

Potthoff, Susanne; Perau, Eugen (2002):

Simulation von Zweiphasen-Strömungen mit der Gemischten Finite-Element-Methode,

in: Beiträge zum 3.Workshop "**Teilgesättigte Böden**",

Weimar 2001, Schriftreihe Geotechnik - Bauhaus Universität Weimar, Heft 06, S. 129-143,

download über www.uni-due.de/geotechnik/

email: eugen.perau@uni-due.de

Simulation von Zweiphasen-Strömungen mit der Gemischten Finite Elemente Methode

Dipl.-Ing. Susanne Potthoff & Priv.-Doz. Dr.-Ing. Eugen Perau

Universität Essen, Fachbereich Bauwesen, Grundbau und Bodenmechanik
45117 Essen, Tel. 0201/ 183 2859; -53
E-Mail: susanne.potthoff; eugen.perau@uni-essen.de

Die Berechnung der Strömung von Luft und Wasser in Böden ist für viele Anwendungen im Grundbau, Tunnelbau und der Umweltgeotechnik von großer Bedeutung. Die meistens verwendeten empirischen Gleichungen zur Beschreibung von Strömungsvorgängen sind lediglich intuitiv begründet und weisen erhebliche Defizite auf. Im Gegensatz dazu wurde am Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik der Universität Essen ein mechanisches Modell entwickelt, das auf rationaler Mechanik basiert [7]. Dieser Artikel befaßt sich mit der numerischen Umsetzung und Verifizierung eines Spezialfalls dieses mechanischen Modells. Die numerische Umsetzung erfolgt mit einer Gemischten Finite Elemente Formulierung unter Verwendung der Raviart-Thomas Elemente. Die Effizienz des Verfahrens wird anhand von zwei synthetischen Experimenten gezeigt.

1 Zweiphasenströmungsmodell

Ein mechanisches Modell auf der Basis rationaler Mechanik und der Theorie der porösen Medien, das am Beispiel der Bewegung von Luft und Wasser in einem deformierbaren Körper (Boden) eine Zweiphasenströmung beschreibt, ist am Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik an der Universität Essen entwickelt worden. Die Herleitung dieses Modells an Hand von mechanischen Grundsätzen ist Thema der Habilitationsschrift [7]. Das System Boden wird durch die drei Phasen: festes Korngefüge, flüssiges Wasser und gasförmige Luft gebildet. Für die Beschreibung von Strömungsvorgängen im deformierbaren Korngefüge, bei der alle vorhandenen Phasen bilanziert werden, sind bei räumlichen Systemen 12 Differentialgleichungen erforderlich. Drei Gleichungen beschreiben die Erhaltung der Masse der jeweiligen Phase. Die Gleichungen zur Impulserhaltung liefern drei vektorwertige Gleichungen, die noch konstitutive Beziehungen beinhalten.

1.1 Strömung im starren Korngefüge

Die numerische Umsetzung erfolgt zunächst für den vereinfachten Fall einer Strömung im starren Korngefüge [4]. Die Gleichungen zur Beschreibung des Festkörperverhaltens entfallen, und der Porenanteil des Korngefüges wird als konstant angesetzt. Die beiden fluiden Phasen werden bilanziert, dabei wird das Wasser als inkompressibel und die Luft als kompressibel betrachtet. Phasenübergänge werden nicht berücksichtigt, und es findet kein Massenaustausch zwischen den Fluiden statt. Das Gleichungssystem reduziert sich auf zwei Gleichungen zur Erhaltung der Masse und zwei vektorwertige Gleichungen zur Impulserhaltung, mit denen sich auch dynamische Strömungsprozesse beschreiben lassen.

Gleichungen der Massenerhaltung:

$$\begin{aligned} \varrho_{FR} \cdot \dot{n}_F + \operatorname{div} \mathbf{w}_F &= 0 \\ - \varrho_{GR} \cdot \dot{n}_F + (n - n_F) \cdot \dot{\varrho}_{GR} + \operatorname{div} \mathbf{w}_G &= 0 \end{aligned}$$

Gleichungen zur Erhaltung der Bewegungsgröße:

$$\begin{aligned} RT \cdot \operatorname{grad} \varrho_{GR} + \operatorname{grad} F_{CF}(n_F) - \varrho_{FR} \cdot \mathbf{b} + \frac{1}{n_F} \dot{\mathbf{w}}_F - \frac{\dot{n}_F}{n_F^2} \cdot \mathbf{w}_F \\ + r_{FF}(n_F) \cdot \mathbf{w}_F + r_{FG}(n_F, \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{w}_G &= \mathbf{0} \\ RT \cdot \operatorname{grad} \varrho_{GR} - \varrho_{GR} \cdot \mathbf{b} + \frac{1}{n - n_F} \cdot \dot{\mathbf{w}}_G - \left(\frac{\dot{\varrho}_{GR}}{(n - n_F) \cdot \varrho_{GR}} - \frac{\dot{n}_F}{(n - n_F)^2} \right) \cdot \mathbf{w}_G \\ + r_{GF}(n_F) \cdot \mathbf{w}_F + r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{w}_G &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

Die Prozeßvariablen sind hierbei der Volumenanteil des Wassers n_F , die Realdichte der Luft ϱ_{GR} , die Massenstromdichte des Wassers \mathbf{w}_F und die Massenstromdichte der Luft \mathbf{w}_G . Die im Modell enthaltenen System- und Materialparameter wie die Realdichte des Wassers ϱ_{FR} , der Volumenanteil der Poren n und die Beschleunigung des Systems \mathbf{b} sind zu Beginn jedes Berechnungsprozesses festzulegen.

In beiden Bewegungsgleichungen ist ein Term mit dem Gradienten des realen Luftdrucks enthalten, der den Druckausgleich zwischen den Fluiden regelt. Dazu wird das bekannte Gesetz von Boyle-Mariotte mit der Proportionalitätskonstanten RT verwendet. Die Terme mit den Zeitableitungen der Massenstromdichten bilden die Massenträgheitskräfte, die aus der Beschleunigung der Fluide entstehen, ab.

