

Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6449

**Ein adaptives Bewegte-Gitter-Verfahren zur Berechnung
von Aufschmelz- und Erstarrungsvorgängen***

I. Wintruff

Institut für Kern- und Energietechnik
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

*Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
2000

Ein adaptives Bewegte-Gitter-Verfahren zur Berechnung von Aufschmelz- und Erstarrungsvorgängen

Zusammenfassung

Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge stellen hohe Anforderungen an numerische Simulationen. Bewegte Phasengrenzen und temperaturabhängige Stoffwerte stellen zusätzliche Nichtlinearitäten in den beschreibenden Differentialgleichungen dar. Spezielle numerische Methoden sind zur Berechnung solcher freier Randwertprobleme erforderlich.

Ein neues *front-tracking*-Verfahren für konvektionsdominierte Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge in beliebig geformten zweidimensionalen Kavitäten wird vorgestellt. Das bewährte numerische Konzept einer kontrollvolumenbasierten Finite-Elemente-Methode (CVFEM) wird durch Koppelung mit einem adaptiven Bewegte-Gitter-Verfahren auf unstrukturierten Dreiecksgittern freien Randwertproblemen zugänglich gemacht. Dabei werden bewegte Phasengrenzen zu jedem Zeitpunkt explizit im numerischen Gitter aufgelöst und eine scharfe Trennung der einzelnen Phasen beibehalten. Um das numerische Modell auch für Probleme mit einem ausgeprägten Phasenübergangsbereich zwischen fester und flüssiger Phase (engl. *mushy zone*) anwenden zu können, wurde außerdem ein mehrphasiges Enthalpie-Porositätsmodell implementiert.

Lokale Gitteradaptionalgorithmen (Gitterrelaxation, Verfeinerung, Vergrößerung) werden eingesetzt, um eine Deformation des numerischen Gitters infolge bewegter Ränder zu verhindern. Auf diese Weise gelingt es selbst bei stark gekrümmten Rändern oder großskaliger Randbewegung eine gleichbleibende Gitterqualität aufrecht zu erhalten und numerische Fehler infolge verzerrter Elemente zu minimieren. Außerdem kann mit Hilfe der implementierten Gitteradaptionstools eine dynamische Veränderung der lokalen räumlichen Auflösung realisiert werden. Während transienter Rechnungen kann damit die lokale Auflösung der sich ändernden Physik (z. B. eine Änderung des Aggregatzustandes) angepaßt und die Effizienz der numerischen Simulation erhöht werden.

Zahlreiche Testrechnungen werden vorgestellt, um die Fähigkeiten des vorgestellten numerischen Verfahrens zu demonstrieren. Anhand des Vergleichs mit analytischen Lösungen, numerischen Benchmarklösungen und experimentellen Ergebnissen wird die Richtigkeit der erhaltenen Ergebnisse überprüft.

An adaptive moving grid model for numerical simulation of melting and solidification problems

Abstract

Numerical simulations of melting and solidification problems is a demanding field in computational fluid dynamics. A moving phase change interface and the temperature dependent thermophysical properties introduce additional non-linearities to the governing equations. Special numerical techniques are needed to perform accurate computations of free boundary problems.

A new front tracking method is presented to solve convection-dominated melting and solidification problems in arbitrarily formed enclosures. The well known numerical concept of a Control Volume based Finite Element Method is extended to moving boundary problems by an adaptive moving grid model based on unstructured triangular grids. At every sampling instant, the liquid-solid phase interface is resolved explicitly in the numerical grid. To extend the numerical model to phase change problems with phase transition regions between liquid and solid (mushy phases) a two-domain enthalpy-porosity model is also implemented.

Local grid adaption algorithms (relaxation, refinement, coarsening) are used to avoid grid distortion due to the moving interfaces. Even in problems involving large scale interface motion or boundary deformation, a continuous high quality grid can be preserved. Additional numerical errors due to highly-distorted elements are also minimised to as far as possible. Furthermore, the use of local grid adaption tools enables dynamical adaption of local grid resolution. During transient calculations local mesh sizes can be adapted on changing physics (e.g. a change in state) to increase computational efficiency.

Numerous test calculations are presented to demonstrate the ability of the numerical code. Simulation results are verified by comparison with analytical results, benchmark calculations and previous experimental data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung	3
2	Theoretische Grundlagen	4
2.1	Physikalische Phänomene	4
2.2	Physikalisches Modell	9
2.3	Erhaltungsgleichungen	11
2.4	Anfangs- und Randbedingungen	12
2.4.1	Hydrodynamische Randbedingungen	13
2.4.2	Thermische Randbedingungen	13
2.5	Dimensionslose Kennzahlen	14
3	Numerische Methoden auf unstrukturierten Gittern	15
3.1	Allgemeines	15
3.1.1	Methode der gewichteten Residuen	15
3.1.2	Unstrukturierte Rechengitter	16
3.1.3	Druckkorrekturverfahren	18
3.1.4	Versetzte und nichtversetzte Gitter	19
3.2	Überblick über CVFEM-Verfahren auf unstrukturierten Gittern	20
3.3	Konzeption des vorgestellten Verfahrens	21
3.3.1	Gebietsdiskretisierung	21
3.3.2	Integrale Erhaltungsgleichung im bewegten Kontrollvolumen	22
3.3.3	Interpolationsfunktionen	24

3.3.3.1	Interpolationsfunktionen für Stoffgrößen und Quellterme	24
3.3.3.2	Interpolationsfunktion für den Druck	25
3.3.3.3	Interpolationsfunktion für die allgemeine skalare Größe ϕ	25
3.3.4	Allgemeine diskretisierte Erhaltungsgleichung	30
3.3.4.1	Flußintegrale	30
3.3.4.2	Instationäre Integrale	32
3.3.4.3	Quelltermintegrale	32
3.3.4.4	Gesamte diskretisierte Erhaltungsgleichung	32
3.3.5	Spezielle diskretisierte Gleichungen	33
3.3.5.1	Druckgleichung	33
3.3.5.2	Druckkorrekturgleichung	33
3.3.5.3	Geschwindigkeitskorrekturgleichung	34
3.3.6	Gitterbewegung und Volumenerhaltungsgleichung	34
3.3.7	Zeitliche Diskretisierung	37
3.3.7.1	Allgemeines	37
3.3.7.2	Explizites Euler-Verfahren	40
3.3.7.3	Implizites Euler-Verfahren	40
3.3.7.4	Crank-Nicolson-Verfahren	41
3.3.8	Lineare Gleichungssysteme	41
3.3.9	Iterativer SIMPLER-Algorithmus	41
4	Numerische Behandlung von Phasenwechselproblemen	43
4.1	Allgemeines	43
4.1.1	Klassifizierung numerischer Modelle	43
4.1.2	Klassifizierung von Phasenwechselproblemen	46
4.1.3	Bewertung numerischer Modelle für Phasenwechselprobleme	47
4.2	Bewegte-Gitter-Verfahren	48
4.2.1	Behandlung diskreter Phasenübergänge	48
4.2.1.1	Diskretisierung der Stefanbedingung	49
4.2.1.2	Gittergeschwindigkeit innenliegender Knoten	51
4.2.1.3	Einordnung in das Gesamtverfahren	52
4.2.2	Kontinuierliche Phasenübergänge	54
4.2.2.1	Enthalpie-Porositätsmodell	54
4.2.2.2	Enthalpie-Porositätsmodell auf bewegten Gittern	56

5	Gittererzeugung und Gitteradaption	59
5.1	Gittererzeugung	60
5.2	Lokale Gitteradaption	62
5.2.1	Geometrische Gitterqualität	63
5.2.2	Verteilung der Gitterpunkte im Rechengebiet	65
5.2.3	Gitterverfeinerung	66
5.2.4	Gittervergrößerung	68
5.2.5	Gitterrelaxation	68
5.2.6	Kombination der Adaptionalgorithmen	71
5.3	Anwendungsbeispiele	72
6	Verifikation und Anwendung	74
6.1	Begriffsabgrenzungen und Vorgehensweise	74
6.2	Einphasige Probleme	76
6.2.1	Instationäre Naturkonvektionsströmung in Flüssigmetall	76
6.2.1.1	Quadratische Kavität mit adiabaten horizontalen Wänden	76
6.2.1.2	Kavität mit $A = 4$ und isothermen horizontalen Wänden .	80
6.3	Mehrphasige Probleme	82
6.3.1	Zweiphasiges Stefanproblem	82
6.3.2	Gerichtetes Aufschmelzen eines Reinstoffes	88
6.3.2.1	Nachrechnung des Schmelzexperiments von Campbell u. Ko- ster (1994)	89
6.3.2.2	Ergebnisse der Benchmarkstudie von Gobin u. Le Quéré (1999)	99
6.3.3	Bénard-Konvektion unter Gefrierflächen	113
6.3.3.1	Nachrechnung des Experiments von Dietsche und Müller (1985)	113
6.3.3.2	Berechnungen in einer quadratischen Kavität	119
6.3.4	Aufschmelzen mit interner Beheizung	122
6.3.4.1	Eindimensionales Wärmeleitproblem mit interner Beheizung	123
6.3.4.2	Vorausrechnung eines Modellexperiments mit interner Be- heizung	126
7	Zusammenfassung und Ausblick	133
	Literaturverzeichnis	136

Symbolverzeichnis

Lateinische Formelzeichen

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
a, b, c, d	div.	versch. Koeffizienten
a, b	div.	Konstanten, siehe Gl. (3.23)
A, B, C	div.	versch. Koeffizienten
\mathbf{A}	div.	Koeffizientenmatrix
A	1	Geometrieverhältnis
B	m	Breite
Bi	1	Biotzahl
c_p	J/kgK	spezifische Wärmekapazität
C	m^3/m^3	volumetrische Konzentration
C	1	Courantzahl, $u\Delta t/\Delta x$
C_N	1	Konstante, siehe Gl. (3.37)
d_i	1	Grad des Dreiecksknotens i , siehe S. 70
D	m	Durchmesser
D	1	Diffusionslimit, $\psi\Delta t/\Delta x^2$
D_i	1	idealer Grad des Dreiecksknotens i , siehe S. 70
Da	1	Damköhlerzahl
f	1	dimensionlose Frequenz, siehe S. 81
f_l	1	lokaler Flüssigkeitsanteil
F, G	div.	Funktionen, siehe Gl. (3.24)
Fo	1	Fourierzahl
F_l	1	integraler Flüssigkeitsanteil
F_s	div.	Quelltermfunktion
Gr	1	Grashofzahl
g	m/s^2	Erdbeschleunigung
h	J/kg	spezifische Enthalpie
H	J/kg	Gesamtenthalpie
H	m	Höhe
i, j, k	1	Laufvariablen
I	A	elektr. Stromstärke
\vec{J}	div.	Vektor der diffusiven und konvektiven Flüsse

l	m	Länge
K	div.	Integrationskonstanten, siehe Gl. (3.34)
k	1	Segregationskoeffizient
L	J/kg	latente Phasenschmelzwärme
L	div.	Differentialoperator
M	1	Anzahl Dreiecke
m_l	K	Gradient der Liquiduslinie, siehe Gl. (2.2)
n	1	diskrete Zeitebene
\vec{n}	m	Normalenvektor
N	1	Anzahl Gitterknoten
N	1	Anzahl thermodynamischer Phasen, siehe Gl. (2.3)
N	1	Konstante der Quelltermfunktion
Nu	1	Nusseltzahl
O	div.	Ordnung
p	N/m^2	Druck
Pe	1	(Maschen-)Pecletzahl
Pr	1	Prandtl-Zahl, ν/κ
q	W/m^2	flächenspezifischer Wärmestrom
r	m	Radius
\vec{r}	div.	Vektor der rechten Seite, siehe Gl. (3.84)
R	div.	Residuum
R	Ω	ohmscher Widerstand
Ra	1	Rayleighzahl
Re	1	Reynoldszahl
$Re_{\Delta x}$	1	Maschenreynoldszahl, $v\Delta x/\nu$
s	m	Wanddicke
s	1	normalisiertes Formverhältnis im Dreieck, siehe Abb. 5.4
S	W/m^3	volumenspezifische Wärmequellstärke
St	1	Stefanzahl
t	s	Zeit
T	K	Temperatur
T	1	dimensionslose Periodendauer, siehe S. 81
T_f	K	lokale Erstarrungstemperatur
T_m	K	Schmelztemperatur
u, v	m/s	kartesische Geschwindigkeitskomponenten
\vec{v}	m/s	Geschwindigkeitsvektor
U, V	m/s	lokale kartesische Geschwindigkeitskomponenten
U^*, V^*	m/s	max. dimensionslose Geschwindigkeitskomponenten, s. S. 80
v_n	m/s	Geschwindigkeitskomponente in Normalenrichtung
v_t	m/s	Geschwindigkeitskomponente in Tangentialrichtung
\vec{w}	m/s	Gitter- bzw. Oberflächengeschwindigkeitsvektor
w	m/s	Gitter- bzw. Oberflächengeschwindigkeitskomponente
W	1	Gewichtsfunktion

S	div.	volumetrischer Quellterm
x, y, z	m	kartesische Koordinaten
X, Y	m	lokale kartesische Koordinaten
X, Y	m	dimensionslose Koordinaten, s. S. 80

Griechische Formelzeichen

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
α	$^\circ$	Rotationswinkel
α	1	Phasenindex, siehe Gl. (2.3)
α_l	1	Relaxationsfaktor, siehe Gl. (4.16)
β	K^{-1}	isobarer Volumenausdehnungskoeffizient
δ	m	Dicke der Fluidschicht
$\delta\Omega$	m	Volumeninhalte des Kontrollvolumenfragments
Δ	m	(doppelte) Dreiecksfläche
Δ	div.	Differenzenoperator
ϵ	div.	kleine Zahl
ϵ	1	Emissivität
ξ	div.	Exponentialfunktion, siehe Gl.(3.21)
ξ	div.	Parameter, siehe Gl. (6.6)
Γ	m^2	Oberfläche
Γ	K/m	Oberflächenspannungskoeffizient, siehe Gl. (2.1)
κ	m^2/s	Temperaturleitfähigkeit
κ	$1/m$	Oberflächenkrümmung, siehe Gl. (2.1)
λ	W/mK	Wärmeleitfähigkeit
λ	div.	Eigenwert, s. Gl. (3.25)
μ	kg/ms	dynamische Viskosität
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ρ	kg/m^3	Dichte
ρ	$\Omega mm^2/m$	spez. elektrischer Widerstand
σ	$W/m^2 K^4$	Stefan-Boltzmann-Konstante, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} W/m^2 K^4$
ϕ	div.	allg. skalare Unbekannte
ϕ_λ	div.	Eigenfunktion
ψ	div.	Diffusionskonstante
θ	1	dimensionslose Zeit, $\theta = St Fo$
Θ	m^3	Rechenraum
Θ	1	Wichtungparameter, siehe Gl. (3.79)
Ω	m^3	Volumeninhalte

Indizes und Abkürzungen

Formelzeichen Bedeutung

<i>a</i>	<u>a</u> ußen
<i>ave</i>	<u>a</u> verage
<i>CVFEM</i>	<u>C</u> ontrol <u>V</u> olume based <u>F</u> inite <u>E</u> lement <u>M</u> ethod
<i>c</i>	<u>c</u> old
<i>c</i>	<u>c</u> onstant
<i>c</i>	<u>c</u> ritical
<i>D</i>	<u>D</u> iffusion
<i>e</i>	<u>E</u> lement
<i>e</i>	<u>e</u> extern
<i>ECC</i>	<u>E</u> mpy <u>C</u> ircumcircle <u>C</u> riterium
<i>EPR</i>	<u>E</u> uropean <u>P</u> ressurized <u>W</u> ater <u>R</u> eactor
<i>f</i>	<u>f</u> reezing
<i>FEM</i>	<u>F</u> inite <u>E</u> lement <u>M</u> ethod
<i>FLO</i>	<u>F</u> lux- <u>O</u> riented <u>U</u> pwind scheme
<i>FLOS</i>	<u>F</u> lux- <u>O</u> riented <u>U</u> pwind scheme with <u>S</u> ource
<i>FVM</i>	<u>F</u> inite <u>V</u> olume <u>M</u> ethod
<i>ges</i>	<u>g</u> esamt
<i>h</i>	<u>h</u> ot
<i>i, j</i>	Laufindizes
<i>i</i>	<u>i</u> ntern
<i>J</i>	Fluß
<i>l</i>	<u>l</u> iquid
<i>lat</i>	<u>l</u> atent
<i>lim</i>	<u>l</u> imitiert
<i>liq</i>	<u>l</u> iquidus
<i>m</i>	<u>m</u> elting
<i>MAW</i>	<u>M</u> ass <u>W</u> eighted <u>I</u> nterpolation <u>S</u> cheme
<i>max</i>	<u>m</u> aximal
<i>min</i>	<u>m</u> inimal
<i>MWR</i>	<u>M</u> ethod of <u>W</u> eighted <u>R</u> esiduals
<i>n</i>	<u>n</u> ormal
<i>n</i>	Zeitindex
<i>nb</i>	<u>n</u> eighbour
<i>RDB</i>	<u>R</u> eaktord <u>r</u> uck <u>b</u> ehälter
<i>O</i>	<u>O</u> rdnung
<i>p</i>	<u>p</u> roportional
<i>s</i>	<u>s</u> olid
<i>sol</i>	<u>s</u> olidus
<i>p</i>	<u>p</u> hase
<i>P</i>	<u>P</u> unkt, Knoten

<i>rel</i>	<u>rel</u> ativ
<i>sens</i>	<u>sen</u> sibel
<i>t</i>	<u>tan</u> gential
<i>umg</i>	<u>Um</u> gebung
<i>umb</i>	<u>Um</u> bildung
<i>W</i>	<u>W</u> and
0	Anfangs- bzw. Referenzzustand

Sonderzeichen

Formelzeichen Bedeutung

\tilde{x}	Näherungswert
\bar{x}	gemittelter Wert
x^*	Prädiktorwert
\hat{x}	Korrektorwert
∞	unendlich
\rightarrow, \leftarrow	Integrationsweg für Linienintegrale
\cap, \cup	Integrationsweg für Linienintegrale
∇	Gradientenoperator

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge sind in einem großen Bereich technischer und industrieller Anwendungen von Bedeutung. Neben den klassischen Technologien der Materialherstellung (Metalle, Legierungen, Kunststoffe, Gläser, Keramik usw.) und Materialbearbeitung (Schweißverfahren, thermische Trennverfahren, bestimmte Wärmebehandlungsverfahren) haben auch neuere Technologien wie die Kristallzucht oder die thermische Energiespeicherung ein grundlegendes Interesse an Phasenübergängen vom festen in den flüssigen Zustand oder umgekehrt. Das Verständnis der mit dem Phasenübergang verknüpften physikalischen Phänomene ist dabei für die Herstellung qualitativ hochwertiger Endprodukte von elementarer Bedeutung. So wird die Mikrostruktur einer metallischen Legierung beispielsweise maßgeblich von den Transportvorgängen an der Phasengrenzfläche während des Erstarrungsprozesses bestimmt (Ramachandran und Gupta 1982). Materialeigenschaften wie lokale Zusammensetzung, Festigkeitskennwerte, Homogenität oder Isotropie des Endproduktes hängen umgekehrt von dessen Mikrostruktur ab. Die Herstellung von Feststoffen mit bestimmten Reinheitsgraden, gewünschten Konzentrationsverteilungen oder Festigkeitskennwerten ist folglich nur bei Kenntnis der relevanten thermophysikalischen Mechanismen beim Erstarrungsvorgang möglich.

Im Bereich der nuklearen Sicherheitsforschung besteht ein vermehrtes Interesse an Aufschmelz- und Erstarrungsvorgängen mit inneren Wärmequellen im Rahmen der Untersuchungen schwerer Störfälle. Ein Schwerpunkt bei der Entwicklung des zukünftigen europäischen Druckwasserreaktors (EPR) liegt in der Beherrschbarkeit schwerer Kernschmelzunfälle. Ziel des nachfolgend beschriebenen *Core-Catcher*-Konzeptes ist es dabei, die Auswirkungen solcher Störfälle auf die Anlage selbst zu begrenzen und damit Maßnahmen wie Evakuierungen oder Umsiedlungen der Bevölkerung zu vermeiden. Im Szenario eines Kernschmelzunfalls ist dabei zunächst eine Stabilisierung der Kernschmelze innerhalb des Reaktordruckbehälters (RDB) vorgesehen. Erst nach Öffnung des Tores unterhalb des RDB infolge zunehmender Betonerosion soll die überhitzte Kernschmelze dann den RDB verlassen und in den 170 m^2 großen Ausbreitungsraum strömen. Nach Beendigung der Ausbreitung erfolgt

das Fluten der Schmelze im Ausbreitungspool und die kontrollierte Erstarrung der Schmelze. Um eine langfristige Kühlbarkeit der Schmelze zu gewährleisten, ist eine vollständige Ausbreitung des flüssigen Kernschutts mit möglichst geringer Schichthöhe sicherzustellen. Bilden sich schon während des Ausbreitungsvorgangs erstarrte Anhäufungen, können diese unter Umständen den weiteren Ausbreitungsprozess gefährden. Die Gefahr einer vorzeitigen Schmelzerstarrung ist insbesondere dann gegeben, wenn große spezifische Oberflächen ein schnelles Auskühlen einer Anhäufung bewirken, z. B. unterhalb des Tores, wenn dieses den Austrittsquerschnitt nur zögerlich freigibt und ein Heruntertröpfeln der Kernschmelze stattfindet (siehe Stelle A in Abb. 1.1). Außerdem können erstarrte Anhäufungen auftreten, wenn die Ausbreitungsströmung aufgrund von topographischen Gegebenheiten des Untergrundes zum Stillstand kommt (siehe Stelle B in Abb. 1.1) und die äußeren Bedingungen vor Ort zumindest zeitweise eine Kühlung der Anhäufung bewirken. Geht man von einer erstarrten Anhäufung beliebiger Geometrie aus, wirkt die interne Wärmeproduktion in der Kernschmelze (Nachzerfallswärme) der externen Wärmeabfuhr über deren Oberfläche entgegen. Unter bestimmten Umständen ist dann die Ausbildung eines flüssigen Kerns im Inneren der Anhäufung zu erwarten, der anwachsen und bis zum Aufbrechen der ihn umgebenden festen Kruste führen kann.

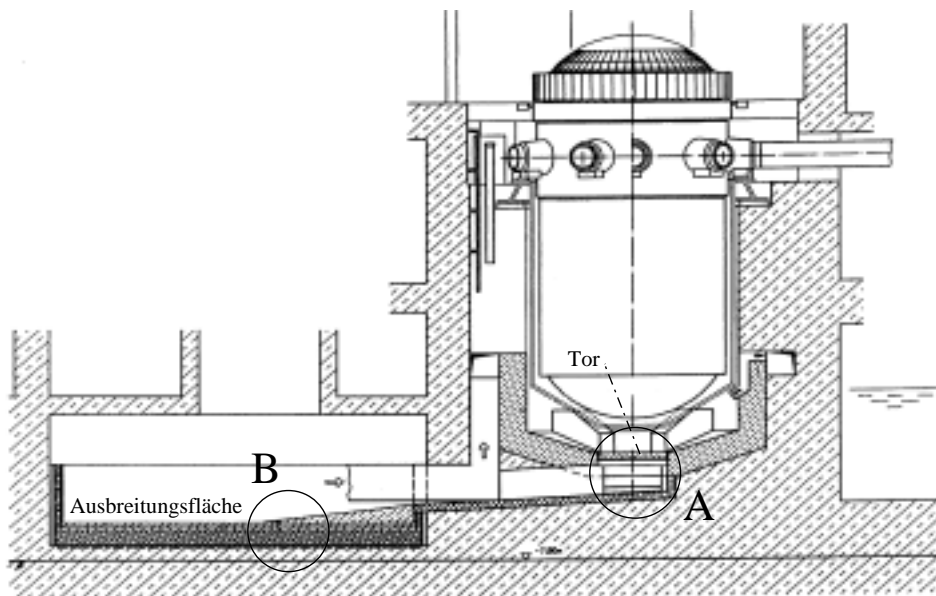


Abbildung 1.1: *Core-Catcher*-Konzept des europäischen Druckwasserreaktors (EPR) mit möglichen Stellen einer Anhäufung von erstarrtem Kernschutt.

1.2 Zielsetzung

Die rechnerische Simulation transienter nichtlinearer Phänomene stellt hohe Anforderungen an jedes numerische Verfahren. Im Zusammenhang mit Aufschmelz- und Erstarrungsvorgängen besteht die klassische Problematik in der exakten räumlichen und zeitlichen Auflösung einer bewegten Schmelz- oder Erstarrungsfront, an der Latentwärme umgesetzt wird. Eine verallgemeinerte Behandlung des Problems hat auch die Koppelung des Temperaturfeldes mit einem Strom- und Konzentrationsfeld und deren Wechselwirkung mit der Grenzflächendynamik zu berücksichtigen. Ferner ist zu beachten, daß Phasenübergänge und Latentwärmeumsetzung bei makroskopischer Betrachtungsweise oftmals nicht an einer diskreten Fest-Flüssig-Phasengrenze, sondern in einem bestimmten räumlichen Bereich zu beobachten sind (z. B. dendritische Erstarrung von Stoffgemischen aus Komponenten mit unterschiedlicher Schmelztemperatur).

In der vorliegenden Arbeit wird ein Bewege-Gitter-Verfahren auf unstrukturierten Dreiecksgittern vorgestellt, das sich die hohe Flexibilität unstrukturierter Vernetzungen bei der Behandlung freier Randwertprobleme zu Nutzen macht. Es soll gezeigt werden, daß das vorgestellte kontrollvolumenbasierte Finite-Elemente-Verfahren (CVFEM) (Baliga und Patankar 1980) auf willkürlich bewegten Dreiecksgittern eine brauchbare Alternative zu den weitverbreiteten Festgitter-Verfahren darstellt und in bestimmten Anwendungsfällen diesen sogar überlegen ist. Simulationen unterschiedlicher, zweidimensionaler Phasenwechselprobleme von Reinstoffen in geschlossenen Kavitäten sollen das Potential des vorgestellten Verfahrens für Probleme mit diskreten Phasenübergängen unter Beweis stellen. Außerdem soll gezeigt werden, daß durch eine geeignete Koppelung mit einer bewährten Enthalpie-Formulierung (Voller, Cross und Markatos 1987) das vorgestellte Bewege-Gitter-Verfahren auch für kontinuierliche Phasenübergänge anwendbar ist und damit der Anwendungsbereich des Codes nicht auf Probleme mit (diskreten) ebenen Phasengrenzen beschränkt ist.

Abgeleitet von der kerntechnischen Motivation der Arbeit sind im besonderen Naturkonvektionsströmungen in Flüssigmetallen und deren Einfluß auf den Fest-Flüssig-Phasenübergang von Interesse. Mit Hilfe des entwickelten numerischen Verfahrens sollen neben Vorhersagen über die räumliche und zeitliche Entwicklung von Phasentrennflächen generelle Aussagen über Stoff- und Wärmeströme in Medien kleiner Prandtl-Zahlen abgeleitet werden. Von speziellem Interesse ist in diesem Zusammenhang die Wirkung interner Wärmequellen auf die Strömungsstruktur im flüssigen Bereich und damit auch auf die Topologie der Fest-Flüssig-Phasengrenze.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

2.1 Physikalische Phänomene

Der Phasenwechsel fest-flüssig ist im allgemeinen mit sehr komplexen Wärme- und Stoffübergangsmechanismen verbunden, die zudem auf stark unterschiedlichen Längenskalen auftreten. Folgende Auflistung gibt einen groben Überblick über die wichtigsten dieser involvierten Mechanismen. Eine detailliertere Beschreibung der Phänomene findet sich beispielsweise in Kurz und Fisher (1986) oder Alexiades und Solomon (1993).

- **Wärme- und Stofftransport**

Jeder Phasenwechselfvorgang ist untrennbar mit dem Transport von Wärme und im allgemeinen Fall auch von Materie verbunden. Die relevanten Transportmechanismen sind dabei Diffusion und Konvektion, wobei Wärme zusätzlich durch Strahlung übertragen werden kann. Eine besondere Bedeutung kommt der Konvektion zu, weil die konvektiv übertragenen Stoff- und Wärmeströme unter bestimmten Voraussetzungen ein Vielfaches der diffusiven Ströme betragen können. Konvektionsströmungen in geschlossenen Kavitäten werden durch Auftriebskräfte initiiert, die aufgrund der Temperatur- oder Konzentrationsabhängigkeit der Dichte auftreten. Ist die Naturkonvektionsströmung in einem Mehrkomponentensystem durch vertikale Temperatur- und Konzentrationsgradienten getrieben, spricht man auch von doppeldiffusiver Konvektion.

- **Freisetzung bzw. Absorption von Latentwärme**

Der feste Aggregatzustand eines Stoffes ist durch starke Kohäsionskräfte der benachbarten Atome charakterisiert, die lediglich Vibrationen der Atome um ihre fixe Gleichgewichtsposition erlauben. Der flüssige Zustand hingegen ist ein Zustand höherer thermischer Anregung, der einem größeren Freiheitsgrad der Molekülbewegung entspricht. Zur Überführung eines Feststoffes in den flüssigen Zustand ist eine bestimmte Menge an Energie erforderlich, um die Bindungskräfte zu überwinden, die die Festkörperstruktur aufrecht erhält. Umgekehrt ist die gleiche Menge an Energie abzuführen,

wenn Atome vom energiereichen flüssigen Zustand in den energieärmeren und geordneteren festen Zustand überführt werden. Diese Energiemenge, die somit gleichzeitig die Differenz der thermischen Energieinhalte (Enthalpien) in fester und flüssiger Phase repräsentiert, wird als latente Schmelzwärme bzw. latente Erstarrungswärme oder kurz Latentwärme bezeichnet. Die Frage nach der Geschwindigkeit und Effizienz industrieller Erstarrungs- oder Aufschmelzvorgänge ist häufig unmittelbar mit der Frage des Abtransports bzw. der Anlieferung der Latentwärme über konvektive und diffusive Transportmechanismen verknüpft.

- **Massentransport in Mehrstoffsystemen**

In Mehrstoffsystemen ist der Phasenübergang neben der Freisetzung oder Absorption von Latentwärme zusätzlich mit der Freisetzung oder Absorption von Masse verknüpft. Ursache dafür sind unterschiedliche Gleichgewichtskonzentrationen für Feststoff und Flüssigkeit im thermodynamischen Gleichgewicht. Dies sei nachfolgend am Beispiel des Phasendiagramms einer stark verdünnten, binären Stoffgemisches erörtert.

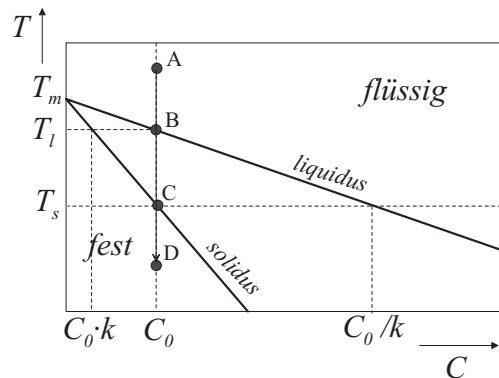


Abbildung 2.1: Lineares Phasendiagramm einer verdünnten binären Mischung.

Beim Abkühlen eines Flüssigkeitsgemisches mit der Konzentration C_0 entlang der Linie A-D wird im Punkt B Liquidustemperatur erreicht. Das erste gebildete Feststoffteilchen besitzt im thermodynamischen Gleichgewicht - entsprechend der Soliduslinie - die geringe Konzentration $C_0 \cdot k$ ($k = \text{Segregationskoeffizient, } k = C_s/C_l$), so daß der Erstarrungsvorgang mit einer Freisetzung von Stoff verbunden sein muß. Dieser Segregationsstoffstrom sorgt oberhalb von Punkt C für eine Anreicherung der Flüssigkeit auf Kosten des Feststoffes und baut einen Konzentrationssprung an der Phasengrenze auf. Der Erstarrungsvorgang eines binären Gemisches erfordert somit nicht nur den Abtransport der freiwerdenden Latentwärme, sondern auch den Abtransport des ausgeworfenen Stoffes.

- **Diskontinuitäten von Stoffwerten**

Der Phasenübergang fest-flüssig der meisten Stoffe ist mit einer abrupten Änderung der thermophysikalischen Stoffgrößen verbunden. Die Größe dieser Änderung hängt

stark vom betrachteten Stoff ab. Diskontinuitäten in Stoffwerten stellen zusätzliche Anforderungen an numerische Simulationen. Als besonders kritisch erweist sich in diesem Zusammenhang ein Sprung der Dichte des Materials. Die meisten Materialien besitzen im festen Zustand eine geringere Dichte als im flüssigen, so daß ein Schmelzvorgang mit einer Volumenschrumpfung und ein Gefriervorgang mit einer Volumenausdehnung verbunden ist.

- **Unterkühlungs- und Überhitzungseffekte**

Kristalline Feststoffe zeichnen sich durch eine regelmäßige Anordnung der Atome in einem Kristallgitter aus. Beim Abkühlen einer Flüssigkeit kann ein metastabiler Zustand auftreten, bei dem die Schmelztemperatur T_m zwar unterschritten ist, die Atome sich aber noch nicht auf ihren strukturiert angeordneten Gitterplätzen befinden. Erst nach Unterschreiten einer bestimmten Temperatur wird der Zustand der unterkühlten Flüssigkeit instabil und Kristallisation setzt ein. Die freiwerdende Latentwärme sorgt dann für einen Wiederanstieg der Temperatur, wie Abb. 2.2b zeigt.

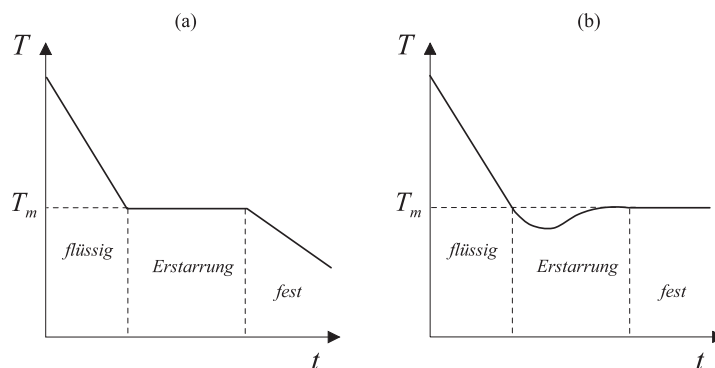


Abbildung 2.2: Typische Abkühlkurven: (a) ohne Unterkühlung, (b) mit Unterkühlung.

Im Falle der homogenen Keimbildung können beim Erstarren sehr große Aktivierungsenergien bzw. Unterkühlungsgrade erforderlich sein, bevor die Kristallisation einsetzt. An Behälterwänden und Verunreinigungen in der Flüssigkeit findet heterogene Keimbildung statt. Die Aktivierungsenergie ist dort wesentlich geringer.

Der umgekehrte Fall, also der Zustand eines überhitzten Feststoffes beim Erschmelzen, tritt wesentlich seltener auf, weil - von einem geordneten Zustand ausgehend - der ungeordnete Zustand leichter zu erreichen ist als umgekehrt.

- **Oberflächenspannungseffekte an gekrümmten Oberflächen**

An gekrümmten Oberflächen ergibt sich eine Abweichung der lokalen Erstarrungstemperatur T_f von der isobaren Gleichgewichtserstarrungstemperatur T_m infolge der dort wirksamen Kapillarkräfte. Den Zusammenhang beschreibt die Gibbs-Thompson-Beziehung

$$T_f = T_m (1 + \Gamma \kappa) , \tag{2.1}$$

in der Γ den Oberflächenspannungskoeffizienten und κ die Krümmung der Oberfläche beschreiben.

- **Morphologische Instabilitäten der Phasengrenze**

Ganz allgemein kann man den Übergangsbereich zwischen festem und flüssigem Material als *Phasengrenze* bezeichnen. Die Dicke dieses räumlichen Bereiches, der sich durch eine Koexistenz beider Aggregatzustände abgrenzen läßt, kann von einigen Angström bis hin zu einigen Zentimetern betragen. Besitzt das Phasenwechselgebiet eine zu vernachlässigende Tiefendimension, liegt makroskopisch betrachtet eine scharfe Trennlinie zwischen fest und flüssig vor. Die Phasengrenze ist morphologisch stabil und zumindest lokal betrachtet eben (siehe Abb. 2.3a). Umgekehrt können morphologische Instabilitäten der Phasengrenze Mikrostrukturen mit einem ausgeprägten Phasenwechselbereich (in der angelsächsischen Literatur häufig als *mushy zone* bezeichnet) hervorrufen (Abb. 2.3b-d).

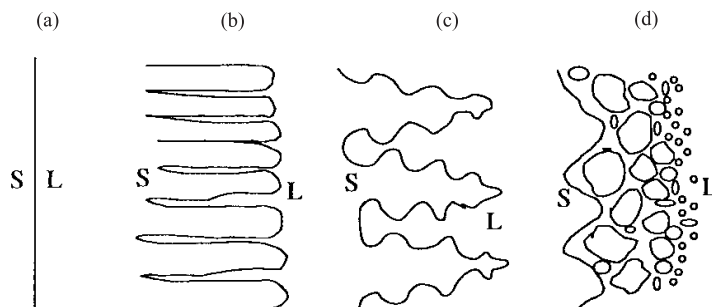


Abbildung 2.3: Unterschiedliche Formen von Phasengrenzflächen: (a) eben, (b) spaltenförmig, (c) dendritisch, (d) amorph (nach Alexiades und Solomon (1993)).

Ein gerichteter Erstarrungsvorgang eines Reinstoffes zeichnet sich durch einen durchweg positiven Temperaturgradienten ($\nabla T_l > 0$) in der Flüssigkeit aus (siehe Abb. 2.4a). Dieser Fall ist immer mit einer ebenen Phasengrenze verbunden, wie man mit Hilfe der Stabilitätsanalyse von Mullins-Sekerka zeigen kann (Mullins und Sekerka 1964). Umgekehrt kann beim Erstarren aus einer unterkühlten Schmelze ($\nabla T_l < 0$) die Phasengrenze unter bestimmten Umständen instabil werden. Der stabilisierende Effekt der Oberflächenspannung (Gibbs-Thompson-Effekt) konkurriert in diesem Fall mit dem destabilisierenden Effekt der Flüssigkeitsunterkühlung. Abb. 2.4 verdeutlicht dies rein qualitativ. Im Falle der gerichteten Erstarrung sorgt eine Störung (hier: Auslenkung der Phasengrenze) im Schnitt A-A für eine Zunahme von ∇T_l und eine Abnahme von ∇T_s . Nachfolgend wird dem Feststoff mehr Energie zugeführt, was für ein schnelles Abschmelzen der Störung sorgt und die Phasengrenze stabilisiert. Im Fall der Erstarrung aus einer unterkühlten Schmelze ist der Feststoff der wärmste Ort in der Schmelze. Eine Auslenkung der Phasengrenze erhöht hier ebenfalls ∇T_l , vergrößert damit aber gleichzeitig die Wärmeabfuhr aus dem Feststoff. Überwiegt dieser Effekt den stabilisierenden Effekt der Oberflächenspannung, kann die Störung anwachsen, die Phasengrenze wird instabil.

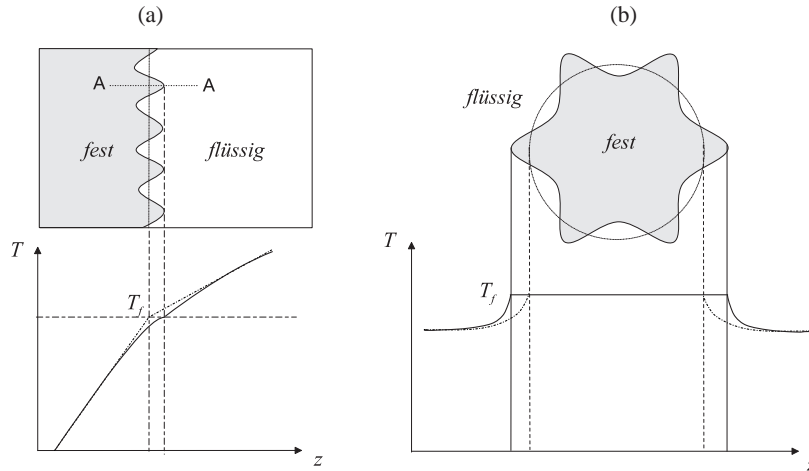


Abbildung 2.4: Erstarrungsvorgänge von Reinstoffen: (a) Gerichtete Erstarrung (immer stabil), (b) Erstarrung in einer unterkühlten Schmelze (instabil).

Bei Stoffgemischen ist zusätzlich der destabilisierende Effekt der konstitutionellen Unterkühlung zu berücksichtigen. Örtliche Konzentrationsgradienten bewirken dabei Gradienten der lokalen Liquidustemperatur. Unter Vernachlässigung von Oberflächenspannungseffekten wird eine anfangs ebene Phasengrenze instabil, wenn in der Flüssigkeit die lokale Temperatur unter die Liquidustemperatur fällt. Rutter und Chalmers (1953) formulierten bereits 1953 folgendes, rein qualitatives Stabilitätskriterium:

$$m_l \frac{\partial C}{\partial z} < \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (2.2)$$

Abb. 2.5 zeigt, daß der Effekt der konstitutionellen Unterkühlung bei binären Gemischen auch im Falle gerichteter Erstarrungsvorgänge zur Instabilität der Phasengrenze führen kann.

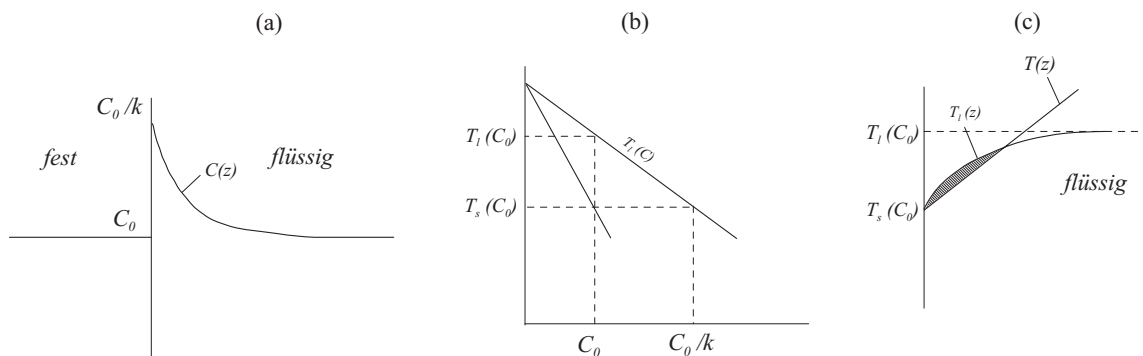


Abbildung 2.5: Gerichtete Erstarrung eines binären Gemisches mit morphologischer Instabilität infolge konstitutioneller Unterkühlung: (a) Konzentrationsverlauf über dem Ort, (b) Liquidustemperaturverlauf über der Konzentration (aus Phasendiagramm), (c) Liquidustemperaturverlauf und angenommener Temperaturverlauf über dem Ort.

2.2 Physikalisches Modell

Die Komplexität der beschriebenen, zum Teil nichtlinearen Phänomene stellt in ihrer Gesamtheit hohe Anforderungen an numerische Simulationen. In einem ersten Schritt der Modellierung wird versucht, eine bestimmte Klasse realer Probleme mit einem abstrakten physikalischen Modell zu beschreiben. Dabei sind bestimmte Vereinfachungen und Beschränkungen erforderlich, die zugleich den Gültigkeitsbereich des Modells stark eingrenzen. Die mathematische Beschreibung dieses physikalischen Modells bildet die Grundlage der numerischen Simulation.

Ausgangspunkt des Modells ist ein geometrisch willkürlich geformtes, zweidimensionales System Θ . Dieses System besteht aus insgesamt N Phasen Ω_i^α , die in ihrer Gesamtheit das betrachtete Gebiet exakt einmal überdecken:

$$\Theta = \sum_{i=1}^N \Omega_i^\alpha . \quad (2.3)$$

Der obere Index α gibt dabei Aufschluß über den Aggregatzustand der Phase. Jede Phase kann prinzipiell einen der drei Zustände fest (abgekürzt s für *solid*), flüssig (l für *liquid* oder "breiig" (m für *mushy*)) annehmen. Der Zustand "breiig" stellt dabei einen Zwischenzustand dar, der immer dann auftritt, wenn ein bestimmter räumlicher Bereich dem Phasenwechsel unterworfen ist. Hauptmerkmal einer solchen Phase ist deswegen eine auf makroskopischen Längenskalen vorhandene Koexistenz von flüssigem und festem Material. Die Ursache der Existenz eines solchen Phasenwechselgebietes kann beispielsweise die dendritische Erstarrung eines Stoffgemisches, aber auch das amorphe Aufschmelzen eines Reinstoffes unter der Wirkung innerer Wärmequellen sein (siehe Kapitel 6.3.4).

