$\sigma_{R\varphi}(R, \varphi, z) = \varrho \nu \left( \frac{1}{R} \partial_\varphi u(R, \varphi, z) + \partial_r v(R, \varphi, z) - \frac{1}{R} v(R, \varphi, z) \right) \quad (3.13)$$

mit der Dichte  $\varrho$ , der kinematischen Viskosität  $\nu$  und den Radial- und Azimutalkomponenten der Geschwindigkeit  $u$  und  $v$ . Da der Zylinder und das Fluid hier nur im Zweidimensionalen bzw. unabhängig von der  $z$ -Richtung betrachtet wird, ist  $u(z = 0..z_{max}) = \text{const}$  und  $v(z = 0..z_{max}) = \text{const}$ . Setzt man (3.13) in (3.12) ein, so wird das Drehmoment  $M_z$  also zu

$$\begin{aligned} M_z &= \varrho \nu R^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{z_{max}} dz \left( \frac{1}{R} \partial_\varphi u(R, \varphi) + \partial_r v(R, \varphi) - \frac{1}{R} v(R, \varphi) \right) \\ &= \varrho \nu R^2 \int_0^{2\pi} d\varphi z_{max} \left( \frac{1}{R} \partial_\varphi u(R, \varphi) + \partial_r v(R, \varphi) - \frac{1}{R} v(R, \varphi) \right) \\ &= \varrho \nu z_{max} R^2 \Delta\varphi \sum_{\varphi=0}^{2\pi} \left( \frac{v(R + \frac{\Delta r}{2}, \varphi) - v(R - \frac{\Delta r}{2}, \varphi)}{2 \frac{\Delta r}{2}} - \frac{1}{R} v(R, \varphi) \right), \end{aligned} \quad (3.14)$$

wobei im letzten Schritt  $\int_0^{2\pi} \frac{1}{R} \partial_\varphi u(R, \varphi) = 0$  wegen der  $2\pi$ -Periodizität von  $u(\varphi)$  gilt. Zudem wird beim letzten Schritt das Integral  $\int_0^{2\pi} f(\varphi) d\varphi$  durch die Summe  $\sum_{\varphi=0}^{2\pi} f(\varphi) \Delta\varphi$  und die Ableitung  $\partial_r v$  durch die zentrale Differenzenformel (3.2) approximiert.

Das Drehmoment  $M_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)$  des Zylinders zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  ist nun eine mit  $\kappa$  gewichtete Mittelung des Drehmoments  $M_z(t)$  der Fluidrandschicht und des vorherigen Zylinderdrehmoments  $M_{\text{Zyl}}(t)$ , d.h.

$$M_{\text{Zyl}}(t + \Delta t) = \kappa M_z(t) + (1 - \kappa) M_{\text{Zyl}}(t), \quad 0 < \kappa < 1. \quad (3.15)$$

$M_z(t)$  wird dabei mit Hilfe von (3.14) berechnet, die Konstante  $\kappa$  gibt den Anteil des von der Fluidrandschicht übertragenen Drehmoments an. Die Änderung  $\partial_t v_{\text{Zyl}}$  der Azimutalkomponente der Zylindergeschwindigkeit erhält man aus dem in (3.15) ermittelten Drehmoment  $M_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)$  durch

$$\partial_t v_{\text{Zyl}} = \partial_t(\omega R) = R \frac{M_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)}{I_{\text{Zyl}}} = \frac{M_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)}{mR}, \quad (3.16)$$

da das Drehmoment  $M = \alpha \cdot I = \partial_t \omega \cdot I$  mit Trägheitsmoment  $I_{\text{Zyl}} = mR^2$  für einen dünnwandigen Hohlzylinder [4] mit Masse  $m$  und Radius  $R$  ist und für die Winkelgeschwindigkeit  $v = \omega r$  gilt.