In dem vorgestellten Gleichungssystem sind noch einige Funktionen enthalten, die das mechanische Verhalten der drei Phasen und deren Wechselwirkungen beschreiben. Die Funktion F_{CF} stellt einen Ausdruck für die Kapillarkraft dar. Die Funktionen r_{FF} , r_{GG} , r_{FG} und r_{GF} repräsentieren die Widerstände, die der Boden auf die strömenden Fluide und die Fluide aufeinander ausüben.

1.2 Ausgangsgleichungen für die numerische Umsetzung

Für die Entwicklung eines Finite Elemente Programms wird das mechanische Modell so weit wie möglich vereinfacht. So werden sowohl die Massenträgheitskräfte, die aus der Beschleunigung der Fluide infolge ihrer Relativbewegung entstehen, wie auch die Kraftwirkungen, die die Fluide gegenseitig auf einander ausüben, vernachlässigt. In den Bewegungsgleichungen entfallen daher die Zeitableitungen sowie die Widerstände r_{FG} und r_{GF} . Die Ergebnisse, die mit dem verbleibenden Gleichungssystem berechnet werden, sind dadurch vergleichbar mit Ergebnissen der klassischen Feldgleichungen. Das vereinfachte Gleichungssystem besitzt die Form:

$$\begin{aligned}
 \varrho_{FR} \cdot \dot{n}_F + \operatorname{div} \mathbf{w}_F &= 0 \\
 -\varrho_{GR} \cdot \dot{n}_F + (n - n_F) \cdot \dot{\varrho}_{GR} + \operatorname{div} \mathbf{w}_G &= 0 \\
 RT \cdot \operatorname{grad} \varrho_{GR} + \operatorname{grad} F_{CF}(n_F) - \varrho_{FR} \cdot \mathbf{b} + r_{FF}(n_F) \cdot \mathbf{w}_F &= \mathbf{0} \\
 RT \cdot \operatorname{grad} \varrho_{GR} &\quad - \varrho_{GR} \cdot \mathbf{b} + r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{w}_G = \mathbf{0}
 \end{aligned}$$

Um die entwickelten Gleichungssysteme lösen zu können, entstand bereits während der Entwicklung des mechanischen Modells eine enge Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. rer. nat. Gerhard Starke (Universität Hannover, vormals Universität Essen, Fachbereich Mathematik)¹. Für die ersten Arbeitsschritte wurden bewußt einfache Ansätze gewählt, um die numerische Umsetzung des Modells zu erleichtern und es damit zunächst verifizieren zu können.

Für die Parametrisierung der Kapillaritätsfunktion wird in der Testphase ein kubisches Polynom verwendet:

$$F_{CF}(n_F) = \alpha_{CF3} \cdot \left(\frac{n_F}{n}\right)^3 + \alpha_{CF2} \cdot \left(\frac{n_F}{n}\right)^2 + \alpha_{CF1} \cdot \left(\frac{n_F}{n}\right) + \alpha_{CF0}$$

Bei der Festlegung der Parameter α_{CF0} , α_{CF1} , α_{CF2} und α_{CF3} ist darauf zu achten, daß die Kapillaritätsfunktion im maßgebenden Bereich von 0 bis n monoton ansteigt. Ein typische Verlauf für die Kapillaritätsfunktion mit den Bodenparametern nach Tabelle 2 ist in der Abbildung 1 dargestellt.

Für die Widerstandsterme werden Exponentialfunktionen angesetzt:

$$\begin{aligned}
 r_{FF}(n_F) &= \frac{R \cdot n \cdot \eta_F}{\varrho_{FR}} \cdot \frac{1}{n_F} \cdot \left[\frac{n_F}{n} + \alpha_{FS1} \cdot \left(1 - \frac{n_F}{n}\right)^{\alpha_{FS2}} \right] \\
 r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) &= \frac{R \cdot n \cdot \eta_G}{\varrho_{FR}} \cdot \frac{1}{(n - n_F)} \cdot \left[1 - \frac{n_F}{n} + \alpha_{GS1} \cdot \left(\frac{n_F}{n}\right)^{\alpha_{GS2}} \right]
 \end{aligned}$$

¹Für die gute Zusammenarbeit sei an dieser Stelle herzlich gedankt

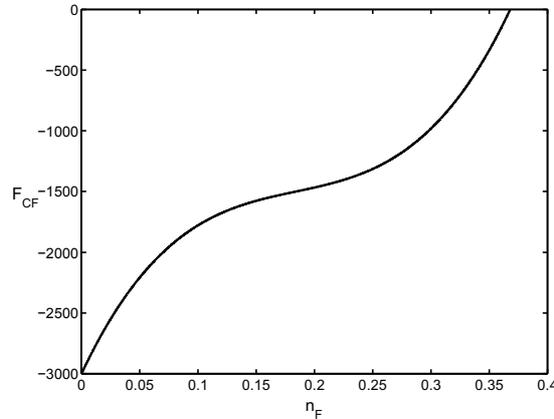


Abbildung 1: Kapillaritätsfunktion F_{CF}

Die Charakterisierung der beiden Fluide erfolgt durch die Angabe ihre Viskositäten, η_F für das Wasser und η_G für die Luft. Der durchströmte Boden wird als isotrop angesehen, wodurch die Resistivität R des Bodens mit einem skalaren Wert, dem Kehrwert der Permeabilität, angegeben werden kann. Die Parameter α_{FS1} , α_{FS2} , α_{GS1} und α_{GS2} beschreiben die Durchlässigkeitsigenschaften des teilgesättigten Bodens im Vergleich zum gesättigten Boden. Der steile, exponentielle Anstieg der Kurven in den Grenzbereichen der Sättigungen ersetzt dabei die traditionellen Ansätze mit Restsättigungen [2].