Da Phasenübergänge von einer zur anderen Phase möglich sein sollen, kann das Volumen, das eine beliebige Phase einnimmt, von der Zeit abhängen. Die räumlichen Bereiche, die von den einzelnen Phasen eingenommen werden, werden durch die Phasengrenzen $\Gamma_{i(j)}$, auch vereinfacht als Ränder bezeichnet, abgegrenzt. Dabei ist prinzipiell zwischen inneren Rändern Γ_{ij} und äußeren Rändern Γ_i zu unterscheiden. Ränder, die zwischen zwei Phasen des Systems angesiedelt sind, werden als innere Ränder bezeichnet. Die beiden Indizes i und j identifizieren die angrenzenden Phasen. Die Geometrie eines inneren Randes kann entweder zeitlich konstant (fester innerer Rand) oder zeitlich variabel (bewegter innerer Rand) sein. Ränder, die nur eine angrenzende Phase i besitzen, bilden die Systemgrenze. *Per definitionem* ist die räumliche Anordnung eines solchen äußeren Randes zeitlich konstant. Das gesamte System steht unter Schwerkräfteinfluß, so daß sich in flüssigen und breiigen Phasen Naturkonvektionsströmungen ausbilden können. Die Behandlung erfolgt in kartesischen Koordinaten x - y .

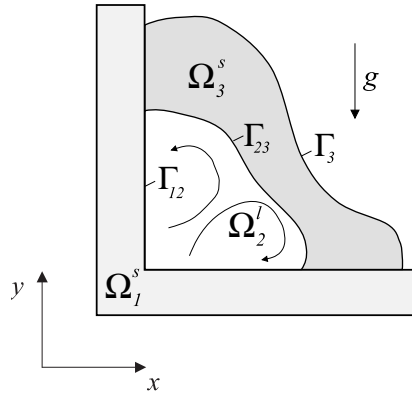


Abbildung 2.6: Physikalisches Modell.

Das beschriebene Modell unterliegt zahlreichen vereinfachenden Annahmen und Einschränkungen, die zugleich als Einschränkungen des Anwendungsbereiches des numerischen Codes verstanden werden müssen. Numerische Simulationen mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Code können nur dann durchgeführt werden, wenn für den betrachteten Fall die nachfolgend aufgeführten Annahmen keine unzulässige Vereinfachung oder Verfälschung der tatsächlich ablaufenden Physik darstellen. Die zu beachtenden Einschränkungen werden unter den Überbegriffen “Verhalten einzelner Phasen“, “Phasenwechselwirkungen“ und “Phasenübergang fest/flüssig“ zusammengefaßt.

- **Verhalten einzelner Phasen:**

- Energietransport innerhalb einer festen Phase erfolgt nur durch Wärmeleitung. Konvektiver Transport oder Strahlungswärmetransport innerhalb eines festen Mediums sind ausgeschlossen.
- In flüssigen Phasen ist konvektiver Massentransport möglich. Die betrachtete Strömung soll zweidimensional, laminar und inkompressibel sein. Das strömende Medium wird als newtonsches Medium behandelt. Naturkonvektionsströmungen werden in der Regel unter der Annahme der Gültigkeit der Boussinesq-Approximation (siehe Gl. (2.10)) berechnet, die alle Stoffwerte mit Ausnahme der Dichte im Auftriebsterm der Impulsgleichungen als konstant betrachtet.
- In breiigen Phasen ist prinzipiell ein Massentransport möglich. Die Strömungsparameter hängen dabei vom Volumenanteil der flüssigen Phase innerhalb der *mushy* Phase ab. Unter Berücksichtigung der Definition einer *mushy* Phase als Phasenübergangsgebiet zwischen flüssig und fest ist die Temperatur an jedem Ort innerhalb der Phase zwischen Solidus- und Liquidustemperatur.
- Für eine Phase beliebigen Zustands gilt weiterhin die vereinfachende Annahme, daß sie bezüglich der Materialzusammensetzung als homogen über dem gesamten Volumen der Phase betrachtet wird. Physikalische Effekte infolge örtlicher Konzentrationsunterschiede in Mehrkomponentensystemen werden nicht berücksichtigt. Damit werden Effekte wie diffusive Stoffströme, konzentrationsbedingte

Auftriebskräfte (doppeldiffusive Konvektion) und konstitutionelle Unterkühlung ausgeschlossen.

- **Phasenwechselwirkungen:**

- Vermischungen von Phasen mit unterschiedlichen Komponenten werden nur dann zugelassen, wenn die Vermischung die thermophysikalischen Eigenschaften nicht maßgeblich beeinflusst.¹ Der Phasenwechsel von fest nach flüssig oder umgekehrt ist die einzige mögliche Triebfeder eines Massenaustausches zwischen zwei benachbarten Phasen.
- Mechanische Stabilität fester Phasen wird nicht betrachtet. Ein etwaiges Versagen fester Krusten ist somit immer als ein (thermisches) Aufschmelzen und niemals als ein (mechanisches) Aufbrechen zu verstehen.
- Auftriebs- und Widerstandskräfte auf losgelöste feste Phasen (“Feststoffinseln“) werden nicht modelliert.

- **Phasenübergang fest-flüssig:**

- Der Phasenübergang fest-flüssig bzw. flüssig-fest wird im thermodynamischen Gleichgewicht betrachtet. Metastabile Zustände (unterkühlte Flüssigkeiten oder überhitzte Feststoffe) werden ausgeschlossen.
- Oberflächenspannungseffekte an gekrümmten Oberflächen, die zu Abweichungen von der isobaren Phasenwechseltemperatur führen (Gibbs-Thompson-Effekt), werden vernachlässigt.
- Mechanische Kräfte infolge von Materialschrumpfung oder -ausdehnung beim Phasenübergang werden nicht berücksichtigt. Die Temperaturabhängigkeit der Dichte wird durch eine auch bei Schmelztemperatur stetige Funktion beschrieben.

2.3 Erhaltungsgleichungen

Die ebene, laminare Strömung eines inkompressiblen Fluids in zeitabhängigen Volumen läßt sich durch die Erhaltungsgleichungen für Volumen, Masse, Impuls und Energie sowie die dazugehörigen Anfangs- und Randbedingungen eindeutig beschreiben (Fox und Donald 1982). Im Hinblick auf das in Kapitel 3 beschriebene numerische Verfahren werden die Erhaltungsgleichungen hier in integraler Form angegeben. Diese Art der Darstellung bringt den konservativen Charakter des numerischen Verfahrens zum Ausdruck. Die Erhaltungsgleichungen gelten in gleichem Maße für eine globale und eine lokale Betrachtungsweise. Bei globaler Betrachtungsweise sind die Volumenintegrale über das gesamte Volumen $\Omega(t)$ einer Phase, die Oberflächenintegrale über die diese Phase begrenzende, geschlossene Oberfläche $\Gamma(t)$ auszuführen. Eine lokale Betrachtungsweise setzt eine Diskretisierung des Rechengbietes in Kontrollvolumen beliebiger Form und Größe voraus. Die Integrationen sind dann

1. Ein möglicher Anwendungsfall hierfür wäre das thermische Versagen einer dünnen Wandphase, die einen großen Flüssigkeitspool umgibt.

entsprechend über diese diskreten Teilvolumen einer Phase bzw. deren Oberflächen auszuführen. Zur Vereinfachung werden die Phasen- bzw. Zählindizes der Integrationsgrenzen weggelassen.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} d\Omega = \int_{\Gamma(t)} \vec{w} \vec{n} d\Gamma \quad (2.4)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho d\Omega = \int_{\Gamma(t)} \rho (\vec{v} - \vec{w}) \vec{n} d\Gamma \quad (2.5)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho u d\Omega + \int_{\Gamma(t)} [\rho u (\vec{v} - \vec{w}) - \mu \nabla u] \vec{n} d\Gamma = \int_{\Omega(t)} \left[-(\rho - \rho_0) g_x - \frac{\partial p}{\partial x} \right] d\Omega \quad (2.6)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho v d\Omega + \int_{\Gamma(t)} [\rho v (\vec{v} - \vec{w}) - \mu \nabla v] \vec{n} d\Gamma = \int_{\Omega(t)} \left[-(\rho - \rho_0) g_y - \frac{\partial p}{\partial y} \right] d\Omega \quad (2.7)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho h d\Omega + \int_{\Gamma(t)} [\rho h (\vec{v} - \vec{w}) - \lambda \nabla T] \vec{n} d\Gamma = \int_{\Omega(t)} S d\Omega . \quad (2.8)$$

Hierin sind ρ die Dichte des Fluids, \vec{v} der Geschwindigkeitsvektor des Fluids mit den Komponenten u und v , \vec{w} der Geschwindigkeitsvektor der bewegten Oberfläche, μ die dynamische Viskosität des Fluids, g_x und g_y die Komponenten des Schwerkraftvektors, p der (um den hydrostatischen Anteil bereinigte) strömungsbedingte Druck, h die spezifische Enthalpie des Fluids, λ die Wärmeleitfähigkeit des Fluids und S eine volumetrische Wärmequelle (bzw. Wärmesenke). In der Energieerhaltungsgleichung wird Wärmefreisetzung durch viskose Dissipation vernachlässigt.

Gl. (2.4) ist eine Volumenerhaltungsgleichung, die bei Existenz bewegter (Kontroll-) Volumen erfüllt werden muß (siehe Kapitel 3.3.6). Die Kontinuitätsgleichung (2.5) kann mit Hilfe der Volumenerhaltungsgleichung für inkompressible Strömungen zu

$$\int_{\Gamma(t)} \rho \vec{v} \vec{n} d\Gamma = 0 \quad (2.9)$$

vereinfacht werden. Für Naturkonvektionsströmungen wird die Boussinesq-Approximation verwendet. Sie beschreibt eine lineare Abhängigkeit der Dichte im Schwerkraftterm von der Temperatur:

$$\rho(T) = \rho_0 [1 - \beta (T - T_0)] . \quad (2.10)$$

ρ_0 ist darin die Bezugsdichte bei der Bezugstemperatur T_0 , β der isobare Volumenausdehnungskoeffizient. Alle anderen Stoffwerte werden als konstant und temperaturunabhängig betrachtet. Je nach Anwendungsfall kann allerdings auch eine polynomiale Temperaturabhängigkeit (bis 3. Grades) von Stoffwerten berücksichtigt werden (siehe Kapitel 3.3.3.1).

2.4 Anfangs- und Randbedingungen

Zeitlich variable Größen in den Erhaltungsgleichungen sind mit Anfangswerten zu besetzen. Die Anfangslösung muß dabei sämtliche Erhaltungsgleichungen im Rahmen des Diskretisierungsfehlers erfüllen.

Bei den Randbedingungen ist zwischen hydrodynamischen Randbedingungen und thermischen Randbedingungen zu unterscheiden.

2.4.1 Hydrodynamische Randbedingungen

Da das physikalische Modell von ortsfesten Systemgrenzen ausgeht, gelten an äußeren Rändern grundsätzlich Haft- und Nichtaustrittsbedingungen für die Geschwindigkeitskomponenten in tangentialer bzw. normaler Richtung:

$$v_t = 0 ; \quad v_n = 0 . \quad (2.11)$$

An diskreten Fest-Flüssig-Phasengrenzen gilt ebenfalls die Haftbedingung. Aus der Massenerhaltung ergibt sich die Bedingung für die Normalkomponente der Fluidgeschwindigkeit

$$\rho_l v_n = (\rho_s - \rho_l) w_n . \quad (2.12)$$

w_n ist darin die Normalengeschwindigkeit der freien Oberfläche. Weil Dichtesprünge an der Phasengrenze vernachlässigt werden, ist Gl. (2.12) identisch mit der Nichtaustrittsbedingung (2.11). Freie Oberflächen zwischen zwei unmischbaren, flüssigen Phasen werden nicht modelliert.

2.4.2 Thermische Randbedingungen

An äußeren, ortsfesten Rändern können beliebige Randbedingungen vorgegeben werden. Die Randbedingungen dort können prinzipiell vom Typ Dirichlet (vorgegebene Temperatur), Neumann (vorgegebener Wärmestrom) oder Robbins (gemischte Randbedingung) sein. Außerdem sind Ränder, die Strahlungswärme mit ihrer Umgebung austauschen, möglich:

$$\int_{\Gamma} q d\Gamma = \int_{\Gamma} \sigma \epsilon_{ges} (T^4 - T_{umg}^4) d\Gamma . \quad (2.13)$$

Darin ist σ die Stefan-Boltzmann-Konstante, ϵ_{ges} die Strahlungsemissivität und T_{umg} die Umgebungstemperatur. Wird der Strahlungsaustausch zwischen Oberfläche (mit Temperatur T) und Umgebung (mit Temperatur T_{umg}) durch den Strahlungsaustausch zwischen zwei großen parallelen Platten approximiert, gilt für die Gesamtemissivität ϵ_{ges}

$$\epsilon_{ges} = \frac{1}{\frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{\epsilon_{umg}} - 1} , \quad (2.14)$$

wobei ϵ und ϵ_{umg} die Emissivitäten von Fluid und Umgebung sind.

An inneren Rändern, deren Geometrie zeitlich konstant ist, gelten auf einem beliebigen Randstück Γ_{ij} , das sich zwischen den Phasen i und j befindet, die Koppelungsbedingungen für Temperatur und Wärmestrom:

$$T_i = T_j \quad (2.15)$$

$$\int_{\Gamma_{ij}} q_i d\Gamma = \int_{\Gamma_{ij}} q_j d\Gamma . \quad (2.16)$$

An inneren, bewegten Phasengrenzen gilt ebenfalls Gl. (2.15). Im Falle eines diskreten Fest-Flüssig-Phasenübergangs ist Gl. (2.16) jedoch durch die Stefanbedingung zu ersetzen. Diese besagt, daß sich die Geschwindigkeit einer bewegten Phasengrenze aus der Differenz der Wärmeströme über die Phasengrenze ergibt:

$$\int_{\Gamma_{ij}} \rho L \vec{w} \vec{n} d\Gamma = \int_{\Gamma_{ij}} [\lambda^s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s - \lambda^l \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^l] d\Gamma . \quad (2.17)$$

2.5 Dimensionslose Kennzahlen

Auf eine dimensionslose Darstellung der Erhaltungsgleichungen (2.4) bis (2.8) wird hier verzichtet, weil je nach Anwendungsfall unterschiedliche Skalierungen von Vorteil sein können. Dennoch lassen sich bestimmte dimensionlose Kennzahlen ausmachen, die konvektionsdominierte Phasenwechselprobleme in geschlossenen Kavitäten charakterisieren. Setzt man konstante und gleiche Stoffgrößen in fester und flüssiger Phase voraus, kann ein Phasenwechselproblem in der Regel durch die Kennzahlen Prandtl-Zahl, Rayleigh-Zahl und Stefan-Zahl und eine geeignete geometrische Kennzahl (z. B. ein Längen- zu Höhenverhältnis) vollständig beschrieben werden. Die Prandtl-Zahl drückt den Einfluß der Stoffgrößen aus und ist auch ein Maß für die relativen Dicken der kinematischen und thermischen Grenzschichten:

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}. \quad (2.18)$$

Die Rayleigh-Zahl kann als Verhältnis von Auftriebs- zu Reibungskräften interpretiert werden, während die Stefan-Zahl das Verhältnis von sensibler zu latenter Wärme ausdrückt. Hierbei ist zwischen Problemen mit externer und interner Wärmequelle zu unterscheiden. Bei externer Wärmezufuhr wird im allgemeinen eine feste Temperaturdifferenz ΔT_e von außen (über die Ränder der Kavität) aufgeprägt und es gilt

$$Ra_e = \frac{g\beta\Delta T_e l^3}{\nu\kappa}, \quad (2.19)$$

$$St_e = \frac{c_p\Delta T_e}{L}. \quad (2.20)$$

Bei Problemen mit interner Wärmequelle ist anstelle einer festen Temperaturdifferenz eine (homogene) Wärmequellstärke S vorgegeben. Externe Rayleigh- und Stefan-Zahl können formal über die Definition einer Damköhler-Zahl, die intern produzierte Wärme und über Wärmeleitung transportierte Wärme ins Verhältnis setzt, in innere Rayleigh- und Stefan-Zahl überführt werden:

$$Da = \frac{Sl^2}{\lambda\Delta T_e}. \quad (2.21)$$

Durch Multiplikation dieser Damköhler-Zahl mit den in den Gl. (2.19) und (2.20) definierten externen Kenngrößen ergeben sich die internen Kenngrößen

$$Ra_i = Ra_e \cdot Da = \frac{g\beta Sl^5}{\nu\kappa\lambda}, \quad (2.22)$$

$$St_i = St_e \cdot Da = \frac{c_p Sl^2}{L\lambda}. \quad (2.23)$$

Der Term Sl^2/λ in den Definitionen der inneren Rayleigh- und Stefan-Zahl kann auch als maximale Temperaturdifferenz des entsprechenden eindimensionalen Wärmeleitfalles mit innerer Wärmequelle interpretiert werden. Entsprechend existieren in der Literatur auch Definition für Ra_i und St_i , die sich von den hier genannten Definitionen um den Faktor 8 oder 32 unterscheiden.

Kapitel 3

Numerische Methoden auf unstrukturierten Gittern

3.1 Allgemeines

3.1.1 Methode der gewichteten Residuen

Zur Lösung mehrdimensionaler Strömungsprobleme hat sich in den letzten Jahrzehnten eine bestimmte Klasse numerischer Verfahren durchgesetzt, die unter dem Sammelbegriff “Methode der gewichteten Residuen (MWR)” zusammengefaßt werden kann und deren Grundgedanke nachfolgend kurz erörtert wird (Finlayson 1972).

$$L(\phi) = 0 \tag{3.1}$$

sei eine beliebige Differentialgleichung. Wird eine nicht näher definierte Näherungsfunktion $\bar{\phi}$ in die Differentialgleichung eingesetzt, löst diese die Differentialgleichung nicht exakt, sondern liefert das Residuum

$$R = L(\bar{\phi}). \tag{3.2}$$

Die Näherungsfunktion $\bar{\phi}$ stellt eine gute Approximation der exakten Lösungsfunktion ϕ dar, wenn das Integral der Residuen für eine Menge verschiedener Gewichtsfunktionen über ein diskretes Teilvolumen verschwindet:

$$\int_{\Omega} W_i R d\Omega = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N. \tag{3.3}$$

W_i sind darin N linear unabhängige, frei wählbare Gewichtsfunktionen, wobei N in der Regel gleich der Anzahl der Knotenpunkte im Rechengebiet ist. Einsetzen der Gewichtsfunktionen W_i und der Näherung $\bar{\phi}$ in Gl. (3.3) liefert dann ein System algebraischer Gleichungen zur Bestimmung der unbekanntenen Knotenwerte ϕ_i .

Sowohl Finite-Volumen-Verfahren (FVM) als auch Finite-Elemente-Verfahren (FEM) können unter den Sammelbegriff MWR subsumiert werden (Finlayson 1972). Sie unterscheiden sich lediglich in der Wahl der Gewichtsfunktionen W_i .

Beim Galerkin-Finite-Elemente-Verfahren werden für W_i dieselben Funktionen wie die FEM-Ansatzfunktionen gewählt (Zienkiewicz 1977). Durch Einsetzen von Gewichtsfunktion und Ansatzfunktion in die Differentialgleichung und anschließende Integration über alle diskreten Teilvolumen des Rechengebietes erhält man in den diskreten Knotenpunkten der finiten Elemente eine Näherungslösung für die Differentialgleichung. Die Ansatz- oder Interpolationsfunktionen geben den Verlauf der unbekanntes Zustandsgröße zwischen diesen Knotenpunkten an.

Finite-Volumen-Verfahren (FVM) zeichnen sich durch die einfachste aller möglichen Gewichtsfunktionen aus: Im betrachteten Subvolumen hat diese den Wert 1, überall sonst den Wert 0 (Patankar 1980). Ihre hervorstechendste Eigenschaft ist die lokale (im einzelnen Teilvolumen) und globale (im gesamten Rechengebiet) Erhaltungstreue, die immer dann erreicht wird, wenn die numerischen Näherungen für Oberflächenintegrale über gemeinsame Kontrollvolumenoberflächen benachbarter Gitterzellen betragsmäßig gleich sind. Anschaulich bedeutet dies, daß der Stoff- oder Energiestrom, der einem bestimmten Kontrollvolumen zufließt, identisch ist mit demjenigen Strom, der ein benachbartes Kontrollvolumen verläßt. Im Gegensatz zu FEM-Verfahren machen FVM-Verfahren keine Aussagen über den Verlauf der Zustandsgröße zwischen den diskreten Knotenpunkten.

Kontrollvolumenbasierte Finite-Elemente-Verfahren (engl. *Control Volume based Finite Element Methods*, CVFEM) versuchen, die Vorteile von FEM- und FVM-Verfahren geschickt zu kombinieren und können gleichfalls zur Klasse der MWR gezählt werden. Ähnlich einem FVM-Verfahren werden die Gewichtsfunktionen W_i in einem geeignet gewählten Kontrollvolumen zu 1 gesetzt und haben überall sonst den Wert 0. Die Oberfläche eines um einen Gitterknoten angeordneten Kontrollvolumens verläuft innerhalb mehrerer finiter Elemente, so daß sich eine starke räumliche Koppelung ergibt (siehe auch Abb. 3.1). Die Ansatzfunktionen sind in den einzelnen finiten Elementen definiert und damit über die Kontrollvolumenoberflächen stetig und differenzierbar. Dies ermöglicht selbst bei grober Diskretisierung eine exakte Einhaltung des physikalischen Erhaltungsprinzips (Baliga und Patankar 1988). Der Verlauf der unbekanntes Zustandsgröße zwischen den Gitterknoten wird durch die FEM-Ansatzfunktionen ausgedrückt. Damit erhält das Verfahren die Flexibilität eines Galerkin-FEM: Ein existierendes Verfahren kann durch die Wahl einer anderen Ansatzfunktion angepaßt bzw. verbessert werden. Für Berechnungen in unregelmäßigen, komplexen Geometrien sind CVFEM-Verfahren in Verbindung mit unstrukturierten Rechengittern besonders gut geeignet.

3.1.2 Unstrukturierte Rechengitter

Unstrukturierte Rechengitter erlauben im Gegensatz zu strukturierten Gittern eine einfache Diskretisierung von Strömungsgebieten mit komplizierter Geometrie. Eine automatische Vernetzung komplexer Gebilde ist mit Hilfe von Gittergeneratoren zumindest im zweidimensionalen Fall schnell und effizient möglich. Diese erhöhte Flexibilität erkaufte man sich allerdings mit einem erhöhten numerischen Gitterbuchhaltungsaufwand. Während bei strukturierten Netzen eine direkte Zuordnung von Nachbarknoten und -elementen allein über die

Indizierung möglich ist, müssen bei unstrukturierten Netzen die Nachbarschaftsverhältnisse in zusätzlichen Feldern gespeichert werden (Oertel und Laurien 1995).

Bezüglich der Genauigkeit sind unstrukturierte Netze strukturierten Gittern unterlegen, weil prinzipiell eine Diskretisierung mit orthogonalen Gitterlinien anzustreben ist. Im Rahmen einer Kontrollvolumenformulierung sind Dreiecksgitter nur dann einer orthogonalen Diskretisierung äquivalent, wenn alle Verbindungslinien der Gitterpunkte orthogonal auf den Kontrollvolumenoberflächen stehen (Ferziger und Peric 1996). Für die in Abb. 3.1 gezeigte CVFEM-Diskretisierung kann dies aber nur mit ausschließlich gleichseitigen Dreiecken erreicht werden, was für komplexere Geometrien oder Vernetzungen mit unterschiedlichen Elementgrößen nicht zu realisieren ist. Außerdem gilt es zu beachten, daß Upwind-Diskretisierungen bei mehrdimensionalen Strömungsproblemen zusätzliche numerische Diffusion einbringen, wenn Geschwindigkeitskomponenten auftreten, die weder parallel noch normal zu den Kontrollvolumenoberflächen ausgerichtet sind und Gradienten normal zur Strömungsrichtung auftreten (Patankar 1980). Vierecksgitter sind gegenüber Dreiecksgittern diesbezüglich topologisch im Vorteil.

Die Matrizen der algebraischen Gleichungssysteme sind im Falle unstrukturierter Gitter unregelmäßig und unsymmetrisch besetzt, was sich ungünstig auf die Genauigkeit und Effizienz des Gesamtverfahrens auswirkt (Ferziger und Peric 1996). Spezielle Element-Neunummerierungs-Algorithmen können erforderlich sein, um die Konvergenz der eingesetzten iterativen Löser zu beschleunigen (Fang, Sheu und Tsai 1997, Rexroth 1996).

Ein bedeutender Vorteil unstrukturierter Gitter liegt in der problemlosen Realisierung lokaler Verfeinerungen bzw. Vergrößerungen. Während bei strukturierten Netzen Modifikationen oftmals nur in großräumigen Teilen des Gesamtgitters gleichzeitig möglich sind, bleiben bei unstrukturierten Netzen die Auswirkungen des Eingriffs in die Gitterstruktur auf einige wenige Elemente um die zu modifizierende Gitterzelle herum beschränkt (Mavriplis 1996). Dies ist Grundvoraussetzung für eine gezielte Gitteranpassung an lokale physikalische Gegebenheiten im Rechengebiet. In Verbindung mit einem Fehlerschätzer kann die Gitteradaptation auch dynamisch erfolgen (z. B. Oden, Demkowicz, Strouboulis und Devloo 1986, Zienkiewicz und Zhu 1987, Franka und Haghghi 1996). Nach jedem Iterations- oder Zeitschritt liefert der Fehlerschätzer eine Abschätzung des numerischen Fehlers, welche als Basis für die Anpassung der lokalen Gittermaschenweiten dient. Im Idealfall wird somit ein numerisches Gitter erzeugt, das überall einen gleichbleibend niedrigen Fehler garantiert (Rexroth 1996).

Bei freien Randwertproblemen kommen die Vorteile unstrukturierter Vernetzungen besonders bei Einsatz eines Bewege-Gitter-Verfahrens (siehe Kapitel 4) zum Tragen. Ein Bewege-Gitter-Verfahren belegt den freien Rand zu jedem Zeitpunkt mit Knoten und Kanten des numerischen Gitters. Eine kontinuierliche Bewegung aller Gitterknoten ist erforderlich, um der Bewegung des freien Randes und der damit verbundenen zeitlichen Änderung des Rechenfeldes Rechnung zu tragen. Bei stark gekrümmten oder verwundenen Rändern stellt dies hohe Anforderungen an die Flexibilität der gewählten räumlichen Diskretisierung.

3.1.3 Druckkorrekturverfahren

Aus numerischer Sicht stellen inkompressible Strömungen eine Besonderheit dar. Die Kontinuitätsgleichung liefert hier keine direkte Information über das Druckfeld, sondern stellt eine Art Nebenbedingung dar: Wird das korrekte Druckfeld in die Impulsgleichungen eingesetzt, erfüllt das resultierende Geschwindigkeitsfeld die Kontinuitätsgleichung (Patankar 1980). Diese Entkoppelung von Druck und Geschwindigkeit bringt für numerische Verfahren, welche die gekoppelten Differentialgleichungen iterativ lösen, eine zusätzliche Schwierigkeit mit sich. Ein spezieller Algorithmus ist erforderlich, um die Konvergenz des Verfahrens sicherzustellen. Eine Möglichkeit, diesem Problem zu begegnen, stellen die Druckkorrekturverfahren dar. Ein sehr bekanntes und weit verbreitetes Verfahren dieser Klasse ist das SIMPLE-Verfahren (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) von Patankar und Spalding (1972), das zur Klasse der iterativen Prädiktor-Korrektor-Verfahren gehört. Ausgehend von einem geschätzten Druckfeld wird zunächst eine Näherung für das Geschwindigkeitsfeld berechnet. Aus der diskretisierten Kontinuitätsgleichung (Druckkorrekturgleichung) werden dann Druckkorrekturen berechnet, mit denen anschließend auch das Geschwindigkeitsfeld korrigiert wird. Dabei handelt es sich um ein semi-implizites Verfahren, weil zur Berechnung der Druck- und Geschwindigkeitskorrekturen derjenige Term, der die Geschwindigkeitskorrekturen der Nachbarknoten enthält, vernachlässigt wird und die Korrekturgleichungen somit explizit lösbar sind. Das SIMPLE-Verfahren zeichnet sich durch große Robustheit, aber auch - bedingt durch oben genannte Näherung - durch sehr langsame Konvergenz des Druckfeldes in bestimmten Fällen aus (Patankar 1980). Das SIMPLER-Verfahren (=SIMPLE-*Revised*) versucht mit Hilfe einer zusätzlichen Druckgleichung diesem Problem entgegenzutreten (Patankar 1985). Von einem geschätzten Geschwindigkeitsfeld ausgehend liefert die Druckgleichung ein berechnetes Druckfeld, auf dessen Basis die diskretisierten Impulsgleichungen ein Geschwindigkeitsfeld liefern. Die Druckkorrekturen aus der Druckkorrekturgleichung werden dann lediglich zur Korrektur des Geschwindigkeitsfeldes, nicht aber zur Korrektur des Druckes verwendet. Die Berechnung eines Druckfeldes (mit Hilfe der Druckgleichung) aus einem geschätzten Geschwindigkeitsfeld anstelle der Verwendung eines geschätzten Druckfeldes führt anschaulich zu einem verbesserten Konvergenzverhalten des Verfahrens, wenn das gegebene Geschwindigkeitsfeld sehr nahe am korrekten Geschwindigkeitsfeld, das anfängliche Druckfeld aber sehr weit vom korrekten Druckfeld entfernt liegt: Das ungenaue Abschätzen eines Druckfeldes wird im SIMPLE-Verfahren anfänglich zu Näherungslösungen führen, die wesentlich schlechter sind als die Startlösung. Die Berechnung des Druckfeldes aus einem (fast) korrekten Geschwindigkeitsfeld wird im SIMPLER-Verfahren die korrekte Lösung nach wenigen Iterationsschritten liefern. Dieses Verhalten rechtfertigt auch den gegenüber dem SIMPLE-Verfahren erhöhten numerischen Aufwand je Iterationsschritt. Naturkonvektionsströmungen, die Gegenstand dieser Arbeit sind, zeichnen sich durch eine starke Koppelung der Impulsgleichungen mit einer skalaren Variablen - nämlich der Temperatur im Auftriebsterm - aus, die alleinige Ursache der Strömung ist. Jang, Jetli und Acharya (1986) stellten im direkten Vergleich mit dem impliziten PISO-Algorithmus (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) (Issa, Gosman und Watkins 1986) und der SIMPLEC-Variante des SIMPLE-Verfahrens (=SIMPLE *Consistent*) (Van Doormal und Raithby 1984) ein sehr positives Konvergenzverhalten des

SIMPLER-Verfahrens für stark gekoppelte Probleme fest.

In der vorliegenden Arbeit wird das SIMPLER-Verfahren im Zusammenhang mit einem CVFEM-Verfahren auf unstrukturierten Gittern eingesetzt. Die hierbei erforderlichen Iterationsschritte werden in Kapitel 3.3.9 ausführlich beschrieben.

3.1.4 Versetzte und nichtversetzte Gitter

Die Bestimmung des Druckfeldes bei inkompressiblen Strömungen ist mit weiteren Schwierigkeiten verknüpft. Da der Druck lediglich in Form eines Druckgradienten in den Impulsgleichungen vorkommt, enthalten die diskretisierten Gleichungen bei Verwendung eines Zentralknotenansatzes nur Druckdifferenzen benachbarter Gitterpunkte, der Druck im betrachteten Gitterpunkt bleibt unberücksichtigt (Patankar 1980). Unphysikalische Oszillationen im Druckfeld können in den Impulsgleichungen unbemerkt bleiben, wenn Druck und Geschwindigkeiten an gleichen und gleich vielen Knoten gespeichert werden (nicht versetzte Gitter, oder engl. *colocated arrangement*). Dem Problem eines Druckwechselfeldes (engl. *checkerboard pressure field*) kann begegnet werden, indem Druck und Geschwindigkeit auf versetzten Gittern berechnet werden (engl. *staggered grid*). Alternativ dazu kann der Druck nur an einem Teil der Geschwindigkeitsknoten berechnet werden oder (im Rahmen von Finite-Elemente-Berechnungen) für die Geschwindigkeit eine Ansatzfunktion von höherer Ordnung als für den Druck gewählt werden (engl. *unequal-order formulation*). Die Genauigkeit solcher Verfahren kann sich jedoch bei großen Druckgradienten oder stark deformierten Rändern als ungenügend erweisen. Außerdem erfordert die gleichzeitige Verwaltung von unterschiedlichen Druck- und Geschwindigkeitsgittern im unstrukturierten Fall einen nicht zu unterschätzenden zusätzlichen Buchhaltungsaufwand. Eine Erweiterung von zweidimensionalen *unequal-order*-Verfahren auf drei Dimensionen erweist sich in diesem Zusammenhang als schwierig bzw. ineffizient (Hookey und Baliga 1988).

Einen anderen Weg, eine unerwünschte Entkoppelung von Druck und Geschwindigkeit zu verhindern, beschreibt das CVFEM-Verfahren von Prakash (1986). Druck und Geschwindigkeit werden hier an den gleichen und auch an gleich vielen Knoten des Netzes berechnet (engl. *co-located and equal order CVFEM*). Eine derartige Gleichbehandlung von Druck und Geschwindigkeit wird durch eine explizite Berücksichtigung des Druckeinflusses in der Interpolationsfunktion für die Geschwindigkeit möglich. Diese Interpolationsfunktion enthält einen zusätzlichen Term, der die Existenz von Quelltermen in den Differentialgleichungen berücksichtigt. Druckgradienten werden in den Impulsgleichungen als Quellterme interpretiert und sorgen damit für eine direkte Abhängigkeit der Geschwindigkeitsinterpolationsfunktion vom Druck. Wird diese Interpolationsfunktion in die Kontinuitätsgleichung eingesetzt, erscheint der Druck explizit in der Kontinuitätsgleichung und unphysikalische Druckoszillationen werden detektiert (Prakash 1986).

3.2 Überblick über CVFEM-Verfahren auf unstrukturierten Gittern

In der Literatur existieren inzwischen zahlreiche Veröffentlichungen, die über die Formulierung und Anwendung von CVFEM-Verfahren für Konvektions-Diffusions-Probleme und/oder Strömungsprobleme mit Wärmeübertragung berichten. Erstmals wurde ein CVFEM-Verfahren 1980 von Baliga und Patankar (1980) für eine Konvektions-Diffusions-Gleichung vorgestellt. Darin wird ein exponentielles Upwind-Schema in Verbindung mit einer flußorientierten Ausrichtung des lokalen Koordinatensystems eingesetzt. Dieses Upwindschema wird in späteren Veröffentlichungen als FLO-Schema bezeichnet und besitzt die herausragende Eigenschaft, daß es keiner Maschen-Reynolds-Zahl-Beschränkung unterliegt und gleichzeitig numerische Diffusion minimiert. In den Veröffentlichungen von Baliga und Patankar (1983) und Baliga, Pham und Patankar (1983) wird dieses Verfahren laminaren Strömungsproblemen zugänglich gemacht, wobei die Druck-Geschwindigkeitskopplung durch ein versetztes Gitter mit Makro- und Subelementen erreicht wird (*Unequal-Order-Verfahren*). In den Arbeiten von Prakash und Patankar (1985) und Prakash (1986) werden erstmals *equal-order*-CVFEM-Verfahren vorgestellt. In der erstgenannten Arbeit wird eine Entkoppelung des Problems durch Verwendung eines speziellen, elementbezogenen \tilde{v} -Geschwindigkeitsfeldes in der Kontinuitätsgleichung verhindert. Dieses Verfahren ist allerdings nicht konservativ bezüglich der Impulserhaltung. Prakash (1986) ergänzt das flußorientierte Upwind-Schema (FLO) von Baliga und Patankar (1980) durch einen zusätzlichen quelltermabhängigen Term (in späteren Veröffentlichungen anderer Autoren als FLOS-Schema bezeichnet), wodurch der Druck explizit in die Interpolationsfunktion für die Geschwindigkeit eingebracht und das Problem eines unphysikalischen Druck-Wechselfeldes (Patankar 1980) vermieden wird. Prakash (1986) verwendet die numerisch aufwendigere SIMPLER-Variante des SIMPLE-Verfahrens (Patankar 1980) als iteratives Lösungsschema. Die Arbeit von Le Dain-Muir und Baliga (1986) erweitert die prinzipiellen Ideen von Prakash und Patankar (1985) auf dreidimensionale Strömungsprobleme mit Tetraeder-Elementen. Hookey, Baliga und Prakash (1988) erweitern das Verfahren von Prakash (1986) durch Verwendung einer verbesserten Quelltermfunktion innerhalb der Ansatzfunktion des FLOS-Schemas, die die Wirkung von Quelltermen auch normal zur lokalen Hauptströmungsrichtung berücksichtigt. Die Druck-Geschwindigkeitskopplung wird hier mit einem iterativen SIMPLEC-Schema (Van Doornal und Raithby 1984) realisiert.

Das CVFEM-Verfahren von Schneider und Raw (1987) stellt erstmals ein massengewichtetes Upwind-Verfahren (MAW) vor, das ausschließlich positive Koeffizienten in den diskretisierten Gleichungen (auf Elementbasis) garantiert. Die Arbeit von Masson, Saabas und Baliga (1994) erweitert das Anwendungsspektrum von *equal-order*-CVFEM-Verfahren auf zweidimensionale, achsensymmetrische Strömungen und enthält auch einen Vergleich des MAW-Schemas mit dem FLO-Schema anhand eines konkreten Beispiels. Saabas und Baliga (1994) verwenden ebenfalls das MAW-Interpolationsschema und zeigen dessen Anwendbarkeit für dreidimensionale Strömungsprobleme. Einen anderen Weg, möglichen Konvergenzproblemen bei verzerrten Gittern und Einsatz des FLO/FLOS-Schemas zu begegnen, beschreibt die Arbeit von Larreteguy (1995). In Abhängigkeit einer Qualitätskennzahl wird darin in

stark verzerrten Elementen eine Ausrichtung des lokalen Koordinatensystems entlang der längsten Kante gewählt, was - vergleichbar mit dem MAW-Schema - das Auftreten negativer Koeffizienten in den diskretisierten Gleichungen vermeidet. Während sich alle oben zitierten Arbeiten auf laminare Strömungsprobleme beschränken, stellen Elkaim, Reggio und Camarero (1992) ein CVFEM-Verfahren vor, das auf Basis einer Stromfunktions-Wirbelstärke-Formulierung zweidimensionale turbulente Strömungen mit Hilfe eines k - ϵ -Modells behandelt.

Eine Formulierung und Anwendung eines CVFEM-Verfahrens für freie Randwertprobleme wurde bis dato nicht veröffentlicht. Das nachfolgend präsentierte CVFEM-Verfahren versucht, diese Lücke zu schließen.

3.3 Konzeption des vorgestellten Verfahrens

Das in dieser Arbeit vorgestellte CVFEM-Verfahren basiert auf den grundlegenden Ideen der CVFEM-Verfahren von Baliga und Patankar (1980), Prakash (1986) und Hookey et al. (1988). Im Rahmen dieser Arbeit wird das *equal-order*-Verfahren von Prakash (1986) auf willkürlich bewegte Kontrollvolumen erweitert und damit freien Randwertproblemen zugänglich gemacht. Außerdem wird der Existenz von Quelltermen in der Energiegleichung durch Verwendung einer diesbezüglich verbesserten Ansatzfunktion Rechnung getragen.

3.3.1 Gebietsdiskretisierung

Charakteristisch für alle CVFEM-Verfahren ist die geometrische Definition von Kontrollvolumen. Der eigentlichen räumlichen Diskretisierung des Gebiets in finite Elemente (hier: finite Dreieckselemente) wird ein *duales Gitter*, bestehend aus den Kontrollvolumen um jeden Knoten des Finite-Elemente-Gitters, überlagert. Die geometrische Form der Kontrollvolumen ist dabei keineswegs eindeutig. Als besonders vorteilhaft hat sich dabei eine polygonale Struktur erwiesen, die entsteht, wenn der Schwerpunkt jeden Dreiecks mit den Mittelpunkten seiner drei Seiten verbunden wird (siehe Abb. 3.1). Dabei entstehen in jedem Dreieck drei gleich große Subvolumen, die ihrerseits Anteile von Kontrollvolumen der ihnen zugewandten Dreiecksknoten sind (Patankar 1980). Diese Art der Kontrollvolumenbildung erfüllt folgende positive Eigenschaften (Saabas und Baliga 1994):

- Die Kontrollvolumen überlappen sich nicht.
- In ihrer Gesamtheit überdecken sie das Rechengebiet exakt einmal.
- Die Form der Kontrollvolumen stellt keine Einschränkung für Form und Größe der Dreieckselemente dar.

Diese Eigenschaften sind elementar für die Erhaltungstreue des Verfahrens (Patankar 1980).

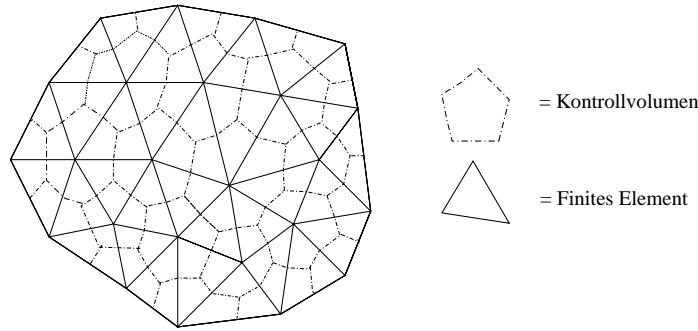


Abbildung 3.1: Räumliche Diskretisierung mit finiten Elementen und Kontrollvolumen.

3.3.2 Integrale Erhaltungsgleichung im bewegten Kontrollvolumen

Die Herleitung der diskretisierten algebraischen Gleichungen wird anhand der allgemeinen zweidimensionalen Transportgleichung für eine skalare Größe ϕ in einem beliebig bewegten Kontrollvolumen dargelegt (Fox und Donald 1982). Der Transport von ϕ soll dabei nur durch Konvektion und Diffusion möglich sein. Um ein Grundprinzip des verwendeten konservativen CVFEM-Verfahrens, nämlich das Arbeiten mit Flüssen, zu verdeutlichen, wird in Gl. (3.4) der Flußvektor \vec{J} verwendet. Dieser ergibt sich durch Addition der gerichteten konvektiven und diffusiven Flüsse.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \phi \, d\Omega + \int_{\Gamma(t)} \vec{J} \vec{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega(t)} S \, d\Omega \quad (3.4)$$

$$\vec{J} = \rho \vec{v}_{rel} \phi - \Psi \nabla \phi . \quad (3.5)$$

In den Gl. (3.4) und (3.5) ist $\Omega(t)$ der zeitabhängige Volumeninhalt des Kontrollvolumens, $\Gamma(t)$ die zeitabhängige Oberfläche des Kontrollvolumens und \vec{n} der auf der Kontrollvolumenoberfläche senkrecht stehende und nach außen gerichtete Normalenvektor. ρ bezeichnet die Dichte des Fluids, S eine volumetrische Quelle und Ψ den Diffusionskoeffizienten. Das Oberflächenintegral der Flüsse \vec{J} entsteht dabei durch Anwendung des Gaußschen Integralsatzes. \vec{v}_{rel} ist der Vektor der Relativgeschwindigkeit zwischen Fluidgeschwindigkeit \vec{v} und Geschwindigkeit der Kontrollvolumenoberfläche \vec{w} :

$$\vec{v}_{rel} = \vec{v} - \vec{w} . \quad (3.6)$$

Die Bewegung der Kontrollvolumenoberflächen ist zunächst willkürlich und stellt einen zusätzlichen Freiheitsgrad des numerischen Verfahrens dar. Auf die Gitterkonvektion wird in Kapitel 3.3.6 näher eingegangen. Nachfolgend wird der Einfachheit halber der Index *rel* wieder weggelassen. Alle Geschwindigkeiten sind aber dennoch als Relativgeschwindigkeiten zu interpretieren, die nur für den Sonderfall unbewegter Gitter mit der Fluidgeschwindigkeit identisch sind. Durch die in Tabelle 3.1 genannten Definitionen für die Größen ϕ , Ψ und S kann die allgemeine Transportgleichung in die das Problem beschreibenden Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie überführt werden.

Tabelle 3.1: Definitionen der Größen ϕ , Ψ und S in der allgemeinen Transportgleichung.