Für die Azimutalkomponente der Zylindergeschwindigkeit  $v_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)$  zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  erhält man wegen  $v_{\text{Zyl}}(t + \Delta t) = v_{\text{Zyl}}(t) + \Delta t \partial_t v_{\text{Zyl}}$ , (3.15) und (3.16)

$$v_{\text{Zyl}}(t + \Delta t) = v_{\text{Zyl}}(t) + \Delta t \frac{\kappa M_z(t) + (1 - \kappa) M_{\text{Zyl}}(t)}{mR}, \quad (3.17)$$

wobei  $M_z(t)$  in (3.14) aus den Azimutalkomponenten der Geschwindigkeiten in der Fluidrandschicht  $v(R, \varphi)$  berechnet wird. Das Anfangsdrehmoment des Zylinders ist  $M_{\text{Zyl}}(t = 0) = 0$ , die Drehmomente  $M_{\text{Zyl}}(t)$  der darauf folgenden Zeitschritte werden mit (3.15) berechnet und für den nächsten Zeitschritt gespeichert. Da die Fluidschicht eine Anfangsgeschwindigkeit ungleich 0 besitzt, wird sich nach und nach ein Drehmoment auf den Zylinder übertragen, das dessen Rotation beeinflusst.

Die Translation der Rotationsachse des Zylinders wird von dessen Rotation auf der horizontalen Unterlage verursacht. Mit

$$\omega = \frac{v_{\text{Zyl}}}{r} = \frac{\Delta \varphi}{\Delta t}$$

ergibt sich für die Länge des Bogensegments, um das der Zylinder und somit dessen Rotationsachse während des Zeitintervalls  $\Delta t$  rollt,  $\Delta s = r \Delta \varphi = v_{\text{Zyl}} \Delta t$ . Interessant ist nun die Funktion  $\Delta s(t) = v_{\text{Zyl}}(t) \Delta t$ . Findet die in Abschnitt 1 beschriebene in abwechselnde Richtung weisende Translation der Rotationsachse tatsächlich statt, so sollte sich für  $\Delta s(t)$  eine Sinus-ähnliche Funktion ergeben.

Die Radialkomponenten  $u$  der Fluidgeschwindigkeit haben keinen Einfluss auf das auf den Zylinder übertragene Drehmoment, vielmehr führen sie direkt zu einer zusätzlichen Translation der Rotationsachse. Die Translationsbeschleunigung  $a$  der Fluidrandschicht kann analog zum Drehmoment mit dem Ansatz

$$a = \frac{F}{m} = \frac{R}{m} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{z_{\text{max}}} dz \sigma$$

berechnet werden, wobei  $\sigma$  hier nicht parallel, sondern senkrecht zum Oberflächenelement  $dA_R$  ist. Um am Ende einen Vektor  $\vec{a}(x, y)$  zu erhalten, wird bei den Integralen, die wieder durch Summen angenähert werden,  $\sigma$  als Vektor  $\vec{\sigma}(x, y)$  in  $x$ - und  $y$ -Richtung komponentenweise addiert. Der Anteil der auf die Rotationsachse übertragenen Beschleunigung wird wiederum durch eine mit  $\kappa' \approx \kappa$  gewichtete Mittelung der Zylinderbeschleunigung zum jeweils vorhergehenden Zeitpunkt und der ermittelten Beschleunigung der Fluidrandschicht berechnet. Aus der neuen Beschleunigung  $a_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)$  der Rotationsachse kann die neue Geschwindigkeit durch

$$v_{\text{Zyl}}(t + \Delta t) = v_{\text{Zyl}}(t) + \Delta t a_{\text{Zyl}}(t + \Delta t)$$

ermittelt werden.