1.3 Numerische Erfordernisse für die Berechnung

Anfangs- und Randbedingungen

Die verbleibenden Gleichungen sind nun mit den altbekannten klassischen Gleichungen vergleichbar. Das Vorgehen bei der Lösung, das der vorhandenen Literatur entnommen werden kann, ist wie folgt: Es werden die beiden Bewegungsgleichungen zu den Massenflüssen hin umgeformt und in die Gleichungen der Massenerhaltung eingesetzt [3]. Als Prozeßvariablen dienen bei diesem Verfahren zwei skalare Variablen, traditionell zwei Drücke. Für das vorgestellte Gleichungssystem sind das hier jedoch der Volumenanteil des Wassers n_F und die Realdichte der Luft ϱ_{GR} . Diese sind bei der zeitabhängigen Problemstellung auf dem gesamten betrachteten Gebiet als Anfangsbedingungen anzugeben.

Die Randbedingungen sind ebenfalls für beide strömenden Phasen vorzugeben. Dazu kann der Rand jeweils in Teilbereiche aufgeteilt werden. Auf einem Teil werden die Werte der skalaren Prozeßvariablen vorgegeben (= Dirichlet-Randbedingungen), auf dem restlichen Teil ist die Vorgabe der Normalkomponente des jeweiligen Massenflusses erforderlich (= Neumann-Randbedingungen). Die Teilbereiche für die beiden Fluide können jeweils verschieden gewählt werden, jedoch muß für beide Variablen der komplette Rand abgedeckt sein [2].

Regularisierung

Das Auftreten numerischer Stabilitätsprobleme in den Grenzbereichen der Sättigung wird durch die Einführung eines Faktors ε (Größenordnung z.B. $\varepsilon = 10^{-3}$) zur Regularisierung der Widerstandsterme vermieden.

$$r_{FF}(n_F) = \frac{R \cdot n \cdot \eta_F}{\varrho_{FR}} \cdot \frac{1}{n_F + \varepsilon \cdot (n - n_F)} \cdot \left[\frac{n_F}{n} + \alpha_{FS1} \cdot \left(1 - \frac{n_F}{n} \right)^{\alpha_{FS2}} \right]$$

$$r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) = \frac{R \cdot n \cdot \eta_G}{\varrho_{GR}} \cdot \frac{1}{n - n_F + \varepsilon \cdot n_F} \left[1 - \frac{n_F}{n} + \alpha_{GS1} \cdot \left(\frac{n_F}{n} \right)^{\alpha_{GS2}} \right]$$

Die regularisierten Widerstandsterme der Beispielrechnungen dieses Artikels sind in der Abbildung 2 für die Parameter aus Tabelle 2 dargestellt.

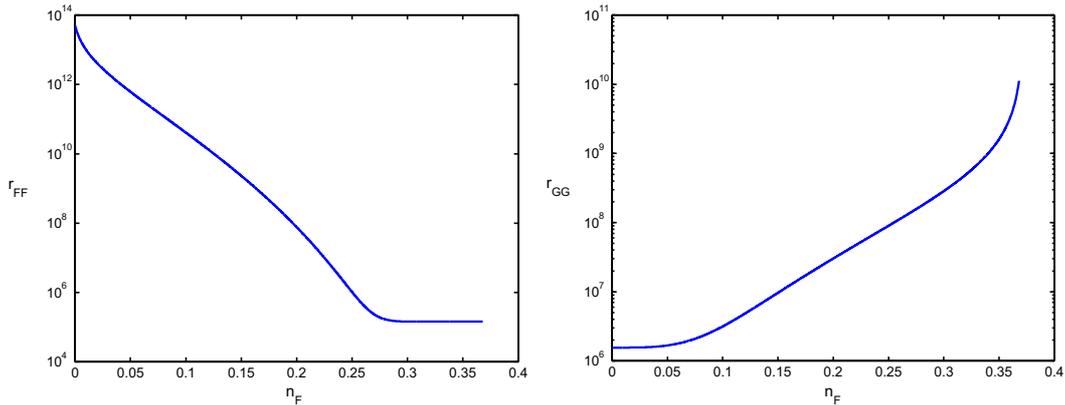


Abbildung 2: Regularisierte Widerstandsterme gegen Wasser r_{FF} und Luft r_{GG}

Subtraktion der Bewegungsgleichungen

Vor dem Aufstellen der Variationsformulierung wird die Bewegungsgleichung für die Luft von der Bewegungsgleichung des Wassers subtrahiert. Erst durch diese analytische Vorgehensweise ist für den gewählten gemischten Ansatz die oben beschriebene Vorgabe von Randbedingungen möglich. Der detaillierte Nachweis für diese erforderliche Umformung findet sich in [4].

2 Diskretisierung mit der Gemischten Methode

Das vereinfachte Gleichungssystem des mechanischen Modells erfordert eine Diskretisierung der Zeit und des Ortes. Für die Zeit wird eine implizite Euler Diskretisierung verwendet. Die Ortsdiskretisierung erfolgt mit Hilfe der Gemischten Finite Element Methode unter Verwendung der Raviart-Thomas Elemente niedrigster Ordnung.

2.1 Zeitdiskretisierung

Die Zeitableitungen werden durch eine zeitschrittweise Berechnung mit der Zeitschrittgröße τ ersetzt, wobei die aktuellen Prozeßvariablen n_F und ϱ_{GR} zum aktuellen Zeitpunkt aus den Werten n_F^{alt} und ϱ_{GR}^{alt} des vorangegangenen Zeitschritts berechnet werden. Zusammen mit der Subtraktion der Bewegungsgleichungen ergeben sich die folgenden vier Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 (n_F - n_F^{alt}) \cdot \varrho_{FR} + \tau \cdot \operatorname{div} \mathbf{w}_F &= 0 \\
 (n - n_F) \cdot \varrho_{GR} + (n - n_F^{alt}) \cdot \varrho_{GR}^{alt} + \tau \cdot \operatorname{div} \mathbf{w}_G &= 0 \\
 \operatorname{grad} F_{CF}(n_F) - (\varrho_{FR} - \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{b} + r_{FF}(n_F) \cdot \mathbf{w}_F - r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{w}_G &= \mathbf{0} \\
 RT \cdot \operatorname{grad} \varrho_{GR} - \varrho_{GR} \cdot \mathbf{b} + r_{GG}(n_F, \varrho_{GR}) \cdot \mathbf{w}_G &= \mathbf{0}
 \end{aligned}$$