Gleichung	ϕ	Ψ	S
Kontinuität	1	0	S_m
x-Impuls	u	μ	$S_u - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x \beta (T - T_0)$
y-Impuls	v	μ	$S_v - \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y \beta (T - T_0)$
Energie	$c_p T$	λ/c_p	S_h

Auf die Diskretisierung der Volumenerhaltungsgleichung, die im Falle bewegter Kontrollvolumen zusätzlich zu erfüllen ist, wird in Kapitel 3.3.6 gesondert eingegangen.

Im nächsten Schritt wird das Kontrollvolumen um einen Knoten i der Triangulation betrachtet. Abb. 3.2 verdeutlicht, daß alle den Knoten i umgebenden Dreiecke und damit alle Knoten der umgebenden Dreiecke Beiträge zur algebraischen Gleichung dieses Knotens liefern. Innenliegende Knoten liegen im Zentrum ihres Kontrollvolumens und werden von einer geschlossenen Oberfläche umgeben. Im Falle von Randknoten wird die Kontrollvolumenoberfläche über den Rand (Strecke $a - c$) geschlossen, so daß der Knoten selbst Bestandteil der Oberfläche ist. In diesem Falle liefern die Randbedingungen des entsprechenden Randes einen zusätzlichen Beitrag zur diskreten Gleichung.

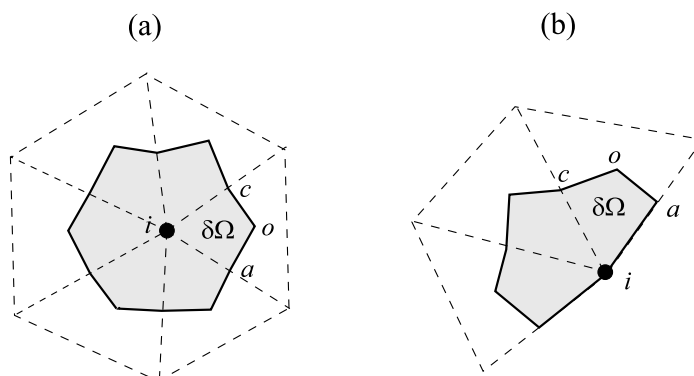


Abbildung 3.2: Einzelnes Kontrollvolumen; (a) innenliegender Knoten; (b) Randknoten.

Innerhalb eines Dreiecks läßt sich das Flußintegral über den Rand des Kontrollvolumens jeweils in zwei Teilintegrale aufteilen, so daß Gl. (3.4) in Form von Gl. (3.7) genauer spezifiziert werden kann:

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt} \int_{\delta\Omega} \rho\phi \, d\Omega + \int_a^o \vec{J}\vec{n} \, d\Gamma + \int_o^c \vec{J}\vec{n} \, d\Gamma - \int_{\delta\Omega} S \, d\Omega \\
 & + [\text{entsprechende Beiträge anderer umliegender Dreiecke}] \\
 & + [\text{Beiträge aus Randbedingungen (wenn } i \text{ Randknoten)}] = 0 . \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

$\delta\Omega$ bezeichnet darin den Flächeninhalt des jeweiligen Kontrollvolumenfragments. Ist M die

Anzahl der Dreiecke, die den Knoten i umgeben, so gilt:

$$\sum_{j=1}^M \delta\Omega = \Omega . \quad (3.8)$$

Da es sich hier um eine zweidimensionale Formulierung handelt, wird in der dritten Dimension eine Einheitstiefe von 1 angenommen, so daß sich alle Volumenintegrale zu Flächenintegralen und alle Oberflächenintegrale zu Linienintegralen reduzieren.

Um die Integrationen in Gl. (3.7) ausführen zu können, sind in einem nächsten Schritt elementweise Interpolationsfunktionen für verschiedene physikalische Größen zu definieren.

3.3.3 Interpolationsfunktionen

3.3.3.1 Interpolationsfunktionen für Stoffgrößen und Quellterme

Alle Stoffgrößen werden im jeweiligen Dreieckselement als örtlich konstant angenommen. Eine Temperaturabhängigkeit von Stoffgrößen wird in Form einer Abhängigkeit von der Durchschnittstemperatur im Dreieck

$$\bar{T}_j = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 T_i \quad (3.9)$$

berücksichtigt. Die jeweilige Stoffgröße wird dabei durch ein Polynom 3. Grades ausgedrückt, wie Gl. (3.10) am Beispiel der Wärmeleitfähigkeit zeigt:

$$\lambda(\bar{T}_j) = A_{\lambda_0} + A_{\lambda_1} \cdot \bar{T}_j + A_{\lambda_2} \cdot \bar{T}_j^2 + A_{\lambda_3} \cdot \bar{T}_j^3 . \quad (3.10)$$

Quellterme S^ϕ der skalaren Unbekannten ϕ werden in eine lineare Taylor-Reihe um ϕ_i entwickelt, wobei Glieder höherer Ordnung vernachlässigt werden (Patankar 1980):

$$S_j^\phi = S_{c,j}^\phi + S_{p,j}^\phi \bar{\phi}_j . \quad (3.11)$$

$\bar{\phi}_j$ ist das arithmetische Mittel der drei Knotenwerte ϕ_1 , ϕ_2 und ϕ_3 . $S_{c,j}^\phi$ und $S_{p,j}^\phi$ sind die im Dreieck konstanten Quelltermkoeffizienten. Wie bei den Stoffwerten handelt es sich hier um elementbezogene Größen, deren Werte im finiten Element konstant sind. Diese Eigenschaft ist unerlässlich für ein konservatives Verfahren und ist auch von den Druckgradienten- und Schwerkrafttermen, die nach Tab. 3.1 als Quellterme in den Impulsgleichungen interpretiert werden, zu erfüllen. Nur dann ist sichergestellt, daß der Wert des Gesamtquellterms in den Impulsgleichungen

$$\begin{aligned} S_{ges}^u &= S^u - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x \beta (T - T_0) \\ S_{ges}^v &= S^v - \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y \beta (T - T_0) \end{aligned} \quad (3.12)$$

ebenfalls im gesamten Dreieck konstant ist. Die Interpolation des Druckes wird im nächsten Unterkapitel erörtert. Bei der Interpolation des Schwerkrafttermes ist für die Temperatur der arithmetische Mittelwert \bar{T}_j der drei Knotentemperaturen einzusetzen.

3.3.3.2 Interpolationsfunktion für den Druck

Der Druck wird innerhalb jeden Dreiecks linear interpoliert:

$$p = A^p X + B^p Y + C^p . \quad (3.13)$$

Diese Interpolation entspricht einer Zentralfrequenzdiskretisierung auf einem strukturierten Finite-Differenzen-Gitter und erfüllt die Forderung konstanter partieller Druckgradienten im finiten Element. In Gl. (3.13) sind X und Y lokale Koordinaten, deren Motivation und Bedeutung in Kapitel 3.3.3.3 erklärt wird. Mit Hilfe der Definitionen des Druckes in den Dreiecksknoten ergeben sich die Konstanten in Gl. (3.13) zu

$$\begin{aligned} A^p &= \frac{1}{\Delta} (Y_{23}p_1 + Y_{31}p_2 + Y_{12}p_3) \\ B^p &= -\frac{1}{\Delta} (X_{23}p_1 + X_{31}p_2 + X_{12}p_3) \\ C^p &= \frac{1}{\Delta} [(X_2Y_3 - X_3Y_2)p_1 + (X_3Y_1 - X_1Y_3)p_2 + (X_1Y_2 - X_2Y_1)p_3] . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dabei werden die Abkürzungen

$$X_{ij} = X_i - X_j \quad \text{und} \quad Y_{ij} = Y_i - Y_j \quad (3.15)$$

verwendet.

$$\Delta = \text{Det} \begin{pmatrix} X_1 & Y_1 & 1 \\ X_2 & Y_2 & 1 \\ X_3 & Y_3 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

gibt das Zweifache des Flächeninhaltes des Dreiecks an.

Unter Berücksichtigung der Transformationsgleichungen (3.18) ergibt sich für die Ableitungen des Druckes nach den globalen Koordinaten

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= A^p \cos\alpha - B^p \sin\alpha \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= A^p \sin\alpha + B^p \cos\alpha , \end{aligned} \quad (3.17)$$

wobei α der Winkel zwischen lokalem und globalem Koordinatensystem ist (siehe Abb. 3.3).

3.3.3.3 Interpolationsfunktion für die allgemeine skalare Größe ϕ

Die Interpolationsfunktion für eine allgemeine skalare Größe ϕ wird in einem lokalen Koordinatensystem (X,Y) definiert. Dieses Koordinatensystem ist so ausgerichtet, daß die Abszisse in Richtung des durch arithmetische Mittelung der Geschwindigkeiten in den Dreiecksknoten erhaltenen mittleren Geschwindigkeitsvektors $\bar{\vec{v}}$ zeigt. Ursprung des lokalen Systems ist der Dreiecksschwerpunkt. Mathematisch ergibt sich die Überführung der globalen in lokale Koordinaten durch eine translatorische und eine rotatorische Bewegung des Systems, welche folgenden Transformationsgleichungen genügt:

$$\begin{aligned} X(x, y) &= y \cdot \sin\alpha + x \cdot \cos\alpha - x_0 \\ Y(x, y) &= y \cdot \cos\alpha - x \cdot \sin\alpha - y_0 . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Darin sind α derjenige Winkel, der die positive x-Achse in die positive X-Achse überführt und (x_0, y_0) die Koordinaten des Dreiecksschwerpunktes.

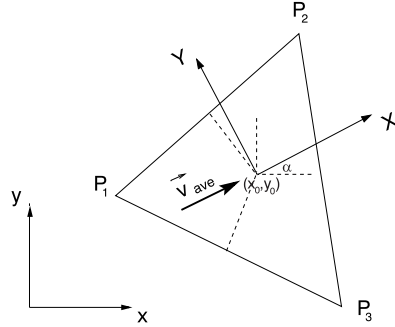


Abbildung 3.3: Flußorientierte Ausrichtung des lokalen Koordinatensystems im finiten Element.

Zur Herleitung einer geeigneten Interpolationsfunktion wird zunächst eine stationäre Konvektions-Diffusions-Gleichung unter der Annahme einer konstanten Durchströmung mit der Geschwindigkeit U ($V = 0$) betrachtet :

$$\rho U \frac{\partial \phi}{\partial X} - \Psi \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right) = 0 . \quad (3.19)$$

Die Funktion

$$\phi(X, Y) = A^\phi \xi(X) + B^\phi Y + C^\phi \quad (3.20)$$

mit

$$\xi(X) = \frac{\Psi}{\rho U} \left[e^{\frac{Pe(X - X_{min})}{X_{max} - X_{min}}} - 1 \right] \quad (3.21)$$

und

$$Pe = \frac{\rho U (X_{max} - X_{min})}{\Psi} \quad (3.22)$$

ist eine exakte Lösung des homogenen Problems. Die algebraischen Ausdrücke für die Konstanten A^ϕ , B^ϕ und C^ϕ , die die Abhängigkeit der Ansatzfunktion von den Funktionswerten in den Dreiecksknoten enthalten, lauten entsprechend den Gleichungen (3.14), wobei alle p_i durch ϕ_i und alle X_i durch entsprechende ξ_i zu ersetzen sind. Die Legitimation für die Verwendung dieser Ansatzfunktion wird im folgenden diskutiert.

- Eine analytische Behandlung des Eigenwertproblems

$$a \frac{\partial \phi}{\partial X} = b \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right) \quad (3.23)$$

(a und b seien beliebige Konstanten) mittels des Produktansatzes

$$\phi = F(X) \cdot G(Y) \quad (3.24)$$

überführt die partielle Differentialgleichung (3.23) in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} aF'(X) - bF''(X) &= \lambda F(X) \\ bG''(Y) &= \lambda G(X). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die Eigenwerte λ sowie die dazugehörigen Eigenfunktionen ϕ_λ des Problems können nur bei Spezifikation aller Randbedingungen bestimmt werden. Sind keine Randbedingungen spezifiziert, existiert eine unendlich große Anzahl an Lösungsfunktionen für das Eigenwertproblem (3.23). Eine sehr einfache und deswegen sinnvolle Lösungsfunktion verknüpft die X- bzw. Y-abhängigen Anteile additiv miteinander.

- In Kombination mit der Verwendung flußorientierter Koordinaten kann durch die Aufspaltung der Ansatzfunktion in X- und Y-abhängige Anteile gleichermaßen dem Upwind-Charakter der Konvektion *und* dem zentralen Charakter der Diffusion Rechnung getragen werden. Die X-Koordinatenrichtung repräsentiert in jedem finiten Element die bevorzugte Richtungen der konvektiven Flüsse, die Y-Richtung ist normal zur Hauptströmungsrichtung.
- Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit in Hauptströmungsrichtung unterliegt diese Ansatzfunktion keiner lokalen Maschen-Reynolds-Zahl-Beschränkung. Das bekannte Problem unphysikalischer Oszillation bei Werten $Pe > 2$, das bei linearen Ansatzfunktionen bzw. Zentraldifferenzenansätzen auftritt, wird hier durch ein - unter den genannten Vereinfachungen - lokal exaktes Exponentialschema vermieden.
- Im Grenzfall reiner Diffusion gilt

$$\lim_{Pe \rightarrow 0} \xi(X) = X. \quad (3.26)$$

Dies verdeutlicht die Abhängigkeit des Upwinding von der lokalen Maschen-Peclet-Zahl Pe . Im Diffusionsfall ist die Ansatzfunktion mit einer linearen Ansatzfunktion 2.Ordnung identisch und bringt keine unerwünschte numerische Diffusion ein. Im Unterschied zum hybriden Verfahren (Patankar 1980) ermöglicht die Exponentialfunktion einen sanften Übergang vom Upwinding zur Zentraldifferenz.

- Über die Seiten der Dreiecke ist diese Ansatzfunktion im allgemeinen Fall weder stetig noch differenzierbar. Über die innerhalb der Elemente liegenden Kontrollvolumenoberflächen, über die die Integrationen auszuführen sind, ist jedoch Stetigkeit und Differenzierbarkeit in jedem Falle gewährleistet, so daß sich kein Widerspruch mit der Zielsetzung eines erhaltungstreuen Verfahrens ergibt.
- Als nachteilig erweist sich, daß diese Ansatzfunktion in Kombination mit stark deformierten Dreiecken zu negativen Koeffizienten der algebraischen Gleichungen führen kann. Nach Patankar (1980) sind nur Verfahren mit ausschließlich positiven Koeffizienten in den diskretisierten Gleichungen zulässig. Negative Koeffizienten bedeuten anschaulich, daß eine Erniedrigung eines Knotenwertes, der ein bestimmtes Kontrollvolumen umgibt, für einen Zufluß in das Kontrollvolumen sorgt. Dieses Verhalten

ist unphysikalisch, weil beispielweise eine Temperaturerniedrigung eines umliegenden Knotens für einen Energiefluß aus dem Kontrollvolumen heraus sorgen muß. Negative Koeffizienten verschlechtern die Konditionierung der Koeffizientenmatrix und können u. U. zu einer Divergenz des gesamten Verfahrens führen. Die Erfahrung zeigt allerdings, daß bei Einhaltung einer bestimmten Gitterqualität nur vereinzelte Dreieckselemente negative Beiträge zu den Gleichungen liefern. Auf Kontrollvolumenebene werden diese Beiträge meist durch Summation mit positiven Beiträgen benachbarter Dreiecke eliminiert.

Spielen im zu lösenden fluiddynamischen Problem volumetrische Quellterme eine dominante Rolle, stellt eine Ansatzfunktion, die nicht nur die homogene Differentialgleichung (3.19), sondern auch die inhomogene Variante

$$\rho U_{ave} \frac{\partial \phi}{\partial X} - \Gamma \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right) = S \quad (3.27)$$

exakt erfüllt, eine bessere Ansatzfunktion als Gl. (3.20) dar (Prakash 1986):

$$\phi = A\xi + BY + C + SF_S \quad (3.28)$$

mit

$$F_S = \left[\frac{1}{N} \frac{X}{\rho U_{ave}} + \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{-Y^2}{2\Psi} \right] ; \quad 1 \leq N \leq \infty . \quad (3.29)$$

Gl. (3.28) erfüllt diese Eigenschaft (zumindest dann, wenn S nicht von ϕ abhängt) für beliebige Werte der noch festzulegenden Konstanten N im genannten Intervall. Die Differenz zweier Partikulärlösungen des inhomogenen Problems (für zwei verschiedene Werte von N) führt in jedem Fall auf eine Lösung des homogenen Problems (Gl. (3.20)). Die Konstanten A , B und C ergeben sich wieder unter Beachtung der bekannten Werte der Interpolationsfunktion in den Dreiecksknoten. Sie lassen sich in Anteile, die von diesen Knotenwerten abhängen und in quelltermabhängige Anteile aufteilen, wobei erstere mit den Konstanten der vereinfachten Interpolationsfunktion (3.20) identisch sind.

$$\begin{aligned} A &= A^\phi + A^S \\ B &= B^\phi + B^S \\ C &= C^\phi + C^S . \end{aligned} \quad (3.30)$$

Die quelltermabhängigen Anteile ergeben sich zu

$$\begin{aligned} A^S &= -\frac{S}{\Delta} (Y_{23}F_{S1} + Y_{31}F_{S2} + Y_{12}F_{S3}) \\ B^S &= \frac{S}{\Delta} (\xi_{23}F_{S1} + \xi_{31}F_{S2} + \xi_{12}F_{S3}) \\ C^S &= -\frac{S}{\Delta} ((\xi_2 Y_3 - \xi_3 Y_2)F_{S1} + (\xi_3 Y_1 - \xi_1 Y_3)F_{S2} + (\xi_1 Y_2 - \xi_2 Y_1)F_{S3}) , \end{aligned} \quad (3.31)$$

wobei F_{S1} , F_{S2} und F_{S3} die Werte der Quelltermfunktion in den Dreiecksknoten darstellen. Für den Grenzfall reiner Diffusion ($Pe = 0$) wird aus Gl. (3.29)

$$F_S = \left[\frac{1}{N} \left(\frac{-X^2}{2\Psi} \right) + \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{Y^2}{2\Psi} \right] . \quad (3.32)$$

Die Größe N in den Gl. (3.29) und (3.32) ist ein freier Parameter, der die Abhängigkeit der Quelltermfunktion F_S von den beiden Koordinatenrichtungen steuert. Gl. (3.28) erfüllt für beliebige reelle Werte von N die inhomogene Differentialgleichung (3.27), unter dem Gesichtspunkt einer gewichteten Interpolation zwischen beiden Koordinatenrichtungen erscheinen aber nur Werte im Bereich $1 \leq N \leq \infty$ als sinnvoll. Prakash (1986) wählt für N den festen Wert 1, wodurch sich eine Abhängigkeit der Quelltermfunktion ausschließlich in lokaler Hauptströmungsrichtung ergibt. Hookey et al. (1988) setzen für N den Wert 2, d. h. sie berücksichtigen gleichermaßen eine X- und Y-Abhängigkeit der Quelltermfunktion.

Im folgenden wird diskutiert, welches der physikalisch sinnvollere Wert für den Quelltermparameter N ist. Dazu werden zunächst zwei Grenzfälle untersucht:

- Für den Grenzfall $Pe \rightarrow \infty$ kann der Diffusionsterm in Y-Richtung in Gl. (3.27) vernachlässigt werden. Die allgemeine analytische Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\rho U \frac{d\phi}{dX} - \Psi \frac{d^2\phi}{dX^2} = S \quad (3.33)$$

verdeutlicht, daß in diesem Fall eine lineare Abhängigkeit der Quelltermfunktion in Strömungsrichtung sinnvoll ist:

$$\phi = \frac{K_1 \Psi}{\rho U} e^{\frac{\rho U}{\Psi} X} + K_2 + S \cdot \frac{X}{\rho U} . \quad (3.34)$$

K_1 und K_2 sind darin Integrationskonstanten. Dies entspricht einem Wert des Quelltermparameters von 1 und führt zur Quelltermfunktion

$$F_S = \frac{X}{\rho U} . \quad (3.35)$$

- Für den Grenzfall $Pe = 0$, also dem Fall reiner Diffusion, verliert die X-Koordinatenrichtung ihre Bedeutung als Hauptströmungsrichtung im Dreieck. X und Y stellen in diesem Fall ein beliebiges, frei wählbares orthogonales System dar und es gibt keinen Grund, eine der beiden Richtungen bezüglich der Wirkung des Quellterms zu bevorzugen. In diesem Fall muß $N = 2$ gewählt werden, um eine quadratische Abhängigkeit der Quelltermfunktion von beiden Raumrichtungen zu erhalten. Die Quelltermfunktion

$$F_S = \frac{1}{4\Psi} (X^2 + Y^2) \quad (3.36)$$

gibt den parabolischen Charakter des zweidimensionalen Diffusionsproblems mit Quelle wieder und erscheint somit physikalisch sinnvoll.

Obige Betrachtung zeigt, daß die Wahl eines fixen Wertes für N eine physikalisch korrekte Behandlung des Problems im gesamten Pe -Zahlenbereich ausschließt. Dies legt nahe, den Parameter N als lokale Größe zu definieren, deren Wert von den lokalen Strömungsbedingungen abhängt. In dieser Arbeit wird eine Berechnung des Quelltermparameters N auf Basis der Funktion

$$N = 1 + e^{-C_N \frac{Pe}{Pe_{max}}} \quad (3.37)$$

vorgeschlagen. Gl. (3.37) liefert lokale, im finiten Dreieckselement konstante Werte für N . Die zur Skalierung der Peclet-Zahl notwendige Größe Pe_{max} ist darin der Maximalwert aller dreiecksbezogenen Pe -Werte. Die Konstante C_N steuert die Steigung der Funktion zwischen den Extremalwerten $N = 2$ und $N = 1$. Für laminare Naturkonvektionsströmungen hat sich beispielsweise ein Wert von $C_N = 3.0$ bewährt, der zu relativ moderaten Gradienten der Funktion bei höheren Pe -Zahlen führt.

Die Erweiterung der Ansatzfunktion (3.20) um einen quelltermabhängigen Beitrag ist gleichbedeutend mit einer expliziten Berücksichtigung der Wirkung von Quelltermen bereits in der Ansatzfunktion. Stellt ϕ in Gl. (3.28) eine Geschwindigkeitskomponente und der Druckgradient entsprechend Tabelle 3.1 eine Impulsquelle dar, wird der Druck massiv in die Kontinuitätsgleichung eingebracht und eine mögliche Entkoppelung von Druck und Geschwindigkeit verhindert. Die Quelltermabhängigkeit der Ansatzfunktion ist Grundvoraussetzung für die Anwendbarkeit des beschriebenen *equal-order*-Verfahrens.

3.3.4 Allgemeine diskretisierte Erhaltungsgleichung

Zur Herleitung der diskretisierten algebraischen Gleichungen für die Zustandsgrößen ϕ_i in den Knotenpunkten der Triangulation sind alle Oberflächen- (=Fluß-) und Volumenintegrale in Gl. (3.4) unter Beachtung der in Kapitel 3.3.3 aufgeführten Interpolationsfunktionen auszuführen.

3.3.4.1 Flußintegrale

Die Berechnung der Oberflächenintegrale erfordert zunächst die Berechnung der ortsabhängigen Flußkomponenten J_x und J_y im Dreieck. Durch Einsetzen der Interpolationsfunktion ergeben sich die lokalen Flüsse in Abhängigkeit von den lokalen Koordinaten X und Y sowie von den unbekanntenen Knotenwerten ϕ_1 bis ϕ_3 zu

$$\begin{aligned}
J_x(X, Y) &= [\rho(u - U_{ave} \cos \alpha)\xi(X) - \Psi \cos \alpha] A + (\rho u Y + \Psi \sin \alpha) B + \rho u C \\
&+ S \left(\rho u F_S(X, Y) - \Psi \frac{\partial F_S}{\partial x} \right) \\
J_y(X, Y) &= [\rho(v - U_{ave} \sin \alpha)\xi(X) - \Psi \sin \alpha] A + (\rho v Y - \Psi \cos \alpha) B + \rho v C \\
&+ S \left(\rho v F_S(X, Y) - \Psi \frac{\partial F_S}{\partial y} \right). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Darin berechnen sich die örtlichen Gradienten der Quelltermfunktion mit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F_S}{\partial x} &= \begin{cases} \frac{1}{N\rho U_{ave}} \cos \alpha + (1 - \frac{1}{N}) \frac{Y}{\Psi} \sin \alpha & \text{für } U_{ave} > 0 \\ -\frac{X}{N\Psi} \cos \alpha + (1 - \frac{1}{N}) \frac{Y}{\Psi} \sin \alpha & \text{für } U_{ave} = 0 \end{cases} \\
\frac{\partial F_S}{\partial y} &= \begin{cases} \frac{1}{N\rho U_{ave}} \sin \alpha - (1 - \frac{1}{N}) \frac{Y}{\Psi} \cos \alpha & \text{für } U_{ave} > 0 \\ -\frac{X}{N\Psi} \sin \alpha - (1 - \frac{1}{N}) \frac{Y}{\Psi} \cos \alpha & \text{für } U_{ave} = 0 \end{cases}. \tag{3.39}
\end{aligned}$$

Die Integrationen über die im jeweiligen Dreieck verlaufenden Kontrollvolumenoberflächen werden numerisch nach der Quadraturregel von Simpson unter Zuhilfenahme von drei äquidistanten Stützstellen ausgeführt.

$$\int_{a-c} \vec{J} \vec{n} d\Gamma = \frac{\Delta y_{ac}}{6} [(J_x)_a + 4(J_x)_b + (J_x)_c] - \frac{\Delta x_{ac}}{6} [(J_y)_a + 4(J_y)_b + (J_y)_c] . \quad (3.40)$$

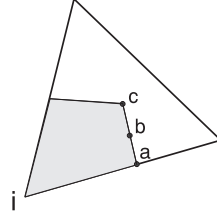


Abbildung 3.4: Stützstellen für Simpson-Integration über Kontrollvolumenoberfläche im Dreieckselement.

Zu beachten ist, daß die Koordinaten der Stützstellen a, b, c im allgemeinen Fall zeitabhängig sind. Aus Gründen der Volumenerhaltung sind die Integrationen über die zwischen den diskreten Zeitpunkten n und $n+1$ arithmetisch gemittelten Koordinaten auszuführen (siehe auch Kapitel 3.3.6). Dabei ist auf einen mathematisch positiven Richtungssinn zu achten.

Die integralen Beiträge der einzelnen Dreiecke sind in geeigneter Weise aufzuaddieren. Im Falle von Randknoten, an denen Randbedingungen vom Typ Neumann oder Robbins vorgegeben sind, sind die entsprechenden Anteile aus diesen Randbedingungen zu berücksichtigen. Das Flußintegral über die geschlossene Kontrollvolumenoberfläche um den Knoten i läßt sich dann in folgender Form darstellen:

$$\int_{\Gamma} \vec{J} \vec{n} d\Gamma = a_i^J \phi_i + \sum_{nb=1}^N a_{nb}^J \phi_{nb} + \sum_{j=1}^M \lambda_j^J S_{cj} . \quad (3.41)$$

Darin ist N die Anzahl der den Knoten i umgebenden Knoten, M die Anzahl der den Knoten i umgebenden Dreiecke (für innenliegende ist $N = M$). $\lambda_j S_{cj}$ sind die quelltermabhängigen Beiträge der umliegenden Dreiecke.¹ Eine separate Abspeicherung dieser Beiträge ist allerdings nur im Falle der Impulsgleichungen notwendig, weil die Koeffizienten λ_j später in der Geschwindigkeitskorrekturgleichung (siehe Kapitel 3.3.5.3) benötigt werden. Im Falle der Energiegleichung oder anderer skalarer Erhaltungsgleichungen können die einzelnen quelltermabhängigen Beiträge zu einer Konstanten b^J aufsummiert werden:

$$\int_{\Gamma} \vec{J} \vec{n} d\Gamma = a_i^J \phi_i + \sum_{nb=1}^N a_{nb}^J \phi_{nb} + b^J . \quad (3.42)$$

1. In den Gl. (3.41ff) kennzeichnet die Indizierung i knotenbezogene, die Indizierung j elementbezogene Werte.

3.3.4.2 Instationäre Integrale

Die Integration des instationären Terms in Gl. (3.4) überführt diesen in eine algebraische Gleichung der Form

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} (\rho \phi d\Omega) = a_i^t \phi_i^{n+1} + d_i^t \phi_i^n, \quad (3.43)$$

sofern für die zeitliche Diskretisierung ein einseitiges Differenzschema mit zwei Zeitebenen zum Einsatz kommt. Bei der Bestimmung der Koeffizienten in Gl. (3.43) ist die Zeitabhängigkeit des Integrationsvolumens zu berücksichtigen. Die Größe ϕ_i des betrachteten Knotens wird als örtlich konstant im gesamten Kontrollvolumenfragment angenommen, so daß gilt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} (\rho \phi d\Omega) \approx \sum_{j=1}^M \left[\frac{d}{dt} (\rho_j \phi_i \delta\Omega_j) \right] \approx \sum_{j=1}^M \left[\frac{\rho_j}{\Delta t} (\delta\Omega_j^{n+1} \phi_i^{n+1} - \delta\Omega_j^n \phi_i^n) \right]. \quad (3.44)$$

Für die Koeffizienten entsprechend Gl. (3.43) ergibt sich

$$a_i^t = \sum_{j=1}^M \frac{\rho_j \delta\Omega_j^{n+1}}{\Delta t} \quad ; \quad d = \sum_{j=1}^M -\frac{\rho_j \delta\Omega_j^n}{\Delta t}. \quad (3.45)$$

3.3.4.3 Quelltermingegrale

Die Volumenintegrale der Quelltermfunktion sind in jedem Kontrollvolumenfragment, das den Knoten i umgibt, unter Beachtung der Interpolationsfunktion für die Quellterme (Gl. 3.11) auszuführen. Im gesamten Teilvolumen $\delta\Omega$ eines jeden Dreiecks wird dabei der Knotenwert ϕ_i als konstant angenommen, das Integrationsvolumen beträgt jeweils ein Drittel der Dreiecksfläche. Nach Addition der Beiträge aller umliegenden Dreiecke erhält man:

$$\int_{\Omega(t)} S d\Omega = a_i^S \phi_i + \sum_{j=1}^M \lambda_j^S S_{cj}. \quad (3.46)$$

3.3.4.4 Gesamte diskretisierte Erhaltungsgleichung

In einem letzten Schritt sind die Beiträge des Flußintegrals, des Quelltermingegrals und des instationären Integrals zu addieren. Auf diese Weise entsteht für jeden Knoten i der Triangulation, dessen Wert nicht vorgegeben ist, eine algebraische Gleichung der Form

$$a_i^\phi \phi_i + \sum_{nb=1}^N a_{nb}^\phi \phi_{nb} + \sum_{j=1}^M \lambda_j^\phi S_{cj} + d^\phi \phi_i^n = 0. \quad (3.47)$$

Für Randknoten mit Dirichlet-Randbedingungen werden keine diskretisierten Gleichungen aufgestellt. Die Zeitindizierung der Terme ohne Zeitindex ist vom gewählten Zeitschrittverfahren (siehe Kapitel 3.3.7) abhängig.

In der beschriebenen Art und Weise lassen sich unter Berücksichtigung der entsprechenden Definition für ϕ und S sowohl die integrale Impulsgleichung als auch die integrale Energiegleichung in Systeme algebraischer Gleichungen überführen. Die davon etwas abweichende Herleitung der außerdem benötigten Druckgleichung sowie der Druckkorrektur- und Geschwindigkeitskorrekturgleichungen wird im nachfolgenden Unterkapitel erörtert.

3.3.5 Spezielle diskretisierte Gleichungen

3.3.5.1 Druckgleichung

Das verwendete iterative SIMPLER-Verfahren sieht neben einer Druckkorrekturgleichung die zusätzliche Verwendung einer Druckgleichung vor. Diese Druckgleichung ergibt sich aus der integralen Kontinuitätsgleichung

$$\int_{\Gamma(t)} \rho \vec{v} \vec{n} d\Gamma = 0 \quad (3.48)$$

durch Einsetzen der Interpolationsfunktionen für die Geschwindigkeiten

$$u = A^u \xi(X) + B^u Y + C^u + S^u \cdot F_S(X, Y, N) \quad (3.49)$$

$$v = A^v \xi(X) + B^v Y + C^v + S^v \cdot F_S(X, Y, N), \quad (3.50)$$

deren Quellterme S^u bzw. S^v eine Abhängigkeit vom Druckgradient enthält. Diese Druckgradienten sind gemäß den Gleichungen (3.17), die Exponentialfunktion $\xi(X)$ und die Quelltermfunktion $F_S(X, Y, N)$ gemäß den Gleichungen (3.21) bzw. (3.29) einzusetzen. Für die Gesamtquellterme sind die Definitionen nach Tab. 3.1 auf Seite 23 zu verwenden. Entsprechend Gl. (3.7) liefern dabei alle den Knoten i umgebenden Dreiecke Beiträge zu den Oberflächenintegralen. Die entstehende diskrete Gleichung im Knoten i kann in die folgende Form überführt werden:

$$a_i^p p_i + \sum_{nb=1}^N a_{nb}^p p_{nb} = c_i^p. \quad (3.51)$$

Die Summation ist dabei über alle N Nachbarknoten, die den Knoten i umgeben, auszuführen.

3.3.5.2 Druckkorrekturgleichung

Prinzipiell bilden die diskretisierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie ein geschlossenes Gleichungssystem, das zur Bestimmung von Strom-, Temperatur- und Druckfeld ausreichend ist.² Im SIMPLER-Algorithmus (Patankar 1985) ist jedoch ein zusätzlicher Druckkorrekturschritt vorgesehen, um die Konvergenz des iterativen Verfahrens sicherzustellen. Dabei ist der aus der Druckgleichung erhaltene Druck p^* so zu korrigieren, daß er zusammen mit dem aus den Impulsgleichungen erhaltenen Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^* die Kontinuitätsgleichung erfüllt. Das so erhaltene divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld geht in die Berechnung des Temperaturfeldes aus der diskretisierten Energiegleichung ein. Die Herleitung der Druckkorrekturgleichung erfolgt analog zur Herleitung der Druckgleichung. Der Druck p ist dabei überall durch die Summe $p^* + \hat{p}$ zu ersetzen, wobei für p^* die zuvor aus der Druckgleichung berechneten nodalen Drücke einzusetzen sind und \hat{p} die unbekannt

2. Im Falle bewegter Kontrollvolumen ist außerdem die diskretisierte Volumenerhaltungsgleichung zu erfüllen (siehe Kapitel 3.3.6).

Korrekturen dieser Drücke darstellen. Die in der Druckgleichung (3.51) berechneten Koeffizienten a_i^p und a_{nb}^p bleiben dabei erhalten, lediglich die rechte Seite des Gleichungssystems muß modifiziert werden:

$$a_i^p \hat{p}_i + \sum_{nb=1}^N a_{nb}^p \hat{p}_{nb} = c_i^{\hat{p}}. \quad (3.52)$$

3.3.5.3 Geschwindigkeitskorrekturgleichung

Im zweiten Teil des Korrektorschrittes des SIMPLER-Verfahrens ist das aus den Impulsgleichungen erhaltene Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^* mit Hilfe der aus der Druckkorrekturgleichung berechneten Druckkorrekturen \hat{p} zu korrigieren. Die diskretisierten Impulsgleichungen bilden die Basis zur Herleitung der Geschwindigkeitskorrekturgleichungen, welche exemplarisch für die u -Geschwindigkeitskomponente aufgezeigt wird und entsprechend auch für die anderen Komponenten gilt. Zunächst sind die nodalen Geschwindigkeiten u_i durch $u_i^* + \hat{u}_i$ und die nodalen Drücke p_i (in den Quelltermen S_{cj} enthalten) durch $p^* + \hat{p}$ zu ersetzen:

$$a_i(u_i^* + \hat{u}_i) = \sum_{nb=1}^N a_{nb}(u_{nb}^* + \hat{u}_{nb}) + d_i u_i^n + \sum_{j=1}^M \lambda_j \left[S_u - \frac{\partial p^*}{\partial x} - \frac{\partial \hat{p}}{\partial x} + \beta \rho g_x (T - T_0) \right]_j. \quad (3.53)$$

Anschaulich wird also das Geschwindigkeitsfeld (genauer: die Korrekturen \hat{u}_i zum bekannten Geschwindigkeitsfeld u_i^*) gesucht, das zusammen mit dem korrigierten Druckfeld ($p_i^* + \hat{p}_i$) die Impulsgleichung erfüllt. Mit

$$a_i u_i^* = \sum_{nb=1}^N a_{nb} u_{nb}^* + d_i u_i^n + \sum_{nb=1}^M \lambda_j \left[S_u - \frac{\partial p^*}{\partial x} + \beta \rho g_x (T - T_0) \right]_i \quad (3.54)$$

kann Gl. (3.53) zu

$$a_i \hat{u}_i = \underbrace{\sum_{nb=1}^N a_{nb} \hat{u}_{nb}}_{\approx 0} + \sum_{j=1}^M \lambda_j \left(-\frac{\partial \hat{p}}{\partial x} \right) \quad (3.55)$$

vereinfacht werden. Bei Vernachlässigung des ersten Termes der rechten Seite in Gl. (3.55) ergibt sich eine explizite Gleichung zur Berechnung der nodalen Geschwindigkeitskorrekturen aus den nodalen Druckkorrekturen:

$$\hat{u}_i = \frac{\sum_{j=1}^M \lambda_j \left(-\frac{\partial \hat{p}}{\partial x} \right)}{a_i}. \quad (3.56)$$

Die dreiecksbezogenen Quelltermkoeffizienten λ_j wurden ebenso wie die Koeffizienten a_i^u bereits bei der Diskretisierung der Impulsgleichung errechnet und abgespeichert.

3.3.6 Gitterbewegung und Volumenerhaltungsgleichung

In dieser Arbeit wird das CVFEM-Verfahren von Prakash (1986) auf bewegte Kontrollvolumen erweitert. Dabei wird dem Geschwindigkeitsfeld der Fluidteilchen das zeit- und

ortsabhängige Geschwindigkeitsfeld des numerischen Gitters überlagert. In diesem Zusammenhang spielt die Einhaltung der Volumenerhaltungsgleichung (2.4) eine wichtige Rolle. Die Geschwindigkeiten der Kontrollvolumenoberflächen sind so zu definieren, daß die zeitliche Volumenänderung aus der Volumenerhaltungsgleichung, nämlich

$$\frac{\Delta\Omega}{\Delta t} = \int_{\Gamma} \vec{w}\vec{n} d\Gamma, \quad (3.57)$$

der tatsächlichen Volumenänderung des Kontrollvolumens entspricht (Demirdzic und Peric 1988).

Eine naheliegende Festlegung der Gittergeschwindigkeiten mißachtet die Volumenerhaltungsgleichung, wie Demirdzic und Peric (1988) am Beispiel einer finiten Volumendiskretisierung zeigen. Werden, wie in Abb. 3.5 angedeutet, die Kontrollvolumen zu den Zeitpunkten n und $n + 1$ als bekannt angenommen, liegt eine Festlegung der Gittergeschwindigkeiten mit

$$w_x = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad w_y = \frac{\Delta y}{\Delta t} \quad (3.58)$$

und eine Diskretisierung der Erhaltungsgleichung der Form

$$\frac{\Delta\Omega}{\Delta t} = w_x\Delta y + w_y\Delta x \quad (3.59)$$

nahe. Wie in Abb. 3.5 angedeutet, führt dies jedoch zu einer Volumendivergenz, also einer zusätzlichen Fehlerquelle im numerischen Verfahren. In Demirdzic und Peric (1988) werden die negativen Auswirkungen solcher künstlicher Volumen- bzw. Massenquellen auf numerische Berechnungen ausführlich diskutiert.

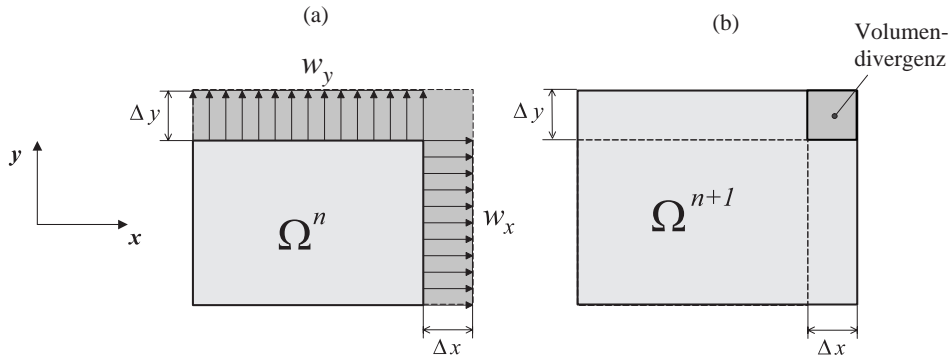


Abbildung 3.5: Volumendivergenz bei fehlerhafter Diskretisierung der Volumenerhaltungsgleichung: (a) Volumen zum Zeitpunkt n und Oberflächengeschwindigkeiten, (b) Volumen zum Zeitpunkt $n + 1$ und resultierende Volumendivergenz.

Im vorgestellten CVFEM-Verfahren wird die Volumenerhaltungsgleichung exakt erfüllt, wenn die Zeitabhängigkeit des Integrationsvolumens beim Ausführen der Oberflächenintegrale berücksichtigt wird. Dies soll die folgende Betrachtung verdeutlichen. Die Positionen der Dreiecksknoten, die das Kontrollvolumen umgeben, werden sowohl zum Zeitpunkt n

als auch zum Zeitpunkt $n + 1$ als bekannt vorausgesetzt.³ In Analogie zu den Gleichungen (3.58) wird ein linearer Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten zwischen den Punkten a und b definiert (siehe auch Abb. 3.6):

$$\begin{aligned} w_x(y) &= w_{x,a} + \frac{y - y_a}{y_b - y_a} w_{x,b} \\ w_y(x) &= w_{y,a} + \frac{x - x_a}{x_b - x_a} w_{y,b}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

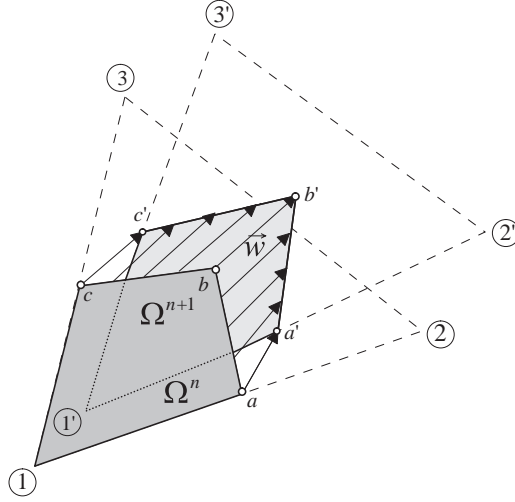


Abbildung 3.6: Bewegte Kontrollvolumenoberfläche im Dreieck.

Wird von der Volumenerhaltungsgleichung in der Form

$$\Omega^{n+1} - \Omega^n = \int_{\Delta t} \left[\int_{\delta\Gamma} \vec{w}\vec{n} d\Gamma \right] dt \quad (3.61)$$

ausgegangen, kann mit Hilfe dieser Geschwindigkeitsdefinitionen zunächst das innere, örtliche Integral analytisch gelöst werden:

$$\begin{aligned} \int_{\delta\Gamma} \vec{w}\vec{n} d\Gamma &= \int_{\Delta y_{ab}} w_x dy - \int_{\Delta x_{ab}} w_y dx = \\ &= \frac{1}{2}(w_{x,a} + w_{x,b})(y_a - y_b) - \frac{1}{2}(w_{y,a} + w_{y,b})(x_a - x_b). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Zur Ausführung des Zeitintegrals ist die Definition der Zeitabhängigkeit der Gittergeschwindigkeiten erforderlich. Prinzipiell ist jede beliebige Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Zeit möglich, die das Kontrollvolumen vom Zustand Ω^n in den Zustand Ω^{n+1} überführt. Am einfachsten ist die Definition zeitlich konstanter Geschwindigkeiten im betrachteten Zeitintervall. Daraus ergibt sich unmittelbar eine lineare Änderung der Koordinaten der Punkte a und b , so daß eine analytische Zeitintegration zwischen den Grenzen t_0 (entspricht dem Zeitindex n) und t_1 (entspricht dem Zeitindex $n + 1$) einfach möglich ist. Dies

3. Die Kriterien zur Festlegung der Gittergeschwindigkeit in den Knotenpunkten der Triangulation werden in Kapitel 5 diskutiert.

führt auf die diskrete Form der Erhaltungsgleichung

$$\frac{\Delta\Omega}{\Delta t} = \frac{1}{2}(w_{x,a} + w_{x,b})(\bar{y}_b - \bar{y}_a) - \frac{1}{2}(w_{y,a} + w_{y,b})(\bar{x}_b - \bar{x}_a) \quad (3.63)$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{y}_i &= \frac{1}{2}(y_i^n + y_i^{n+1}) & i = a, b \\ \bar{x}_i &= \frac{1}{2}(x_i^n + x_i^{n+1}) & i = a, b. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Gl. (3.63) ist - obwohl auf völlig anderem Wege hergeleitet - identisch mit der in Demirdzic und Peric (1988) vorgeschlagenen Diskretisierung, die eine exakte Einhaltung der Volumenerhaltung garantiert. Anschaulich bedeutet dies, daß eine Divergenzfreiheit nur dann gewährleistet ist, wenn die örtlichen Integrationen über die zeitlich gemittelten Koordinaten der Integrationsbasen ausgeführt werden. Konsistenterweise sind auch alle Fluß- und Quelltermintegrationen jeweils auf Basis dieser Mittelung auszuführen.