### 3.2.5 Anfangsbedingungen

Zur Verifizierung der korrekten Arbeitsweise des Codes wird zunächst eine mit konstanter Winkelgeschwindigkeit rotierende Flasche angenommen und alle Radial- und Azimutalkomponenten der Geschwindigkeit auf  $u = v = 0$  gesetzt. Durch die no-slip-Randbedingung kommt es dann zu einer Rotation des Wassers im Drehsinn der Zylinderrotation. Je nach Geschwindigkeit der Zylinderrotation pflanzt sich die Rotation schneller oder langsamer von der Randschicht in weiter innen (d.h. näher an der Rotationsachse  $r = 0$ ) gelegene Schichten fort. Zum Überprüfen des Codes sind die Anfangsbedingungen für das Fluid also  $u = v = 0$ , für den Zylinder  $u_Z = 0, v_Z = \text{const} \neq 0$ .

Zur Modellierung des in Abschnitt 1 beschriebenen Problems müssen die Anfangsbedingungen etwas angepasst werden. Der Anfangsstoß der Flasche soll nur in der Horizontalebene senkrecht zur Rotationsachse erfolgen. Dies wird dadurch modelliert, dass alle Anfangsgeschwindigkeiten  $\vec{u}$  in Horizontalrichtung zeigen und den gleichen Betrag haben. Die Vektoren  $\vec{u}$  müssen dabei noch in Zylinderkoordinaten transformiert werden, was wegen der von  $\varphi$  abhängigen Einheitsvektoren zu ungleichen Komponenten  $u(\varphi), v(\varphi)$  führt, die sich mit Hilfe von  $\vec{u}(\varphi) = u_x \hat{e}_x + 0 \cdot \hat{e}_y = u(\varphi) \hat{e}_r(\varphi) + v(\varphi) \hat{e}_\varphi(\varphi)$  und  $\hat{e}_r(\varphi) = \cos \varphi \hat{e}_x + \sin \varphi \hat{e}_y$  sowie  $\hat{e}_\varphi(\varphi) = -\sin \varphi \hat{e}_x + \cos \varphi \hat{e}_y$  ermitteln lassen. Die gleichen Anfangsbedingungen sollen für die Bewegung des Zylinders gelten, da dieser ebenfalls den Stoß erfährt. Wichtig ist dabei, dass es sich um einen sehr kurzzeitigen Stoß handelt, der lediglich zu Anfangsgeschwindigkeiten, jedoch nicht zu Drehmomenten bzw. Beschleunigungen führt.

Die Anfangsbedingungen für den Druck  $p$  sind im Prinzip egal, da der Druck beim ersten Durchlauf der Iteration für die Druck-Nachregelung so angepasst wird, dass die NSG erfüllt werden. Deshalb werden den Druckwerten  $p$  vor dem ersten Zeitschritt schlichtweg Zufallswerte zugewiesen, die im ersten Zeitschritt dann zu sinnvollen Werten umgeformt werden.

### 3.2.6 Freies Randwertproblem bei teilweise gefülltem Zylinder

In den vorhergehenden Abschnitten wurde davon ausgegangen, dass der gesamte Innenbereich des Zylinders mit Wasser gefüllt ist. Die interessanten Oszillationen der Zylinderrotation sind jedoch bei nur teilweise gefülltem Innenbereich des Zylinders wesentlich ausgeprägter. In diesem Abschnitt soll darauf eingegangen werden wie man dieses *freie Randwertproblem* mit einer Wasser-Luft Grenze im Inneren des Zylinders hanhaben kann.

Der Zylinderinnenbereich  $\Omega + \bar{\Omega}$  ist aufgeteilt in einen gefüllten, d.h. Wasser enthaltenden Bereich  $\Omega$  und den mit Luft gefüllten Restbereich  $\bar{\Omega}$ , der durch ein Vakuum angenähert werden kann.<sup>3</sup> Zur Unterscheidung dieser beiden Bereiche im Code gibt es verschiedene Methoden, beispielsweise kann eine Höhenfunktion der Grenzschicht zwischen Luft und Wasser gespeichert und berechnet werden, jedoch sind damit nur sehr einfache Grenzschichten zu fassen, die auch tatsächlich als Funktion darstellbar sind. Nach [3] gibt es noch einige weitere Verfahren, die zu ähnlichen Einschränkungen führen, die geringsten Einschränkungen müssen dabei bei einer Beschreibung von  $\Omega$  und  $\bar{\Omega}$  durch *Partikel* hingenommen werden. Diese Partikel werden in folgende drei Klassen unterteilt.