2.2 Ortsdiskretisierung

Bei vielen Strömungsproblemen besteht ein gleiches oder höheres Interesse an den Flüssen als an den skalaren Variablen. Die Massenstromdichten des Wassers und der Luft werden daher als zusätzliche Prozeßvariablen beibehalten. Bei der numerischen Umsetzung wird direkt mit dem Gleichungssystem des letzten Abschnitts gearbeitet. Dadurch ist eine gleichzeitige Approximation aller vier Prozeßvariablen mit der gleichen Genauigkeitsordnung möglich. Die dazugehörige variationelle Formulierung wird üblicherweise als gemischte Formulierung des Problems bezeichnet.

Wahl der Ansatzfunktionen

Die Prozeßvariablen können nicht mit analytischen Methoden bestimmt werden, daher wird die Lösung nur noch näherungsweise innerhalb bestimmter Funktionen, den Ansatzfunktionen, gesucht. Gemäß der Forderung der Gemischten Methode sind dazu sowohl Ansatzfunktionen für die Bestimmung der skalaren Größen φ als auch für die Approximation der Flüsse ψ erforderlich, wie aus der Tabelle 1 ersichtlich ist. Die Aufstellung der gemischten Variationsformulierung wird zunächst allgemeingültig erläutert, ohne detailliert auf die verwendeten Finite Elementansätze einzugehen. Bei der Gemischten Methode nach Raviart-Thomas [8], [1] werden die Randbedingungen für die Massenflüsse in die Ansatzfunktionen eingebaut, d.h. die Ansatzfunktionen für die Flüsse müssen die Randbedingungen auf den Neumann-Rändern

exakte Lösung	Naherungslosung		Ansatzfunktion	
n_F	\tilde{n}_F	=	$f(\varphi)$	frei wahlbar
q_{GR}	\tilde{q}_{GR}	=	$f(\varphi)$	frei wahlbar
\mathbf{w}_F	$\tilde{\mathbf{w}}_F$	=	$f(\boldsymbol{\psi})$	erfullt Neumann-RB
\mathbf{w}_G	$\tilde{\mathbf{w}}_G$	=	$f(\boldsymbol{\psi})$	erfullt Neumann-RB

Tabelle 1: Ansatzfunktionen

erfullen. Die Ansatzfunktionen fur die skalaren Groen konnen zunachst frei gewahlt werden. Die Dirichlet-Randbedingungen werden nach Umformungen des resultierenden Gleichungssystems implizit uber Randintegrale erfullt.

Variationsformulierung

Da die Losung fur die unbekanntenen Prozevariablen nur noch innerhalb der festgelegten Ansatzfunktionen gesucht wird, kann das System der Differentialgleichungen nicht mehr exakt erfullt werden. Fur die Aufstellung der Variationsformulierung, der schwachen Formulierung, wird das Gleichungssystem mit geeigneten Testfunktionen multipliziert. Gema der Methode der gewichteten Residuen [9] wird die gesuchte Naherungslosung gefunden, indem die Gleichungsfehler bezuglich der Testfunktionen im integralen Mittel uber dem Gebiet zu Null werden. Das Verfahren nach Galerkin stellt einen Sonderfall der Methode der gewichteten Residuen dar. Bei diesem Verfahren werden fur die Testfunktionen die Ansatzfunktionen der Naherungsansatze verwendet [9].

Die gemischte Variationsformulierung fur das vorgestellte Modell lautet damit:

$$\begin{aligned}
& \iint_{\Omega} (\tilde{n}_F - n_F^{alt}) \cdot q_{FR} \cdot \varphi_j \, dx \, dy + \tau \cdot \iint_{\Omega} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{w}}_F \cdot \varphi_j \, dx \, dy &= 0 \\
& \iint_{\Omega} (n - \tilde{n}_F) \cdot \tilde{q}_{GR} \cdot \varphi_j \, dx \, dy - \iint_{\Omega} (n - n_F^{alt}) \cdot q_{GR}^{alt} \cdot \varphi_j \, dx \, dy \\
& \quad + \tau \cdot \iint_{\Omega} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{w}}_G \cdot \varphi_j \, dx \, dy &= 0 \\
& \iint_{\Omega} \operatorname{grad} F_{CF}(\tilde{n}_F) \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy - \iint_{\Omega} \mathbf{b} \cdot (q_{FR} - \tilde{q}_{GR}) \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy \\
& \quad + \iint_{\Omega} r_{FF}(\tilde{n}_F) \cdot \tilde{\mathbf{w}}_F \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy - \iint_{\Omega} r_{GG}(\tilde{n}_F, \tilde{q}_{GR}) \cdot \tilde{\mathbf{w}}_G \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy &= 0 \\
& \iint_{\Omega} RT \cdot \operatorname{grad} \tilde{q}_{GR} \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy - \iint_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \tilde{q}_{GR} \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy \\
& \quad + \iint_{\Omega} r_{GG}(\tilde{n}_F, \tilde{q}_{GR}) \cdot \tilde{\mathbf{w}}_G \cdot \boldsymbol{\psi}_i \, dx \, dy &= 0
\end{aligned}$$

Einbau der Randbedingungen

Probleme stellen in der gemischten Formulierung die Integrale dar, in denen die Gradienten der skalaren Variablen auftreten. Durch Anwendung der partiellen Integration lassen sich diese Integrale aufspalten. In die dabei entstehenden Randintegrale werden die Dirichlet-Randbedingungen eingebaut [4].