3.3.7 Zeitliche Diskretisierung

3.3.7.1 Allgemeines

Die Verwendung eines Zeitschrittverfahrens erfordert sowohl für instationäre wie auch für stationäre Probleme eine Diskretisierung der transienten Terme in den Erhaltungsgleichungen und die Zuteilung eines Zeitindex für alle Zustandsgrößen aus den Ortsableitungen. Kriterien zur Beurteilung der Güte zeitlicher Diskretisierungsschemata sind u. a. Genauigkeit (Fehlerordnung), numerischer Aufwand, numerische Diffusion und numerische Stabilität. Grundsätzlich wird dabei zwischen expliziten und impliziten Verfahren unterschieden.

Explizite Verfahren weisen allen Zustandsgrößen aus den Ortsableitungen den Zeitindex n zu, d. h. diese werden als bekannt angenommen. Die Lösung großer Gleichungssysteme, die in der Regel einen nicht unerheblichen numerischen Aufwand darstellt, wird damit hinfällig. Explizite Verfahren der Zeitordnung $O(\Delta t)$ sind unterdiffusiv, d. h. sie berücksichtigen weniger als die physikalische Diffusion. Diese künstliche Verringerung der Diffusivität, die auch als numerische Dissipation bezeichnet wird, wird im Folgenden anhand einer eindimensionalen Konvektions-Diffusions-Gleichung erörtert:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -u\frac{\partial\phi}{\partial x} + \Psi\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}. \quad (3.65)$$

Um die Wirkung einer einseitigen, expliziten zeitlichen Näherung bezüglich numerischer Diffusion zu verdeutlichen, werden die örtlichen Ableitungen mit zentralen Differenzen diskretisiert:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = -u\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} + \Psi\frac{\phi_{i+1}^n + \phi_i^n + \phi_{i-1}^n}{\Delta x^2}. \quad (3.66)$$

Werden nun alle Differenzenquotienten in Gl. (3.66) in Taylorreihen entwickelt und dort eingesetzt, so ergibt sich

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_i^n + \frac{\Delta t}{2}\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_i^n + O(\Delta t^2) = -u\left[\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i^n + O(\Delta x^2)\right] + \Psi\left[\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_i^n + O(\Delta x^2)\right]. \quad (3.67)$$

Gl. (3.67) verdeutlicht, daß die finite Differenzennäherung in Gl. (3.66) eine Näherung von 1. Ordnung bezüglich der Zeit und von 2. Ordnung bezüglich des Ortes ist. Wird Gl. (3.65) nach der Zeit differenziert, erhält man nach geeigneter Umformung (Günther 1997a)

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2u\Psi \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \Psi^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} = 0 \quad (3.68)$$

bzw. bei Vernachlässigung der Ableitungsterme höherer Ordnung

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \approx u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} . \quad (3.69)$$

Wird diese Näherung in Gl. (3.67) eingesetzt, erhält man

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_i^n = -u \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n + \left(\Psi - \frac{u^2 \Delta t}{2} \right) \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i^n + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2). \quad (3.70)$$

Man erkennt eine zu Δt proportionale Verringerung des Diffusionsterms, die eindeutig auf die Verwendung einer expliziten und einseitigen Näherung für den instationären Term zurückzuführen ist und u. U. zur Instabilität des gesamten Verfahrens führen kann. Um bei Verwendung einer expliziten Zeitdiskretisierung numerische Stabilität zu gewährleisten, sind ferner folgende numerische Kriterien zu erfüllen, die in der Praxis eine starke Beschränkung des zulässigen Zeitschritts Δt bedeuten:

- Diffusionslimit:

$$D = \frac{\Psi \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} . \quad (3.71)$$

- Courant-Friedrichs-Levy-Kriterium:

$$C = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \leq 1 . \quad (3.72)$$

Eine einfache Herleitung dieser Kriterien erhält man, wenn Gl. (3.66) unter Verwendung der Kennzahlen C und D wie folgt dargestellt wird:

$$\phi_i^{n+1} = \left(\frac{C}{2} + D \right) \phi_{i-1}^n + (1 - 2D) \phi_i^n + \left(-\frac{C}{2} + D \right) \phi_{i+1}^n . \quad (3.73)$$

Nach Patankar (1980) ist die Stabilität eines numerischen Verfahrens nur für Diskretisierungsschemata mit ausschließlich positiven Koeffizienten gesichert. Ein negativer Koeffizient auf der rechten Seite von Gl. (3.73) bedeutet nämlich, daß die Erhöhung des ϕ -Wertes eines Nachbarknotens den ϕ -Wert im Knoten i verringert. Ein solches Verhalten ist unphysikalisch und kann zur Instabilität des Verfahrens führen. Eine Einhaltung dieser positiven Koeffizientenregel ist für die FTCS-Diskretisierung (= Forward Time Centered Space) in Gl. (3.73) nur dann gewährleistet, wenn

$$D \leq \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad C \leq 1 \quad (3.74)$$

erfüllt sind.⁴ Der Koeffizient vor ϕ_{i+1}^n ist allerdings nur dann positiv, wenn außerdem das Kriterium

$$\frac{C}{D} \leq 2 \quad (3.75)$$

erfüllt ist. Dies führt direkt auf die bekannte Maschen-Reynolds-Zahl-Bedingung

$$Re_{\Delta x} = \frac{u\Delta x}{\Psi} \leq 2. \quad (3.76)$$

Gl. (3.76) ist im übrigen auch bei stationären Gleichungen zu erfüllen und stellt nur indirekt (über Δx) eine Zeitschrittbeschränkung dar.

Implizite Verfahren betrachten die diskretisierten ortsabhängigen Terme zum neuen Zeitpunkt $n + 1$. Eine Lösung diskretisierter Gleichungen ist somit nur innerhalb eines Gleichungssystems möglich, was einen erheblichen numerischen Mehraufwand gegenüber expliziten Verfahren bedeutet. Implizite Verfahren 1. Ordnung sind überdiffusiv. Eine zu Gl. (3.70) analoge Gleichung kann für einseitige implizite Diskretisierung (implizites Euler-Verfahren) hergeleitet werden, wobei sich lediglich das Vorzeichen der numerischen Dissipation umdreht:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_i^{n+1} = -u \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n + \left(\Psi + \frac{u^2 \Delta t}{2} \right) \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i^n + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2). \quad (3.77)$$

Positive numerische Dissipation hat die gleiche dämpfende Wirkung wie die von einer Upwind-Diskretisierung des konvektiven Termes herrührende positive numerische Diffusion. In diesem Sinne ist die Verwendung einer impliziten Zeitdiskretisierung in Kombination mit einer örtlichen Upwind-Diskretisierung als besonders negativ zu werten, weil sich die überdiffusiven Beiträge aufaddieren (Günther 1997a).

Seitens der numerischen Stabilität gelten für implizite Verfahren keine Zeitschrittbeschränkungen, wie man z. B. anhand einer Neumannschen Stabilitätsanalyse für eine implizite Euler-Diskretisierung in Verbindung mit Zentralkoeffizientenansätzen für Gl. (3.65) zeigen kann. Die zu Gl. (3.73) analoge Gleichung lautet im impliziten Fall

$$(1 + 2D)\phi_i^{n+1} = \left(\frac{C}{2} + D\right)\phi_{i-1}^{n+1} + \phi_i^n + \left(-\frac{C}{2} + D\right)\phi_{i+1}^{n+1} \quad (3.78)$$

und verdeutlicht die numerische Stabilität anschaulich anhand der Koeffizienten. Für die Einhaltung der positiven Koeffizientenregel muß hier lediglich Gl. (3.76) erfüllt sein. Eine Verletzung des Maschenreynoldskriteriums kann zu unphysikalischen Oszillationen führen, auch wenn die unbedingte Stabilität vollimpliziter Verfahren gewährleistet, daß diese Oszillationen in der Zeit nicht kontinuierlich anwachsen (Patankar 1980, S.57).

Neben den beschriebenen voll expliziten und voll impliziten Zeitdiskretisierungen ist eine gewichtete Addition von expliziten und impliziten Anteilen möglich:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = \Theta L(\phi_i^{n+1}) + (1 - \Theta)L(\phi_i^n). \quad (3.79)$$

4. Das Kriterium für D ergibt sich direkt aus dem Koeffizienten für ϕ_i^n , das Kriterium für C aus dem Koeffizienten für ϕ_{i-1}^n im Falle $D = 0$.

L ist darin ein beliebiger örtlicher Differentialoperator, Θ ein freier Parameter, der bei einer Interpolation zwischen 0 und 1 zu wählen ist, bei einer Extrapolation auch andere Werte annehmen kann. Eine Herleitung der äquivalenten Differentialgleichung entsprechend Gl. (3.67) für eine zentrale örtliche Diskretisierung und eine zeitliche Diskretisierung nach Gl. (3.79) liefert den führenden Fehlerterm

$$O(\Delta t) = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} - 2\Theta \left(u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \psi \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (3.80)$$

Man erkennt, daß der Klammerterm für $\Theta = 0.5$ gerade zu null wird. Dies führt zur Crank-Nicolson-Diskretisierung, die folglich von 2. Ordnung Genauigkeit ist und anschaulich eine lineare Interpolation zwischen beiden Zeitebenen darstellt.

Neben den oben genannten Kriterien zur Bewertung numerischer Zeitdiskretisierungsschemata ist bei der Entscheidung für oder gegen eines der genannten Verfahren zusätzlich das zeitliche Verhalten des gestellten Problems zu berücksichtigen. Wird ein stationäres Problem mit einem *time-marching*-Verfahren gelöst, ist die Zeitgenauigkeit der einzelnen Zeitschrittlösungen oftmals von untergeordneter Bedeutung. Dies gilt jedoch nicht, wenn die zeitlichen Perioden oder aperiodischen Oszillationen eines instationären Problems berechnet werden soll. Das Diskrepanz-Statement (Chapman 1981, Günther 1997a) besagt sogar, daß beide genannten Probleme bei Verwendung desselben Zeitdiskretisierungsschemas nicht mit gleicher Genauigkeit gelöst werden können. Es entsteht ein Zielkonflikt zwischen dem korrekten zeitlichen Transport von Strömungsstrukturen und der Oszillationsfreiheit einzelner Zeitschrittlösungen.

Im vorgestellten numerischen Code sind die drei im folgenden beschriebenen zeitlichen Diskretisierungsschemata implementiert. Je nach Art des gestellten Problems ist vom Benutzer unter Abwägung der genannten Kriterien das jeweils geeignetste Verfahren auszuwählen.

3.3.7.2 Explizites Euler-Verfahren

Die einfachste Form einer expliziten Diskretisierung stellt das explizite Euler-Verfahren dar, welches ein Verfahren von 1. Ordnung Genauigkeit ist:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = L(\phi^n) + O(\Delta t). \quad (3.81)$$

L ist darin ein beliebiger örtlicher Differentialoperator. Explizite Verfahren sind nur für sehr kleine Zeitschritte numerisch stabil.

3.3.7.3 Implizites Euler-Verfahren

Das implizite Euler-Verfahren betrachtet alle örtlichen Terme der Differentialgleichung zum Zeitschritt $n + 1$:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = L(\phi^{n+1}) + O(\Delta t). \quad (3.82)$$

Diese Diskretisierung ist ebenfalls von 1. Ordnung Genauigkeit, unterliegt seitens der Stabilität aber keiner Zeitschrittbeschränkung.

3.3.7.4 Crank-Nicolson-Verfahren

Das Crank-Nicolson-Verfahren ist ein semi-implizites Verfahren, das durch lineare Interpolation zwischen den Zeitebenen $n + 1$ und n entsteht:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}L(\phi_i^{n+1}) + \frac{1}{2}L(\phi_i^n) + O(\Delta t^2). \quad (3.83)$$

Bezüglich des numerischen Aufwands und des Stabilitätsverhaltens ist es mit vollimpliziten Verfahren vergleichbar. Das Crank-Nicolson-Verfahren ist ein Verfahren 2. Ordnung Genauigkeit und bringt keine zusätzliche numerische Dissipation ein.

3.3.8 Lineare Gleichungssysteme

Die Diskretisierung und Linearisierung der Differentialgleichungen führt auf große lineare Gleichungssysteme der Form

$$\mathbf{A}_{(n \times n)} \cdot \vec{\phi} = \vec{r} \quad (3.84)$$

mit der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} , dem Vektor $\vec{\phi}$ der zu bestimmenden Unbekannten und dem Vektor \vec{r} der rechten Seite. Direkte Lösungsverfahren (z. B. Jacobi-Methode oder Gauss-Seidel-Elimination) lösen dieses System durch Inversion der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} . Bei großen Gleichungssystemen (d. h. bei hohen Werten für n) sind direkte Löser jedoch sehr speicher- und rechenzeitintensiv, so daß bevorzugt iterative Lösungsverfahren eingesetzt werden.

Die im vorliegenden CVFEM-Verfahren auf unstrukturierten Gittern entstehenden Koeffizientenmatrizen sind im allgemeinen weder symmetrisch noch von ausgeprägter Bandstruktur.⁵ Im vorliegenden Code hat sich hierbei der Einsatz eines präkonditionierten CGS-Verfahren (*Conjugate Gradient Squared*) aus der ESSL-Bibliothek (*ESSL - Engineering and scientific subroutine library, release 4 1990*) bewährt. Dieser instationäre iterative Löser zeigte innerhalb aller Test- und Anwendungsrechnungen gutes Konvergenzverhalten bei akzeptablem Rechenaufwand.

3.3.9 Iterativer SIMPLER-Algorithmus

In Tabelle 3.3.9 sind abschließend alle Rechenschritte aufgelistet, die innerhalb einer SIMPLER-Iteration zu jedem Zeitschritt abzarbeiten sind. Die Diskretisierung der dabei verwendeten Gleichungen hat wie in den vorangegangenen Kapiteln beschrieben zu erfolgen.

Als Konvergenzresiduum wird die Summe der normalisierten Gleichungsresiduen verwendet:

$$R = R_p + R_u + R_v + R_h < R_{max}. \quad (3.85)$$

R_{max} ist je nach Anwendungsfall (Zeitgenauigkeit der Lösung erforderlich oder nicht?) festzulegen.

5. Mit Hilfe spezieller Elementneuordnungsalgorithmen, die nach jedem Zeitschritt eine Neunummerierung der Knoten und Elemente vornehmen (siehe z. B. Gibbs (1976)), kann auch auf unstrukturierten Netzen eine bandähnliche Struktur der Matrix aufrechterhalten werden.

Tabelle 3.2: Iterationsschritte des SIMPLER-Verfahrens.

1. Löse diskretisierte Druckgleichung (3.51), um das Druckfeld p^* zu erhalten:

$$a_i^p p_i^* + \sum_N a_n^p p_n^* + c_i^p = 0 . \quad (3.86)$$

Verwende hierzu ein geschätztes Geschwindigkeitsfeld bzw. das Geschwindigkeitsfeld der letzten Iteration.

2. Löse diskretisierte Impulsgleichungen (3.47), um das Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^* zu erhalten:

$$\begin{aligned} a^u u_i^* + \sum_N a_{nb}^u u_{nb}^* + \sum_M \lambda_j^u S_{cj}^u + d_i^u u_i^n &= 0 \\ a^v v_i^* + \sum_N a_{nb}^v v_{nb}^* + \sum_M \lambda_j^v S_{cj}^v + d_i^v v_i^n &= 0 . \end{aligned} \quad (3.87)$$

In die Interpolation der Geschwindigkeitskomponenten entsprechend Gl. (3.28) geht dabei das zuvor berechnete Druckfeld p^* ein.

3. Löse Druckkorrekturgleichung (3.52) zur Bestimmung der Druckkorrekturen \hat{p} :

$$a_i^p \hat{p}_i = \sum_N a_n^p \hat{p}_n + c^{\hat{p}i} . \quad (3.88)$$

\hat{p} ist dabei derjenige Druck, um den das Druckfeld p^* zu korrigieren ist, damit $p^* + \hat{p}$ zusammen mit u^* die Druckgleichung erfüllt.

4. Löse Geschwindigkeitskorrekturgleichung und bestimme \hat{v} mit Hilfe der zuvor berechneten Druckkorrekturen \hat{p} :

$$\begin{aligned} a_i^u \hat{u}_i &= \sum_M \lambda_j^u \frac{\partial \hat{p}}{\partial x} \\ a_i^v \hat{v}_i &= \sum_M \lambda_j^v \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} . \end{aligned} \quad (3.89)$$

5. Löse diskretisierte Energieerhaltungsgleichung und bestimme Enthalpiefeld h (bzw. Temperaturfeld T):

$$a^h h_i + \sum_N a_{nb}^h h_{nb} + \sum_M \lambda_j^h S_{cj}^h + d_i^h h_i^n = 0 . \quad (3.90)$$

Verwende hierzu das korrigierte Druckfeld $p = p^* + \hat{p}$ und das unkorrigierte Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^* .

6. Korrigiere das Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^* mit Hilfe der zuvor berechneten Geschwindigkeitskorrekturen:

$$\begin{aligned} u &= u^* + \hat{u} \\ v &= v^* + \hat{v} . \end{aligned} \quad (3.91)$$

7. Wiederhole Schritte 1. - 6., bis Konvergenzkriterium erfüllt ist.

Kapitel 4

Numerische Behandlung von Phasenwechselproblemen

4.1 Allgemeines

Entsprechend ihrer großen Bedeutung in technischen Prozessen stößt die numerische Behandlung von Phasenwechselproblemen in der Literatur auf großes Interesse. Schwerpunkte der Untersuchungen sind dabei vielfach die Bestimmung der transienten Phasengrenzflächenposition bzw. die Lokalisierung des Phasenwechselgebietes, welche mit den komplexen Stoff- und Wärmetransportmechanismen wechselwirken. Aus mathematischer Sicht stellt ein Phasenwechselproblem ein freies Randwertproblem dar. Die Phasentrennfläche zwischen flüssiger und fester Phase ist nicht a priori bekannt, sondern ergibt sich als Teil der Lösung des Problems. Die numerische Behandlung freier Randwertprobleme wird dabei durch deren starke Nichtlinearität erschwert. Neben dem konvektiven Massentransport und der Temperaturabhängigkeit der Stoffgrößen stellt die Existenz einer freien Grenzfläche eine dritte Nichtlinearität dar (Samarskii, Vabishchevich, Iliev und Churbanov 1993). Das ein freies Randwertproblem beschreibende Differentialgleichungssystem ist somit im allgemeinen ein hochgradig gekoppeltes, nichtlineares System. Die Koppelung der einzelnen Gleichungen erfolgt hierin nicht nur über den Transport von Masse, Impuls und Energie, sondern zusätzlich über die Dynamik der Grenzfläche. Die gleichzeitige Lösung des Differentialgleichungssystems und der Grenzflächendynamik erfordert spezielle numerische Modelle.

4.1.1 Klassifizierung numerischer Modelle

In der Literatur existiert eine Vielzahl unterschiedlichster numerischer Modelle zur Behandlung konvektionsdominierter Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge. Diese Modelle lassen sich prinzipiell in drei Gruppen unterteilen (Voller et al. 1987):

- **Empirische Modelle:** Im Sinne einer ingenieurmäßigen Näherung wird das Phasenwechselproblem als reines Wärmeleitproblem behandelt. Der Einfluß der Konvektion

wird lediglich in Form einer verbesserten Wärmeleitfähigkeit des flüssigen Mediums berücksichtigt. Zur groben Abschätzung industrierelevanter integraler Größen wie zu- oder abzuführende Wärmemengen oder erforderliche Kühlwasserströme reicht eine derartige Modellierung häufig aus. Eine genauere Betrachtung mit der Zielsetzung, lokale Größen wie örtliche Temperaturen oder Grenzflächenpositionen zu ermitteln, macht jedoch die Berücksichtigung konvektiver Transportmechanismen unabdingbar. Empirische Modelle liefern im technischen Maßstab oftmals wichtige Anhaltspunkte zur Dimensionierung von Neuanlagen, werden im Rahmen dieser Arbeit aufgrund ihrer Einfachheit aber nicht näher behandelt.

- **Klassische Modelle:** Klassische Modelle zeichnen sich durch eine zweiphasige numerische Behandlung des Problems aus. Stoff- und Wärmetransport in der flüssigen Phase werden durch Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie beschrieben. In der festen Phase wird eine Energietransportgleichung gelöst. Feste und flüssige Phasen werden über die Randbedingungen des freien Randes aneinander gekoppelt. Eine explizite Anwendung dieser Randbedingungen am exakten Ort ihrer Gültigkeit erfordert zu jedem Zeitpunkt eine diskrete Auflösung des Randes in Form von Knoten bzw. Kanten des numerischen Gitters. Prinzipiell kann dies mit Hilfe von transformierten Koordinatensystemen oder bewegten, deformierbaren Gittern erfolgen.
- **Enthalpie-Modelle:** Im Gegensatz zu klassischen Modellen bedienen sich Enthalpie-Modelle einer einphasigen Behandlung des gesamten Rechengebietes. Die Berechnung geschieht in der Regel auf einem festen numerischen Gitter, ein freier Rand wird nicht explizit aufgelöst. Dies macht gleichzeitig eine explizite Anwendung der Randbedingungen des freien Randes wie im klassischen Modell unmöglich. Stattdessen wird die Freisetzung oder Absorption von Latentwärme beim Phasenübergang implizit in einer Erhaltungsgleichung für die Enthalpie berücksichtigt und die Phasengrenze anschließend über eine Hilfsvariable (lokaler Flüssigkeits- oder Feststoffanteil) rekonstruiert. Diese Implementierung der Randinformation in einer Erhaltungsgleichung ist gleichbedeutend mit einem Verschmieren der Phasengrenze bzw. der Phasengrenzflächeninformation über einen bestimmten räumlichen Bereich. In diesem Sinne sind Enthalpie-Methoden eine Unterklasse der *Volume-of-Fluid*-Methoden (VoF) (Hirt und Nichols 1981), die im Bereich der Zweiphasenströmungen große Bedeutung erlangt haben. In Verbindung mit konvektiven Transportvorgängen sind bei einer einphasigen Behandlung des Problems zusätzliche Modelle erforderlich, um die Fluidgeschwindigkeit im Feststoff zu unterdrücken.

Klassische Modelle werden in der englischsprachigen Literatur auch als *front-tracking*-Methoden bezeichnet. Transformationsmethoden bilden den bewegten, physikalischen Raum auf einen unbewegten Rechenraum ab, wodurch eine "Immobilisierung" des freien Randes erreicht wird. Aufgrund der erforderlichen Landau-Koordinatentransformation ist die Flexibilität dieser Methode bezüglich Berechnungen in komplexen Geometrien allerdings eingeschränkt (Viswanath und Jaluria 1993). Beispiele für Transformationsmethoden für Aufschmelz- und Erstarrungsprobleme finden sich u. a. in Hsu, Sparrow und Patankar

(1981), Gadgil und Gobin (1984), Lacroix (1992) sowie Shyy, Udaykumar, Rao und Smith (1996).

Numerische Modelle mit deformierbaren, bewegten Gittern sind in der Literatur seltener anzutreffen. Die Mehrzahl der veröffentlichten Modelle arbeiten auf unstrukturierten Finite-Elemente-Gittern. Lynch stellte 1982 ein Verfahren vor, das die Auswirkungen der Gitterbewegung direkt in die Erhaltungsgleichungen einschließt. Die Bewegung des Gitters wird dabei über einen - der linearen Elastizitätstheorie entlehnten - Gitterdehnungsalgorithmus kontrolliert, der das Gitter wie ein elastisches Fachwerk aus Knoten und Stäben behandelt. Weitere Beispiele für Finite-Elemente-Methoden, die der freien Randbewegung mit deformierbaren Gittern begegnen, sind die Verfahren von Albert und O'Neill (1986) und Ruan und Zabaras (1990).

Enthalpie-Modelle, die eine Behandlung von Phasenwechselproblemen auf einem festen, numerischen Gitter ermöglichen, werden von zahlreichen Autoren eingesetzt. Finite-Volumen-Verfahren für zweidimensionale, konvektionsdominierte Phasenwechselprobleme wurden u. a. von Voller et al. (1987), Voller und Prakash (1987) und Brent, Voller und Reid (1988) vorgestellt. Varianten der Enthalpieformulierung berücksichtigen die Latentwärmefreisetzung in Form einer scheinbaren Wärmekapazität oder eines fiktiven Quellterms in der Energiegleichung (Dalhuijsen und Segal 1986, Voller 1997). Lewis, Huang, Usmani und Cross (1991) sowie Usmani, Lewis und Seetharamu (1992) behandeln konvektionsdominierte Erstarrungsprobleme mit Festgitter-Finite-Elemente-Verfahren auf Dreiecksgittern. Hong und Liou (1998) berechnet das Aufschmelzen eines Metalls mit einem adaptiven CVFEM-Verfahren auf unstrukturierten Dreiecksgittern, wobei auch hier eine Festgitter-Enthalpieformulierung zum Einsatz kommt.

Neben den Enthalpie-Methoden haben im Bereich der Festgitterformulierungen neuerdings die Phasenfeldmodelle Bedeutung erlangt. Diese Modelle lösen in einem engen Bereich um die physikalische Phasengrenze eine diffusive Transportgleichung für die Phasenfeldvariable, was einen sanften Übergang vom festen zum flüssigen Bereich gewährleistet. Die Phasengrenze wird über volumetrische Quellen in den Erhaltungsgleichungen berücksichtigt, eine explizite Berechnung von Grenzflächennormalen oder -geschwindigkeiten ist nicht erforderlich. Tönhardt und Amberg (1998) sowie Diepers, Beckermann und Steinbach (1997) untersuchen mit Hilfe zweidimensionaler Phasenfeldmodelle dendritische Erstarrung unter dem Einfluß von Konvektion.

Eine Bewertung der genannten Modelle oder ein Vergleich verschiedener Modelle miteinander ist jeweils nur in Verbindung mit dem gerade betrachteten physikalischen Problem möglich. Jedes numerische Modell besitzt einen eingeschränkten Gültigkeitsbereich, der seine Anwendung nur unter bestimmten Voraussetzungen gestattet. Beispielsweise verbietet sich die Anwendung eines Modells, das die Wirkung von Oberflächeneffekten vernachlässigt, wenn die Morphologie einer Phasengrenze auf mikroskopischen Skalen interessiert. Ebenso dürfen Modelle, die eine homogene Materialzusammensetzung im Berechnungsgebiet voraussetzen, nicht auf physikalische Probleme angewandt werden, bei denen Stoff- und Wärmetransport maßgeblich durch örtliche Konzentrationsunterschiede beeinflusst werden. Im Sinne einer effizienten und ökonomischen Berechnung verlangt die Komplexität und

Mannigfaltigkeit der möglichen physikalischen Phänomene (siehe Kapitel 2.1) angepaßte numerische Modelle, die jeweils nur die maßgeblichen Phänomene berücksichtigen und in der Lage sind, diese physikalisch korrekt wiederzugeben. Um eine qualitative Bewertung der unterschiedlichen Modelle vornehmen zu können, ist eine bestimmte Klassifizierung der Phasenwechselprobleme notwendig.

4.1.2 Klassifizierung von Phasenwechselproblemen

Der Aufschmelzvorgang bzw. Erstarrungsvorgang eines beliebigen Stoffes ist mit der Absorption bzw. Freisetzung von Latentwärme verbunden. Beim Aufschmelzvorgang stellt die Latentwärme eine Art thermische Aktivierungsenergie dar, die erforderlich ist, um die starken intermolekularen Anziehungskräfte zu überwinden, die den festen Aggregatzustand kennzeichnen. Beim Erstarren werden die Moleküle umgekehrt vom einem angeregten Zustand in einen Zustand geringerer kinetischer Energie überführt, wobei der Differenzbetrag der Energie als Latentwärme frei wird. Der Ort des Latentwärmeumsatzes ist dabei immer die Phasengrenze zwischen fest und flüssig. Im Hinblick auf die Anwendbarkeit unterschiedlicher numerischer Modelle ist eine Klassifizierung von Phasenwechselproblemen entsprechend der makroskopischen Gestalt dieser Phasengrenze sinnvoll. Zwei Grenzfälle lassen sich diesbezüglich unterscheiden.

1. Diskrete Phasenwechselprobleme

Diskrete Phasenwechselprobleme sind gleichbedeutend mit der Existenz diskreter, auf makroskopischen Skalen ebener Phasengrenzen. Der Phasenübergang findet ausschließlich an der Phasengrenze statt, die eine scharfe Trennung von flüssiger und fester Phase darstellt. Unter der Voraussetzung von thermodynamischem Gleichgewicht und der Vernachlässigung von Oberflächeneffekten besitzt jeder Punkt der Phasengrenze zu jedem Zeitpunkt Schmelztemperatur. Diskrete Phasengrenzen treten bei gerichteten Erstarrungs- oder Aufschmelzvorgängen von Reinstoffen oder eutektischen Gemischen auf. Generelle Phasenwechselprobleme können als diskrete Phasenwechselprobleme angenähert werden, wenn das räumliche Phasenwechselgebiet eine vernachlässigbare Tiefendimension (normal zur Oberfläche) besitzt.

2. Kontinuierliche Phasenwechselprobleme

Obwohl Phasenübergänge - mikroskopisch betrachtet - immer diskrete Phasenübergänge sind, können diese bei makroskopischer Betrachtungsweise kontinuierlich erscheinen. Der Übergang vom flüssigen zum festen Zustand erstreckt sich dann über einen bestimmten räumlichen Bereich. Innerhalb dieses Übergangsbereiches findet ein kontinuierlicher Übergang aller physikalischer Größen von ihren Werten im flüssigen Zustand zu ihren Werten im festen Zustand statt. Eine Phasengrenze im Sinne einer scharfen Trennung der beiden Zustände ist nicht vorhanden. Beispiele für diese Klasse von Problemen sind gerichtete Erstarrungsvorgänge, die mit morphologischen Instabilitäten verknüpft sind (z. B. dendritische Erstarrung), innere Aufschmelzvorgänge unter (annähernd) isothermen Bedingungen oder die Erstarrung unterkühlter Schmelzen (Nichtgleichgewichtserstarrung).

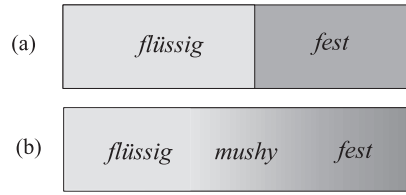


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung von Phasenübergängen bei makroskopischer Betrachtung: (a) diskreter Phasenübergang, (b) kontinuierlicher Phasenübergang.

Selbstverständlich ist die Zuordnung eines physikalischen Problems zu einem dieser beiden Klassen nicht immer eindeutig möglich. Die Frage, ob beispielsweise die gerichtete Erstarrung eines binären Stoffgemisches ein diskretes oder kontinuierliches Phasenwechselproblem darstellt, ist gleichbedeutend mit der Frage des Auftretens morphologischer Instabilitäten. Diese Fragestellung wiederum ist oftmals im Voraus nicht zu beantworten, da sie von einer Vielzahl von Einflußfaktoren abhängt (Stoffwerte, Randbedingungen, Geometrie, Konvektionseffekte etc.).

4.1.3 Bewertung numerischer Modelle für Phasenwechselprobleme

In Zusammenhang mit der im vorherigen Kapitel dargelegten Einteilung der Phasenwechselprobleme in diskrete und kontinuierliche Phasenübergänge liegt folgende Bewertung der numerischen Modelle nahe: Eine realitätsnahe Modellierung eines diskreten Phasenübergangproblems erfordert eine klassische Modellierung mit strikter Phasentrennung und expliziter Frontdefinition. Die Anwendung der Enthalpie-Formulierung führt in diesem Falle zu einer unphysikalischen Verschmierung der diskreten Phasengrenze. Umgekehrt wird im Falle eines kontinuierlichen Phasenübergangs die Existenz eines Phasenüberganggebietes zwischen fester und flüssiger Phase durch ein Enthalpie-Modell treffend wiedergegeben. Die Verschmierung der Latentwärmefreisetzung über einen gewissen räumlichen Bereich hat hier durchaus physikalische Relevanz. Die Anwendung eines klassischen Modells ist in diesem Fall problematisch und zudem fragwürdig, da die Stefanbedingung die Wärmeströme an einer diskreten Phasengrenze bilanziert, diese aber numerisch nicht aufgelöst werden kann. Ungeachtet der unphysikalischen Informationsverschmierung an diskreten Phasengrenzen werden Enthalpie-Methoden in der einschlägigen Literatur auch für gerichtete Phasenwechselprobleme von Reinstoffen eingesetzt. Mit Hilfe geeigneter Algorithmen gelingt es dabei in der Regel, die Breite des Phasenwechselgebietes auf die Dimension weniger Gitterzellen zu reduzieren. Bei entsprechend hoher Gitterauflösung erlaubt die Rekonstruktion der Phasengrenze aus dem Feld des lokalen Flüssigkeitsanteils eine Genauigkeit, die mit der klassischen Modelle vergleichbar ist. Enthalpie-Modelle arbeiten in der Regel auf einem festen numerischen Gitter und sind bezüglich des numerischen Aufwands den klassischen Modellen überlegen. Ihr größter Vorteil ist in ihrer hohen Flexibilität zu sehen. Während

der Einsatz klassischer Modelle aus den genannten Gründen auf diskrete Phasenwechselprobleme beschränkt ist, können Enthalpie-Methoden generell eingesetzt werden. Im direkten Vergleich mit klassischen Modellen (anhand diskreter Phasenwechselprobleme) zeigt die Erfahrung, daß klassische Modelle immer dann versagen, wenn die Berechnung mit starken Verkrümmungen und Verwindungen der Phasengrenze einhergeht (Voller 1997). Problematisch erweisen sich diese Modelle auch, was die Entstehung neuer Phasen (z. B. zu Beginn des Aufschmelzvorgangs eines anfänglich komplett erstarrten Körpers) oder die Koaleszenz verschiedener Phasen (z. B. das Abschmelzen einer festen Phase zwischen zwei flüssigen Phasen) angeht. Hier erweist sich die Anwendung der Enthalpie-Methoden als weitgehend unproblematisch.

Diese eingeschränkte Flexibilität klassischer Modelle für diskrete Phasenwechselprobleme ist zum großen Teil in der eingeschränkten Flexibilität der Gitteradaptionalgorithmen begründet (Voller 1997). Ein stabiler und flexibler Gitteralgorithmus erhöht zugleich die Flexibilität des gesamten Verfahrens. Die Anwendbarkeit klassischer Modelle mit transformierten Koordinatensystemen ist auf eher geringe Deformationsgrade beschränkt. Strukturierte Vernetzungen haben im Vergleich zu unstrukturierten Vernetzungen ein eingeschränktes Potential, was die Anwendung lokaler Eingriffe in die Gitterstruktur betrifft. Eine adaptive, unstrukturierte Vernetzung sollte hingegen - bei entsprechender Stabilität der numerischen Algorithmen - in der Lage sein, auch starke Verwindungen freier Ränder aufzulösen.

4.2 Bewegte-Gitter-Verfahren

Das in dieser Arbeit vorgestellte klassische Modell eines Bewegte-Gitter-Verfahrens eignet sich primär für die Behandlung diskreter Phasenwechselprobleme (Kapitel 4.2.1). Ein Schwerpunkt darin stellen die in Kapitel 5.2 näher behandelten Gitteradaptionalgorithmen dar, die eine Anwendbarkeit des Verfahrens auch bei großskaligen Bewegungen und komplexen geometrischen Formen der Phasengrenze(n) ermöglichen sollen. Um dieses Bewegte-Gitter-Verfahren auch für kontinuierliche Phasenwechselprobleme anwenden zu können, wird es zusätzlich mit einem Enthalpie-Modell gekoppelt. Das resultierende mehrphasige Enthalpiemodell versucht auch für diese Problemklasse bewegte numerische Gitter möglichst gewinnbringend einzusetzen (Kapitel 4.2.2).

4.2.1 Behandlung diskreter Phasenübergänge

Diskrete Phasenübergänge an einer makroskopisch ebenen Phasentrennfläche sind durch sprunghafte Änderungen physikalischer und thermophysikalischer Größen gekennzeichnet. Der große Vorteil eines Bewegte-Gitter-Verfahrens besteht darin, daß die Phasengrenze hier auch als Diskontinuität im Strömungsfeld behandelt wird und nicht - wie im Falle einer Fest-Gitter-Formulierung - über ein Phasenwechselgebiet endlicher Dicke verschmiert wird. Die strikte räumliche Trennung von fester und flüssiger Phase, die sich im numerischen Gitter widerspiegelt, erlaubt eine exakte Anwendung der Randbedingungen an der freien Grenzfläche. Die kinematische Randbedingung des freien Randes (Stefanbedingung) liefert

im vorgestellten Verfahren zunächst für jedes Kontrollvolumen, das einen Randknoten umgibt, denjenigen Volumenstrom, der einem Phasenwechsel unterworfen ist. In geeigneter Weise ist daraus dann die Gitterknotengeschwindigkeit der Randknoten zu berechnen. Im Sinne einer gemischten Lagrange-Euler-Betrachtung wird diese Randbewegung dann mittels eines einfachen Entspannungsalgorithmus auf alle Knoten im Rechengebiet verteilt. Das so bestimmte Gittergeschwindigkeitsfeld wird in der anschließenden Berechnung der Strömungsgrößen und des Temperaturfeldes dem Fluidgeschwindigkeitsfeld überlagert, so daß am Ende einer Zeitschrittlösung die berechneten Größen an den neuen Positionen der Gitterknoten vorliegen. Die folgenden Unterkapitel geben Aufschluß über einige Details dieser Verfahrensschritte.

4.2.1.1 Diskretisierung der Stefanbedingung

Die bereits in Kapitel 2.4 skizzierte Stefanbedingung in integraler Form bilanziert anschaulich die diffusiven Wärmeströme über einen diskreten Abschnitt des freien Randes und setzt diese mit dem Latentwärmestrom gleich. Unter Beachtung des Richtungssinnes der offenen Randintegrale ist Gl. (2.17) gleichbedeutend mit

$$\rho L \frac{\Delta \Omega^s}{\Delta t} = \int_{\delta \Gamma_{\rightarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s d\Gamma + \int_{\delta \Gamma_{\leftarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^l d\Gamma. \quad (4.1)$$

$\Delta \Omega^s$ drückt darin das im Zeitintervall Δt erstarrte Volumen aus. $\delta \Gamma_{\rightarrow}$ und $\delta \Gamma_{\leftarrow}$ symbolisieren die beiden entgegengesetzt gerichteten Strecken entlang der Phasengrenze, über die integriert wird. Man beachte, daß der Normalenvektor in die flüssige Phase hineinzeigt.

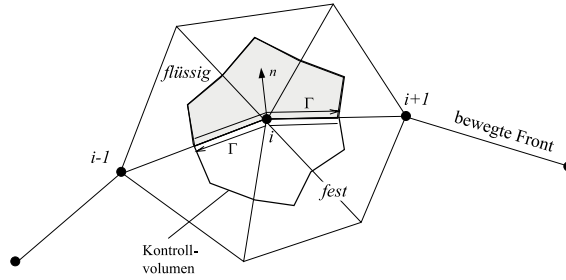


Abbildung 4.2: Randknoten mit zweiphasigem Kontrollvolumen.

Der Energietransport in der oberen bzw. unteren Kontrollvolumenhälfte (Ω_s bzw. Ω_l), die durch die geschlossenen Randkurven Γ_s bzw. Γ_l begrenzt werden, kann analog Gl. (3.4) unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes bilanziert werden:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^s} \rho c_p T d\Omega &+ \int_{\delta \Gamma_{\rightarrow}} \rho c_p T (v_n - w_n) d\Gamma + \int_{\delta \Gamma_{\leftarrow}} \rho c_p T (v_n - w_n) d\Gamma \\ &- \left[\int_{\delta \Gamma_{\rightarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s d\Gamma + \int_{\delta \Gamma_{\leftarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s d\Gamma \right] = \int_{\Omega_s} S d\Omega, \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^l} \rho c_p T d\Omega &+ \int_{\delta\Gamma_{\leftarrow}} \rho c_p T (v_n - w_n) d\Gamma + \int_{\delta\Gamma_{\rightarrow}} \rho c_p T (v_n - w_n) d\Gamma \\ &- \left[\int_{\delta\Gamma_{\leftarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^l d\Gamma + \int_{\delta\Gamma_{\rightarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^l d\Gamma \right] = \int_{\Omega^l} S d\Omega . \end{aligned} \quad (4.3)$$

$\delta\Gamma_{\rightarrow}$ und $\delta\Gamma_{\leftarrow}$ sind darin die innerhalb der festen bzw. flüssigen Phase verlaufenden Teile der Kontrollvolumenoberfläche (siehe Abb. 4.2).

Bei isothermen Phasenübergängen ist die Temperatur im Knotenpunkt i identisch der Schmelztemperatur T_m . Wird ein bestimmter Anteil des Kontrollvolumens erstarrt, wird der Knoten mitbewegt, so daß er zu jedem Zeitpunkt an der Front verharrt und die Schmelztemperatur beibehält. Unter Berücksichtigung der Leibnitzschen Integrationsregel über bewegte Kontrollvolumen (Bronstein und Semendjajew 1984) ist

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega^\alpha} \rho c_p T d\Omega = \underbrace{\int_{\Omega^\alpha} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega}_{=0} + \int_{\delta\Gamma} \rho c_p T w_n d\Gamma \quad \alpha = s, l, \quad (4.4)$$

wobei der erste Term der rechten Seite zu null wird.

Werden die Gl. 4.2 - 4.4 in Gl. 4.1 eingesetzt, ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho L \frac{\Delta\Omega^s}{\Delta t} &= \int_{\Gamma_{\rightarrow}} \underbrace{\left[\rho c_p T (v_n - w_n) - \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s \right]}_{J_n^s} d\Gamma - \int_{\Omega^s} S^l d\Omega \\ &+ \int_{\Gamma_{\leftarrow}} \underbrace{\left[\rho c_p T (v_n - w_n) - \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^l \right]}_{J_n^l} d\Gamma - \int_{\Omega^l} S^l d\Omega. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Gl. (4.5) erlaubt eine anschauliche Interpretation. Sie bilanziert - ähnlich der Erhaltungsgleichung eines innenliegenden Knotens - die Energieströme im Kontrollvolumen. Weil das Kontrollvolumen einem Phasenwechsel unterworfen ist, wird der Nettoenergiestrom hier jedoch nicht in sensible Wärme (Temperaturänderung), sondern in latente Wärme (Phasenwechsel) umgesetzt. Die Aufteilung des Kontrollvolumens in Anteile diesseits und jenseits der Grenze ermöglicht eine denkbar einfache Handhabung von Diskontinuitäten in Stoffwerten.

Das mit Gl. (4.5) berechnete Volumen $\Delta\Omega^s$ liefert unter Beachtung der Volumenerhaltungsgleichung die diskreten Gittergeschwindigkeiten $(w_n)_i$ der Randknoten in Normalenrichtung zum Rand:

$$(w_n)_i = \frac{2 \cdot \Delta\Omega^s}{(y_{i+1} - y_{i-1}) \cos\alpha + (x_{i+1} - x_{i-1}) \sin\alpha} . \quad (4.6)$$

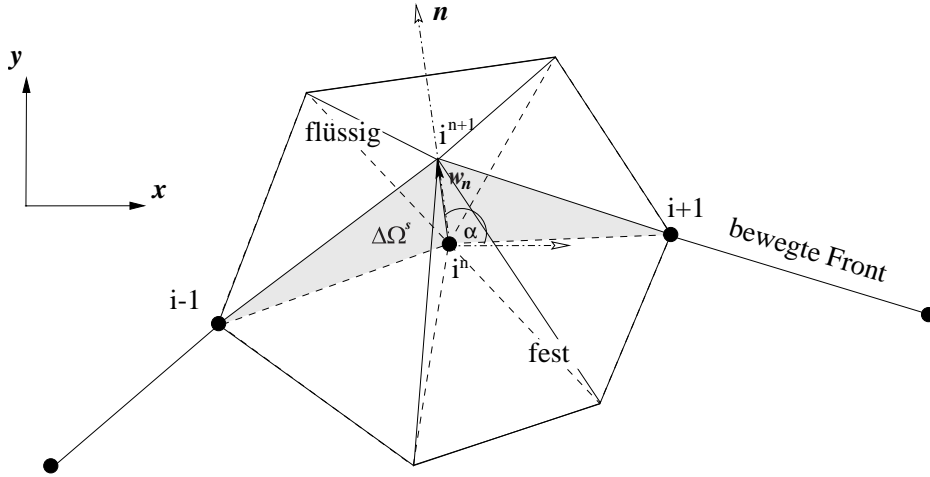


Abbildung 4.3: Bewegung eines Randknotens.