1. Innere Partikel: Partikel, die in  $\Omega$  liegen und deren angrenzende Partikel sich ebenfalls alle in  $\Omega$  befinden, d.h. Partikel im „Innern“ des Fluids.

<sup>3</sup>D.h. die Strömungen innerhalb der Luft nach Gasgleichungen werden vernachlässigt, da diese keinen wesentlichen Einfluss auf die Strukturbildung des Fluids haben.

2. Oberflächenpartikel: Partikel, die in  $\Omega$  liegen und mindestens ein Nachbarpartikel haben, das sich in  $\bar{\Omega}$  befindet, d.h. Fluidpartikel an der Fluidoberfläche, d.h. an der Grenze zum Vakuum.
3. Äußere Partikel: Partikel, die sich in  $\bar{\Omega}$  befinden, d.h. Vakuumpartikel außerhalb des Fluids.

Innere Partikel beschreiben also das Gebiet des Fluids, Oberflächenpartikel beschreiben die freie Grenzschicht zwischen Fluid und Luft bzw. Vakuum.

Aus den Spannungstensoren  $\sigma$  in dem Fluid lassen sich Randbedingungen für die freie Oberfläche ableiten (vgl. [3]), die wiederum durch eine Diskretisierung analog zu Abschnitt 3.2.2 in Abhängigkeit der bekannten Geschwindigkeitskomponenten an den einzelnen Gitterpunkten gebracht werden können. Anschließend lassen sich wie oben beschrieben die neuen Geschwindigkeitskomponenten und der Druck berechnen, nur dass von nun an lediglich innere Partikel betrachtet werden. Durch die Kenntnis der neuen Geschwindigkeiten kann das neue Gebiet  $\Omega$  bestimmt und die Klassifizierung der Partikel in 1. bis 3. neu durchgeführt werden.

## 4 Implementierung und Visualisierung

In diesem Abschnitt soll nun noch ein kurzer Blick auf die programmiertechnische Realisierung der oben beschriebenen Methoden und die Visualisierung der Ergebnisse geworfen werden.

### 4.1 Algorithmus

Der Algorithmus für die in Abschnitt 3.2 beschriebene FDM mit Drucknachregelung durch ein Relaxationsverfahren kann in Pseudocode wie folgt formuliert werden.

1.  $\mathbf{t} = 0$ , setze Anfangswerte von  $u, v, p$  (vgl. Abschnitt 3.2.5)
2. Solange  $\mathbf{t} < N\mathbf{t}$ 
  - a. Setze Randwerte von  $u, v$  (vgl. Abschnitt 3.2.4)
  - b. Berechne  $u'$  und  $v'$  aus (3.4) und (3.5)
  - c. Setze  $\mathbf{rel} = 0, u'_0 = u', v'_0 = v'$
  - d. Solange  $\mathbf{rel} < \mathbf{maxRelaxLoops}$ 
    - i. Berechne  $u'_{rel}$  und  $v'_{rel}$  aus (3.7) und (3.8)
    - ii.  $\mathbf{rel} ++$
  - e. Ausgabe von  $u'_{maxRelaxLoops}$  und  $v'_{maxRelaxLoops}$
  - f.  $\mathbf{t} ++$

Als Ergebnis erhält man eine Liste an Daten für das Geschwindigkeits- und Druckfeld, die nun grafisch dargestellt werden können.

## 4.2 Implementierung

Zur Implementierung des beschriebenen Algorithmus wird die Programmiersprache C verwendet, da v.a. eine schnelle Berechnung gewünscht ist und neuere Sprachen wie Java oder C++ zwar mehr Funktionsmöglichkeiten bieten, aber dadurch eben auch Abstriche bei der Performance gegenüber C machen müssen. Für die Implementierung sind im Prinzip nur Grundrechenarten und evtl. Pointer bei der freien Oberfläche nötig, was sich beides im Umfang von C befindet.