Linearisierung des Gleichungssystems

Auch nach dem Einbau der Randbedingungen bleiben Terme bestehen, in denen mehrere der unbekanntes Prozeßvariablen in nichtlinearer Form enthalten sind. Um diese Ausdrücke zu vereinfachen wird das Gleichungssystem mit Hilfe des Gauß-Newton Verfahrens linearisiert. Dabei werden im aktuellen Zeitschritt nur die Änderungen der Prozeßvariablen δn_F , $\delta \varrho_{GR}$, $\delta \mathbf{w}_F$, $\delta \mathbf{w}_G$ zu den Werten des vorherigen Zeitschritts bzw. des Anfangswerts berechnet.

Es entsteht ein lineares Gleichungssystem der Form:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{13} & \mathbf{A}_{14} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \mathbf{A}_{23} & \mathbf{A}_{24} \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} & \mathbf{A}_{34} \\ \mathbf{A}_{41} & \mathbf{A}_{42} & \mathbf{A}_{43} & \mathbf{A}_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta n_F \\ \delta \varrho_{GR} \\ \delta \mathbf{w}_F \\ \delta \mathbf{w}_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{f}_3 \\ \mathbf{f}_4 \end{pmatrix},$$

aus dem sich die vier Prozeßvariablen für einen Zeitschritt in einem Rechendurchgang bestimmen lassen.

3 Ansatz mit Gemischten Finiten Elementen

Wie bei jedem Finiten Element Ansatz wird das Berechnungsgebiet in eine endliche Anzahl einzelner Elemente unterteilt. Dadurch wird die Verwendung einfacher Ansatzfunktionen auf jedem Element möglich. Die Herleitungen im letzten Kapitel haben deutlich gemacht, daß dafür zwei verschiedene Funktionen benötigt werden, eine Funktion φ zur Ermittlung der skalaren Größen und eine Ansatzfunktion ψ zur Approximation der Flüsse. Für unsere Berechnungen werden die Raviart-Thomas-Dreieckselemente niedrigster Ordnung für die vektorwertigen Variablen verwendet. Da die verschiedenen Variablen in den Bewegungsgleichungen zusammen auftreten, muß diese Beziehung auch bei der Wahl der Ansatzfunktionen berücksichtigt werden. Es läßt sich zeigen, daß die skalaren Variablen mit einem elementweise konstantem Ansatz $\varphi = 1$ auf jedem Element eindeutig bestimmt werden können [1].

Das Programm zur Simulation von Zweiphasenströmungen wurde in einer eindimensionalen und in einer zweidimensionalen Version entwickelt. Im Folgenden sollen die zweidimensionalen Raviart-Thomas Elemente näher vorgestellt werden. An diesen läßt sich der Ansatz der Flußvariablen deutlich erkennen.

Bei den Elementen niedrigster Ordnung, den RT_0 -Elementen, wird ein linearer Verlauf des Flusses angesetzt. Die Ansatzfunktionen lauten in der allgemeinen Form [1]:

$$\psi(x, y) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + c \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Die Definition der Basisfunktionen erfolgt über den Fluß in Richtung der nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektoren \mathbf{n} (s. Abbildung 3).

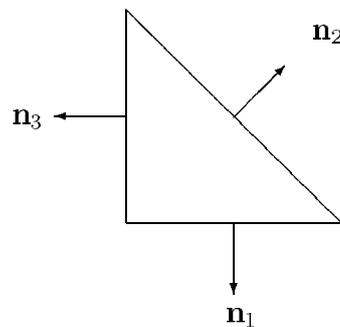


Abbildung 3: Normalenvektoren am Einheitsdreieck

Die Normalkomponente des Flusses $\mathbf{n} \cdot \psi$ wird dabei als konstant entlang der Kanten angesetzt. Der vektorwertige Fluß ist bei dieser Vorgabe durch drei Basisfunktionen auf jedem Element eindeutig festgelegt. Für die Basisfunktionen gilt:

$$\psi_i(e_j) \cdot \mathbf{n}_j = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j \end{cases} \text{ für } i, j = 1, 2, 3$$

e_i : Bezeichnung einer Kante
 i, j : Zähler für die Kanten

Die drei Basisfunktionen der RT_0 -Elemente sind am Einheitsdreieck in Abbildung 4 dargestellt.

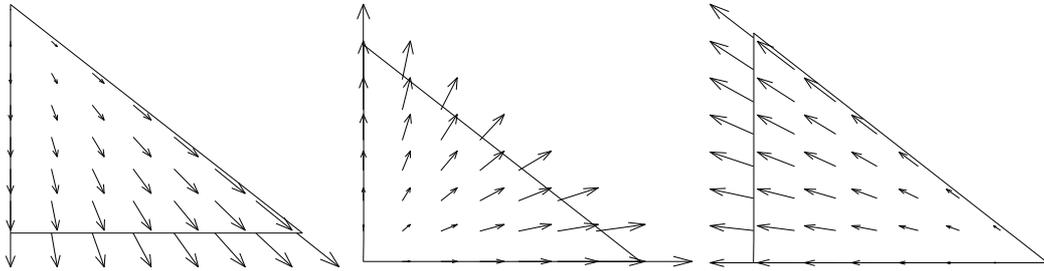


Abbildung 4: Basisfunktionen am Einheitsdreieck

4 Numerische Rechenbeispiele

Zum Abschluß werden zwei verschiedene Beispiele vorgestellt. Diese verifizieren das in Kapitel 1 vorgestellte mechanische Modell und zeigen die Effektivität der gemischten Finite Element Methode. Die Bodenparameter des Modells müssen noch näher bestimmt werden. In der Tabelle 2 sind die in den vorgestellten Rechenbeispielen verwendeten Parameter zusammengestellt. Diese sind lediglich als eine Arbeitshypothese aufzufassen.