4.2.1.2 Gittergeschwindigkeit innenliegender Knoten

Die Formulierung der Erhaltungsgleichungen in bewegten Kontrollvolumen offeriert die Möglichkeit, auch Knoten, die keine Randknoten sind, mit einer Gittergeschwindigkeit \vec{w}_i zu belegen. Dies stellt einen zusätzlichen Freiheitsgrad des numerischen Verfahrens dar. Mit Ausnahme der Gittergeschwindigkeiten der Randknoten, die in Normalenrichtung durch die Stefanbedingung vorgegeben sind, können alle anderen Geschwindigkeitskomponenten prinzipiell willkürlich bestimmt werden. Wichtigstes Kriterium bei der Festlegung dieser Geschwindigkeit ist die Gitterqualität. Randknotenverschiebungen gehen unvermeidlich mit gewissen Verzerrungen und damit Qualitätsverlusten der Gitterzellen in Randnähe einher. Ein einfacher Laplacescher Entspannungsalgorithmus (Field 1988) minimiert im vorgestellten Verfahren die Gitterdeformation:

$$(w_x)_i = \frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{\Delta t} \quad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^{N_i} (x_j^{n+1} - x_i^{n+1}) = 0 \quad (4.7)$$

$$(w_y)_i = \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\Delta t} \quad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^{N_i} (y_j^{n+1} - y_i^{n+1}) = 0. \quad (4.8)$$

Die Summation ist dabei über alle N_i Knoten auszuführen, die mit dem Knoten i über eine Dreieckskante verbunden sind.

Die Gitterentspannung bewirkt anschaulich die Verteilung der Randknotenbewegung auf großräumige Gebiete um den freien Rand herum. Um die Integrität fester Ränder zu wahren, wird für Randknoten auf festen Rändern lediglich eine Bewegung in tangentialer Richtung zugelassen. Jedem Knoten des Dreiecksgitters wird auf diese Art eine bestimmte Knotengeschwindigkeit zugewiesen. Innerhalb jeden Dreieckselements werden diese Gittergeschwindigkeiten linear interpoliert, um die benötigten Geschwindigkeiten \vec{w} der bewegten Kontrollvolumenoberflächen zu erhalten.

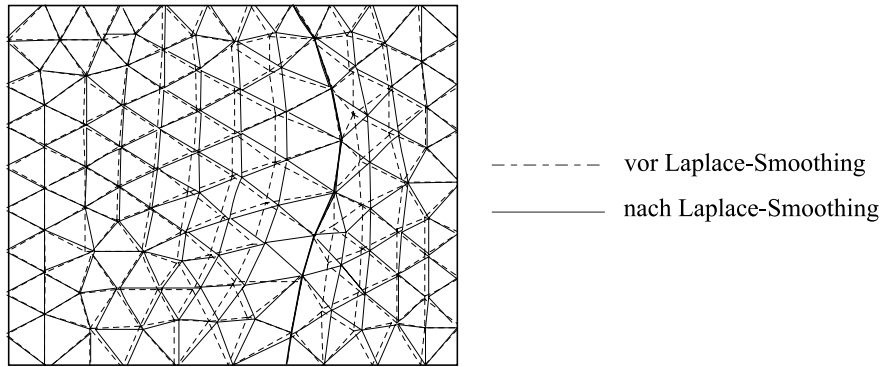


Abbildung 4.4: Verschiebung innenliegender Knoten durch Laplace-Smoothing.

Die räumliche Diskretisierung in bewegten Kontrollvolumen kann analog einer Diskretisierung in fixen Kontrollvolumen durchgeführt werden, sofern folgende Punkte beachtet werden:

- Alle konvektiven Flüsse sind mit der relativen Geschwindigkeit \vec{v}_{rel} zu bilden, die die Differenz aus Fluid- und Gittergeschwindigkeit darstellt.
- Während des Zeitschritts Δt werden alle örtlichen Koordinaten des Rechengitters von (x_i^n, y_i^n) nach (x_i^{n+1}, y_i^{n+1}) weiterbewegt. Eine volumenerhaltende Diskretisierung ist nur dann gewährleistet, wenn alle räumlichen Integrationen über die zeitlich gemittelten Koordinaten entsprechend Gl. (3.64) ausgeführt werden (siehe auch Kapitel 3.3.6).
- Das numerische Lösungsverfahren liefert am Ende eines Zeitschritts die unbekannt Zustandsgrößen zum neuem Zeitschritt $n + 1$. Diese Zustandsgrößen gelten entsprechend der gewählten Lagrangeschen Formulierung an den diskreten Orten, an denen sich die Gitterknoten zum neuen Zeitschritt $n + 1$ befinden. Eine Interpolation der Zustandsgrößen auf das neue, fortbewegte Gitter ist nicht erforderlich.

4.2.1.3 Einordnung in das Gesamtverfahren

Die geschilderten Schritte zur Bestimmung der Front- und Gittergeschwindigkeiten sind in den Ablauf des gesamten numerischen Verfahrens einzugliedern. Jeder Zeitschritt innerhalb einer transienten Rechnung erfordert prinzipiell das Weiterbewegen der Front, das Lösen der Erhaltungsgleichungen sowie Maßnahmen zur Adaption des numerischen Gitters (siehe Kapitel 5). Ein implizites Weiterbewegen der Front, welches das unbekannte Temperaturfeld zum Zeitpunkt $n + 1$ berücksichtigt, erfordert eine Iterationsschleife zwischen den beiden erstgenannten Verfahrensschritten. Um von einer Lösung zum Zeitschritt t zu einer Lösung zum Zeitschritt $t + \Delta t$ zu gelangen, sind im Einzelnen folgende Schritte erforderlich:

1. Berechne neue Grenzflächenposition aus der integralen Stefanbedingung auf der Basis des aktuellen Temperaturfeldes.
2. Berechne das Gittergeschwindigkeitsfeld mit Laplaceschem Entspannungsalgorithmus.
3. Löse die diskretisierten Erhaltungsgleichungen mit SIMPLER-Verfahren.
4. Aktualisiere das Temperaturfeld und gehe zurück zu 1.
5. Wiederhole 1. - 4., bis Konvergenz erreicht ist.
6. Führe lokale Gittermodifikationen auf der Basis einer vorgegebenen Gitterverteilungsfunktion durch.

Abb. 4.5 veranschaulicht diese Verfahrensschritte anhand eines vereinfachten Flußdiagramms und skizziert die Auswirkungen der einzelnen Schritte auf das numerische Gitter.

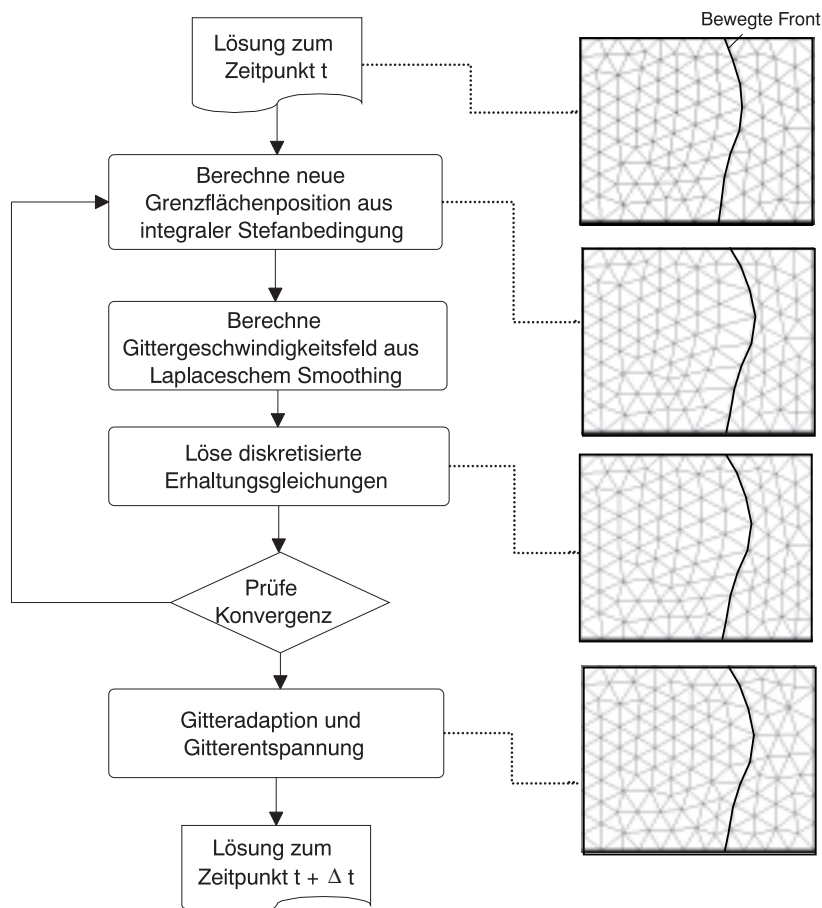


Abbildung 4.5: Verfahrensschritte für diskrete Phasenwechselprobleme und ihre Auswirkungen auf die Gittertopologie.

4.2.2 Kontinuierliche Phasenübergänge

Im Gegensatz zu diskreten Phasenübergängen ist bei kontinuierlichen Phasenübergängen keine scharfe Phasentrennlinie zwischen fester und flüssiger Phase vorhanden. Stattdessen existiert ein Gebiet endlicher Dicke zwischen reinem Feststoff und reiner Flüssigkeit, das dem Phasenwechsel unterworfen ist. Da die physikalischen Phasengrenzen zwischen festem und flüssigem Material auf mikroskopisch kleinen Skalen sichtbar sind und von der Numerik nicht aufgelöst werden, ist eine direkte Anwendung der Randbedingungen an diesen Phasengrenzen nicht möglich. Fundamental für alle Enthalpie-Modelle ist die Definition einer Gesamtenthalpie aus Summe von latenter und sensibler Wärme und die Formulierung einer Erhaltungsgleichung für diese Gesamtenthalpie anstelle einer gewöhnlichen Wärmetransportgleichung. Auf diese Weise gelingt es, die Randinformation in die Erhaltungsgleichung zu implementieren und eine explizite Auflösung des Randes zu jedem Zeitschritt zu umgehen. Mit Hilfe einer zusätzlichen Variablen, dem Flüssigkeitsanteil f_l (oder dem komplementären Feststoffanteil $f_s = 1 - f_l$), kann dann im Nachhinein der dem Phasenwechsel unterworfenen Bereich rekonstruiert werden. Dieser in der Literatur im allgemeinen als *mushy phase* bezeichnete Bereich zeichnet sich dadurch aus, daß sein Flüssigkeitsanteil immer Werte zwischen 0 und 1 annimmt, $0 < f_l < 1$.

4.2.2.1 Enthalpie-Porositätsmodell

Für kontinuierliche Phasenübergänge kommt im vorgestellten Bewegte-Gitter-Verfahren ein Enthalpie-Modell zum Einsatz, das auf dem Enthalpie-Porositätsmodell von Brent et al. (1988) basiert. Im Gegensatz zum Bewegte-Gitter-Verfahren für diskrete Phasenwechsel handelt es sich um ein einphasiges Modell, das keine explizite Trennung der Phasen vorsieht. Die auf Voller et al. (1987) zurückgehende Formulierung der Enthalpiegleichung beruht auf folgender Definition für die massenspezifische Gesamtenthalpie H :

$$H = \underbrace{h}_{H_{sens}} + \underbrace{\Delta H}_{H_{lat}} . \quad (4.9)$$

Sensible und latente Anteile dieser Gesamtenthalpie ergeben sich aus

$$h = c_p T \quad (4.10)$$

und

$$\Delta H = f_l L . \quad (4.11)$$

f_l ist darin der lokale Flüssigkeitsanteil, der anschaulich ausdrückt, welcher volumetrische Anteil einer numerischen Zelle der flüssigen Phase zuzuordnen ist. Wird in der allgemeinen Erhaltungsgleichung (3.4) der Skalar ϕ durch die Gesamtenthalpie

$$H = c_p T + f_l L \quad (4.12)$$

ersetzt, entsteht die Enthalpiegleichung (4.13):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho c_p T d\Omega + \int_{\Gamma} \rho c_p T \vec{v} \vec{n} d\Gamma - \int_{\Gamma} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} d\Gamma = \int_{\Omega} S d\Omega - \underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho f_l L d\Omega - \int_{\Gamma} \rho f_l L \vec{v} \vec{n} d\Gamma}_{S_{lat}} . \quad (4.13)$$

Dabei ist zu beachten, daß die Diffusionskonstante Ψ in Gl. (3.4) nur für den sensiblen Teil der Enthalpie zu λ/c_p wird (siehe auch Tab. 3.1). Der Flüssigkeitsanteil f_l kann diffusiv nicht transportiert werden, für den latenten Anteil der Enthalpie ist die Diffusionskonstante formal zu null zu setzen. Gl. (4.13) legt die Interpretation der letzten beiden Terme auf der rechten Seite als latente Energiesenke nahe. Die Diskretisierung der Enthalpiegleichung erfolgt analog zur Diskretisierung der Energiegleichung bei diskreten Phasenwechselproblemen, wobei für Kontrollvolumen, die vom Phasenwechsel betroffen sind, ein zusätzlicher Quellterm S_{lat} zu berücksichtigen ist.

Neben der Temperatur T enthält Gl. (4.13) als weitere Unbekannte die lokalen Flüssigkeitsanteile f_l . Zur Schließung des Gleichungssystems ist die Formulierung einer Funktion $f_l = f_l(T)$ erforderlich, die den Zusammenhang zwischen Temperatur und Flüssigkeitsanteil ausdrückt. Für isotherme Phasenwechselprobleme mit einer festen Phasenwechseltemperatur $T_m = T_{sol} = T_{liq}$ ist dieser Zusammenhang durch die Sprungfunktion

$$f_l(T) = \begin{cases} 0 & \text{für } T < T_m \\ 1 & \text{für } T > T_m \end{cases} \quad (4.14)$$

gegeben. Für Phasenwechselprobleme mit $T_{sol} < T_{liq}$ muß dieser Zusammenhang entweder experimentell bekannt sein oder eine aus der Metallurgie bekannte Beziehung zwischen Flüssigkeitsanteil und Temperatur kommt zum Einsatz. Beispielhaft sei hier das bekannte Hebelgesetz (Kurz und Fisher 1986) genannt, das für eine binäre Mischung die Gleichgewichtskonzentrationen in flüssiger und fester Phase in Beziehung zum Flüssigkeitsanteil setzt. Unter der Annahme einer konstanten Neigung der Liquiduslinie wird daraus dann die gesuchte Latentwärmeverbindung $f_l(T)$:

$$f_l(T) = \frac{c_0 - c_s}{c_l - c_s} = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}}. \quad (4.15)$$

Unabhängig von der gewählten $f_l(T)$ -Funktion muß eine iterative Prozedur sicherstellen, daß Gl. (4.13) und die gewählte Latentwärmegleichung innerhalb des numerischen Lösungsverfahrens gleichzeitig erfüllt werden. Voller et al. (1987) schlagen dazu eine Iterationsvorschrift vor, nach der die lokalen Flüssigkeitsanteile in den Gitterknoten $f_{l,i}$ nach jedem k -ten Iterationsschritt neu zu berechnen sind:

$$\begin{aligned} f_{l,i}^{k+1} &= f_l^k + \alpha_l \cdot \frac{a_i^h}{d_i^h} \left[\frac{h_i}{L} - \frac{c_p}{L} \cdot T(f_l^k) \right] \\ f_{l,i}^{k+1} &= 0, \quad \text{wenn } f_{l,i}^{k+1} < 0 \\ f_{l,i}^{k+1} &= 1, \quad \text{wenn } f_{l,i}^{k+1} > 1. \end{aligned} \quad (4.16)$$

$T(f_l^k)$ ist darin die Umkehrfunktion der gewählten Latentwärmegleichung und α_l ein Unterrelaxationsfaktor. Der Quotient $\frac{a_i^h}{d_i^h}$ berücksichtigt Koeffizienten aus der diskretisierten Enthalpiegleichung (siehe Gl. (3.47)) und sorgt dafür, daß auch bei Veränderungen der räumlichen und zeitlichen Auflösung schnelle Konvergenz erreicht wird (Brent et al. 1988).

Bei einer einphasigen Behandlung des Problem müssen im gesamten Rechenggebiet Kontinuitäts- und Impulsgleichungen gelöst werden. Mittels zusätzlicher, von der Geschwindigkeit

linear abhängiger Quellterme S_a in den Impulsgleichungen, wird dabei Fluidkonvektion im Feststoff unterdrückt:

$$\begin{aligned} S_a^u &= -C \frac{(1-f_l)^2}{\epsilon^3} \cdot u \\ S_a^v &= -C \frac{(1-f_l)^2}{\epsilon^3} \cdot v . \end{aligned} \quad (4.17)$$

C ist darin ein Konstante, die die morphologischen Eigenschaften der *mushy* Phase (alle Orte mit $0 < f_l < 1$) berücksichtigt, ϵ eine kleine Zahl, die Division durch Null verhindern soll. Gl. (4.17) geht auf die Carman-Kozeny-Gleichung für Strömungen in porösen Medien zurück (Voller und Prakash 1987), wonach der Druckgradient linear von der Geschwindigkeit abhängt (mit S_a als Proportionalitätsfaktor). Problematisch in diesem Modell erweist sich die Festlegung der Konstanten C , die die Eindringtiefe der Fluidgeschwindigkeit in die *mushy zone* steuert. Numerische Experimente zeigen, daß Form und Ausdehnung der *mushy zone* durchaus sensitiv auf die Wahl dieser Konstante reagieren. Eine Verknüpfung mit dem Viskositätsanstieg während der Erstarrung erscheint plausibel, weil beide Phänomene die gleiche Wirkung haben, nämlich das Ausschalten der Fluidgeschwindigkeit. Aus numerischer Sicht ist das Unterdrücken der Geschwindigkeit in erstarrten Zellen mittels eines dominanten Quellterms in den Impulsgleichungen nicht unproblematisch. Besonders in Verbindung mit dem beschriebenen CVFEM-Verfahren auf nicht-versetzten Gittern, das die Wirkung von Quelltermen explizit in den Interpolationsfunktionen in den finiten Elementen berücksichtigt, können große Quellterme leicht zu unphysikalischen Oszillationen und negativen Koeffizienten in den diskretisierten Gleichungen führen.

Aufgrund dieser Tatsache wird im vorgestellten Verfahren versucht, die Vorteile einer mehrphasigen Behandlung des Problems mit einem Enthalpie-Modell zu verknüpfen.

4.2.2.2 Enthalpie-Porositätsmodell auf bewegten Gittern

Die herkömmliche Anwendung des Enthalpie-Porositätsmodell sieht eine einphasige Behandlung des Problems vor. Phasengrenzen zwischen verschiedenen Phasen lassen sich dann aus den Werten des Flüssigkeitsanteils rekonstruieren. Die Isolinien $f_l = 0$ und $f_l = 1$ grenzen dabei die *mushy* Phase gegen feste und flüssige Phasen ab. Mit Hilfe der in Kapitel 5 beschriebenen Gitteralgorithmen besteht die Möglichkeit, diese Phasengrenzen - ähnlich der Vorgehensweise für diskrete Phasenwechselprobleme - kontinuierlich mit Kanten und Knoten des numerischen Gitters zu belegen, d. h. die Phasengrenzen während jeden Zeitschritts der Rechnung explizit aufzulösen. Prinzipiell wird damit eine Idee von Voller und Peng (1994) weiterentwickelt, der eine ähnliche Vorgehensweise auf strukturierten Gittern am Beispiel einfacher Stefanprobleme vorstellt.

Im Gegensatz zur Vorgehensweise für diskrete Phasengrenzen ist zu beachten, daß die im Gitter abgebildeten Phasengrenzen hier kontinuierliche Phasengrenzen sind. Sie markieren lediglich die Grenzen des Übergangsbereiches zwischen fest und flüssig, in dem ein kontinuierlicher Übergang aller Stoffgrößen von fest nach flüssig erfolgt. Eine explizite Anwendung

der Stefanbedingung setzt jedoch eine Diskontinuität, d. h. eine scharfe Trennlinie zwischen fester und flüssiger Phase voraus. Eine mehrphasige Behandlung des Problems wird möglich, wenn diese Phasengrenzen als *bewegte Koppelungsränder* behandelt werden. Diese Vorgehensweise wird im folgenden näher erörtert.

Die in Abb. 4.2 gezeigte Konfiguration sei Teil einer Phasengrenze, die eine *mushy* Phase von einer festen Phase trennt. Während des Zeitschritts Δt soll die Front zunächst an ihrem Ort verharren. Entsprechend wird in diesem Fall den Gitterknoten auch keine Gittergeschwindigkeit zugeordnet ($w_i = 0$). Die Phasengrenze stellt eine stetige Verbindung der Temperaturfelder und Wärmeströme der angrenzenden Phasen dar und es gelten die entsprechenden Koppelungsrandbedingungen:

$$T_i^s = T_i^m \quad (4.18)$$

$$\int_{\Gamma_{\rightarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s d\Gamma + \int_{\Gamma_{\leftarrow}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^m d\Gamma = 0. \quad (4.19)$$

Analog der Herleitung der diskretisierten Stefanbedingung lassen sich nun die Oberflächenintegrale längs der Front durch Oberflächenintegrale, die längs der Kontrollvolumenoberflächen verlaufen, ersetzen. Dabei ist der zusätzliche Quellterm infolge des Latentwärmeeinsatzes in der Enthalpiegleichung zu berücksichtigen (Gl. (4.13)). Gilt gleichzeitig die Haftbedingung ($u_i = 0, v_i = 0$), ergibt sich die integrale Bilanzgleichung für das skizzierte Randkontrollvolumen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho L f_l d\Omega + \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho c_p T d\Omega &= \int_{\Gamma_{\cap}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^m d\Gamma + \int_{\Omega^l} S^m d\Omega \\ &+ \int_{\Gamma_{\cup}} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)^s d\Gamma + \int_{\Omega^s} S^s d\Omega. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Gl. (4.20) unterscheidet sich von der Bilanzgleichung eines innenliegenden, unbewegten Kontrollvolumens ohne Konvektion durch die Aufspaltung des Kontrollvolumens entsprechend der Phasenzugehörigkeit. In anschaulicher Weise wird ein im Kontrollvolumen verbleibender Nettoenergiestrom (rechte Seite der Bilanzgleichung) in latente *und* sensible Speicherwärme umgesetzt. Bei isothermem Phasenwechsel entfällt der sensible Anteil (die Phasengrenze besitzt zu jedem Zeitpunkt die gleiche Temperatur, nämlich Schmelztemperatur T_m) und der gesamte Nettoenergiestrom wird zur Phasenumwandlung herangezogen.

Auf diese Weise werden Temperatur und Flüssigkeitsanteil aller Frontknoten bestimmt. Anschließend werden die Erhaltungsgleichungen der angrenzenden Phasen getrennt voneinander und nacheinander gelöst, wobei der Koppelungsrand jeweils als Dirichlet-Rand eingeht. Die Berechnung der festen Phase beschränkt sich auf das Lösen der Energiegleichung. Im Gegensatz zum Bewegte-Gitter-Modell erfolgt während des Zeitschritts Δt keine Gitterbewegung (eulersche Form der Erhaltungsgleichungen). Erst am Ende jeden Zeitschritts wird die neue Position der Isolinie $f_l = 0$ bestimmt und die Position der Front in geeigneter Weise mit der Position dieser Isolinie in Deckung gebracht. Abschließend werden eventuelle Gitterverzerrungen in Frontnähe, die durch Verschieben von Frontknoten entstanden sind, durch lokale Gitteradaptionen (siehe Kapitel 5.2) beseitigt.

Abb. 4.6 zeigt die innerhalb eines Zeitschritts erforderlichen Verfahrensschritte für kontinuierliche Phasenwechselprobleme bei Anwendung des Enthalpie-Porositätsmodells auf

bewegten Gittern. Auch hier ist eine innere Iterationsschleife erforderlich, wenn die Anwendung der Randbedingung am freien Rand implizit erfolgen soll.

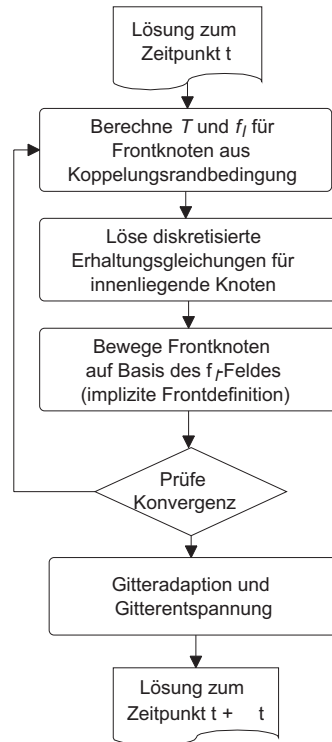


Abbildung 4.6: Verfahrensschritte für kontinuierliche Phasenwechselprobleme.

Die mehrphasige Behandlung bietet gegenüber der einphasigen Behandlung kontinuierlicher Phasenübergänge einige Vorteile, die nachfolgend zusammengefaßt werden:

- In festen Phasen kann auf ein Lösen von Kontinuitäts- und Impulsgleichungen verzichtet werden. Damit ist dort kein Unterbinden der Fluidgeschwindigkeit mittels eines Zusatzterms in den Impulsgleichungen notwendig, der zu den angesprochenen numerischen Komplikationen führen kann.
- Besonders für Probleme mit großem integralem Feststoffanteil wird dadurch der Rechenaufwand erheblich reduziert. Diesem Effizienzgewinn ist allerdings der zusätzliche Aufwand für die innere Iterationsschleife (siehe Abb. 4.6) und die Gitteradaptionen gegenüberzustellen.
- Die Anwendung eines einphasigen Modells auf ein diskretes Phasenwechselproblem verursacht unphysikalische Temperaturplateaus, wenn ein ortsfestes Kontrollvolumen das künstliche *mushy*-Gebiet durchläuft (siehe auch Kapitel 6.3.1 und Voller und Peng (1994)). Ein mehrphasiges Modell kann hier Abhilfe schaffen.

Kapitel 5

Gittererzeugung und Gitteradaptation

Innerhalb eines Bewegte-Gitter-Verfahrens kommt der Erzeugung, Verarbeitung und dynamischen Anpassung des numerischen Gitters eine bedeutende Rolle zu. Die Flexibilität des gesamten numerischen Verfahrens ist entscheidend von der Flexibilität der Gitteralgorithmen abhängig. Scheitert bei starker Randdeformation die dynamische Gitteranpassung, ist dies unmittelbar mit dem Scheitern des gesamten Verfahrens verknüpft. In diesem Sinne stellt die Implementierung der Gitteralgorithmen das zentrale Problem beim Einsatz numerischer Verfahren mit deformierbaren Gittern dar (Voller 1997).

Bei nicht-eulerscher Behandlung freier Randwertprobleme erfordert die Bewegung einer freien Grenzfläche eine ständige Anpassung des Rechengitters an die sich verändernde Rechengeometrie. Unabhängig davon ist eine dynamische Gitteranpassung auch bei gewöhnlichen Randwertproblemen von großem Nutzen. Effizienz und Genauigkeit einer numerischen Lösung sind nicht nur von der Anzahl der Zellen, sondern auch von deren Anordnung bzw. Verteilung im Rechengebiet abhängig. Um eine Näherungslösung mit überall gleichbleibender Genauigkeit zu erzielen, können stark unterschiedliche lokale Auflösungen erforderlich sein. Bereiche hoher örtlicher Gradienten bedürfen selbstverständlich einer erheblich höheren Auflösung als Bereiche mit weitgehend konstanten Werten der relevanten physikalischen Größen. Wird eine nur in einem kleinen Teilbereich des Rechengebietes erforderliche hohe räumliche Auflösung im gesamten Rechengebiet realisiert, stößt man schnell an die Grenze der vorhandenen Rechner- bzw. Speicherkapazität.

Bei der numerischen Behandlung von Aufschmelz- und Erstarrungsproblemen erweist sich der Einsatz einer dynamischen Gitteranpassung als sehr vorteilhaft. Im Verlauf einer transienten Rechnung unterliegt oftmals ein großer Bereich des Rechengebietes einem Phasenwechsel. Prinzipiell erfordern aber Bereiche fester Materie, in denen lediglich diffusiver Wärmetransport eine Rolle spielt, eine wesentlich geringere Auflösung als flüssige Bereiche, in denen u. U. sehr kleinskalige Strömungsstrukturen aufzulösen sind. Die Behandlung eines Aufschmelzproblems mit anfänglich vollständig erstarrtem Fluid würde bei Verwen-

derung eines festen, unbewegten Gitters im gesamten Rechengebiet eine maximale Auflösung erfordern und wäre in dieser Hinsicht sehr unwirtschaftlich.

Der Anwendung lokaler Gitteradaptionalgorithmen geht die automatisierte Erzeugung eines unstrukturierten Gitters voraus. Im folgenden wird zunächst das im vorgestellten Code eingesetzte Verfahren der Gittergenerierung erörtert. Anschließend werden die verschiedenen Bestandteile der lokalen Gitteradaption vorgestellt. Eine vom eigentlichen Strömungsproblem losgelöste Anwendung der kombinierten Gitterbearbeitungsalgorithmen soll abschließend deren Robustheit, Flexibilität und Güte unter Beweis stellen.

5.1 Gittererzeugung

Die numerische Lösung eines Anfang-Randwertproblems, das durch ein System partieller Differentialgleichungen sowie Anfangs- und Randbedingungen beschrieben wird, setzt eine zeitliche und räumliche Diskretisierung dieser Gleichungen voraus. Eine räumliche Diskretisierung mit Hilfe unstrukturierter Gitter erweist sich besonders dann als positiv, wenn Berechnungen in komplexen Geometrien durchzuführen sind. Als Elementtyp wird für zweidimensionale Berechnungen bevorzugt das Dreieck eingesetzt. Sowohl die automatisierte Gittererzeugung als auch lokale Gitteradaptionen (z. B. Verfeinerungen) sind mit Dreiecken einfacher zu realisieren als beispielsweise mit Viereckselementen.

Unter den zahlreichen bekannten Algorithmen zur automatischen Generierung unstrukturierter Dreiecksgitter sind neben den Frontgenerierungsmethoden vor allem die Delaunay-Triangulationsverfahren von Bedeutung (Mavriplis 1996). Frontgenerierungsmethoden erzeugen - von einer anfänglichen Front ausgehend - durch Hinzufügen neuer Punkte zur Front eine Triangulation, die kontinuierlich in den Rechenraum hineinwächst und letztendlich das gesamte Rechengebiet erfaßt (Peraire, Morgan und Peiro 1990). Delaunay-Triangulationsmethoden hingegen basieren in ihrer ursprünglichen Form auf der Vorgabe eines Satzes von Dreiecksknoten und beschränken sich darauf, diese so zu verbinden, daß die entstehende Vernetzung bestimmte geometrische Kriterien erfüllt. Als bekanntestes Kriterium ist hier das sog. *Empty Circumcircle Criterium* (im Folgenden mit ECC abgekürzt) zu nennen: Im Umkreis eines jeden Dreiecks liegt kein weiterer Knoten (George 1996). Dreiecke mit besonders spitzen und flachen Winkeln werden damit so weit wie möglich vermieden. Unter allen möglichen Triangulationsmethoden eines zufällig erzeugten Satzes von Punkten ist die Delaunay-Triangulation diejenige, die die Summe der kleinsten Winkel der Dreiecke minimiert (Field 1988). Im Zusammenhang mit FEM-Berechnungen, deren Genauigkeit bei Verwendung stark verzerrter Elemente drastisch abnimmt (Babuska und Aziz 1976), werden Delaunay-Triangulationen von vielen Autoren deshalb als die beste Triangulationsmethode bewertet (Ho-Le 1988).

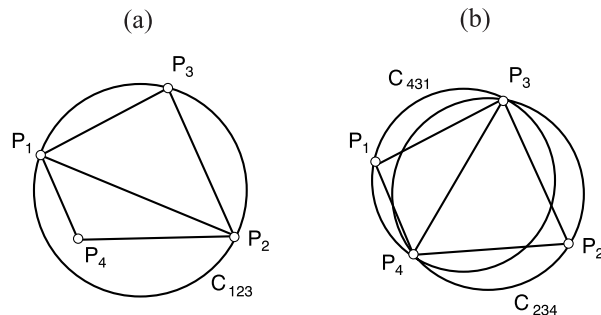


Abbildung 5.1: *Empty-Circumcircle-Criterion*: (a) nicht erfüllt, (b) erfüllt (George 1996).

Ausgehend von einem vorhandenen Satz von Dreiecksknoten geht der eigentlichen Delaunay-Triangulation eine Dirichlet-Tessellation (Dirichlet 1850) voraus, welche das Voronoi-Diagramm liefert. Das Voronoi-Diagramm besteht (bei N vorgegebenen Punkten) aus N konvexen Polygonen (=Voronoi-Regionen), die das gesamte Gebiet einfach überdecken und anschaulich diejenigen Bereiche abgrenzen, die näher zu ihrem (innenliegenden) Knoten sind als zu irgendeinem anderen Knoten (Weatherill 1990):

$$\{V_i\} = \{P : \|P - P_i\| < \|P - P_j\| \quad \forall \quad j \neq i.\} \quad (5.1)$$

Durch Verbinden aller Punkte, die ein gemeinsames Polygon-Segment besitzen, entsteht daraus die Delaunay-Triangulation.

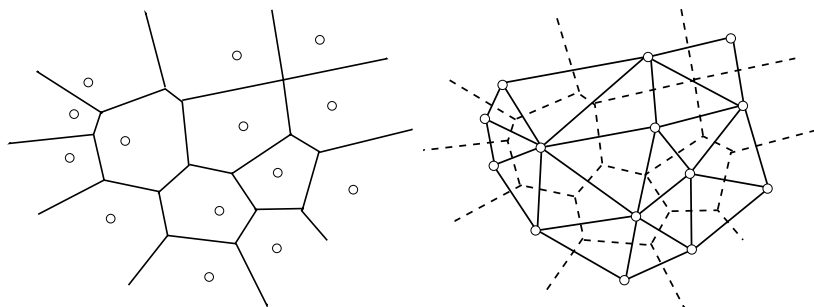


Abbildung 5.2: Voronoi-Diagramm und Delaunay-Triangulation (George 1996) .

Im Rahmen der Automatisierung von Gittergenerierungsalgorithmen besteht das Bedürfnis, das eigentliche Delaunay-Triangulationsverfahren mit Algorithmen zu koppeln, die gleichzeitig die Knoten der Triangulation im Inneren des Rechengebietes erzeugen. Sehr häufig wird hierzu der Bowyer-Watson-Algorithmus verwendet (Bowyer 1981, Watson 1981), der neue Punkte in eine bestehende Delaunay-Triangulation derart einfügt, daß auch die resultierende Triangulation die charakteristischen geometrischen Eigenschaften einer Delaunay-Triangulation erfüllt. Ausgehend von einer Diskretisierung, die anfänglich nur aus Verbindungen der Randpunkte besteht, werden solange neue Punkte hinzugefügt, bis die gewünschte Elementgröße erreicht ist. Dieses Verfahren wird vielfach nicht nur zur automatischen

Erzeugung von Triangulationen, sondern auch zur lokalen Modifikation bestehender Triangulationen eingesetzt. Mit Hilfe des Bowyer-Watson-Algorithmus können prinzipiell lokale Verfeinerungen durchgeführt werden, ohne die geometrische Qualität der bestehenden Triangulation (siehe Kapitel 5.2.1) entscheidend zu verschlechtern (siehe Kapitel 5.2.3).

In dem in dieser Arbeit vorgestellten numerischen Verfahren wird das Gittergenerierungsprogramm GEOMPACK (Joe 1991) eingesetzt, das auf Basis einer vom Anwender vorzugebenden Randkurve (definiert über Koordinaten und deren Verbindungen) eine Delaunay-Triangulation durchführt. Zur Erzeugung der Knotenpunkte innerhalb des Rechengebietes wird dieses in zwei Stufen in kleinere, konvexe Polygone unterteilt: In der ersten Stufe werden konvexe Subregionen mit dem vorrangigen Ziel der Vermeidung kleiner Winkel generiert. Im zweiten Schritt wird eine weitere Unterteilung dieser Subregionen derart vorgenommen, daß innerhalb jeder so entstehenden Sub-Subregion eine einheitliche Elementgröße realisiert werden kann. Die Längenskalen einer solchen Sub-Subregion werden dabei von den Längenskalen der die Region begrenzenden Randkurve bestimmt. Anschaulich bedeutet dies, daß die örtliche Größenverteilung von Dreieckselementen indirekt über die Vorgabe von Knotenhäufigkeiten auf äußeren oder inneren Polygonrändern beeinflußt werden kann. GEOMPACK sieht zu diesem Zwecke auch die Möglichkeit der Definition von zusätzlichen Polygonzügen (= *Interfaces*) im Gebietsinneren vor.

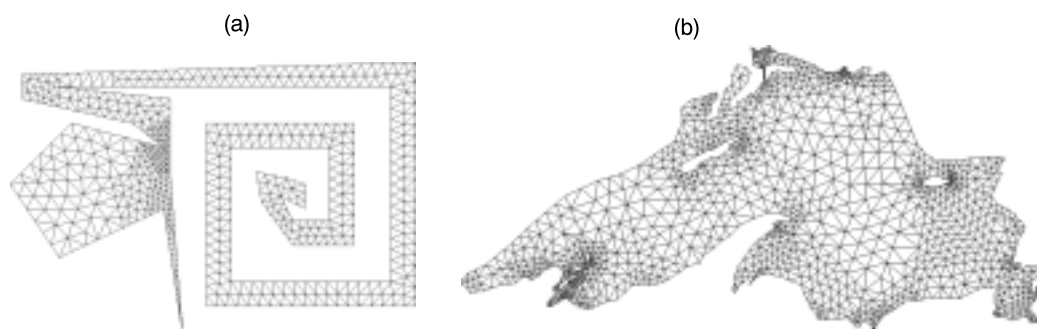


Abbildung 5.3: Beispiele der Gittererzeugung mit GEOMPACK: (a) einfache Polygonstruktur, (b) "Lake Superior" (Joe 1991).

5.2 Lokale Gitteradaption

In einem Bewegte-Gitter-Verfahren (siehe Kapitel 4.2) ist ein freier Rand zu jedem Zeitpunkt der Rechnung mit Gitterknoten belegt. Die Bewegung des Randes erfordert eine entsprechende Adaption des Rechengitters, wenn die Bewegung des Randes nicht zu unerwünschten Verzerrungen und Größenänderungen der in Randnähe angesiedelten Gitterzellen führen soll. Prinzipiell besteht natürlich die Möglichkeit, der Randbewegung mit einer vollständigen Neugenerierung des Rechengitters nach jedem Zeitschritt zu begegnen (Peraire, Vahdati, Morgan und Zienkiewicz 1987). Dies stellt zwar eine sehr flexible und einfache Art der Adaption dar, der Anwendungsbereich ist aber aufgrund des hohen Rechen-

aufwands auf Probleme beschränkt, die nur gelegentlich eine Gitterneugenerierung erfordern (Mavriplis 1996).

Unstrukturierte Rechengitter bieten prinzipiell die Möglichkeit, innerhalb eines lokal eng begrenzten Gebietes in die Gitterstruktur einzugreifen. Der räumliche Bereich, in dem eine Adaption des Gitters notwendig ist, kann damit unabhängig vom restlichen Gitter bestimmten Modifikationen unterzogen werden. Unter Modifikationen sind in diesem Zusammenhang lokal begrenzte Eingriffe in die Gitterstruktur zu verstehen, die Größe, Form und/oder Verbindungen der Gitterelemente verändern. Konkret werden hierzu Algorithmen zur Verfeinerung, zur Vergrößerung und zur Relaxation einer bestehenden Triangulation eingesetzt. Solche lokalen Gittermodifikationen werden immer dann erforderlich, wenn Gitterelemente bestimmten Mindestanforderungen bezüglich geometrischer Qualität und/oder Elementgröße nicht genügen. Dies verlangt gleichzeitig die Festlegung einer bestimmten Sollqualität und Sollgrößenverteilung, um innerhalb eines Automatismus jeweils die zu modifizierenden Gitterelemente zu selektieren.

5.2.1 Geometrische Gitterqualität

Die Genauigkeit eines numerischen Lösungsverfahrens auf Finite-Elemente- oder Finite-Volumen-Basis sinkt bei Verwendung stark verzerrter Gitterelemente. Dreiecke mit sehr kleinen oder sehr großen Winkeln vergrößern im allgemeinen die führenden Fehlerterme und damit den Abbruchfehler des numerischen Diskretisierungsschemas (Günther 1997b). Geschwindigkeitskomponenten, die die Kanten der Gitterelemente in spitzen Winkeln schneiden, führen zu zusätzlicher numerischer Diffusion (*cross wind diffusion*). Bei Verwendung des in Kapitel 3.3 erörterten CVFEM-Verfahrens treten bei degenerierten Dreiecken zudem vermehrt negative Koeffizienten in den diskreten Gleichungen auf, die die Konditionierung der Koeffizientenmatrix verschlechtern und im schlimmsten Fall zur Divergenz des iterativen Lösungsverfahrens führen können (Larreteguy 1995). Unter diesen Gesichtspunkten liegt es nahe, eine Triangulation, die ausschließlich gleichseitige Dreiecke (alle Winkel 60°) verwendet, als qualitativ beste Diskretisierung zu bewerten. Eine reale Diskretisierung in komplexen, bewegten Geometrien wird selbstverständlich diesen Idealfall nicht erreichen. Die Festlegung minimal zulässiger und maximal zulässiger Winkel im Dreieck liefert hier ein Kriterium zur Selektierung qualitativ minderwertiger Dreiecke. Für die praktische Anwendung haben sich im vorgestellten Verfahren Extremalwerte in der Größenordnung von 30° für das untere und 100° für das obere Limit bewährt. Selbst bei starken Deformationen der Systemgrenzen gelingt es mit der in Kapitel 5.2.6 vorgestellten Kombination von Gittermodifikationen in der Regel alle Winkel außerhalb dieses Winkelsollgrößenintervalls zu beseitigen. Als alternatives oder überlagertes Kriterium bietet sich ein normalisiertes Formverhältnis des Dreiecks an, das das Verhältnis von Innkreis- zu Umkreisdurchmesser ausdrückt (George 1996).

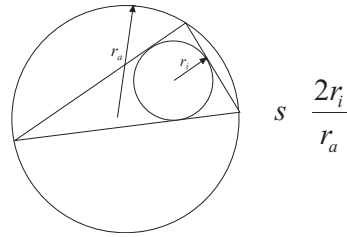


Abbildung 5.4: Normalisiertes Formverhältnis eines Dreiecks.

Ein gleichseitiges Dreieck erreicht den Maximalwert $s = 1,0$. Als minimal zulässiges Formverhältnis sollten Werte um 0,4 verwendet werden, um nicht aufgrund von überzogenen Qualitätsansprüchen die Konvergenz des gesamten iterativen Gitteradaptionprozesses zu gefährden (Jayaraman, Udaykumar und Shyy 1997).