Die von dem C Code erzeugten Daten werden in eine Datei geschrieben und von dort mit der Mathematiksoftware Maple eingelesen, ausgewertet und geplottet. Maple bietet für die Ausgabe solcher Daten sehr viele gute Werkzeuge und Möglichkeiten und zeichnet sich zudem wegen der Programmierbarkeit durch eine sehr hohe Flexibilität aus.

## 4.3 Visualisierung

Das berechnete Geschwindigkeits- und Druckfeld lassen sich auf verschiedene Art und Weise darstellen. Die einfachste Möglichkeit ist wohl ein dreidimensionaler Plot mit dem Zylinderquerschnitt in der  $(r, \varphi)$ -Ebene und den Werten für  $u(r, \varphi), v(r, \varphi)$  oder  $p(r, \varphi)$  auf der  $z$ -Achse. In Maple stehen dazu einige verschiedene Darstellungsmöglichkeiten zur Verfügung; für unsere Zwecke hat sich v.a. „patch“ mit oder ohne Gitter als sehr anschaulich erwiesen, in dem die einzelnen Funktionspunkte zu einer kontinuierlichen Oberfläche verbunden und nach verschiedenen Kriterien, z.B.  $z$ -Wert, eingefärbt werden können. Sehr interessant kann zudem manchmal eine nähere Betrachtung des „wireframes“ sein, das aus den Funktionswerten ein Drahtgitter baut, welches einen sehr guten Eindruck vom Funktionsverlauf entstehen lässt.

Die Bewegung des Wassers kann auch direkt über seine Geschwindigkeitsvektoren  $\vec{u}(r, \varphi)$  angegeben werden, indem die Vektoren  $\vec{u}(r, \varphi)$  in die  $(r, \varphi)$ -Ebene gezeichnet werden und die Beträge durch eine normierte Länge angegeben werden. Eine solche Darstellung lässt sich beispielsweise mit dem `XGraphics`-Paket zum Zeichnen einfacher geometrischer Elemente in C oder auch indirekt mit Maple erzeugen.

In [2] und [3] sind noch weitere Möglichkeiten zur Visualisierung genannt, beispielsweise eine sog. Partikelverfolgung, die die zeitabhängige Bahnkurve eines einzelnen Partikels für sich betrachtet beschreibt oder die Darstellung der Strömung durch eine Stromfunktion  $\psi$  und eine Wirbelstärke  $\zeta$ , die mit Hilfe von (vgl. [3])