Porenanteil	$n =$	0,368
Resistivität des Korngefüges	$R =$	$1,1 \cdot 10^{11} \text{ 1/m}^2$
Parameter des Widerstandsterms gegen Wasser	$\alpha_{FS1} =$	3 570 000
	$\alpha_{FS2} =$	12
Parameter des Widerstandsterms gegen Luft	$\alpha_{GS1} =$	72
	$\alpha_{GS2} =$	3,5
Parameter der Kapillaritätsfunktion	$\alpha_{CF3} =$	-3000 N/m ²
	$\alpha_{CF2} =$	7500 N/m ²
	$\alpha_{CF1} =$	-13500 N/m ²
	$\alpha_{CF0} =$	9000 N/m ²

Tabelle 2: Parameter des starren Korngefüges

Das erste Beispiel simuliert einen Laborversuch. Die dafür verwendete einfachere eindimensionale Variante soll für eine spätere Parameteridentifizierung verwendet werden. Das zweite Beispiel stammt aus dem Bereich des Tunnelbaus und verdeutlicht die Entstehung eines zweidimensionalen Strömungsfeldes.

Für die programmtechnische Umsetzung wird das MATLAB5-Paket [6] mit der PDE (Partial Differential Equations)-Toolbox [5] verwendet. Die Programmiersprache MATLAB arbeitet matrixorientiert. Die vielen auf Matrizen abgestimmten Funktionen wie z.B. die Matrizenmultiplikation und Invertierung erleichtern die Handhabung linearer Gleichungssysteme. Für die zweidimensionale Programmvariante werden zusätzlich Teile der PDE-Toolbox verwendet. Deren Funktionen berechnen die

Ausgangstriangulierung und Verfeinerungen des Strömungsgebiets. Die so erzeugten Geometriedaten werden ebenfalls in Matrizen abgelegt. Die zur Verfügung gestellte Benutzeroberfläche wird nicht benutzt. Ein wesentlicher Programmierschritt, neben der Implementierung der Gleichungen des mechanischen Modells, besteht in der Kopplung der verwendeten Ansatzfunktionen mit den vom Programm erzeugten Punkt-, Rand- und Dreiecksmatrizen, wobei auf die Erfahrungen aus anderen Forschungsarbeiten der Arbeitsgruppe von Prof. Starke zurückgegriffen werden konnte.

4.1 Kapillare Steighöhe

Bei diesem Beispiel wird der kapillare Anstieg von Wasser in einer 1 m hohen Bodensäule simuliert. Bei dem eindimensionalen Strömungsproblem ist die Angabe von Randbedingungen am oberen und unteren Punkt der Strömungslinie erforderlich. Für das Beispiel werden ausschließlich Dirichletbedingungen für die Luft und für das Wasser vorgegeben. Während des Versuchs soll die Bodensäule 0,5 m tief in Wasser eintauchen. Dies entspricht einer Realdichte der Luft von $\rho_{GR} = 1,31 \text{ kg/m}^3$ am unteren Punkt. Mit der Bedingung $n_F = n$ wird sichergestellt, daß der Boden an dieser Stelle für alle Zeitpunkte vollständig gesättigt ist. Der obere Rand ist vollkommen trocken ($n_F = 0$) und es herrscht der atmosphärischer Luftdruck ($\rho_{GR} = 1,25 \text{ kg/m}^3$). Die Randwerte entsprechen den Bedingungen zu Beginn der Berechnung. Zum Testen des Programms wird als Anfangsbedingung eine lineare Verteilung der skalaren Prozeßvariablen zwischen diesen Werten vorgegeben.

Für die Simulation wird eine Elementgröße von $h = 0,002 \text{ m}$ gewählt. Die Kurven in der Abbildung 5 zeigen die Entwicklung der Sättigung, ausgedrückt über den Volumenanteil des Wassers n_F , und der Realdichte der Luft ρ_{GR} zu Beginn der Berechnung und nach 4, 6, 12, 22 Minuten sowie nach 6 Stunden. Die Massenstromdichten für das Wasser und die Luft zu denselben Zeitpunkten sind in der Abbildung 6 dargestellt. Wie die Kurven für die Realdichte der Luft zeigen, hat die unrealistische Vorgabe der Anfangsbedingung kaum Einfluß auf die Berechnung. Bereits in den ersten Rechenschritten stellt sich die erwartete Dichteverteilung ein. Oberhalb des vorgegebenen Wasserspiegels von 0,5 m nimmt die Realdichte der Luft einen konstanten Wert an, der mit dem atmosphärischem Luftdruck korrespondiert. Im Bereich des Wassers erhält man eine lineare Verteilung, die dem hydrostatischem Druck entspricht. Die Entwicklung der Sättigung hingegen ist zeitabhängig. In unserer Berechnung ist nach einer Simulationszeit von 6 Stunden nur noch ein geringer Wasserfluß zu beobachten und die Kurve auf der linken Seite von Abbildung 5 zeigt eine typische Sättigungsverteilung: Bis zu dem vorgegebenen Wasserspiegel von 0,5 m ist der Boden vollständig mit Wasser gesättigt, darüber befindet sich eine teilgesättigte Zone, in der sich die Wassersättigung erhöht hat. Aus dieser Zone des kapillaren Anstiegs läßt sich die kapillare Steighöhe ablesen. Im Bereich am oberen Ende der Probe ist der Wassergehalt unverändert geblieben ist. Die Abbildung 6 zeigt, wie das einströmende Wasser die Luft verdrängt und wie die Bereiche, in denen Bewegungen der beiden Fluide zu beobachten sind, mit der Änderung der Sättigungsverteilung korrespondieren.

