

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	ix
Tabellenverzeichnis	xiii
Symbolverzeichnis	xv
1 Einleitung	1
2 Grundlagen der Strömungsmechanik	5
2.1 Stationäre Strömungen	6
2.2 Turbulente Strömungen	6
2.3 Randbedingungen	7
2.3.1 Haftbedingung	7
2.3.2 Slip-Randbedingung	8
3 Theorie Poröser Medien	9
3.1 Parameter zur Beschreibung poröser Medien	9
3.2 Erweiterungen	11
3.2.1 Abweichungen von der Haftbedingung auf Porenebene	12
3.2.2 Erweiterung für hohe Reynoldszahlen	13
4 Simulation von Strömungen in porösen Medien	15
4.1 Anforderungsprofil	15
4.2 Kurze Einführung und Vergleich der verwendeten Methoden	16
4.2.1 Navier-Stokes-Löser	16
4.2.2 Lattice-Boltzmann-Methode (LBM)	16
4.2.3 Molekulardynamik (MD)	17
4.3 Verwendete Software	18
5 Anwendbarkeit von Kontinuumsmethoden für Strömungssimulationen in nanoporösen Medien	19
5.1 Stand der Forschung	20
5.2 Zieldefinition und Strategie	21
5.3 Definition eines Benchmark-Szenarios	23
5.4 Referenzlösungen unter Kontinuumsannahmen	24
5.5 Grundlagen der Molekulardynamik	24
5.5.1 Zusammenhang zwischen mikroskopischer und makroskopischer Betrachtung	25
5.5.2 Molekulardynamische Simulationen	27
5.5.3 Die Potentiale	28

5.5.4	Integration der Bewegungsgleichungen	30
5.5.5	Thermostate	30
5.5.6	Randbedingungen	32
5.5.7	Initialisierung	32
5.6	Wahl der Simulationsparameter	33
5.6.1	Validierung der Simulation	35
5.7	Ergebnisse	41
5.7.1	Definition der Wandposition in molekulardynamischen Simulationen	41
5.7.2	Simulationsfehler	42
5.7.3	Couette-Strömung	42
5.7.4	Poiseuille-Strömung	51
5.7.5	Krümmen-Durchströmung	56
5.7.6	Zylinder-Umströmung	63
5.8	Diskussion und Zusammenfassung	70
6	Die Lattice-Boltzmann-Methode zur hocheffizienten Simulation von Strömungen in komplexen Geometrien	75
6.1	Die Lattice-Boltzmann-Methode	76
6.1.1	Das Kollisionsintegral	77
6.1.2	Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung	77
6.1.3	Gleichgewichtsverteilung	79
6.1.4	Modifikation des Standard-Verfahrens zur inkompressiblen Lattice-Boltzmann-Methode	80
6.1.5	Anfangsbedingungen	81
6.1.6	Randbedingungen	83
6.1.7	Volumenkräfte	85
6.1.8	Gittereinheiten	86
6.1.9	Wahl der Simulationsparameter	87
6.2	Entwicklung einer Slip-Randbedingung für gekrümmte Geometrien	88
6.2.1	Das Slip-Reflection-Modell	88
6.2.2	Entwicklung eines makroskopischen Modells	90
6.2.3	Validierung der Randbedingung	92
7	Direkte numerische Simulation turbulenter Strömungen auf Porenebene	99
7.1	Benchmark-Geometrie	100
7.2	Kriterien für eine erfolgreiche DNS	101
7.2.1	Zeitliche Diskretisierung	102
7.2.2	Räumliche Diskretisierung	102
7.2.3	Abschätzung des Gesamtfehlers der Simulation	104
7.2.4	Größe des Rechengebietes	104
7.3	Start- und Randbedingungen	107
7.4	Der Übergang zum Forchheimer-Bereich und zu turbulenten Strömungen .	108
7.4.1	Durchgeführte Simulationen	108
7.4.2	Permeabilität und Verlustbeiwerte	109
7.4.3	Graphische Analyse	109
7.4.4	Statistische Auswertung	116

7.4.5	Forchheimer-Parameter	118
7.5	Die Frage der makroskopischen Turbulenz	118
7.5.1	Durchgeführte Simulationen	121
7.5.2	Graphische Analyse der turbulenten Strukturen	121
7.5.3	Statistische Auswertung	121
7.5.4	Grenzen der Untersuchung	131
7.5.5	Zusammenfassung	133
8	Zusammenfassung	135
A	Durchgeführte direkte numerische Simulationen mit der Lattice-Boltzmann-Methode	137
B	Rechenanforderungen	141
B.1	Molekulardynamische Simulationen	141
B.2	Direkte numerische Simulationen mit der LBM	142
	Literaturverzeichnis	145