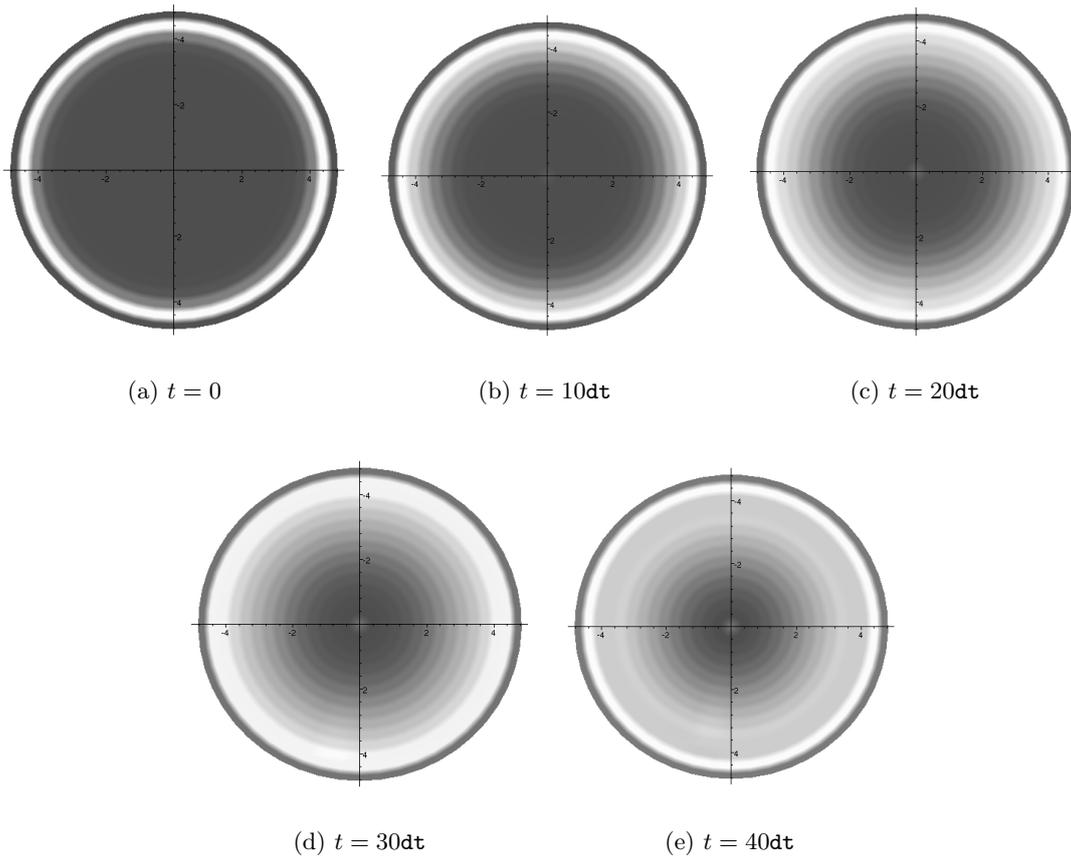
$$\partial_x \psi(x, y) = -u_y, \quad \partial_y \psi(x, y) = u_x, \quad \zeta(x, y) = \partial_y u_x - \partial_x u_y \quad (4.1)$$

bestimmt werden können.

## 4.4 Beispiel zur Prüfung der Funktionsweise

Für eine erste grobe Überprüfung der Funktionsweise des Codes wurde das Beispiel eines Fluids in einer mit konstanter Winkelgeschwindigkeit rotierenden Flasche getestet. Durch die no-slip-Randbedingung ergeben sich die Azimutalkomponenten der Fluidrandschicht direkt aus der konstanten Winkelgeschwindigkeit des Zylinders und sind somit ebenfalls konstant. In dem Beispiel, das wir betrachten werden, soll die Randbedingung  $v_R = 5$  für die Azimutalkomponenten der Fluidrandschicht gelten. Im restlichen inneren Bereich des Fluids soll die Anfangsbedingung  $v_r = 0$  bei  $t = 0$  sein, d.h. nur die äußerste Fluidschicht bewegt sich, nicht der Innenteil. Die Radialkomponenten sollen im gesamten

Fluidgebiet zunächst auf  $u = 0$  gesetzt werden. Für den Druck werden wie oben beschrieben zufällige Anfangswerte gewählt. Diese Bedingungen wurden in das C Programm zur Geschwindigkeits- und Druckberechnung integriert, die in Abb. 2 gezeigte Ausgabe der ermittelten Werte wurde mit Maple erzeugt. Dabei soll eine weiße Färbung für einen relativ zu  $v_R$  hohen Wert der Azimutalgeschwindigkeit  $v$  stehen, graudere Färbungen geben geringere  $v$ -Werte an. Wie man an Abb. 2 erkennen kann, pflanzt sich die Anfangsazi-



**Abb. 1:** Azimutalkomponenten  $v$  des Geschwindigkeitsfelds eines Fluids in einem mit konstanter Winkelgeschwindigkeit rotierenden Zylinder. Je weißer eine Stelle ist, desto größer ist  $v$  an dieser Stelle. Die Anfangsgeschwindigkeit in a) pflanzt sich mit wachsender Zeit in die Mitte fort. Anfangszustand:  $u = 0$ ,  $p = \text{zufällig}$ ,  $v(r \geq R - 2dr) = 5$  (Randbedingung) und  $v(r < R - 2dr) = 0$ . Parameter:  $dt = 0.0005$ ,  $Nt = 40$ ,  $Nphi = 50$ ,  $Nr = 30$ ,  $\text{maxRelaxLoops} = 50$ .