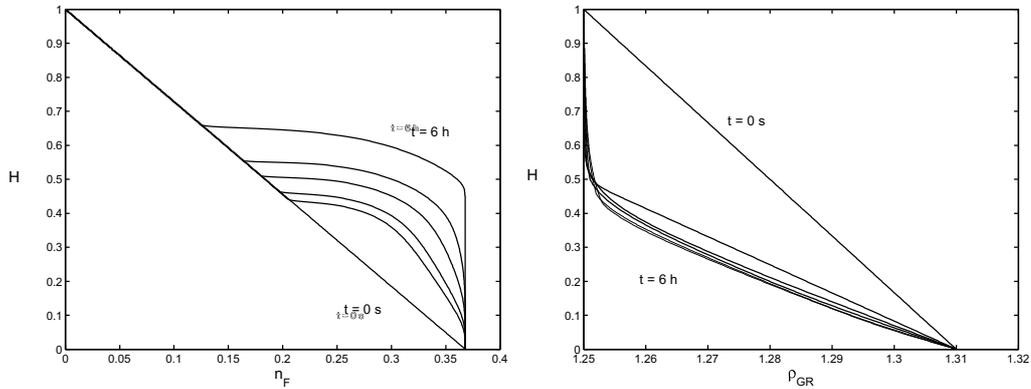


Abbildung 5: n_F und ρ_{GR} zu unterschiedlichen Zeitpunkten

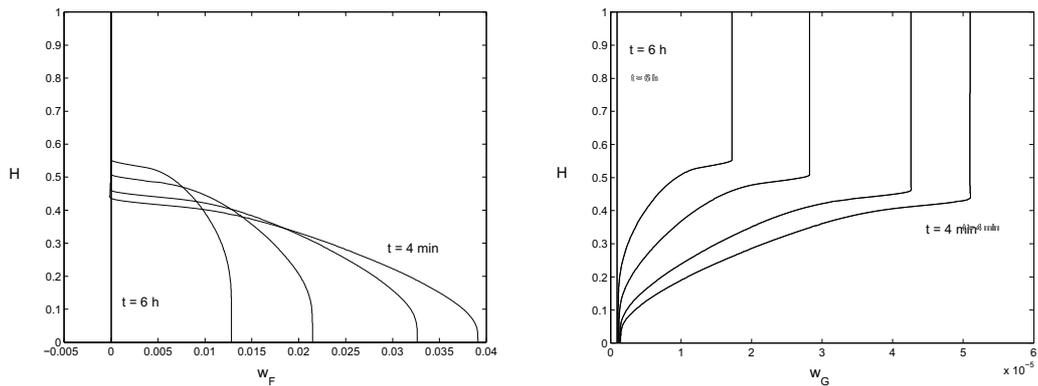


Abbildung 6: w_F und w_G zu unterschiedlichen Zeitpunkten

4.2 Tunnelvortrieb unter Druckluft

Das zweite Rechenbeispiel simuliert das Prinzip eines Tunnelvortriebs unter Grundwasser mit Druckluftbetrieb (vgl. [3]). Ein Luftdruck innerhalb des Tunnels verhindert dabei den Wassereintritt in den Tunnel. Für die Berechnungen wird ein Strömungsgebiet von 5 m Länge und einer Tiefe von 3 m betrachtet, wobei eine Aussparung von 1 Meter mal 1 Meter an der linken unteren Ecke einen Teil des Tunnels repräsentiert. Der Boden ist zu Beginn vollständig gesättigt ($n_F = n$). Er soll einen Wasserüberstau von einem Meter erfahren, wobei der korrespondierende hydrostatische Druck wiederum über die Vorgabe der Realdichte der Luft angegeben wird. Diese steigt zu Beginn der Berechnung von einem Wert $\rho_{GR} = 1,37 \text{ kg/m}^3$ am

oberen Rand linear bis zu dem Wert $\rho_{GR} = 1,74 \text{ kg/m}^3$ am unteren Rand an. Am oberen horizontalen Rand werden die Werte der Anfangsbedingungen als Dirichlet-Randbedingungen während der Berechnung beibehalten. An den übrigen Rändern werden Neumann-Bedingungen vorgegeben. Um die Vorteile der gemischten Methode an diesem zweidimensionalen Beispiel verdeutlichen zu können, wird für die Berechnung an der Ortsbrust des Tunnels ein konstanter Massenfluß der Luft senkrecht zum Rand von $\mathbf{n} \cdot \mathbf{w}_G = -0,01 \text{ kg/m}^2\text{s}$ als Randbedingung vorgegeben und auf die traditionelle und technisch sinnvollere Vorgabe eines konstanten Luftdrucks verzichtet. An den bisher nicht näher beschriebenen Rändern wird ein Nullfluß für Wasser und Luft vorgeschrieben.

Wie aus der Abbildung 7 ersichtlich ist, wurde das Beispiel mit einer sehr groben Vernetzung gerechnet. Bereits mit dieser geringen Anzahl an Elementen ist eine qualitative Verifizierung des mechanischen Modells möglich, und es zeigt sich die Effizienz des numerischen Verfahrens. Im Gegensatz zu der normalerweise praktizierten und erforderlichen feinen Triangulierung (vgl. [4]) sind hier jedoch die einzelnen lokalen Massenflüsse aus dem Plot erkennbar.

Die Abbildung 7 zeigt die Ergebnisse für die vier Prozeßvariablen nach 20, 100 und 200 Sekunden. Im Bereich vor der Ortsbrust wird durch die einströmende Luft ein Teil des Wassers aus den Poren des Bodens verdrängt, dieses Wasser entweicht über den oberen Rand. Im Bereich der Einströmung erhöht sich der Druck. Es ist aber auch erkennbar, daß die Luft das Wasser nicht vollständig verdrängen kann, es bleibt ein Restwassergehalt, der in dem gesamten entwässerten Bereich einen konstanten Wert annimmt. Das selbe Beispiel wird in [4] in einer feineren Triangulierung aber für die gleichen Zeitschritte dargestellt. Qualitativ sind die Ergebnisse gleichwertig.

5 Ausblick

In den beiden vorgestellten Beispielrechnungen wurden bereits mit den geschätzten Parametern die vermuteten Ergebnisse erzielt. Für den Sonderfall des starren Korngefüges können mit dem mechanischen Modell die beiden am Strömungsprozeß beteiligten Phasen Wasser und Luft bilanziert werden. Die Aufstellung einer gemischten Variationsformulierung und die Verwendung der Raviart-Thomas Elemente erlauben die direkte Berechnung des Strömungsfeldes.