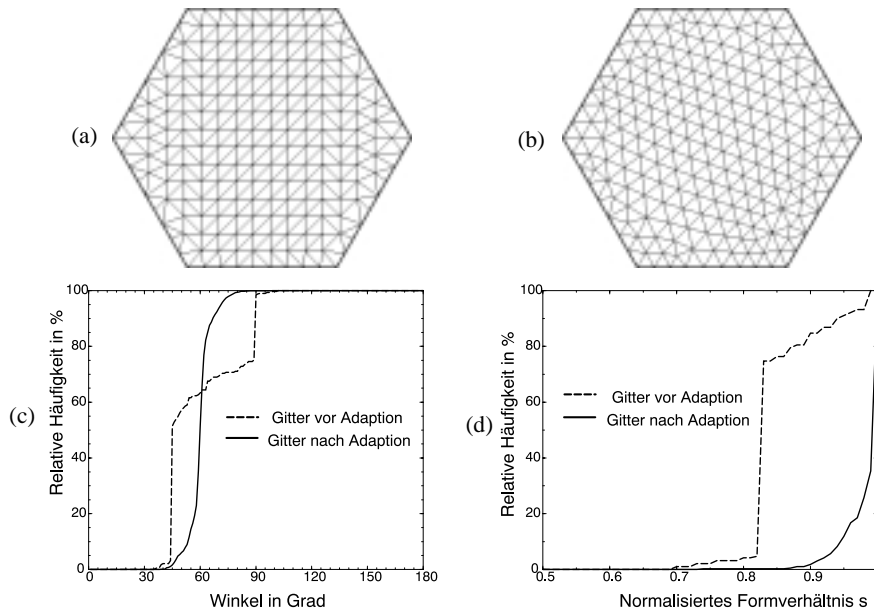


Abbildung 5.5: Auswirkungen des Gitteradaptionsverfahrens auf die integrale Gitterqualität:
 (a) Gitter vor Adaption, (b) Gitter nach Adaption, (c) Häufigkeitsverteilung der Winkel, (d) Häufigkeitsverteilung der Formverhältnisse.

Während die oben genannten Kriterien zur Beurteilung der lokalen Gitterqualität auf Elementebene herangezogen werden, kann mit Hilfe von Häufigkeitsverteilungen von Winkeln und Formverhältnissen die integrale Gitterqualität einer gesamten Triangulation beurteilt werden. Abb. 5.5 zeigt exemplarisch eine Triangulation in einer sechseckigen Kavität vor und nach der sequentiellen Gitteradaption sowie deren Auswirkung auf die genannten integralen Qualitätskennzahlen.

5.2.2 Verteilung der Gitterpunkte im Rechengebiet

Die Motivation für lokale Eingriffe in die Gitterstruktur liefert neben rein geometrisch qualitativen Gesichtspunkten der Wunsch, eine bestimmte, von Ort und Zeit abhängige Verteilung der Gitterknoten und damit der lokalen Maschenweiten zu realisieren. Basierend auf einer Verteilungsfunktion, die die gewünschte lokale Elementgröße angibt, werden mit einem einfachen Soll-Ist-Vergleich die zu modifizierenden Dreiecke selektiert. Zu große Dreiecke werden einer Verfeinerung, zu kleine Dreiecke einer Vergrößerung unterzogen. Die Festlegung der Sollgrößenverteilung stellt einen weiteren Freiheitsgrad des numerischen Verfahrens dar. Innerhalb einer transienten Rechnung werden hier Informationen aus der bekannten Lösung des vorherigen Zeitschritts möglichst sinnvoll verarbeitet. Die Sollgrößenverteilungsfunktion zum Zeitpunkt $n + 1$ ist also im allgemeinen Fall eine Funktion einer oder mehrerer abhängiger Variablen zum Zeitpunkt n :

$$\Omega_e^{n+1}(x, y) = \Omega_e(u^n, v^n, p^n, T^n, f_t^n, \dots). \quad (5.2)$$

Im numerischen Code wird dem Bediener des Programms die Festlegung dieser Funktion überlassen, weil je nach betrachtetem Anwendungsfall sehr unterschiedliche Abhängigkeiten sinnvoll sein können.¹ Abb. 5.6 zeigt das Beispiel eines Aufschmelzproblems eines Flüssigmetalls in einer rechteckigen Kavität und die für dieses Problem gewählte Sollgrößenverteilung. Innerhalb der im Laufe der transienten Rechnung ständig wachsenden flüssigen Phase wird eine konstant kleine Maschenweite realisiert, um die Auflösung der hydrodynamischen Grenzschichten zu gewährleisten. In der festen Phase hingegen sind Elemente mit zwei Zehnerpotenzen größeren Maschenweiten ausreichend. Eine eindimensionale Arcus-Tangens-Funktion beschreibt hier die lokale Maschenweite in Abhängigkeit der Entfernung von der Phasengrenze.

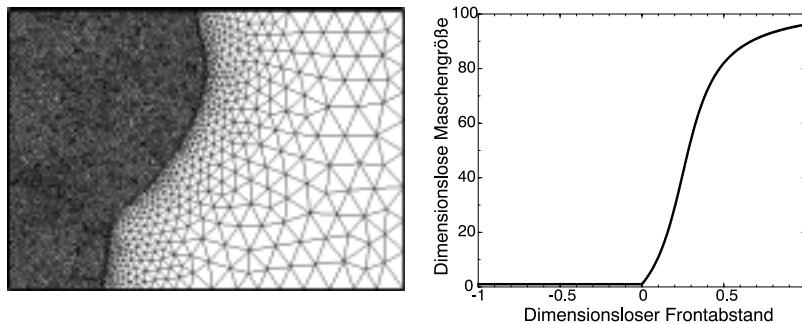


Abbildung 5.6: Beispiel für die Realisierung einer dynamischen Gitterverteilungsfunktion: Momentaufnahme des Gitters und Größenverteilung in fester und flüssiger Phase.

Sind die einen bestimmten Dreiecksknoten umgebenden Dreiecke in ihrer Größe stark unterschiedlich, tritt abgesehen vom unvermeidlichen Verlust an geometrischer Qualität ein

1. Wird die Möglichkeit der Eingabe einer Sollgrößenverteilungsfunktion vom Bediener nicht wahrgenommen, wird der einfachste Fall eines Gitters mit konstanten Maschenweiten ($\Omega_e(x, y) = C$) realisiert.

Genauigkeitsverlust der diskreten Näherung auf (Ferziger und Peric 1996). Demzufolge sind innerhalb jeder Phase stetig differenzierbare Gitterverteilungsfunktionen mit mäßigen Gradienten (insbesondere in flüssigen Phasen) zu bevorzugen. Prinzipiell besteht auch die Möglichkeit, einen Fehlerschätzer (z. B. Padra und Larreteguy 1995) über die Gitterverteilungsfunktion an das numerische Verfahren anzukoppeln. Der Fehlerschätzer liefert dann auf Basis der aktuellen Zeitschrittlösung eine räumliche Verteilungsfunktion des numerischen Fehlers, welche wiederum die Basis für die Verteilungsfunktion der Gitterknoten liefert. Im Idealfall gelingt es dann im gesamten Berechnungsgebiet, unabhängig von den dort herrschenden physikalischen Gegebenheiten, eine Näherungslösung mit gleichbleibend geringem numerischen Fehler zu erzielen.

Die Frage nach der idealen Gittergrößenverteilung für ein konkretes Problem ist nur sehr schwierig zu beantworten. In jedem Fall sollte die Verteilungsfunktion so gewählt werden, daß nur wenige Durchläufe der Adaptionsalgorithmen in der Lage sind, den gewünschten Sollzustand einzustellen. Ansonsten besteht die Gefahr, daß der in einer dynamischen Verteilung der Gitterzellen im Rechengbiet begründete prinzipielle Gewinn an Effizienz durch zusätzlichen numerischen Gitterbearbeitungsaufwand verloren geht. Obwohl die Verteilung der Gitterknoten einen großen Einfluß auf die Effektivität des Gesamtverfahrens hat, sollte eine gute numerische Lösung im Sinne einer gitterunabhängigen Lösung von dieser Verteilung unabhängig sein. In diesem Zusammenhang offenbart sich ein weiterer Vorteil der dynamischen Gitteranpassung: Die Überprüfung der Gitterunabhängigkeit einer stationären Lösung kann sehr einfach über eine Veränderung der lokalen Maschengrößen kontrolliert werden. Beispielsweise kann so überprüft werden, ob sich das stationäre Endergebnis einer Berechnung durch Änderung der Gitterverteilungsfunktion qualitativ ändert.

5.2.3 Gitterverfeinerung

Unter einer Gitterverfeinerung ist in diesem Zusammenhang ein (automatisierter) Algorithmus zu verstehen, der in eine bestehende Triangulation einen zusätzlichen Knotenpunkt einfügt, so daß eine neue Triangulation mit einer erhöhten Anzahl an Elementen entsteht. Diese Art einer Verfeinerung, die die lokale Elementgröße verringert, ist in der Literatur auch als *h-refinement* bekannt. Im Gegensatz dazu wird beim *p-refinement* die Ordnung der Näherungsfunktion im finiten Element erhöht. Das *p-refinement* bietet einige beachtliche Vorteile (schnelle Konvergenz, hohe Effizienz), hat aber den Nachteil, daß zum Teil tiefgreifende Eingriffe in die Programmstruktur und damit erheblicher Programmieraufwand zur Implementierung erforderlich ist (Lewis et al. 1991). Das in dieser Arbeit verwendete *h-refinement* ist diesbezüglich einfacher und kann auch problemlos an einen bereits existierenden Code angekoppelt werden.

Ist die bestehende Triangulation eine Delaunay-Triangulation, bietet sich zum Einfügen zusätzlicher Gitterknoten der Bowyer-Watson-Algorithmus an (Bowyer 1981, Watson 1981). Entscheidender Vorteil hierbei ist, daß die nach der lokalen Modifikation entstandene Triangulation wiederum eine Delaunay-Triangulation ist. Abb. 5.7 zeigt die erforderlichen Schritte des Algorithmus. Nach Selektierung des zu verfeinernden Dreiecks ist zunächst ein geeigneter

Einfügpunkt für den neuen Knoten zu wählen. In der Regel ist dies der Umkreismittelpunkt des zu verfeinernden Dreiecks. Im folgenden Schritt sind alle Dreiecke zu markieren, die in Folge des Einfügens des neuen Gitterpunktes nun das ECC-Kriterium verletzen (neuer Punkt liegt innerhalb ihres Umkreises). Die anschließende Beseitigung von Kanten, die beidseitig an markierte Dreiecke grenzen, erzeugt ein konvexes Polygon, in dessen Mitte sich der neue Punkt befindet. Die Verbindung dieses Punktes mit allen Eckpunkten dieses Polygons erzeugt schließlich eine Triangulation, in der alle Elemente das ECC-Kriterium erfüllen.

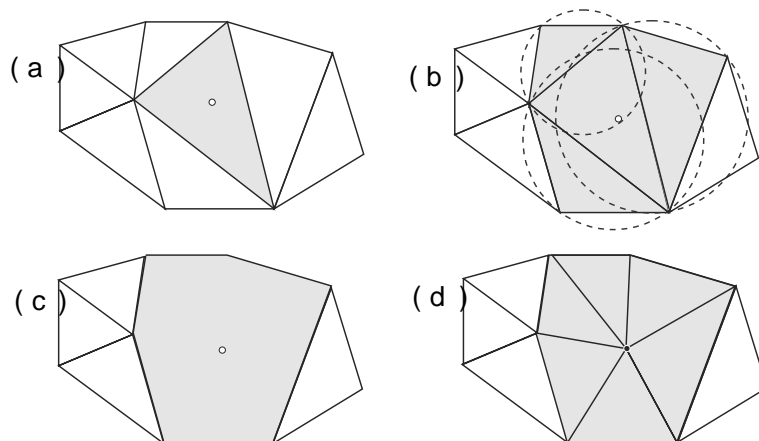


Abbildung 5.7: Bowyer-Watson-Algorithmus: (a) Selektiertes Dreieck mit Einfügpunkt, (b) Markierung "fehlerhafter" Dreiecke, (c) Beseitigung "fehlerhafter" Dreiecke, (d) Retriangulation.

Sind Gitterelemente, die einen festen oder bewegten Rand des Rechengebietes berühren, von einer Verfeinerung betroffen, sind bestimmte Modifikationen dieses Algorithmus erforderlich. Besitzt ein Dreieck eine Randkante und der der Randkante gegenüberliegende Winkel überschreitet 90° , wird ein einfacher *bisection*-Algorithmus (Mitchell 1989) angewandt. Dazu wird ein zusätzlicher Punkt auf dem Rand eingeführt, so daß das zu verfeinernde Dreieck in zwei flächengleiche Dreiecke unterteilt wird.

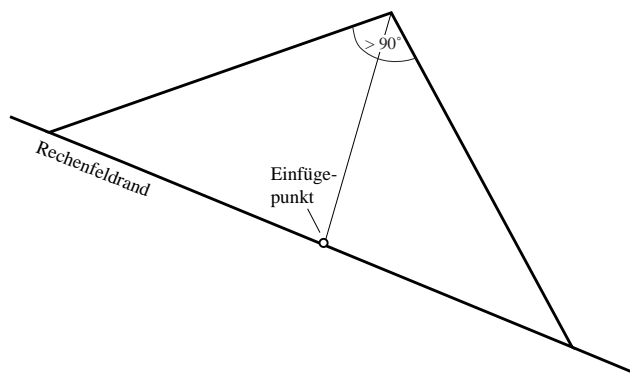


Abbildung 5.8: Bisection-Verfeinerung "flacher" Randdreiecke.

5.2.4 Gittervergrößerung

Eine Gittervergrößerung verringert die Anzahl der Elemente in einem lokal eng begrenzten Gitterbereich. Abb. 5.9 zeigt die dazu erforderlichen Schritte (Rexroth 1996). Ähnlich dem Bowyer-Watson-Algorithmus wird ein neuer Punkt im Schwerpunkt des zu vergrößernden Dreiecks eingefügt. Anschließend werden sämtliche Knoten des zu vergrößernden Dreiecks und die von ihnen ausgehenden Kanten gelöscht. Das entstehende konvexe Polygon wird dann wiederum durch Verbinden des neuen Knotens mit allen Eckpunkten des Polygons retrianguliert.

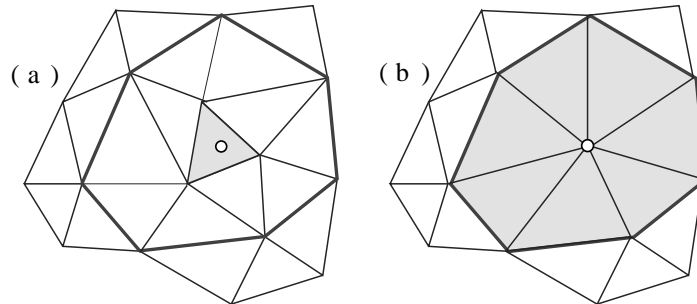


Abbildung 5.9: Vergrößerung innenliegender Dreiecke: (a) Selektiertes Dreieck mit Einfügepunkt, (b) Retriangulation nach Entfernung aller umliegenden Kanten.

Auch hier sind Modifikationen des Algorithmus für Dreiecke erforderlich, die mit ein, zwei oder drei Knoten Ränder des Rechengebietes berühren. Zur Entfernung von Randknoten wird ein inverser Bisection-Algorithmus angewandt, der zwei kleinere Dreiecke in ein größeres überführt.

5.2.5 Gitterrelaxation

Bestimmte Verzerrungen in der Gitterstruktur infolge der oben beschriebenen Verfeinerungs- und Vergrößerungsmaßnahmen sind unvermeidbar. Als sehr effektiv erweisen sich hier einfache Entspannungsalgorithmen, die eine gewisse Vergleichmäßigung der Gitterstruktur bewirken. Hier ist vor allem der Laplacesche Entspannungsalgorithmus (Field 1988) zu nennen, der im Rahmen eines iterativen Prozesses sukzessiv jeden Knoten in den Mittelpunkt der mit ihm unmittelbar verbundenen Nachbarknoten rückt. Mit Hilfe einer Gewichtsfunktion W kann zusätzlich eine gewisse Häufung von Gitterknoten in bestimmten Raumrichtungen erzielt werden.

$$\sum_{i=1}^N W_i(x_i - x) = 0 \qquad \sum_{i=1}^N W_i(y_i - y) = 0. \qquad (5.3)$$

Als problematisch erweist sich die Verschiebung von Randknoten. Da der Systemrand über einen Polygonzug festgelegt ist, verändert jede Randknotenverschiebung den Flächeninhalt des Gesamtsystems, sofern der eingeschlossene Winkel nicht 180° beträgt. Zur Minimierung

solcher Volumendivergenzen sind Randknotenverschiebungen nur in tangentialer Richtung des Randes und nur für Randknoten mit eingeschlossenen Winkeln von nahezu 180° zulässig.

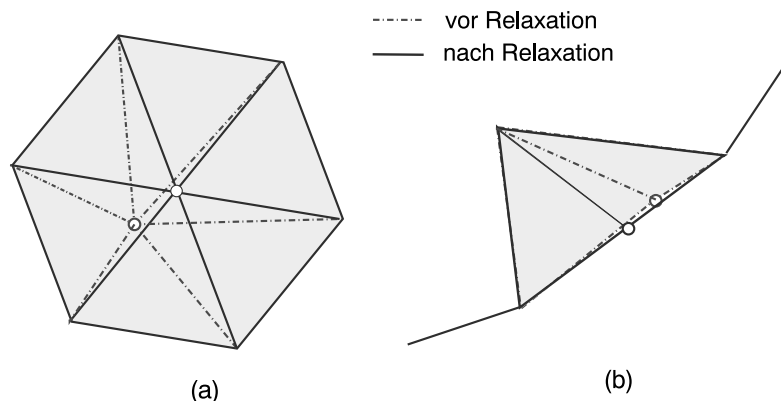


Abbildung 5.10: Laplacesche Gitterentspannung: (a) innenliegender Knoten, (b) Randknoten.

Dieser Algorithmus hat sich als sehr wirksam, schnell und robust erwiesen. Ein Nachteil bei der Verwendung innerhalb Delaunay-Triangulationen ist jedoch, daß die berechneten Knotenverschiebungen zu Verletzungen des ECC-Kriteriums führen können. Durch geschickte Kombination mit einem Kantendreh-Algorithmus (engl. *edge swapping*) lassen sich diese Verletzungen jedoch vermeiden. Dazu wird im vorgestellten Verfahren ein modifizierter Laplace-Algorithmus eingesetzt. Nach jeder Knotenverschiebung entsprechend Gleichung 5.3 wird geprüft, ob der Punkt durch die Verschiebung in einen der Umkreise der ihn umgebenden Dreiecke gewandert ist. Sollte dies der Fall sein, wird die dem Punkt zugewandte Kante des entsprechenden Dreiecks gedreht. Nach wenigen Iterationen wird auf diese Art und Weise eine geglättete Gitterstruktur erreicht, die keinerlei ECC-Verletzungen beinhaltet.

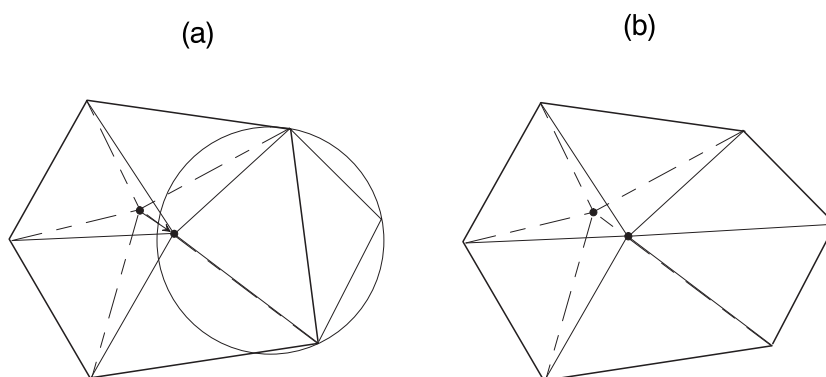


Abbildung 5.11: Laplacesche Gitterentspannung mit optionalem *edge swapping*: (a) ECC-Verletzung infolge Laplace-Entspannung, (b) *edge swapping* beseitigt ECC-Verletzung.

Abb. 5.12 veranschaulicht die Wirkung des modifizierten Laplaceschen Glättungsalgorithmus anhand eines einfachen Beispiels. In ausreichender Entfernung vom Rechengebietrand wird eine regelmäßige Struktur gleichseitiger Dreiecke erreicht. Lediglich in den Randbereichen sind Abweichungen von der idealen Dreiecksform unvermeidbar.

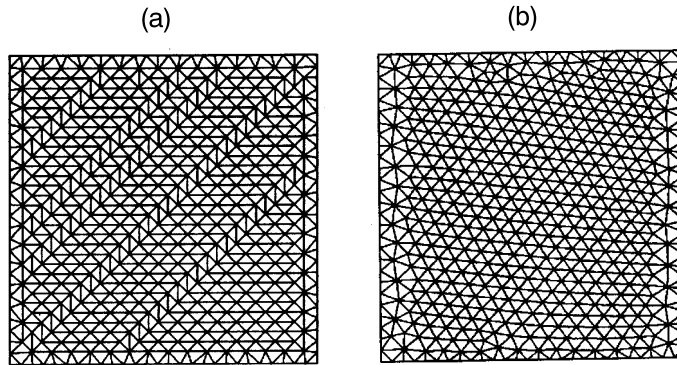


Abbildung 5.12: Gitterrelaxation durch modifiziertes Laplace-Smoothing: (a) Ausgangsgitter, (b) geglättetes Gitter.

Im vorgestellten numerischen Code wird dieser modifizierte Laplacesche Filter mit einem weiteren Entspannungsalgorithmus gekoppelt. Frey und Field (1991) schlagen ein Relaxationsverfahren vor, welches Gitterunregelmäßigkeiten, die durch das Zusammentreffen zu vieler oder zu weniger Kanten in einem Gitterknoten verursacht werden, durch gezieltes Drehen von Dreieckskanten zu beseitigen versucht.

Definiert man die Anzahl der einen Knotenpunkt i umgebenden Dreiecke als Grad d_i des Knotens und legt für jeden Knoten gleichzeitig einen idealen Grad D_i fest (für innenliegende Knoten ist $D_i = 6$), so liefert die Summe der quadratischen Abweichungen vom idealen Grad ein Maß für die Regelmäßigkeit des Gitters:

$$R = \sum_{i=1}^N (d_i - D_i)^2 . \quad (5.4)$$

Abb. 5.13 verdeutlicht, daß die Grade von insgesamt vier Knoten vom Drehen einer Kante betroffen sind. Das Drehen einer Kante ist nur dann durchzuführen, wenn die Summe aller quadratischen Abweichungen vom idealen Grad R durch das Drehen der Kante reduziert wird. Abb. 5.13 zeigt eine Situation, in der das *edge swapping* eine Verringerung von R um 4 bewirkt.

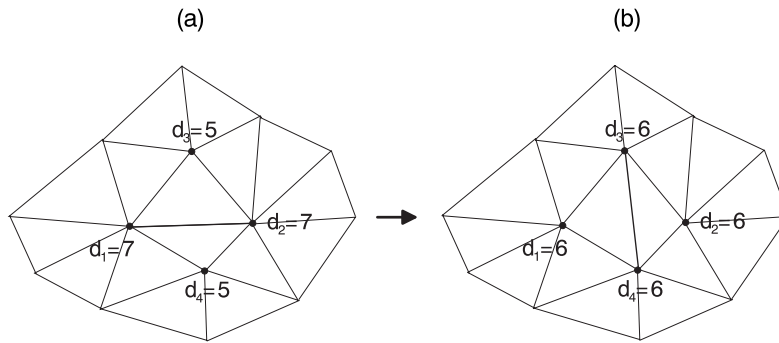


Abbildung 5.13: Gitterrelaxation durch Relaxations-*Swapping*: (a) Ursprungskonfiguration, (b) Konfiguration nach *edge swapping*.

5.2.6 Kombination der Adaptionalgorithmen

Abb. 5.14 veranschaulicht abschließend alle erforderlichen Schritte im Rahmen der Gitteradaption, die prinzipiell nach jedem Zeitschritt des numerischen Verfahrens durchlaufen werden. Werden innerhalb eines Zeitschritts eine Vielzahl von Elementen selektiert, die nicht den Anforderungen des Soll-Ist-Vergleiches standhalten, sind die Schritte des adaptiven Verfahrens in mehreren Durchgängen mit zwischenzeitlicher Neuberechnung der Soll- und Istgrößen durchzuführen. Dies ist erforderlich, da beispielsweise eine Verfeinerung eines bestimmten Dreiecks auch die Gittergrößen der umliegenden Elemente verändert.

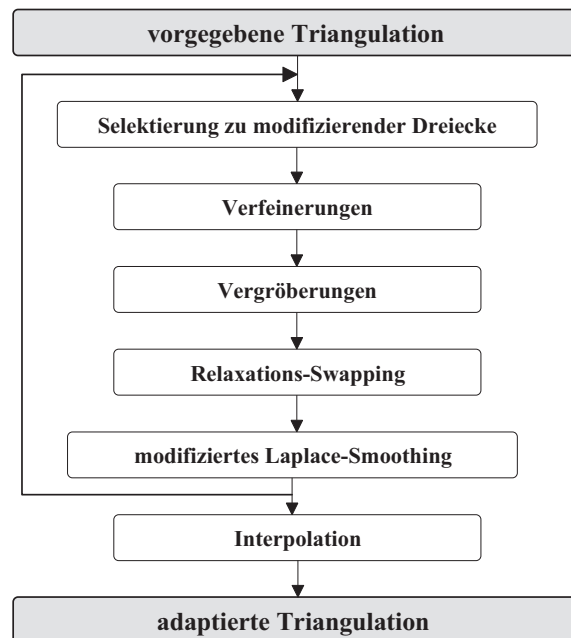


Abbildung 5.14: Einzelne Schritte des gesamten Adaptionsverfahrens.

Bei der Anwendung dieses Adaptionverfahrens für ein freies Randwertproblem wird sich innerhalb eines Zeitschritts eine nur geringfügige Veränderung des Rechenraumes und der abhängigen Variablen der Gitterverteilungsfunktion (Gl. (5.2)) ergeben. Entsprechend ist ein Durchlaufen des Adaptionverfahrens nur nach einem Bruchteil aller Zeitschritte erforderlich, was gleichzeitig den Rechenaufwand des Gesamtverfahrens in vertretbaren Grenzen hält.

5.3 Anwendungsbeispiele

In sämtlichen in Kapitel 6 angesprochenen Verifikationsrechnungen kommt das beschriebene Adaptionverfahren zum Einsatz. Um das Verhalten des Verfahrens bei extremer Deformation bewegter Ränder und großskaliger Grenzflächenbewegung zu testen, wurden Rechnungen durchgeführt, die auf der willkürlichen Vorgabe einer Randbewegung beruhten. Losgelöst von einer fluiddynamischen Problemstellung konnte so der für die Gittererzeugung und Gitteradaption verantwortliche Programmteil separat ausgetestet werden.

Abb. 5.15 zeigt die Ergebnisse von drei ausgewählten Testrechnungen. Dabei ist zu beachten, daß sich die im Laufe der transienten Rechnung stark ändernde Gittertopologie allein durch eine Folge von *lokalen* Eingriffen in die Gitterstruktur ergibt. Eine *globale* Retriangulation findet zu keinem Zeitschritt statt. Während in den Fällen (a) und (b) konstante Maschenweiten im gesamten Berechnungsgebiet realisiert wurden, basiert Rechnung (c) auf einer Gitterverteilungsfunktion, die einen linearen Anstieg der Maschengrößen mit dem Abstand vom Kavitätzentrum vorsieht. Die Frontgeschwindigkeit der bewegten Ränder wurde jeweils so gewählt, daß der Endzustand (das vierte Bild jeder Rechnung) nach 800 Zeitschritten erreicht wurde. Durchschnittlich 10 % dieser Zeitschritte führten im Anschluß an die Frontbewegung zu einem Aufruf des Adaptionverfahrens. Innerhalb des iterativen Adaptionsprozesses wurde dann nach jeweils 2 – 3 Iterationen die gewünschte Sollgrößenverteilung (innerhalb bestimmter Toleranzschranken) erreicht.

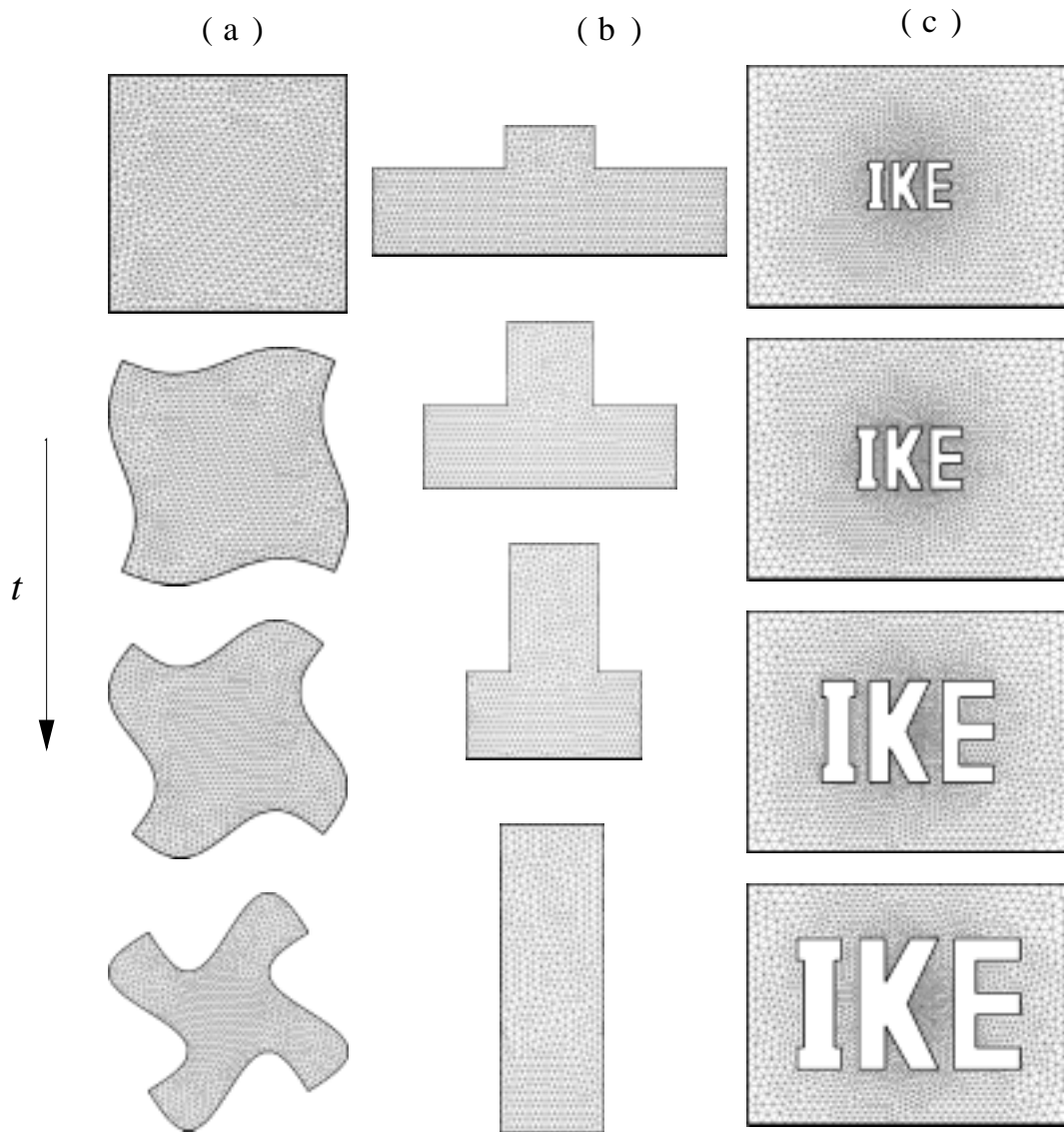


Abbildung 5.15: Testrechnungen zur Gitteradaption: (a) Wellenförmige Deformation einer quadratischen Kavität, (b) Umbildung eines horizontalen in einen vertikalen Stab, (c) Wachsende Buchstabengruppe.

Kapitel 6

Verifikation und Anwendung

6.1 Begriffsabgrenzungen und Vorgehensweise

Neben dem theoretischen und dem experimentellen Ansatz nehmen numerische Simulationen inzwischen einen wichtigen Platz in Industrie und Forschung ein. Dennoch wird Ergebnissen, die auf numerischen Simulationen beruhen, vielfach noch mit großer Skepsis begegnet. Diese müssen deshalb nicht nur die Hauptanforderungen hohe Genauigkeit, geometrische Flexibilität und akzeptable Rechenzeit erfüllen, sondern auch eine gewisse Glaubhaftigkeit und Vertrauenswürdigkeit sicherstellen. Jede Codeentwicklung muß daher eine ausgiebige und kritische Verifikationsphase beinhalten. Anhand des Vergleiches mit genauen Lösungen oder theoretisch abgesicherten Experimenten ist dabei zu prüfen, ob die zugrunde liegenden Gleichungen richtig gelöst werden (Oertel und Laurien 1995). In diesem Sinne stellt die Verifikation sicher, daß die für einen bestimmten Anwendungsfall bzw. Anwendungsbereich verwendeten physikalischen Modelle und numerischen Algorithmen fehlerfrei implementiert sind. Unter Validierung ist hingegen der weiterführende Prozeß zu verstehen, der überprüft, ob einer Simulation die korrekten physikalischen Modelle bzw. Gleichungen zugrunde gelegt wurden. Dies ist nur im direkten Vergleich mit realen Experimenten möglich. Die Validierung überprüft gewissermaßen den Bezug der Simulation zur Realität. In diesem Zusammenhang macht der Begriff "Codevalidierung" wenig Sinn, da nur bestimmte Rechnungen (bzw. Anwendungsfälle), nicht aber der Code als solcher validiert werden können (Roache 1997).

Für den in dieser Arbeit vorgestellten Code wurde die Strategie einer sukzessiven Verifikation implementierter Teilmodelle verfolgt. Schon in einer frühen Phase der Codeentwicklung wurde damit begonnen, die numerische Realisierung bestimmter mathematischer und physikalischer Modelle anhand einfacher Testfälle zu überprüfen und somit mögliche Fehlerquellen frühzeitig aufzudecken. Die in Tabelle 6.1 genannte Auflistung durchgeführter Verifikationsrechnungen ist auch als Verifikationsplan zu verstehen, der chronologisch abgearbeitet wurde. Später durchgeführte Testrechnungen basieren zum Teil auf Modellen, die durch vorangegangene Rechnungen bereits verifiziert wurden. Sie erweitern den An-

wendungsbereich dieser Modelle und testen deren Verhalten in Kombination mit anderen Modellen.

Prinzipiell kann eine Verifikation durch Vergleich mit analytischen Lösungen, anderen numerischen Lösungen (Benchmarklösungen) oder experimentellen Daten erfolgen. Da geschlossene analytische Lösungen nur in den seltensten Fällen und für sehr einfache Probleme existieren, ist man häufig auf einen Vergleich mit numerischen oder experimentellen Ergebnissen anderer Autoren angewiesen.

Tabelle 6.1: Überblick über durchgeführte Verifikationsrechnungen.

Nr.	Testfall	zu verifizierender Programmteil	Vergleich mit
1	Instationäres Wärmeleitproblem	Zeitdiskretisierung, Wärmetransportgleichung	Analytischer Lösung
2	Laminare Nischenströmung	Navier-Stokes-Gleichungen	Benchmarklösungen
3	Stationäre Naturkonvektionsströmung: - quadratische Kavität - komplexere Kavitäten - mit inneren Wärmequellen	Navier-Stokes + Energiegl. Gitteralgorithmen Quelltermimplementierung	Benchmarklösungen Experiment Experiment
4	Instationäre Naturkonvektionsströmung	Zeitdiskretisierung	Benchmarklösungen
5	Zweiphasiges Stefanproblem	Latentwärmefreisetzung, Frontbewegung	Analytischer Lösung
6	Gerichtetes Aufschmelzen eines Reinstoffes	Diskr. Phasenwechselmodell, Bewegtes-Gitter-Verfahren	Benchmarklösungen, Experiment
7	Bénard-Konvektion unter Gefrierflächen	Diskr. Phasenwechselmodell, Bewegtes-Gitter-Verfahren	Numerischer Lösung, Experiment
8	Aufschmelzen mit interner Beheizung	Kont. Phasenwechselmodell, Bewegtes-Gitter-Verfahren	Numerischer Lösung, Experiment

In den folgenden Unterkapiteln wird auf die Verifikationsfälle 4 -8 ausführlich eingegangen. Dabei wird zwischen ein- und mehrphasigen Problemen unterschieden. Auf eine Darstellung der Ergebnisse der einfacheren Fälle 1-3 wird aus Platzgründen verzichtet.

6.2 Einphasige Probleme

6.2.1 Instationäre Naturkonvektionsströmung in Flüssigmetall

6.2.1.1 Quadratische Kavität mit adiabaten horizontalen Wänden

Zur Überprüfung der Genauigkeit des Zeitverhaltens instationärer Strömungen wird zunächst der Fall der Naturkonvektionsströmung in einer seitlich beheizten und mit Flüssigmetall gefüllten Kavität untersucht. Zum Zeitpunkt $t = 0$ besitzt das Fluid überall die Temperatur T_c . Ein plötzliches Erhöhen der Temperatur der linken vertikalen Wand auf $T_h > T_c$ bringt dann eine Naturkonvektionsströmung in Gang. Alle Stoffwerte mit Ausnahme der Dichte im Auftriebsterm der Impulsgleichungen sind konstant, d. h. die Boussinesq-Approximation wird als gültig betrachtet. Die Strömung wird ferner als zweidimensional, laminar und inkompressibel behandelt.

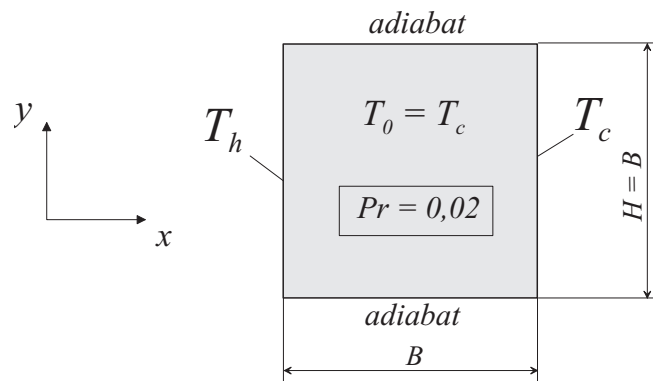


Abbildung 6.1: Instationäre Naturkonvektionsströmung in einer quadratischen Kavität: Problemdefinition.

Im Gegensatz zu Problemen mit horizontalen äußeren Temperaturgradienten (Bénard-Probleme) setzt bei vorhandenen vertikalen Temperaturgradienten die Naturkonvektionsströmung sofort und auch schon bei kleinsten Rayleigh-Zahlen ein. In Medien mit sehr kleinen Prandtl-Zahlen ist diese Strömung hochgradig nichtlinear, weil sie stark trägheitsdominiert ist. Viskose Kräfte sind lediglich in den sehr dünnen Grenzschichten von Bedeutung (Mohamad und Viskanta 1991). Entsprechend gering ist der viskose Dämpfungseffekt bei Störungen des Stromfeldes, weswegen Strömungen in Medien mit kleiner Prandtl-Zahl zu Oszillationen neigen. Für mittlere und höhere Grashof-Zahlen wurden sowohl in experimentellen (Pamplin und Bolt 1976) als auch in numerischen Studien (Mohamad und Viskanta 1991) Oszillationen in seitlich beheizten Kavitäten nachgewiesen. In Abhängigkeit von der Prandtl-Zahl existiert eine kritische Grashof-Zahl, bei der die oszillationsfreie Lösung instabil wird. Diese kritische Grashof-Zahl nimmt mit der Prandtl-Zahl des Mediums ab. Bei einer festen Prandtl-Zahl existiert ein bestimmter Grashof-Zahlenbereich oberhalb der kritischen Grashof-Zahl, in dem die oszillatorische Lösung asymptotisch gedämpft wird und einer stationären Lösung entgegenstrebt. Für höhere Grashof-Zahlen hingegen bleibt die Strömung für alle Zeiten oszillierend und instationär (Mohamad und Viskanta 1991).

Für den untersuchten Fall $Pr = 0.02$ und $Gr = 2 \cdot 10^6$ ($Ra = 4 \cdot 10^4$) bilden sich in einer Kavität mit dem Geometrieverhältnis $B/H = 1$ nur anfänglich Oszillationen aus. Diese verschwinden nach einiger Zeit und ein stationärer Strömungszustand stellt sich ein. Mohamad (1998) veröffentlichte 1998 für das beschriebene Problem sehr genaue numerische Benchmarklösungen. Aufgrund seiner wohldefinierten Geometrie und seiner einfachen Rand- und Anfangsbedingungen eignet sich dieses instationäre Problem sehr gut als transienter Benchmarkfall, mit dem sowohl der Transport von Strömungsstrukturen als auch die Dämpfungseigenschaften des Codes (infolge numerischer Diffusion) überprüft werden können.

Abb. 6.2 zeigt zunächst den nach Abklingen der Oszillationen erreichten stationären Endzustand in Form von Isothermen und Stromlinien. Ebenfalls dargestellt ist das hierzu verwendete feste numerische Gitter ($N=3798$). Um die Grenzschichten besser aufzulösen, wurde als Sollgrößenverteilungsfunktion eine Gaussverteilung verwendet, die die Maschenweite (Dreiecksgröße) in Randnähe in Abhängigkeit vom Abstand vom Kavitätszentrum verringert:

$$\Delta(x, y) = 20 \cdot e^{\ln \frac{1}{20} \cdot [\min(x, y)]^2} \quad (6.1)$$

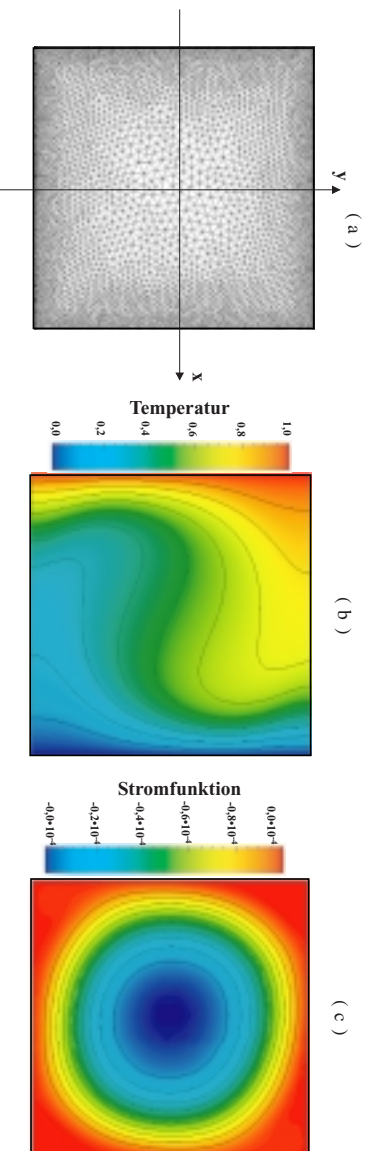


Abbildung 6.2: Stationäre Lösung einer Simulation für $Pr = 0.02$ und $Gr = 2 \cdot 10^6$:

(a) numerisches Gitter; (b) Isothermen, (c) Stromlinien.

Das asymptotische Abklingverhalten der oszillierenden Strömung wird anhand der mittleren Nusselt-Zahlen entlang der warmen und kalten Wand sowie der u -Geschwindigkeitskomponente im Kavitätszentrum näher untersucht. Abb. 6.3 zeigt zunächst das transiente Verhalten der mittleren Nusselt-Zahl entlang der warmen und kalten Wand einer hochauflösenden Simulation (256x256 Gitterpunkte) von Mohamad (1998) in direktem Vergleich mit einer Simulation mit dem vorgestellten Code. Dabei wurde ein festes Gitter mit $N = 3798$ Gitterknoten verwendet. Der dimensionslose Zeitschritt wurde - ähnlich dem Vorgehen in der Benchmarksimulation - von anfänglich $1 \cdot 10^{-5}$ nach 100 Zeitschritten auf $5 \cdot 10^{-5}$ und nach 1000 Zeitschritten auf $1 \cdot 10^{-4}$ erhöht. Als Zeitdiskretisierungsschema kann das Crank-Nicolson-Verfahren zum Einsatz.

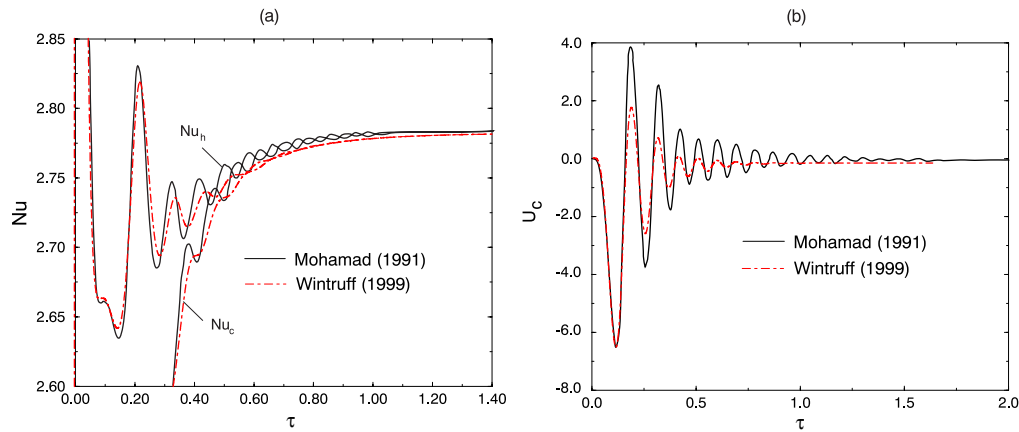


Abbildung 6.3: Vergleich des transienten Verhaltens bestimmter Kenngrößen mit der Benchmarklösung von (Mohamad 1998): (a) Nusselt-Zahlen entlang der warmen und kalten Wand, (b) u -Geschwindigkeitskomponente im Kavitätzentrum.