mutalgeschwindigkeit zur Mitte des Zylinders hin fort, da dort die ursprünglich auf 0 gesetzten Azimutalgeschwindigkeiten nach und nach größer werden. Diese Geschwindigkeitsübertragung verläuft wie bei Fluiden erwartet, d.h. der Code und die oben beschriebenen Methoden haben den ersten Prüfstein bestanden. Die weiteren Ergebnisse für einen Anfangszustand nach einem Stoß in horizontaler Richtung (d.h.  $\vec{u}$  haben alle den gleichen Betrag und zeigen in horizontaler Richtung, vgl. Abschnitt 3.2.5), eine von der Fluidrandschicht abhängige Zylinderrotation und Rotationsachsentranslation (vgl. Abschnitt 3.2.4), sowie schließlich eine nur halbgefüllte Flasche mit freier Oberfläche (vgl. Abschnitt 3.2.6)

werden beim Regionalwettbewerb in Form von Animationen vorgestellt.

## 5 Danksagung

Mein Dank gilt insbesondere Christian Hoffmann und Kamen Beronov für ihre aufschlussreichen Erklärungen und Antworten auf meine Fragen. Moritz Beller und Jörg Metzner möchte ich für das Korrekturlesen danken. Desweiteren bedanke ich mich bei Hendrik Kuhlmann, Michael Breuer, Steffen Jahnke und Paul-Uwe Thamsen für die eMails, die mir den Einstieg in die Fluidodynamik und das Problem der Wasserflasche durch hilfreiche Hinweise und Tipps erleichtert haben.

## Literatur

- [1] BRONSTEIN, I. N.: *Teubner-Taschenbuch der Mathematik*. Teubner-Verlag, Wiesbaden, 2003.
- [2] FERZIGER, J. H.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [3] GRIEBEL, MICHAEL: *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg, Wiesbaden, 1995.
- [4] HAMMER, ANTON: *Physikalische Formeln und Tabellen*. J. Lindauer Verlag, München, 2002.
- [5] HOFFMANN, CHRISTIAN: *Persönliche Mitteilung*.
- [6] HOFFMANN, CHRISTIAN: *Stationäre und zeitabhängige Strömungsmuster im Taylor Couette System - Taylorwirbel, Spiralen und modulierte Strukturen*. Diplomarbeit, Saarbrücken, 1998.
- [7] HOFFMANN, CHRISTIAN: *Bifurkationsverhalten stationärer Spiralen im Taylor Couette System mit Durchfluss*. Dissertation, Saarbrücken, 2005.
- [8] HOLZER, STEFAN. <http://www.bauv.unibw-muenchen.de/bauv1/download/lehre/IngInf/Skript/Differenzenverfahren.pdf>, München, 2002.
- [9] JACHENS: *Numerische Verfahren zur Simulation der Rohrströmung in drei Dimensionen*. <http://staff-www.uni-marburg.de/~jachens/diplom/>, 2000.
- [10] OERTEL, HERBERT: *Strömungsmechanik*. Vieweg, Wiesbaden, 2004.
- [11] PASSMANN, JÖRN-THORSTEN: *Finite-Differenzen-Verfahren zum Lösen partieller Differentialgleichungen*. <http://www.wissenschaft-online.de/spektrum/projekt2/gaes11.htm>.
- [12] ROACHE, PATRICK J.: *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Hermosa, Albuquerque, 1998.
- [13] SIMEON, BERND: *Numerik partieller Differentialgleichungen, Finite Differenzen für die Poisson Gleichung*. <http://www-m2.ma.tum.de/~simeon/numerik4/skript.html> S. 15-20.