Die Bearbeitung konkreter Problemstellungen erfordert in den nächsten Schritten zunächst eine Parameteridentifizierung, wobei die verwendeten und geschätzten Parameter bereits eine gute Ausgangsbasis bilden. Die Vorteile des vorgestellten und verifizierten Modells werden jedoch erst vollständig zum Tragen kommen, wenn die größeren Möglichkeiten des mechanischen Modells, die dieses im Vergleich zu den Standardmodellen bietet, in die numerische Implementierung miteinbezogen werden.

Literatur

- [1] BREZZI, F.; FORTIN, M.: *Mixed and Hybride Finite Element Methods*. New York: Springer Verlag, 1991
- [2] CHAVENT, G.; JAFFRE, J.: *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1986
- [3] GÜLZOW, Hans-Georg: *Dreidimensionale Berechnung des Zweiphasenströmungsfeldes beim Tunnelvortrieb unter Druckluft in wassergesättigten Bodens*. Veröffentlichungen des Instituts für Grundbau, Bodenmechanik, Felsmechanik und Verkehrswasserbau der RWTH Aachen, Heft 25, 1994
- [4] KORSawe, J.; PERAU, E.; POTTHOFF, S. ; STARKE, G.: Numerical Approximation of Water-Air Two-Phase Flow by the Mixed Finite Element Method. (2000). – eingereicht bei Computational Geosciences
- [5] MATLAB5: *Partial Differential Equation Toolbox - User's Guide*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 1997
- [6] MATLAB5: *Using MATLAB*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 1997
- [7] PERAU, Eugen: *Die Phasen des Bodens und ihre mechanischen Wechselwirkungen*. Mitteilungen aus dem Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik, Heft 28, Universität Essen, 2001
- [8] RAVIART, P.A.; THOMAS, J.M.: A Mixed Finite Element Method For 2-nd Order Elliptic Problems. In: GALLIGANI, Ilio (Hrsg.): *Mathematical Aspects of Finite Element Methods*. Berlin: Springer Verlag, 1977, S. 292–315
- [9] ZIENKIEWICZ, O.C.; TAYLOR, R.L.: *The Finite Element Method*. 5. Auflage. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000

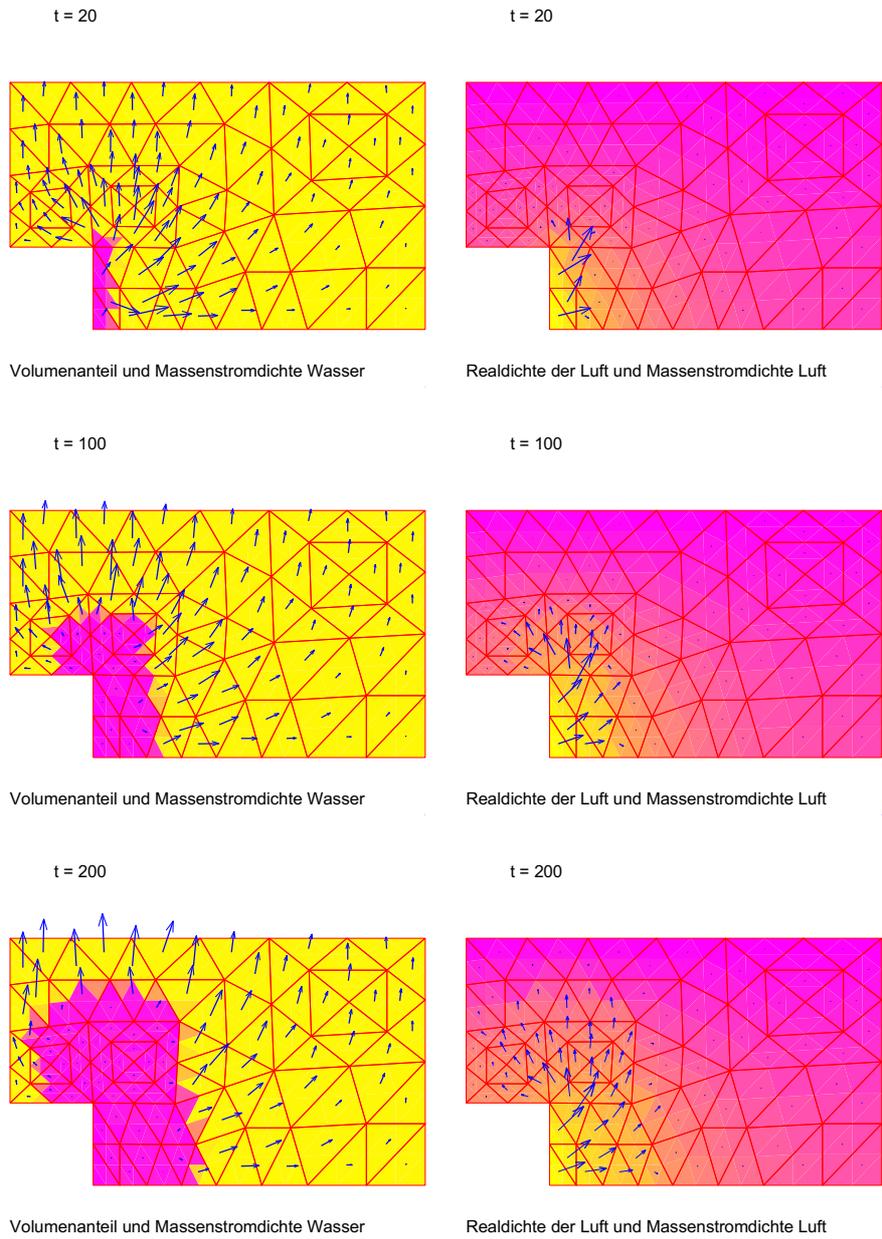


Abbildung 7: Prozeßvariablen für $t = 20, 100$ und 200 Sekunden