Abb. 6.3 zeigt, daß das Auf- und Abschwingverhalten der Nusselt-Zahlen qualitativ dem der Benchmarklösung entspricht. Die wesentlich geringere räumliche Auflösung sorgt allerdings für leicht gedämpfte Schwingungsamplituden. Schwingungen geringer Amplituden werden bei einer im Vergleich zur Benchmarklösung um Faktor 5 geringeren Auflösung komplett unterdrückt. Der stationäre Endwert der Nusselt-Zahlen weicht lediglich um 0.2% von dem der Benchmarklösung ab. Die Frequenz der periodischen Schwingung wird gut wiedergegeben. Die relativ geringe Phasenverschiebung spricht für einen untergeordneten Einfluß künstlicher Diffusion höherer Ordnung (Dispersion).

Ein ähnliches Verhalten zeigt der Vergleich der u -Geschwindigkeitskomponente im Kavitätzentrum. Auch hier werden Frequenz und stationärer Endwert der Oszillation gut wiedergegeben, eine gewisse Dämpfung der Schwingungsamplituden ist aber aufgrund der begrenzten räumlichen Auflösung unvermeidbar.

Die Sensitivität der gezeigten Kenngrößen bezüglich der räumlichen Auflösung zeigt Abb. 6.4. Größere Maschenweiten verbessern das Dämpfungsverhalten der Simulation leicht. Der stationäre Endwert der Nusselt-Zahlen wird bei geringerer räumlicher Auflösung leicht unterschätzt. Die Eigenfrequenz der Oszillation reagiert insensitiv auf die Reduzierung der räumlichen Auflösung. Der Verlauf der u -Geschwindigkeit im Kavitätzentrum zeigt bei geringer Auflösung eine leichte Zunahme der Dämpfung, aber insbesondere eine leichte Verschiebung der Kurve hin zu positiven Geschwindigkeiten. Hier könnte sich die Asymmetrie des numerischen Gitters und auch die starke Variation der Maschenweiten in Horizontalrichtung negativ auswirken. Unterschiedliche Größen der einen Knotenpunkt umgebenden Dreiecke reduzieren die Fehlerordnung des Verfahrens und sorgen - je nach Vorzeichen der Größenänderung - für zusätzliche positive oder negative numerische Diffusion. So kann eine Abnahme der Gitterauflösung in Strömungsrichtung zu einer gefährlichen Verringerung der Diffusion führen (Günther 1997b). Bei Rezirkulationsströmungen ist dies bei der Verwendung adaptiver Gitter jedoch praktisch unvermeidbar.

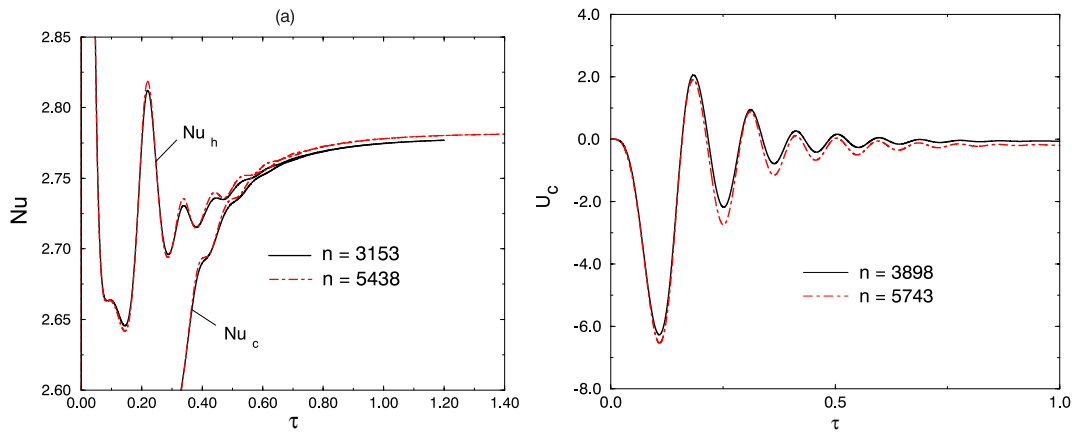


Abbildung 6.4: Vergleich unterschiedlicher räumlicher Diskretisierungen: (a) Nusselt-Zahlen entlang der warmen und kalten Wand, (b) u -Geschwindigkeitskomponente im Kavitätszentrum.

Eine Erhöhung der zeitlichen Auflösung (Beibehaltung des Zeitschritts von $1 \cdot 10^{-5}$ während der gesamten Simulation) brachte keine nennenswerte Verbesserung. Der Einsatz einer vollimpliziten Euler-Zeitdiskretisierung ($O(\Delta t)$) verstärkt das Dämpfungsverhalten des Codes im Vergleich zur Crank-Nicolson-Diskretisierung ($O(\Delta t^2)$) nur geringfügig, wie Abb. 6.5 anhand vergrößerter Ausschnitte offenbart. Die Frequenz der Oszillation bleibt in beiden Fällen unverändert. Für die u -Geschwindigkeit im Zentrum zeigt die implizite Euler-Diskretisierung eine ähnliche Auswirkung wie die verringerte räumliche Auflösung in Abb. 6.4(b). Die zusätzliche numerische Diffusion bei Einsatz eines Zeitdiskretisierungsschemas der Ordnung Δt sorgt hier neben zusätzlicher Dämpfung für einen Versatz der Schwingungsamplituden. Beide Rechnungen in Abb. 6.5 wurden mit einer vergleichsweise geringen räumliche Auflösung von $N = 3256$ Knotenpunkten durchgeführt, die zeitliche Auflösung war gegenüber den vorangegangenen Simulationen unverändert.

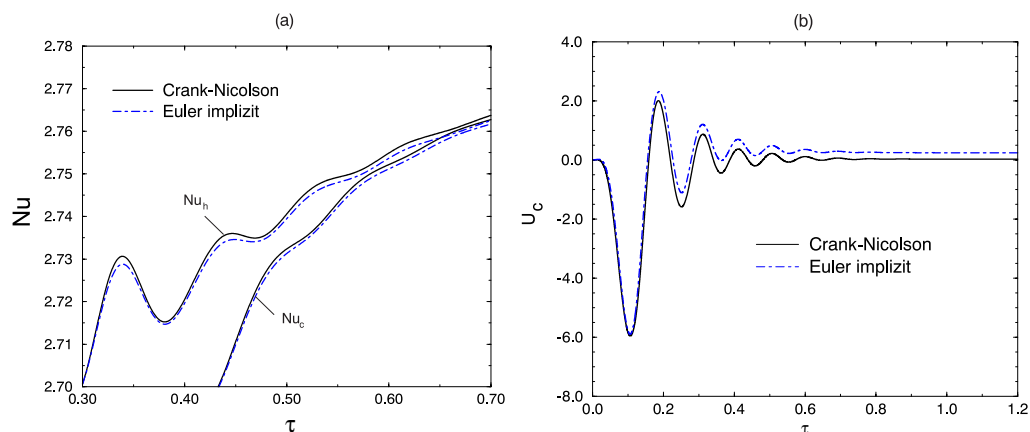


Abbildung 6.5: Vergleich unterschiedlicher Zeitdiskretisierungen: (a) Nusselt-Zahlen entlang der warmen und kalten Wand, (b) u -Geschwindigkeit im Kavitätszentrum.

6.2.1.2 Kavität mit $A = 4$ und isothermen horizontalen Wänden

Naturkonvektionsströmungen für kleine Prandtl-Zahlen in einer Kavität mit einem Breiten-Höhenverhältnis von $A = 4$ wurden im Rahmen einer Benchmarkstudie anlässlich der GAMM-Tagung 1988 in Marseille ausführlich untersucht (Roux 1990). Motiviert u. a. durch die experimentelle Arbeit von Hurle, Jakeman und Johnson (1974), die in einem parallelepipedförmigen Behälter mit flüssigem Gallium unter der Wirkung eines horizontalen Temperaturgradienten die kritische Bedingungen für den Einsatz von Oszillationen quantifizierten, wurden Testfälle für die Prandtl-Zahlen 0 und 0.015 sowie für unterschiedliche hydrodynamische Randbedingungen der oberen horizontalen Berandung (fester Rand und Schubspannungsfreier Rand) formuliert. Der zu untersuchende Grashof-Zahlenbereich wurde dabei unter Berücksichtigung der theoretischen Ergebnisse von Winters (1988) festgelegt, der mit einer Verzweigungsanalyse kritische Grashof-Zahlen für den Einsatz von Oszillationen ausmachte. Demnach ergibt sich für die genannten Bedingungen bei einer Grashof-Zahl von $Gr = 2.8153 \cdot 10^4$ eine Hopf-Verzweigung. Oberhalb dieser kritischen Grashof-Zahl ist eine mono-oszillatorische Lösung mit konstanter Schwingungsamplitude stabil. Dennoch können sich nach Winters (1988) oberhalb der kritischen Grashof-Zahl auch stationäre Sekundärlösungen auf instabilen Lösungsästen ausbilden.

Als Testfall für das vorgestellte numerische Verfahren wird der Fall mit festen horizontalen Berandungen für $Pr = 0.015$ und $Gr = 30000$ herangezogen (siehe Abb. 6.6).

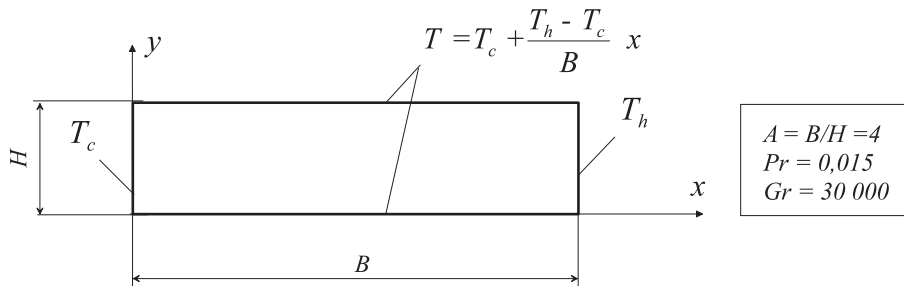


Abbildung 6.6: Instationäre Naturkonvektion in einer länglichen Kavität ($A = 4$): Geometrie, Randbedingungen und dimensionslose Kennzahlen.

Für die quantitative Auswertung der Ergebnisse werden die Längenskalen x/B bzw. y/H , die Zeitskala H^2/ν sowie die Geschwindigkeitsskala $\nu/(H\sqrt{Gr})$ eingeführt. Der quantitative Vergleich mit den numerischen Ergebnissen anderer Autoren wird anhand der maximalen Horizontalgeschwindigkeit U^* im Schnitt $X = 1/4$ sowie der maximalen Vertikalgeschwindigkeit V^* im Schnitt $Y = 1/2$ geführt.

Die Berechnungen wurden auf einem festen numerischen Gitter mit $N = 3464$ Knotenpunkten durchgeführt, die Verteilung der Knotenpunkte im Rechengebiet basierte auf Gl. (6.1). Als Zeitdiskretisierung kam das Crank-Nicolson-Schema mit einem konstanten Zeitschritt von $\theta = 5 \cdot 10^{-5}$ zum Einsatz, als Startlösung diente die eindimensionale Wärmeleitlösung des Problems.

Abb. 6.7 zeigt den zeitlichen Verlauf der genannten Maximalgeschwindigkeiten. Es stellt sich ein oszillierender Strömungszustand mit leicht degressiver Schwingungsamplitude ein. Innerhalb des von der numerischen Simulation abgedeckten Zeitintervalls konnte kein Schwingungszustand mit konstanter Amplitude erreicht werden. Die in Tabelle 6.2 genannten Maximal- und Minimalwerte der Geschwindigkeiten U^* und V^* beziehen sich auf die Anfangsphase der Berechnung. Die dimensionslose Oszillationsfrequenz f hingegen bleibt während der gesamten Simulationszeit exakt konstant.

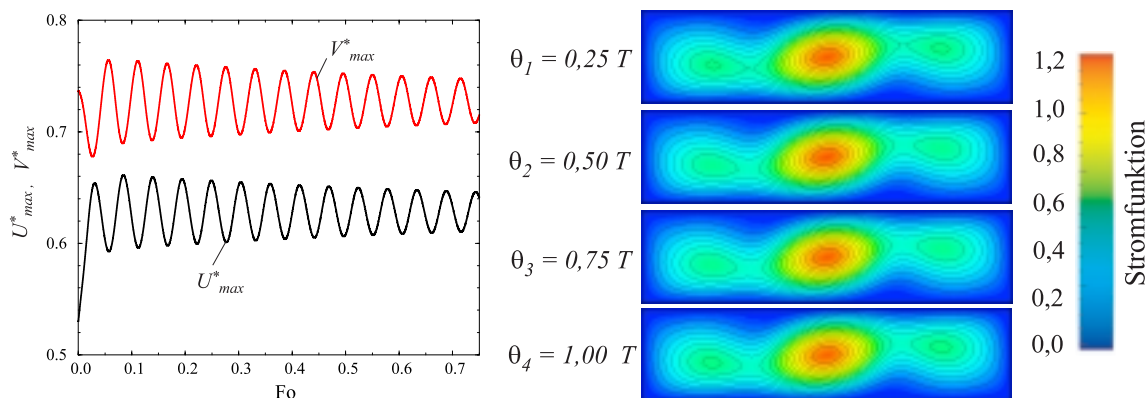


Abbildung 6.7: Zeitl. Verlauf der Maximalgeschwindigkeiten $U^* = U_{max}$ für $X = 1/4$ und $V^* = V_{max}$ für $Y = 1/2$ sowie Stromfunktion während der Periodendauer T .

Tabelle 6.2: Vergleich der Ergebnisse für den Fall $Pr = 0.015$, $Gr = 30000$, feste horizontale Berandungen (B1 - B15 = diverse Beiträge zur Benchmarkstudie, hier nicht näher genannt, E = eigener Beitrag, O = oszillatorische Lösung, S = stationäre Lösung, - = Wert nicht bekannt).

Beitrag	Lösungsform	U_{min}^*	U_{max}^*	V_{min}^*	V_{max}^*	f
B1	O	0.4319	0.8411	0.4895	0.9526	18.05
B2	S	0.609	0.609	0.703	0.703	
B3	O	-	-	-	-	18.18
B4	O	-	-	-	-	18.04
B5	O	0.5146	0.7266	0.6024	0.8286	17.89
B6	O	-	0.635	-	0.7411	18.09
B7	O	0.596	0.6662	0.685	0.754	17.9
B8	O	0.558	0.645	0.656	0.762	18.1
B9	O	0.5883	0.6016	0.7026	0.7194	17.24
B11	O	0.525	0.753	0.584	0.843	16.9
B12	O	0.496	0.782	0.562	0.872	17.86
B13	O	-	-	-	-	18.2
B14	O	-	-	-	-	18.05
B15	O	0.5609	0.7289	0.6346	0.8237	18.40
E	O	0.589	0.660	0.692	0.761	18.23

Mit einer Ausnahme werden von allen Autoren oszillatorische Lösungen berechnet. Eine Referenzlösung wurde im Rahmen der Auswertung der Benchmarkergebnisse nicht bestimmt. Die eigene Lösung befindet sich innerhalb der Wertebereiche, die von den Benchmarklösungen abgedeckt werden.

6.3 Mehrphasige Probleme

6.3.1 Zweiphasiges Stefanproblem

Als Testfall zur Verifikation der Kinematik bewegter Fest-Flüssig-Phasengrenzen eignet sich besonders das klassische Stefanproblem (Rubenstein 1971). Dabei wird ein eindimensionaler Halbraum $x \geq 0$ betrachtet, der mit einem Medium gefüllt ist, das für $t \leq 0$ eine konstante Temperatur $T_2 > T_m$ besitzt, d. h. zunächst den flüssigen Zustand einnimmt. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird die Oberfläche bei $x = 0$ auf $T_1 < T_m$ abgekühlt und für alle Zeiten auf dieser Temperatur gehalten, so daß - ausgehend von dieser Oberfläche - eine feste Phase entsteht, die mit der Zeit immer mehr anwächst. Als einziger Wärmeübertragungsmechanismus wird Wärmeleitung betrachtet. Das System läßt sich durch die beiden Fourierschen Wärmeleitgleichungen in fester und flüssiger Phase beschreiben:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) &= \rho c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) &= \rho c_l \frac{\partial T_l}{\partial t}.\end{aligned}\quad (6.2)$$

An der bewegten Fest-Flüssig-Phasengrenze gelten unter Vernachlässigung von Nicht-Gleichgewichtseffekten und Volumenänderung beim Phasenwechsel ($\rho = \rho_s = \rho_l$) die isotherme Bedingung

$$T_s = T_l = T_m \quad (6.3)$$

sowie die Stefan-Bedingung, die anschaulich die Wärmeströme an der Phasengrenze bilanziert:

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{dx_{sl}}{dt}.\quad (6.4)$$

x_{sl} bezeichnet darin die zeitabhängige Position der Phasentrennfläche. Obiges Differentialgleichungssystem besitzt eine analytische Lösung, die als Neumannsche Ähnlichkeitslösung (Crank 1984) bekannt ist. Demnach wird die Bewegung der Phasentrennfläche durch die Wurzelfunktion

$$x_{sl}(t) = 2\xi\sqrt{\kappa_s t} \quad (6.5)$$

beschrieben. Die Größe ξ ist aus der transzendenten Gleichung

$$\frac{e^{-\xi^2}}{\operatorname{erf}(\xi)} - \frac{\lambda_l}{\lambda_s} \frac{\sqrt{\kappa_s}(T_2 - T_m)e^{-\kappa_s \xi^2/\kappa_l}}{\sqrt{\kappa_l}(T_m - T_1)\operatorname{erfc}(\xi\sqrt{\kappa_s/\kappa_l})} = \frac{\xi L \sqrt{\pi}}{c_s(T_m - T_1)} \quad (6.6)$$

zu bestimmen. Die Temperaturverteilung im Medium wird durch die Funktion

$$T = \begin{cases} \frac{T_m - T_1}{\operatorname{erf}(\xi)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\kappa_s t}}\right) + T_1 & \text{für } x < x_{sl} \\ T_m & \text{für } x = x_{sl} \\ T_2 - \frac{T_2 - T_m}{\operatorname{erfc}(\xi\sqrt{\lambda_s/\lambda_l})} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\kappa_l t}}\right) & \text{für } x > x_{sl} \end{cases} \quad (6.7)$$

beschrieben.

Für $T_2 = T_m$ ergibt sich der einfachere einphasige Fall, bei dem Wärmeleitung nur in der flüssigen Phase stattfindet. Im folgenden wird nur der zweiphasige Fall mit $T_2 > T_m$ behandelt. Das eindimensionale Problem wird in einer zweidimensionalen Kavität mit einem

Geometrieverhältnis von $L/H = 10$ behandelt. Dadurch läßt sich zusätzlich prüfen, inwieweit unphysikalische Verkrümmungen der Phasengrenze oder andere zweidimensionale Effekte durch numerische Fehler in das Problem hineingetragen werden. Abb. 6.8 zeigt die in der Simulation verwendete Geometrie, Randbedingungen und Stoffwerte.

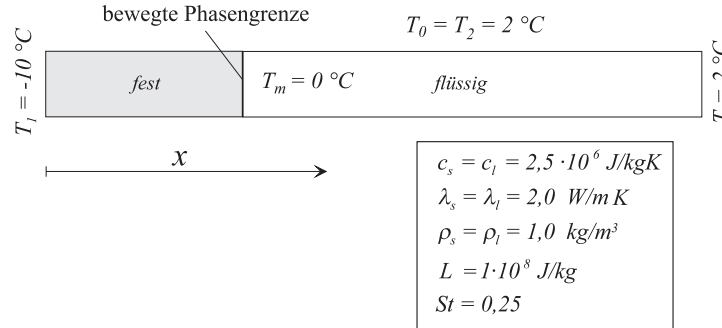


Abbildung 6.8: Zweiphasiges Stefanproblem: Problemdefinition mit Stoffwerten, Anfangs- und Randbedingungen.

Die analytische Lösung des Problems setzt einen unendlich ausgedehnten Halbraum voraus ($T = T_2$ für $x = \infty$), die numerische Simulation bedarf jedoch einer endlichen Geometrie. Für sehr lange Simulationszeiten entsteht am rechten Rand der Kavität ein nicht mehr zu vernachlässigender Temperaturgradient. Der Wärmestrom in die Kavität verursacht dann einen systematischen Fehler. Der Vergleich zwischen Analytik und Numerik ist deshalb nur in einem begrenzten zeitlichen Rahmen möglich. Quantitative Abschätzungen (unter Zuhilfenahme des Temperaturgradienten am rechten Rand) zeigen, daß der Wärmeeintrag über den rechten endlichen Rand der Kavität bis zu einer dimensionslosen Frontposition von $x \approx 0.2$ zu vernachlässigen ist.

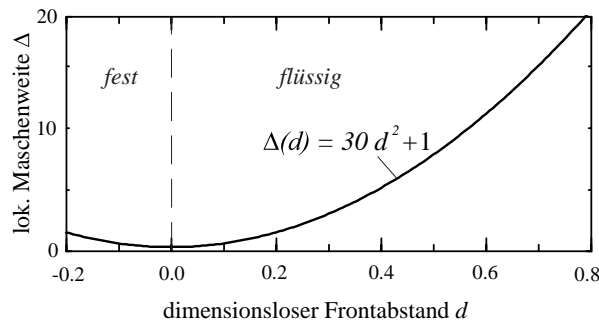


Abbildung 6.9: Dynamische Sollgrößenverteilungsfunktion der Dreieckselemente für das zweiphasige Stefanproblem.

Die Genauigkeit der Berechnung der Frontgeschwindigkeit ist maßgeblich davon abhängig, wie genau die Temperaturen in unmittelbarer Frontnähe erfaßt werden. Die gewählte Gitterverteilungsfunktion sorgt im Rahmen einer dynamischen Gitteranpassung für eine maximale Auflösung jeweils in unmittelbarer Nähe der bewegten Front. Mit zunehmender Entfernung

von der Front steigt die Auflösung dann um eine Größenordnung an. Abb. 6.9 zeigt die gewählte Sollgrößenverteilungsfunktion, die während der gesamten Simulation die Basis der dynamischen Gitteradaption bildete. Abb. 6.10 zeigt den direkten Vergleich einer Simulation mit einer räumlichen Auflösung von $1756 < N < 2078$ Gitterpunkten und einem Zeitschritt von $\Delta t = 20s$ (Crank-Nicolson-Verfahren) mit der analytischen Lösung. Neben dem transienten Fortschreiten der Front sind darin Temperaturprofile zu ausgewählten Zeiten dargestellt. Eine Abweichung zwischen Numerik und analytischer Lösung ist jeweils nur in einem vergrößerten Bildausschnitt zu erkennen. Die maximale Abweichung beträgt für den Frontfortschritt 0.3 % und für die Temperaturprofile 0.4 %.

Anhand dieses einfachen Testfalles lassen sich die Vorteile eines Bewegte-Gitter-Verfahrens im Vergleich zu Fest-Gitter-Verfahren bei diskreten Phasenwechselproblemen zeigen. Eine weitere Simulation mit mäßiger räumlicher ($N \approx 1000$) und zeitlicher ($\Delta t = 50s$) Auflösung soll dies verdeutlichen. Für ansonsten gleiche Bedingungen und Parameter wurden Simulationen mit dem vorgestellten Bewegte-Gitter-Verfahren und einer einfachen Enthalpie-Methode durchgeführt und miteinander verglichen. In den Vergleich wird außerdem eine auf der vorgestellten zweiphasigen Enthalpie-Methode basierende Simulation einbezogen. Auch wenn dieser Anwendungsfall kein typischer Anwendungsfall für diese Verfahrensvariante ist, so veranschaulicht er doch deren Vorgehensweise an einem konkreten Beispiel. In Tabelle 6.3 sind die wichtigsten Unterschiede der drei Verfahren bezüglich der angesprochenen Simulation zusammengefaßt.

Tabelle 6.3: Unterscheidungsmerkmale der drei anhand des Stefanproblems getesteten Verfahren.

	Bewegte-Gitter-Verfahren	Enthalpie-Methode	zweiphasige Enthalpie-Methode
numerisches Gitter	bewegt + adaptiv	fest	bewegt + adaptiv
Behandlung	zweiphasig	einphasig	zweiphasig
Frontdefinition	explizit	implizit (über Hilfsvariable f_i)	implizit (über Hilfsvariable f_i)
Frontrandbedingung	Stefan-Bedingung am exakten Ort	in Erhaltungsgleichungen enthalten (Verschmierungs-effekt)	in Erhaltungsgleichungen enthalten (Verschmierungs-effekt)
Front mit Gitterknoten besetzt?	ja	nein	ja
künstliches <i>mushy</i> -Gebiet?	nein	ja	ja

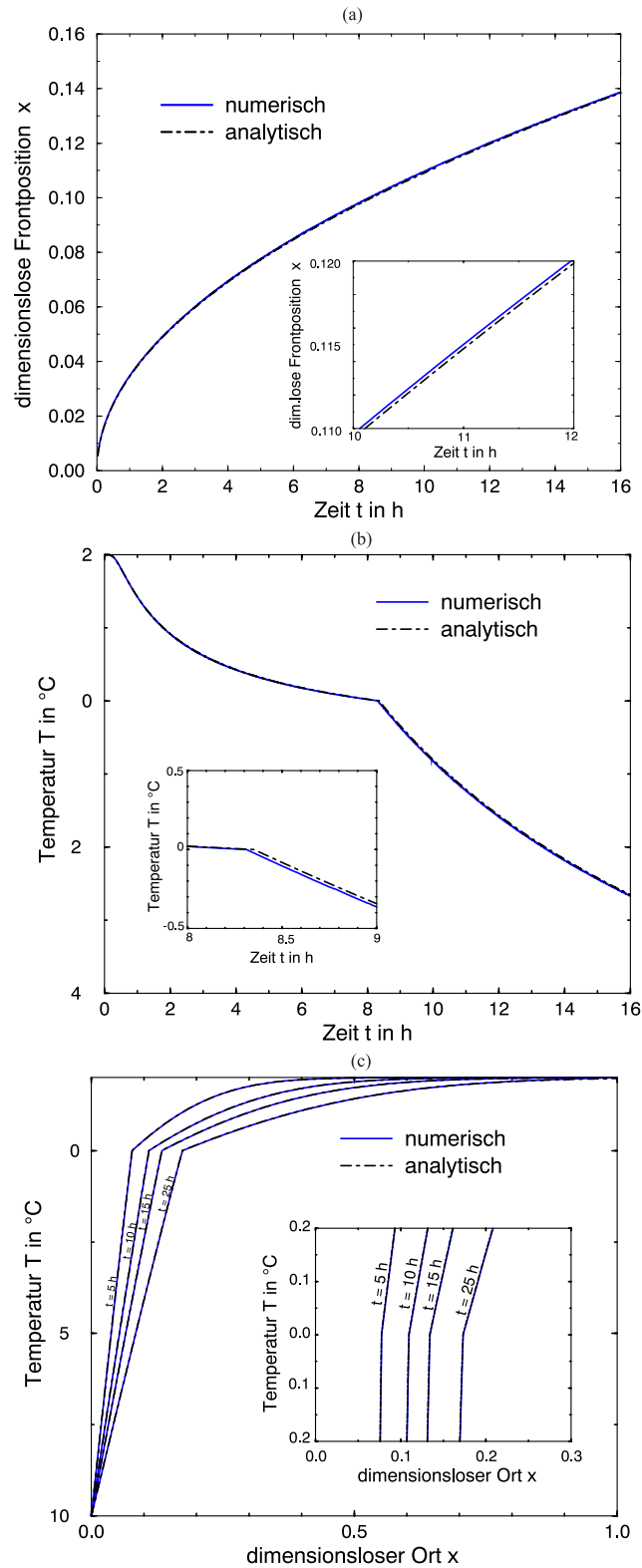


Abbildung 6.10: Vergleich des Bewegt-Gitter-Verfahrens mit analytischer Lösung: (a) Frontfortschritt, (b) Temperaturverlauf an der Stelle $x = 0.1$, (c) Temperaturprofile zu ausgewählten Zeiten.

Der direkte Vergleich der Simulationsergebnisse offenbart die bekannten Probleme von Festgitter-Verfahren bei diskreten Phasenwechselproblemen. Neben unphysikalischen Oszillationen im Frontfortschritt (Abb. 6.11c) sind in den transienten Temperaturverläufen an einer festen Stelle x typischerweise Temperaturplateaus (Abb. 6.11d) zu erkennen. Im Enthalpieverfahren bleibt die Temperatur eines vom Phasenwechsel betroffenen Kontrollvolumens solange auf Schmelztemperatur, bis das gesamte Kontrollvolumen dem Phasenwechsel unterzogen wurde. Diese Probleme resultieren unmittelbar aus der Einführung eines künstlichen *mushy*-Gebietes und der damit verbundenen Informationsverschmierung. Vergleichbare Oszillationen sind beim Bewege-Gitter-Verfahren (Abb. 6.11a und 6.11b) nicht zu erkennen. Die Übereinstimmung mit der analytischen Lösung ist trotz geringer räumlicher und zeitlicher Auflösung exzellent. Im Gegensatz zur Enthalpie-Methode werden während der gesamten transienten Simulation keinerlei zweidimensionale Effekte beobachtet, die Phasengrenze bleibt fortwährend eine senkrechte Gerade. Die zweiphasige Variante der Enthalpie-Methode rekonstruiert die Phasengrenze "online" nach jedem Zeitschritt und belegt sie mit Gitterknoten. Die Phasengrenze ist hier wie bei der einphasigen Enthalpie-Methode implizit über die Bedingungen $T = T_m$ und $f_l = 0.5$ definiert. Die Abb. 6.11e und 6.11f zeigen geringe unphysikalische Oszillationen, insbesondere in der Darstellung des Temperaturverlaufes an einem festen Ort. Diese Oszillationen werden durch ständige Gitteradaption und Interpolation in Frontnähe verursacht. Dies erklärt auch, warum diese Oszillationen in Abb. 6.11f hauptsächlich in einem Zeitintervall um den Zeitpunkt des Phasenwechsels am betrachteten Ort auftreten. In Frontnähe treten vor allem zu Beginn der Simulation hohe örtliche Temperaturgradienten auf. Bei einer (wie im dargestellten Fall verwendeten) eher geringen Gitterauflösung führen Eingriffe in die Gitterstruktur in Frontnähe (Verfeinerungen und Vergrößerungen) und die mit ihnen verknüpften linearen Interpolationen der Temperatur zu numerischen Fehlern. Außerdem wird die Handhabung der zweiphasigen Enthalpie-Methode hier durch den Fall eines physikalisch diskreten Phasenübergangs erschwert. Dabei tritt bezüglich der Genauigkeit des Verfahrens der ungünstigste aller Fälle, nämlich ein Fall mit sehr dünnem *mushy*-Gebiet, auf. Diese Tatsache ist unmittelbar mit der Existenz sehr hoher Gradienten des Flüssigkeitsanteils f_l verknüpft, was wiederum Interpolationsfehler verstärkt.

Für diskrete Phasenwechselprobleme (wie im untersuchten Fall) ist selbstverständlich das Bewege-Gitter-Verfahren der zweiphasigen Enthalpie-Methode vorzuziehen, wie die dargestellten Ergebnisse beweisen. Für kontinuierliche Phasenwechselprobleme mit physikalisch existenten *mushy*-Gebieten verbietet sich eine Anwendung des Bewege-Gitter-Verfahrens. Die zweiphasige Enthalpie-Methode stellt dann eine brauchbare Alternative zur traditionellen einphasigen Enthalpie-Methode auf einem festen Gitter dar. Die in Kapitel 4.2.2.2 genannten Vorteile der "online"-Rekonstruktion der Phasengrenze müssen nicht automatisch einen erhöhten numerischen Aufwand bedeuten. Im Rahmen eines adaptiven Verfahrens kann das Gitter besser auf die sich verändernde Physik reagieren. Im Idealfall wird eine optimierte Verteilung der Gitterknoten erreicht, was einem Gewinn an Effizienz gleichkommt.

Trotz der aufwendigen Gitterbewegung und Gitteradaption wird im dargestellten Testfall für das Bewege-Gitter-Verfahren die geringste Rechenzeit benötigt. Für die gezeigten Ergebnisse wurde jeweils nur eine innere Iteration zwischen Stefanbedingung und Energieglei-

chung (siehe Abb. 4.5) durchgeführt. Im Vergleich zu den Enthalpie-Methoden entfällt die Iterationsschleife zwischen Energiegleichung und der Gleichung für den Flüssigkeitsanteil, die einen Großteil der CPU-Zeit in Anspruch nimmt.

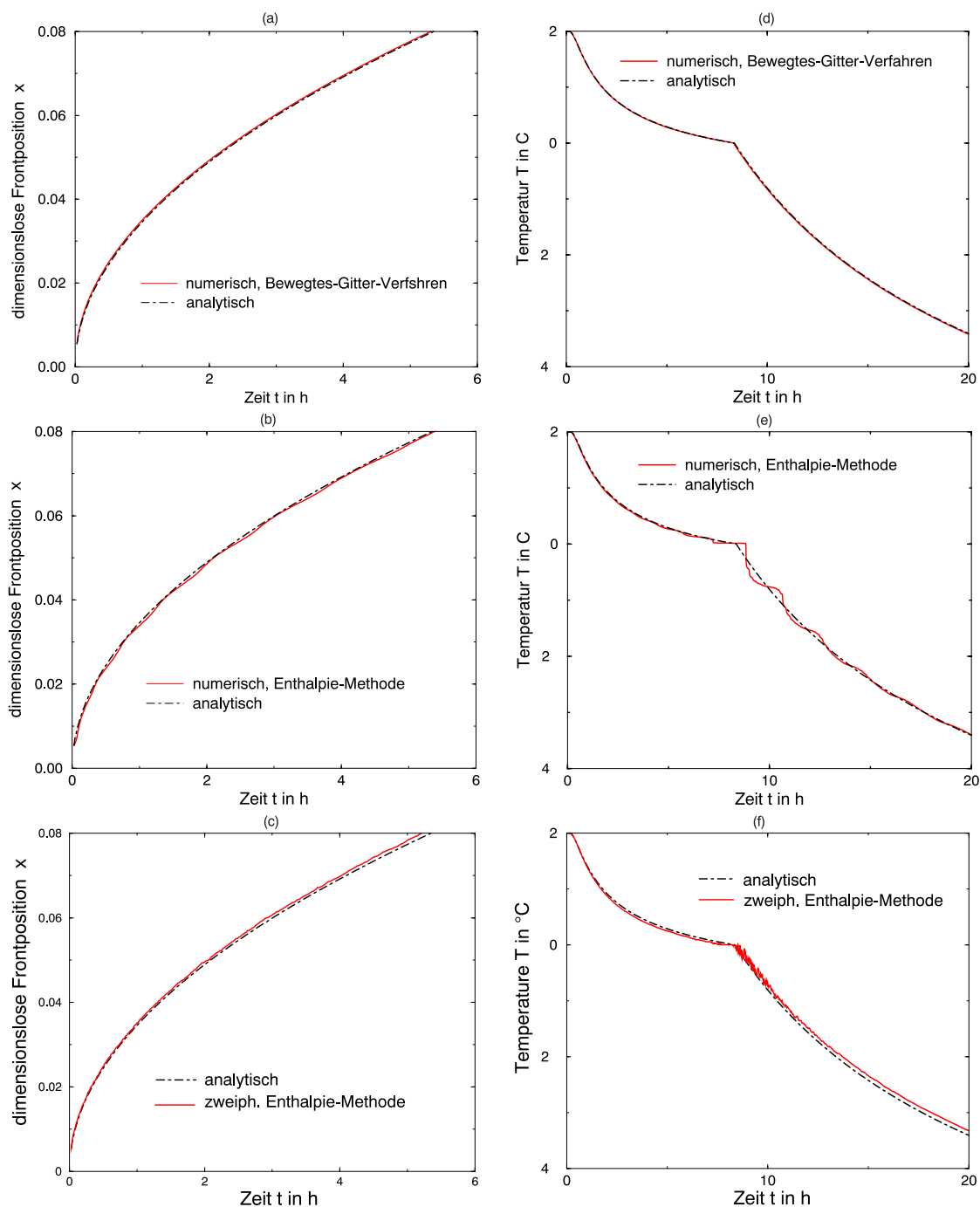


Abbildung 6.11: Frontfortschritt im Vergleich zur analytischen Lösung: (a) Bewegtes-Gitter-Verfahren, (b) Enthalpie-Methode, (c) zweiphasige Enthalpie-Methode; Temperaturverlauf an der Stelle $x = 0.1$ im Vergleich zur analytischen Lösung: (d) Bewegtes-Gitter-Verfahren, (e) Enthalpie-Methode, (f) zweiphasige Enthalpie-Methode.

6.3.2 Gerichtetes Aufschmelzen eines Reinstoffes

Als erster zweidimensionaler Anwendungsfall für das numerische Verfahren wird das Aufschmelzen eines Flüssigmetalls in einer seitlich beheizten Kavität unter Konvektionseinfluß untersucht. Die Kavität sei anfänglich vollständig mit erstarrtem Fluid gefüllt. Zum Zeitpunkt t_0 wird die linke, vertikale Wand des Systems auf eine Temperatur $T_h > T_m$ gebracht, so daß sich eine flüssige Phase ausbilden kann. Im Schwerfeld der Erde setzt im Fluid eine Naturkonvektionsströmung ein, die wärmeres Fluid in die oberen Regionen der Kavität transportiert und für eine entsprechende Deformation der bewegten Fest-Flüssig-Phasengrenze sorgt.

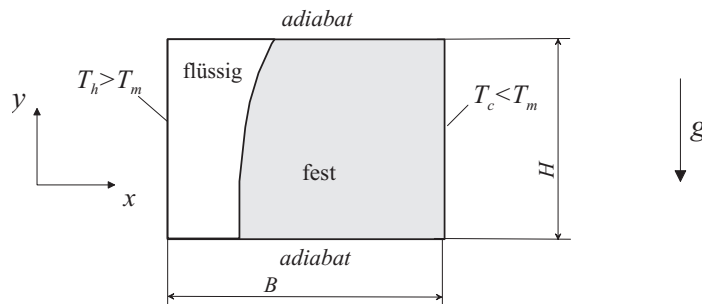


Abbildung 6.12: Aufschmelzen eines Reinstoffes in einer seitlich beheizten Kavität: Problemdefinition.

Die numerische Modellierung des Problems unterliegt folgenden, zum Teil vereinfachenden Annahmen:

- Innerhalb der Kavität befindet sich ein reiner Stoff ohne Verunreinigungen.
- Die bewegte Schmelzfront besitzt zu allen Zeiten die dem thermodynamischen Gleichgewicht entsprechende isobare Schmelztemperatur der betrachteten Substanz. Kapillaritätseffekte (Gibbs-Thompson-Effekt) werden nicht berücksichtigt.
- Die Temperaturabhängigkeit der Dichte im Auftriebsterm wird durch die Boussinesq-Approximation beschrieben. Ansonsten werden alle Stoffeigenschaften in flüssiger und fester Phase als gleich und konstant angenommen.
- Das erschmolzene Fluid wird als inkompressibles, newtonsches Medium modelliert, die Naturkonvektionsströmung ist laminar und zweidimensional.
- Wärmefreisetzung durch viskose Dissipation wird nicht berücksichtigt.

Das Problem wird durch die Kennzahlen Prandtl-Zahl, Stefan-Zahl und Rayleigh-Zahl sowie das Geometrieverhältnis $A = H/B$ der Kavität charakterisiert. Bezüglich der Annahme einer laminaren Naturkonvektionsströmung wird auf die Ausführungen in Kapitel 6.3.2.2 verwiesen.

In der Literatur existieren zahlreiche Veröffentlichungen, die das beschriebene Problem experimentell (z. B. Ho und Viskanta 1984, Gau und Viskanta 1986, Wolff und Viskanta 1988, Campbell und Koster 1994) oder numerisch (z. B. Webb und Viskanta 1986, Brent et al. 1988, Dantzig 1989, Lacroix 1992) untersuchen. Die durchgeführten Experimente unterscheiden sich dabei in der Wahl des Geometrieverhältnisses, der untersuchten Bereiche der relevanten Kennzahlen und der verwendeten Substanzen. Mangels experimenteller Daten über die Strömungskonfiguration ist ein direkter Vergleich mit dem Experiment dabei nur bezüglich des transienten Frontfortschritts möglich. Die Simulationsergebnisse zeigen zum Teil erhebliche, auch qualitative Abweichungen vom Experiment (Dantzig 1989, Hong und Liou 1998), was eine weitere Untersuchung des Problems rechtfertigt. Einen detaillierten Vergleich verschiedener numerischer Simulationen ermöglicht die Benchmarkstudie von Gobin und Le Quéré (1999a), die konvektionsdominiertes Aufschmelzen für Medien kleiner (Zinn, $Pr = 0.02$) und großer Prandtl-Zahlen (Paraffin, $Pr = 50$) untersucht.

Im folgenden wird eine zweiteilige numerische Studie des skizzierten Aufschmelzfalles vorgestellt. Im ersten Teil werden numerische Ergebnisse präsentiert, die einen direkten Vergleich mit experimentellen Daten aus einem Flüssigmetall-Experiment ermöglichen. Der Vergleich beschränkt sich dabei im Wesentlichen auf die Position der Schmelzfront. Im zweiten Teil werden Rechnungen aus der erwähnten Benchmarkstudie vorgestellt und mit den Simulationsergebnissen anderer Autoren verglichen. Diese Simulationen beinhalten auch Rechnungen für Medien hoher Prandtl-Zahl. Ferner wird versucht, die erhaltenen Ergebnisse mit Hilfe von theoretisch abgeleiteten Skalengesetzen zu verifizieren.

6.3.2.1 Nachrechnung des Schmelzexperiments von Campbell u. Koster (1994)

In der Literatur wird das Gallium-Experiment von Gau und Viskanta (1986) (nachfolgend als GV bezeichnet) sehr häufig zur Verifikation numerischer Codes herangezogen. Sie visualisierten die transiente Grenzflächenposition und -topologie mittels der Ausgießtechnik. Zu bestimmten Zeiten wird dabei das erschmolzene Gallium abgeschüttet und das verbliebene, feste Gallium vermessen und fotografiert. Diese Methode weist bekannte Schwachpunkte auf, die die Genauigkeit der erhaltenen Ergebnisse stark einschränkt. Zum einen ist das Ausgießen des flüssigen Galliums mit konvektiven Stoff- und Wärmeströmen verbunden, deren Wirkung auf die Grenzflächentopologie nicht bekannt ist. Zum anderen stellt das Ausgießen und Wiedereinfließen des Galliums einen Eingriff in das Zeitverhalten des thermodynamischen Systems dar. Die Wärmetransportvorgänge während der Zeitspanne der Frontvisualisierung sind nicht kontrollierbar. In einem Experiment, daß sich über eine längere Zeitspanne erstreckt und zahlreiche solcher Ausgieß- und Wiedereinfließvorgänge beinhaltet, kann eine maßgebliche Beeinflussung der Transienten des Systems (z. B. des Fortschreitens der Schmelzfront) durch diese Meßintervalle nicht ausgeschlossen werden.

Eine Echtzeit-Visualisierung der Schmelzfront mittels Röntgenstrahlen, die Campbell und Koster (1994) (nachfolgend als CK bezeichnet) in ihren Experimenten verwenden, stellt eine offensichtlich geeignetere Methode dar. Diese Visualisierungstechnik macht sich den Dichtesprung beim Phasenübergang zu Nutzen und erlaubt eine "online"-Beobachtung der

Grenzflächenbewegung, ohne die transienten Wärmeübergangsmechanismen des Systems zu stören. Die Stoffdaten und Kennzahlen in der numerischen Simulation wurden so gewählt, daß ein direkter Vergleich mit beiden Experimenten möglich ist.

Tabelle 6.4: Stoffwerte von Gallium und dimensionslose Kennzahlen.

