

Ein PLIC-basierter Ansatz zur Erfassung des Stoffübergangs an bewegten Phasengrenzflächen

*A. Schulz, C. Wecker, E. Y. Kenig, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik,
Universität Paderborn, Paderborn/Deutschland*

In der Vergangenheit, insbesondere der letzten zehn Jahre, wurden einige auf Computational Fluid Dynamics (CFD) basierende Methoden entwickelt, die den Stoffübergang an bewegten fluid-fluid Phasengrenzen beschreiben. Diese Methoden haben verschiedene Vorteile und Einschränkungen. In dieser Arbeit wird ein Zwei-Feld-Ansatz vorgestellt, der zur Simulation eines Fluid-fluid-Systems aus zwei inerten und einer übergelöhen Komponente eingesetzt wird.

Der verwendete Ansatz wurde mittels der Software OpenFoam® mit Finite Volumen realisiert. Die Phasengrenze dabei wurde mit der *Level Set* (LS) Methode fluiddynamisch erfasst. Die LS-Funktion ist eine Abstandsfunktion zur Phasengrenzfläche, die für den *Piecewise Linear Interface Construction* (PLIC) Algorithmus genutzt wird, um die Phasengrenzfläche zellweise durch ebene Flächen zu rekonstruieren. Wie bereits von Bothe und Fleckenstein [1] vorgeschlagen, werden die Zellen für die Berechnung des Stofftransports an den rekonstruierten Phasengrenzflächen geteilt.

An der Phasengrenze müssen zwei Randbedingungen erfüllt werden, nämlich der sich aus Gleichgewichtsbedingung ergebende Konzentrationssprung und die Kontinuität des Stoffflusses. Die vorgestellte Methode approximiert die dafür benötigten Konzentrationswerte und -gradienten unmittelbar an der Phasengrenze, sodass eine große Bandbreite von Diffusions- und Verteilungskoeffizienten mit hoher Genauigkeit erfasst werden kann. Eine weitere Herausforderung ist die genaue Beschreibung des konvektiven Stofftransports in der Nähe der Phasengrenze, die den Stoffübergang maßgeblich beeinflusst. Dafür werden die Stoffflüsse an Grenzflächenzellen approximiert und mittels eines für nicht-orthogonale Grenzflächenzellen erweiterten *Monotonized Central Limiter* Schemas [2] begrenzt. Der vorgeschlagene Ansatz wurde anhand verschiedener Testfälle für bewegte Tropfen und Blasen validiert.

Die Autoren danken dem „Paderborn Center for Parallel Computing (PC²)“ für die bereitgestellte Rechenleistung.

[1] D. Bothe, S. Fleckenstein: A Volume-of-Fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles. *Chemical Engineering Science*, 101, 283-302, 2013.

[2] P. Batten, C. Lambert, and D. M. Causon. Positively conservative high-resolution schemes for unstructured elements. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 39:1821–1838, 1996.