Größe	Formelzeichen	Wert
Dichte	ρ	6095 kg/m^3
Schmelztemperatur	T_m	29.78°C
Wärmeausdehnungskoeffizient	β	$1.2 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$
Wärmeleitfähigkeit	λ	32 W/mK
Spez. Wärmekapazität	c_p	381.5 J/kgK
Latente Phasenschmelzwärme	L	80160 J/kg
Dynamische Viskosität	μ	$1.81 \cdot 10^{-3} \text{ kg/ms}$
Prandtl-Zahl	Pr	0.02
Stefan-Zahl	St	0.03
Rayleigh-Zahl ($a = 0.7$)	Ra	$6.0 \cdot 10^5$
Rayleigh-Zahl ($a = 0.3$)	Ra	$4.2 \cdot 10^4$

Sowohl GV als CK berichten von Problemen in Verbindung mit der experimentellen Realisierung der Randbedingungen. Idealerweise ist die Temperatur der beheizten Wand zum Zeitpunkt $t = 0$ sprunghaft auf $T = T_h$ zu erhöhen und dann für alle Zeiten $t > t_0$ auf dieser isothermen Temperatur zu halten. Im realen Experiment verlangsamten die thermische Masse der Wand, die Wärmeleitfähigkeit der Wand und die Wärmeleitfähigkeit des Galliums diesen Temperaturanstieg erheblich. Temperaturmessungen in GV zeigen, daß selbst nach einem Viertel der gesamten Versuchszeit die gewünschte Wandtemperatur noch nicht erreicht war. Ein Teil des Experiments wurde damit in Wirklichkeit mit einer geringeren als der angegebenen Ra-Zahl durchgeführt (Webb und Viskanta 1986). Auch die Isolation der Testzelle, d. h. die Realisierung adiabater horizontaler Wände, gestaltet sich im Experiment als schwierig. Wie sensitiv das System auf etwaige Wärmeverluste über horizontale Wände reagiert, wurde bis dato nicht näher untersucht. Ungeachtet dieser Problematik verwenden alle Autoren, die das angesprochene Problem numerisch nachrechnen, idealisierte thermische Randbedingungen an den angrenzenden Wänden.

In der vorliegenden Arbeit werden Berechnungen in Kavitäten mit zwei unterschiedlichen Geometrieverhältnissen ($A = 0.3$ und $A = 0.7$) präsentiert. Jeweils eine Rechnung (Rechnung A und C, siehe Tabelle 6.5) verwendet idealisierte isotherme und adiabate Ränder, zwei weitere Simulationen (Rechnung B und D) berücksichtigen Wärmeverluste über die horizontale Berandung der Kavität. Eine Simulation (Rechnung D) berücksichtigt zusätzlich die transiente Aufheizphase der beheizten vertikalen Wand. Die Rayleigh-Zahl wird jeweils mit der festen Temperaturdifferenz $T_h - T_c$ und der Höhe der Meßzelle als charakteristische Länge gebildet.

Tabelle 6.5: Thermische Randbedingungen und Rayleigh-Zahlen in den durchgeführten numerischen Simulationen.

Rechnung	A	Ra	Isolierende Wände	Leitende Wände
A	0.7	$6.0 \cdot 10^5$	adiabat	isotherm
B	0.7	$6.0 \cdot 10^5$	transiente WL	isotherm
C	0.3	$4.2 \cdot 10^4$	adiabat	isotherm
D	0.3	$4.2 \cdot 10^4$	transiente WL	trans.WL

Die Modellierung der transienten Wärmeleitung in den begrenzenden Wänden der Kavität (in Rechnung B und D) wurde unter Berücksichtigung des Aufbaus der Testzelle in CK durchgeführt. Die beheizte Wand des Systems wird darin mit einer molybdänbeschichteten Kupferplatte realisiert, die horizontalen Wände bestehen aus Plexiglas. Der detaillierte Aufbau der Testzelle kann CK entnommen werden. Abb. 6.13 zeigt das vereinfachte geometrische und numerische Modell, mit dem in Rechnung D versucht wird, die Wärmeübertragungscharakteristik der Testzelle zu simulieren. Die Modellierung geht von isothermen Bedingungen an der Außenseite der Wände aus und berücksichtigt neben der transienten Aufheizphase Wärmeleitung in Wandnormalen- und Wandtangentialrichtung. Die Diskretisierung der Wände erfolgt mit nur einer Volumenzelle normal zur Oberfläche der Wand.

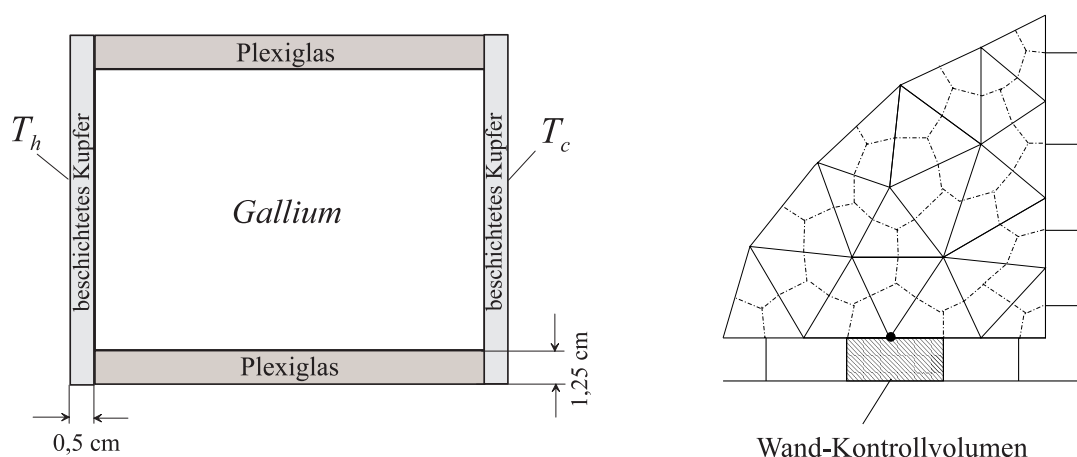


Abbildung 6.13: Modellierung realer thermischer Randbedingungen der Testzelle: Geometrisches und numerisches Modell.

Alle Berechnungen wurden auf einer IBM-RS/6000-595-Workstation durchgeführt. Die Gitterauflösung variierte zwischen ca. 500 Knoten zu Beginn der Rechnung bis hin zu ca. 10 000 Knoten nach einer Echtzeit von 19 min (für Rechnung A und B). Das vorliegende Problem mit sehr dünnen hydrodynamischen Grenzschichten ($Pr = 0.02$) erfordert eine Gitterauflösung im flüssigen Bereich, die zwei Größenordnungen höher als die im festen Bereich ist. Die Maschenweiten im festen Bereich werden mit zunehmender Entfernung von der Phasengrenze entsprechend einer $arctan$ -Funktion vergrößert (siehe Abb. 6.14). Somit ist eine kontinuierliche und dynamische Anpassung des numerischen Gitters bei Anwachsen der flüssigen Phase gewährleistet. Der Zeitschritt betrug konstant $\Delta t = 0.1$ s. Die erforderliche

Rechenzeit für einen Rechenlauf variierte zwischen 30 (Rechnung C) und 100 (Rechnung B) CPU-Stunden.

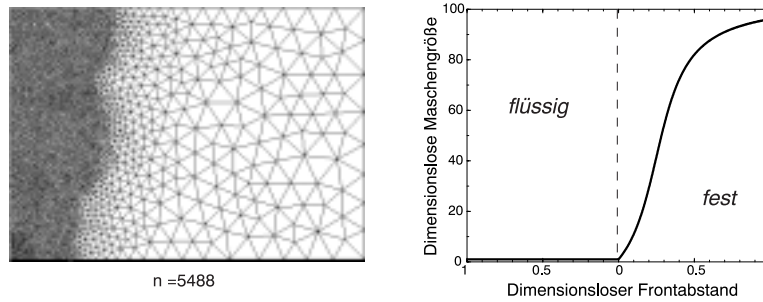


Abbildung 6.14: Typisches numerisches Gitter und gewählte Sollgrößenverteilungsfunktion in Abhängigkeit vom Frontabstand.

Das eingesetzte numerische *front-tracking*-Verfahren macht die Existenz einer dünnen, erschmolzenen Galliumschicht (Dicke s_0) zu Beginn der Rechnung erforderlich. Für sehr dünne Fluidschichten ist der Einfluß der Konvektion auf das Temperaturfeld vernachlässigbar, so daß die Anfangsbedingungen aus der eindimensionalen Wärmeleitlösung des Problems (Alexiades und Solomon 1993) abgeschätzt werden können.

Strömungskonfiguration in dünnen Galliumschichten

Abb. 6.15 zeigt zunächst Stromfelder zu frühen Zeiten aus den Simulationen A und C (idealisierte Randbedingungen), also in der anfänglich noch dünnen Fluidschicht. In Rechnung A tritt nach 30-40 s Aufschmelzzeit eine erste Strömungsinstabilität auf. Die anfängliche Strömungskonfiguration mit einer langgezogenen Konvektionsrolle wird instabil und durch eine Konfiguration mit vier Konvektionsrollen ersetzt. Weitere Instabilitäten reduzieren die Anzahl der Konvektionsrollen bei dicker werdender Fluidschicht, bis schließlich nur noch eine ausgeprägte Konvektionsrolle übrig bleibt (siehe Abb. 6.16). Deutlich erkennbar ist auch, wie sich das jeweilige Konvektionsmuster in der Grenzflächentopologie widerspiegelt. Für ein Geometrieverhältnis von $A = 0.3$ werden vergleichbare Instabilitäten in der Simulation nicht beobachtet. Stattdessen bleibt die einwirbelige Strömungskonfiguration kontinuierlich erhalten.

Mit zunehmender Dicke der Fluidschicht nimmt die Intensität der Strömung zu, was auch die stärker werdende Ausbeulung der Phasengrenze im oberen Bereich sowie die Form der Isothermen in Abb. 6.16 verdeutlichen. Für den hier nicht dargestellten Fall C ($A = 0.3$) ergaben sich vergleichbare Resultate.

Schon in einem relativ frühen Stadium des Aufschmelzprozesses setzt im Fall A (erstmal nach ca. 60 s erkennbar) außerdem eine hochfrequente, oszillatorische Instabilität ein, die für ein periodisches Anwachsen bzw. Abklingen der Konvektionsrolle(n) in einen relativ engen Amplitudenbereich sorgt. Die Amplituden der Oszillation nehmen mit wachsender Dicke der Fluidschicht zu. Diese Instabilität wird nur in einer filmischen Animation des

transienten Aufschmelzprozesses sichtbar. In Rechnung B tritt diese Instabilität ebenfalls auf, die Amplituden der periodischen Oszillation sind jedoch weniger ausgeprägt.

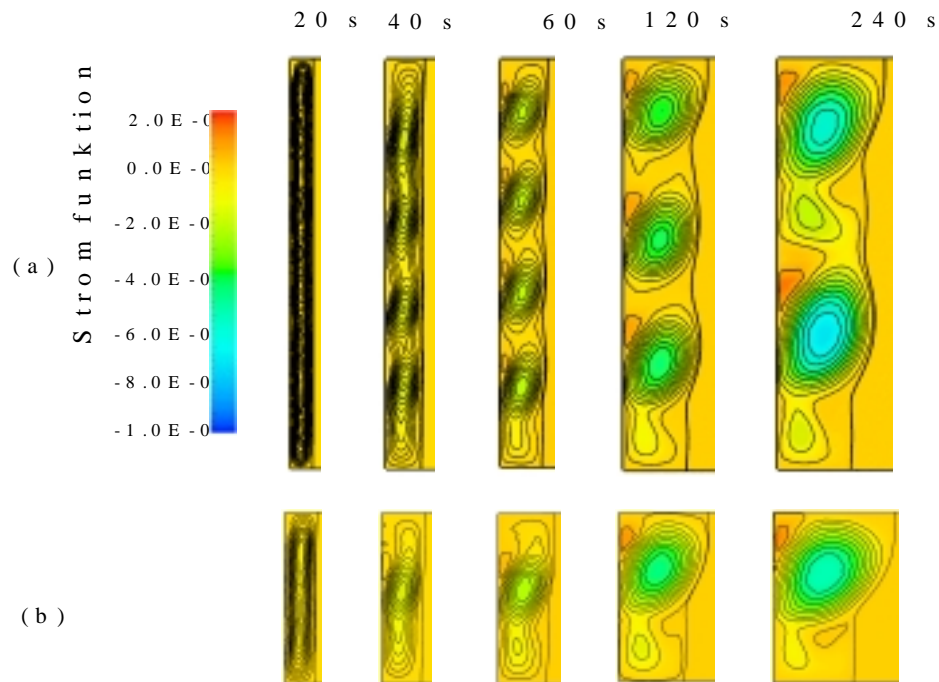


Abbildung 6.15: Stromfelder in dünnen Galliumschichten: (a) Rechnung A ($a = 0.7$), (b) Rechnung C ($a = 0.3$).

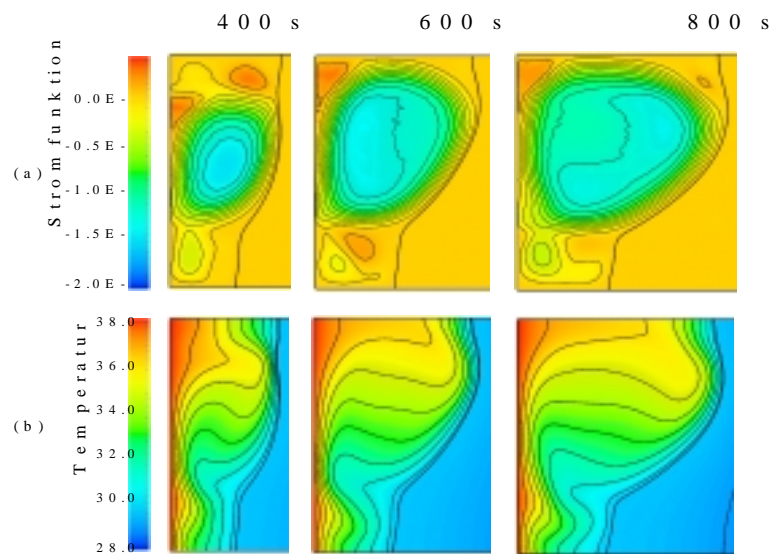


Abbildung 6.16: Simulationsergebnisse aus Rechnung A ($a = 0.7$): (a) Stromfelder, (b) Temperaturfelder.

Von den Autoren, die numerische Simulationen in einer Kavität mit $A = 0.7$ und $Ra = 6 \cdot 10^5$

durchführen, wird lediglich von Dantzig (1989) ein vielwirbeliges Strömungsmuster in der zu Beginn dünnen Galliumschicht vorausgesagt. In Übereinstimmung mit Rechnung A tritt die erste Instabilität nach ca. 30 s auf, wobei sich die Anzahl der gleichsinnig rotierenden Wirbel im frühen Stadium der Rechnung laufend ändert. Durch Vereinigung zweier Wirbel zu einem im oberen Bereich der Kavität wird die Anzahl der Wirbel mit wachsender Dicke der erschmolzenen Schicht allmählich reduziert. Andere Autoren (Brent et al. 1988, Lacroix 1992) hingegen berechnen auch für dieses Geometrieverhältnis der Kavität durchweg einwirbelige Strömungskonfigurationen. Der Vergleich mit experimentellen Daten schafft bezüglich des Auftretens solcher Instabilitäten keine abschließende Klarheit, da weder in GV noch in CK Strömungskonfigurationen visualisiert wurden. Während die in GV und CK gemessenen Grenzflächentopologien keine Anzeichen vielwirbeliger Strömungskonfigurationen beinhalten, lassen die von Wolff und Viskanta (1988) gemessenen Schmelzfronten eines Erstarrungsexperiments mit Zinn bei genauerer Betrachtung die Interpretation zu, daß die dort gemessenen Unregelmäßigkeiten in der Topologie der Schmelzfront zu späteren Zeiten ihre Ursache in solchen Strömungsinstabilitäten haben. Abb. 6.17 zeigt die Ergebnisse für zwei verschiedene Rayleigh-Zahlen.

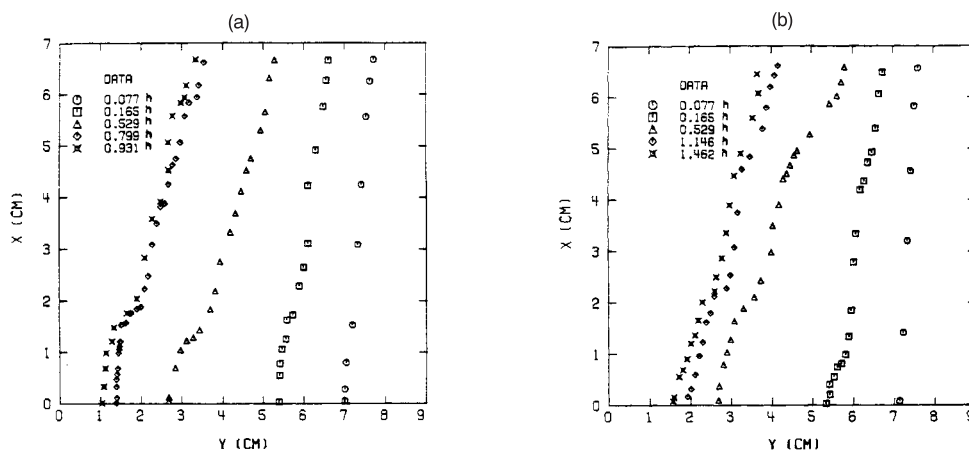


Abbildung 6.17: Gemessene Schmelzfronten im Zinn-Experiment ($Pr = 0.02$, $A = 0.75$, $St = 0.0269$) von Wolff und Viskanta (1988): (a) $Ra = 1.59 \cdot 10^5$, (b) $Ra = 3.01 \cdot 10^5$.

Aus Ergebnissen experimenteller und numerischer Studien von Naturkonvektionsströmungen in dünnen, vertikalen Spalten ist die Neigung von Medien kleiner Prandtl-Zahl zu Instabilitäten seit langem bekannt (Lee und Korpela 1983). Im Rahmen der Auswertung der Benchmarkstudie von Gobin und Le Quéré (1999a) im nächsten Unterkapitel wird die Existenz von Strömungsinstabilitäten in Medien geringer Prandtl-Zahl weiter diskutiert und versucht, deren Auftreten auch theoretisch zu untermauern.

Einfluß realer thermischer Randbedingungen

Der Vergleich der Simulationsergebnisse aus Rechnung A und B erlaubt eine Abschätzung der Sensitivität der Ergebnisse auf Wärmeverluste über die horizontalen Wände der Test-

zelle. Abb. 6.18 zeigt einen direkten Vergleich der erhaltenen Strömungskonfigurationen und Schmelzfrontpositionen mit und ohne Berücksichtigung von Wärmeverlusten. Bei der verwendeten Isolierung (1.25 cm Plexiglas, $\lambda = 0.2 \text{ W/mK}$) sind die Auswirkungen der Wärmeverluste eher gering. Lediglich in einem frühen Stadium der Simulation sind qualitative Unterschiede erkennbar. Die Wärmeverluste verschieben die Zeitpunkte, an denen die Strömungsinstabilitäten einsetzen, leicht und sorgen so zu bestimmten Vergleichszeitpunkten für unterschiedliche Strömungskonfigurationen. Die Auswirkungen auf den integralen Flüssigkeitsanteil in der Kavität sind auch zu späteren Zeitpunkten eher gering, wie der Vergleich der Frontpositionen verdeutlicht.

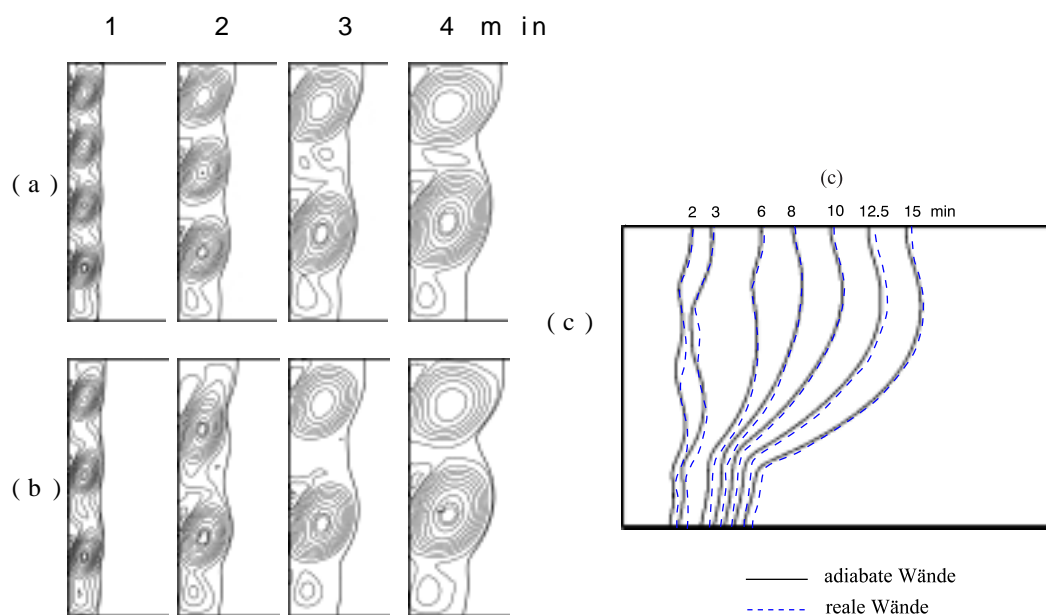


Abbildung 6.18: Vergleich von Simulationsergebnissen ohne (Rechnung A) und mit (Rechnung B) Berücksichtigung von Wärmeverlusten über adiabate Wände: (a) Stromfelder aus Rechnung A; (b) Stromfelder aus Rechnung B, (c) Frontpositionen.

Untersuchungen in einer Kavität mit $A = 0.3$ sollen den Einfluß der transienten Aufheizphase der warmen Wand verdeutlichen. Hinsichtlich der Strömungsstruktur brachte Rechnung D (mit realen Wänden) keine merklichen Unterschiede gegenüber Rechnung C (idealisierte Wände). Dies gilt jedoch nicht für die Geschwindigkeit der Schmelzfront. Rechnung D liefert ein deutlich langsamer Fortschreiten der Front, wie Abb. 6.19 beweist. Abb. 6.20 zeigt Temperaturplots am unteren und oberen Ende der Innenseite der beheizten Wand und erklärt diese Verzögerung im Aufschmelzprozeß. Die eigentliche Aufheizphase der Wand ist nach ca. 150 Sekunden beendet. Oben wird eine quasistationäre Wandtemperatur von ca. 37.8°C , unten von ca. 37.2°C erreicht (bei einer Wandaußentemperatur von 38.0°C). Dies entspricht einem Abfall der tatsächlichen Rayleigh-Zahl von durchschnittlich 5 %. Außerdem bleibt während der gesamten Simulation ein - wenn auch geringer - vertikaler Temperaturgradient entlang der Wand (in y-Richtung) erhalten.

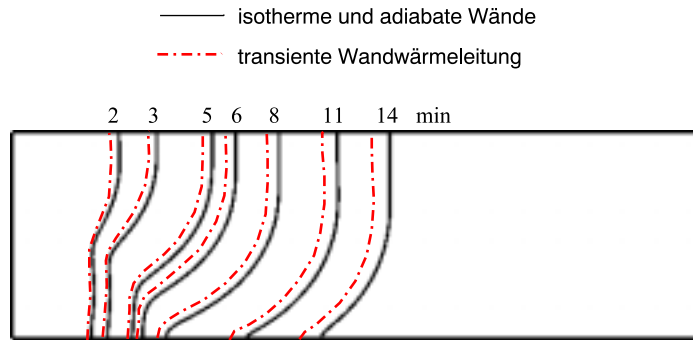


Abbildung 6.19: Vergleich berechneter Schmelzfronten mit und ohne Modellierung der warmen Wand (Rechnungen C und D, $A = 0.3$).

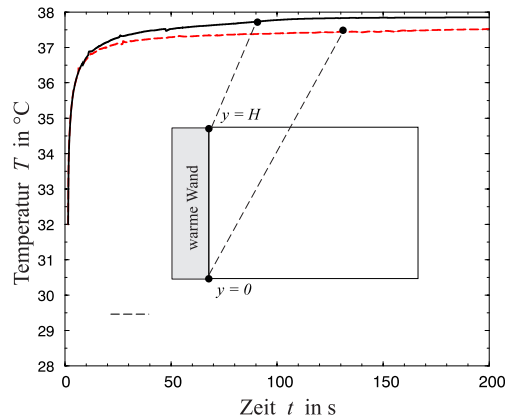


Abbildung 6.20: Transiente Aufheizphase der warmen Wand (Rechnung C, $A = 0.3$).

Transiente Frontpositionen: Vergleich Numerik/Experiment

Abb. 6.21 zeigt den direkten Vergleich der numerisch berechneten Frontposition aus Simulation B mit den Frontpositionen aus den beiden angesprochenen Experimenten. Die Abweichung der Simulation von den Experimenten, aber auch der Experimente untereinander ist jeweils für kleine Zeiten am größten. Hier zeigen sich größere Unterschiede in der Morphologie der Front. CK erklären ihre charakteristische Form der Front mit einer Dichteinversion des Galliums in der Nähe der Schmelztemperatur, die zu Beginn des Experiments zu einer Umkehr der Strömungsrichtung (entlang der warmen Wand abwärts gerichtet) im flüssigen Gallium führt. Folglich ist die Front im oberen Bereich der Testzelle im frühen Stadium des Experiments nach links gekrümmt. Da die Dichte jedoch vermutlich nur in einem engen Bereich oberhalb der Schmelztemperatur mit steigender Temperatur zunimmt, gewinnt die entlang der heißen Wand nach oben gerichtete Strömung mit der Zeit Überhand und der Effekt der Dichteanomalie ist nicht mehr sichtbar. Ist ein solcher Effekt anfänglich vorhanden, kann damit auch die deutlich langsamere Frontgeschwindigkeit in CK zu Beginn erklärt werden. Der in einem engen Temperaturbereich wirksame Abtriebseffekt

konkurriert mit dem Auftriebseffekt und vermindert die Konvektionsbewegung im flüssigen Gallium. Damit ist auch der konvektive Wärmetransport durch die Kavität eingeschränkt, was zu geringeren Aufschmelzraten führt.

Zu späteren Simulationszeiten zeigen die berechneten Schmelzfronten im Detail eine geringfügig bessere Übereinstimmung mit CK. So wird die von diesen Autoren bestimmte Richtungsänderung der Frontkrümmung im oberen Teil (Wendepunkt in der Grenzflächenkurve) insbesondere zum Zeitpunkt $t = 15$ min in der Simulation sichtbar.

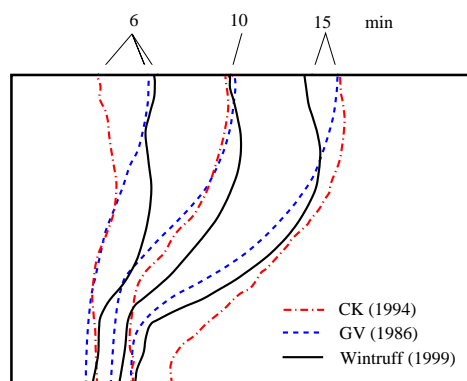


Abbildung 6.21: Vergleich mit experimentellen Schmelzfronten (Rechnung C, $A = 0.7$).

Die berechneten Phasengrenzen aus Simulation D ($A = 0.3$, reale therm. Randbedingungen, siehe Abb. 6.22) zeigen zu frühen Zeitpunkten trotz des im Vergleich zu Rechnung C ($A = 0.3$, idealisierte Ränder) verlangsamten Frontfortschritts ein deutlich schnelleres Aufschmelzen als in CK. Die Modellierung der transienten Aufheizphase bewirkt hier aber zumindest eine Annäherung der Simulation an das Experiment CK. Die Schmelzfronten zu den Zeiten $t = 3$ min und $t = 6$ min zeigen eine gute Übereinstimmung mit GV. Für größere Simulationszeiten wird die in GV gemessene Aufschmelzrate allerdings unterschätzt.

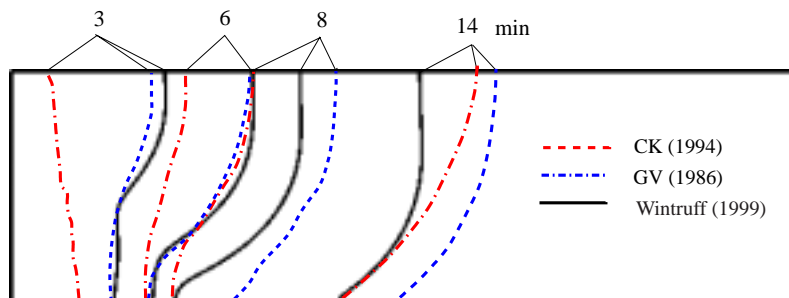


Abbildung 6.22: Vergleich mit experimentellen Schmelzfronten (Rechnung D, $A = 0.3$).

Die Abb. 6.21 und 6.22 bestätigen die auch von anderen Autoren festgestellten Schwierigkeiten, die experimentell ermittelten Schmelzfronten qualitativ und quantitativ richtig

wiederzugeben. Abschließend werden einige Gründe aufgelistet, die für Abweichungen zwischen Experiment und Numerik verantwortlich sein könnten:

- Experimentelle Realisierung von Rand- und Anfangsbedingungen.
Die durchgeführten Simulationen haben gezeigt, daß die reale Aufheizphase der warmen Wand den Aufschmelzprozeß beeinflußt. Die Sensitivität bezüglich Rand- und Anfangsbedingungen erklärt auch die zum Teil gravierenden Abweichungen der beiden Experimente untereinander. Unterschiedlich aufgebaute Testzellen haben unterschiedliche Wärmeübergangscharakteristiken und können damit auch nur unterschiedliche thermische Randbedingungen realisieren. Mit der verwendeten stark vereinfachten Modellierung der warmen Wand können die in der Realität vorhandenen Wärmetransportmechanismen in der molybdänbeschichteten Kupferplatte nur angenähert wiedergegeben werden. Eine Modellierung unter Berücksichtigung des exakten geometrischen und physikalischen Aufbaus der Wand ist erforderlich, um hier eine weitere Verbesserung zu erzielen.
- Nicht-Boussinesqsche Eigenschaften von Stoffwerten.
In der Simulation werden alle Temperaturabhängigkeiten von Stoffwerten (mit Ausnahme der Dichte im Auftriebsterm) vernachlässigt. Gegenwärtig liegt keine Stoffdatenbank für Gallium vor, die genauen Aufschluß über die Temperaturabhängigkeit in einem engen Bereich um die Schmelztemperatur gibt und damit eine Simulation unter Berücksichtigung dieser Abhängigkeiten ermöglicht. Deshalb bleibt auch die Frage nach der von CK vermuteten Dichteinversion von Gallium oberhalb der Schmelztemperatur unbeantwortet.
- Verunreinigungen, Inhomogenitäten und Anisotropie von Stoffwerten.
Neben Verunreinigungen, die im realen Experiment die Wärmeübertragungseigenschaften beeinflussen können, ist hier besonders die bekannte Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit von Gallium im festen Zustand zu nennen. Um diese Effekte so klein wie möglich zu halten, ist im Experiment ein möglich gleichmäßiges und feinkristallines Gefüge zu realisieren.
- Reale Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht.
Reale Stoffe zeigen beim Phasenübergang oftmals ausgeprägtes Nichtgleichgewichtsverhalten in Form von Überhitzungs- oder Unterkühlungseffekten beim Phasenübergang. Dieses Verhalten ist in den molekularen Umstrukturierungseffekten beim Phasenübergang begründet. Detaillierte Untersuchungen zum Werkstoff Gallium liegen nicht vor.
- Dreidimensionale Effekte im Experiment.
Das reale Experiment wurde in einer endlichen dreidimensionalen Kavität mit vier vertikalen Wänden durchgeführt. Nach Oertel (1982) sind Konvektionsströmungen in Kavitäten immer dreidimensional, weil die Existenz vertikaler Wände zu lokalen Rückstromgebieten in den Ecken der Kavität führt. Rückwirkungen auf die in der mittleren Meßebeane als zweidimensional betrachtete Strömung können zumindest nicht ausgeschlossen werden.

6.3.2.2 Ergebnisse der Benchmarkstudie von Gobin u. Le Quéré (1999)

Die Benchmarkstudie von Gobin und Le Quéré (1999a) untersucht den in Abb. 6.12 skizzierten Fall des konvektionsdominierten Aufschmelzens eines Reinstoffes in einer seitlich beheizten Kavität mit adiabaten horizontalen Rändern. Zur weiteren Vereinfachung wird die Temperatur der rechten Wand für alle Zeiten auf Schmelztemperatur gehalten, so daß die feste Phase komplett isotherm ist.

Nachdem in einer ersten Ausschreibung zunächst nur französische Forschungszentren zur Teilnahme aufgefordert waren, wurde das Benchmarkproblem 1999 in einer zweiten Ausschreibung sowohl im Internet als auch in einschlägigen Fachzeitschriften publiziert und so einer internationalen Forschergemeinde zugänglich gemacht. Die Auswertung der Ergebnisse der ersten Ausschreibung mit insgesamt 10 Teilnehmern wurde in Gobin und Le Quéré (1999a) veröffentlicht und gab Anlaß zu einer weiterführenden Untersuchung der Problematik. Durch die zweite Ausschreibung erweiterte sich die Anzahl der Teilnehmer auf 13. Eine detaillierte Darstellung und Diskussion dieser Ergebnisse findet sich in Gobin und Le Quéré (1999b).

Konkret beinhaltet die Benchmarkstudie vier verschiedene Fälle mit den in Tab. 6.6 genannten Kennzahlen:

Tabelle 6.6: Kennzahlen der untersuchten Benchmarkfälle.

Testfall	A	St	Pr	Ra
1	1.0	0.01	0.02	$2.5 \cdot 10^4$
2	1.0	0.01	0.02	$2.5 \cdot 10^5$
3	1.0	0.1	50	$1 \cdot 10^7$
4	1.0	0.1	50	$1 \cdot 10^8$

Neben der Zeithistorie der integralen Größen Flüssigkeitsanteil und mittlere Nusselt-Zahl (entlang der warmen Wand) werden lokale Größen wie Strom- und Temperaturfelder, Frontposition und lokale Nusselt-Zahlen jeweils zu vier dimensionslosen Zeiten

$$\theta_i = St \cdot Fo = \frac{c_p \Delta T}{L} \cdot \frac{\kappa t_i}{H^2} \quad i = 1..4 \quad (6.8)$$

verglichen. Die den Fällen 1 und 2 (kleine Prandtl-Zahl) zu Grunde liegenden Stoffdaten entsprechen denen von Zinn, Fälle 3 und 4 (hohe Prandtl-Zahl) repräsentieren den Aufschmelzvorgang in einem Paraffin. Die numerischen Simulationen wurden unter Berücksichtigung der auf Seite 88 aufgeführten Vereinfachungen durchgeführt. Die sich im flüssigen Bereich ausbildende Naturkonvektionsströmung wird zu jedem Zeitpunkt als zweidimensional und laminar betrachtet.

Diskussion der Annahme laminarer Strömung

Zahlreiche Veröffentlichungen beschäftigen sich mit der Transition vom laminaren zum turbulenten Strömungszustand in seitlich beheizten Kavitäten mit adiabaten horizontalen

Rändern. Untersuchungen mit Luft ($Pr = 0.71$) zeigen, daß für Medien kleiner Prandtl-Zahlen die Transition vom laminaren zum turbulenten Strömungszustand zunächst über einen periodischen (eine ausgezeichnete Frequenz der Schwankungsbewegung), dann über einen quasi-periodischen (diskretes Frequenzspektrum) Strömungszustand führt (Paolucci und Chenoweth 1989, Janssen und Henkes 1995). Neben der Prandtl-Zahl hat dabei auch das Geometrieverhältnis der Kavität Einfluß auf die bei der kritische Rayleigh-Zahl einsetzende Instabilität. Für Geometrieverhältnisse $H/B \geq 3$ ist die primäre Instabilität eine Grenzschichtinstabilität an der vertikalen Wand, während für kleinere Geometrieverhältnisse ($0.5 < H/B < 3$) zuerst eine Welleninstabilität vom Typ Kelvin-Helmholtz auftritt, die von den abströmenden Ecken der Kavität ausgeht (Paolucci und Chenoweth 1989, Le Quéré und Alziary de Roquefort 1985). Bei der Frage nach der Größe der kritischen Rayleigh-Zahl, bei der die primäre Instabilität einsetzt, ist zwischen Instabilität gegenüber zweidimensionalen und dreidimensionalen Störungen zu unterscheiden. Henkes und Le Quéré (1996) zeigen, daß in einer quadratischen Kavität dreidimensionale Störungen zuerst angefacht werden. Mit Hilfe einer dreidimensionalen Stabilitätsanalyse errechnen sie für die Stabilität gegen zweidimensionale Störungen eine kritische Rayleigh-Zahl in der Größenordnung von 10^8 , für die Stabilität gegen dreidimensionale Störungen in der Größenordnung von 10^7 . Die in den Benchmarkfällen 1 und 2 (kleine Prandtl-Zahlen) verwendeten Rayleigh-Zahlen (gebildet mit der festen Höhe der Kavität) liegen um einige Größenordnungen unter den genannten kritischen Rayleigh-Zahlen, so daß die Annahme einer zweidimensionalen laminaren Strömung hier gerechtfertigt ist.

Janssen und Henkes (1995) sagen für Fluide größerer Prandtl-Zahl ($2 < Pr < 7$) einen plötzlichen Übergang vom laminaren zum chaotischen Zustand voraus, der nicht (wie im Falle kleinerer Pr-Zahl) über oszillatorische Strömungszustände mit periodischen Schwankungsbewegungen führt. Gleichzeitig berechnen die Autoren (mit einer 2D-Stabilitätsanalyse) eine um zwei Größenordnungen höhere kritische Rayleigh-Zahl als für kleinerer Prandtl-Zahlen. Gadgil und Gobin (1984) bestätigen diese Aussage unter Verweis auf eine experimentelle Studie von Nannsteel und Greif (1981) und nennen eine kritische Rayleigh-Zahl von 10^{10} für den Beginn der Transition zur Turbulenz für ein Phasenwechselmaterial mit $Pr = 50$. Überträgt man die von Henkes und Le Quéré (1996) in Luft gefundene Stabilitätsgrenze gegen dreidimensionale Störungen von ca. 10^7 auf Paraffin (und ignoriert den zu erwartenden Anstieg der kritischen Rayleigh-Zahl bei wachsender Prandtl-Zahl), befinden sich die Rayleigh-Zahlen der Benchmarkfälle 3 und 4 (hohe Prandtl-Zahl) im Transitionsbereich. Allerdings gilt zu beachten, daß im Benchmarkproblem die Rayleigh-Zahl mit der fixen Höhe der Kavität gebildet ist. Eine mit der Breite des flüssigen Bereiches gebildete Rayleigh-Zahl liegt während der gesamten Simulationszeit unterhalb der genannten kritischen Rayleigh-Zahl von 10^7 und rechtfertigt somit auch in diesen Fällen die Annahme laminarer Strömung.

Die in Abb. 6.24 bis 6.29 dargestellten Ergebnisse wurden mit dem in dieser Arbeit vorgestellten adaptiven *front-tracking*-Verfahren berechnet. Während jeder Rechnung nahm dabei die Anzahl der Gitterpunkte mit steigendem Flüssigkeitsanteil kontinuierlich zu. Die Verteilung der Gitterknoten im Rechengebiet basiert auf einer ähnlichen Verteilungsfunktion wie in Abb. 6.14b. Tabelle 6.7 nennt für alle 4 Fälle die Anzahl an Knotenpunkten zu vier ausgewählten Zeitpunkten der transienten Simulation.

Tabelle 6.7: Anzahl von Gitterknoten zu bestimmten Zeitpunkten.

Testfall	$\theta_1 = 0.004$	$\theta_2 = 0.01$	$\theta_3 = 0.04$	$\theta_4 = 0.1$
1	2039	2886	5253	4408
2	2068	2934	5828	7285
Testfall	$\theta_1 = 0.0005$	$\theta_2 = 0.002$	$\theta_3 = 0.006$	$\theta_4 = 0.01$
3	1101	1298	1406	1899
4	1114	1842	2716	3157

Abb. 6.23 zeigt am Beispiel der Fälle 2 und 4 die dynamisch adaptierten Gitter zu den in Tab. 6.7 genannten Zeiten.

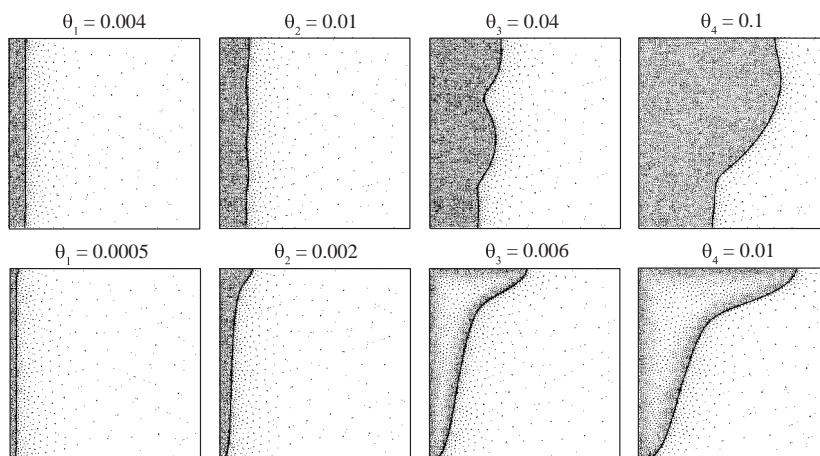


Abbildung 6.23: Numerische Gitter der Testfälle 2 und 4 zu vier ausgewählten Zeiten.

Die zeitliche Auflösung wurde im Laufe jeder Simulation ebenfalls variiert. Die Berechnungen der Fälle mit kleiner Prandtl-Zahl erforderten zwar eine höhere räumliche Auflösung, erlaubten aber die Verwendung eines größeren Zeitschritts. Der maximale dimensionslose Zeitschritt betrug im Fall 2 $4 \cdot 10^{-6}$, im Fall 4 nur $8 \cdot 10^{-7}$. Aufgrund der wesentlich höheren Anzahl erforderlicher Zeitschritte wurde für Rechnung D die bei weitem größte CPU-Zeit benötigt (ca. 250 CPU-Stunden auf einer IBM RS/6000-595 mit 512 MB RAM).

Auch hier erforderte das verwendete numerische Verfahren als Anfangslösung bereits eine dünne, erschmolzene Schicht. Bei einer vorgegebenen dimensionslosen Schichtdicke von $D = 0.033$ (Fall 1 u. 2) bzw. $D = 0.015$ (Fall 3 und 4) berechnet sich die zum Aufschmelzen dieser Schicht erforderliche dimensionslose Anfangszeit aus der analytischen Lösung des Wärmeleitproblems (Alexiades und Solomon 1993) mit $\theta_0 = 5.57 \cdot 10^{-5}$ (Fall 1 und 2) bzw. $\theta_0 = 1.44 \cdot 10^{-4}$ (Fall 3 und 4). Das Temperaturfeld wird ebenfalls mit Hilfe der analytischen Lösung initialisiert. Untersuchungen anderer Autoren zeigen, daß die Lösungen insensitiv auf die Dicke der anfänglich erschmolzenen Fluidschicht reagiert, sofern die mit der anfänglichen Schichtdicke gebildete Rayleigh-Zahl Ra_0 (für große Prandtl-Zahlen) einen Wert von $Ra_{lim} = 10^4$ nicht überschreitet (Gadgil und Gobin 1984). Im Fall 4 der Benchmarkstudie

berechnet sich mit der oben erwähnten Schichtdicke ein Wert von $Ra_0 = 337$.

Präsentation der eigenen Ergebnisse

In den Abb. 6.24 und 6.25 sind die mit dem in dieser Arbeit vorgestellten *front-tracking*-Verfahren erzielten Ergebnisse der Fälle 1 und 2 ($Pr = 0.02$) abgebildet. Im Fall 1 zeigen die Bilder der Stromfunktion zu frühen Zeiten eine Strömungskonfiguration mit einer langgezogenen Konvektionsrolle. Auch zu späteren Zeiten bleibt eine Struktur mit einer dominanten Konvektionszelle erhalten, wobei sich das Zentrum dieser Zelle nach oben verschiebt. Bei einer moderaten Rayleigh-Zahl von $Ra = 2.5 \cdot 10^4$ hat die Konvektionsströmung nur mäßige Auswirkungen auf Frontpositionen, Nusselt-Zahlen und Aufschmelzrate.

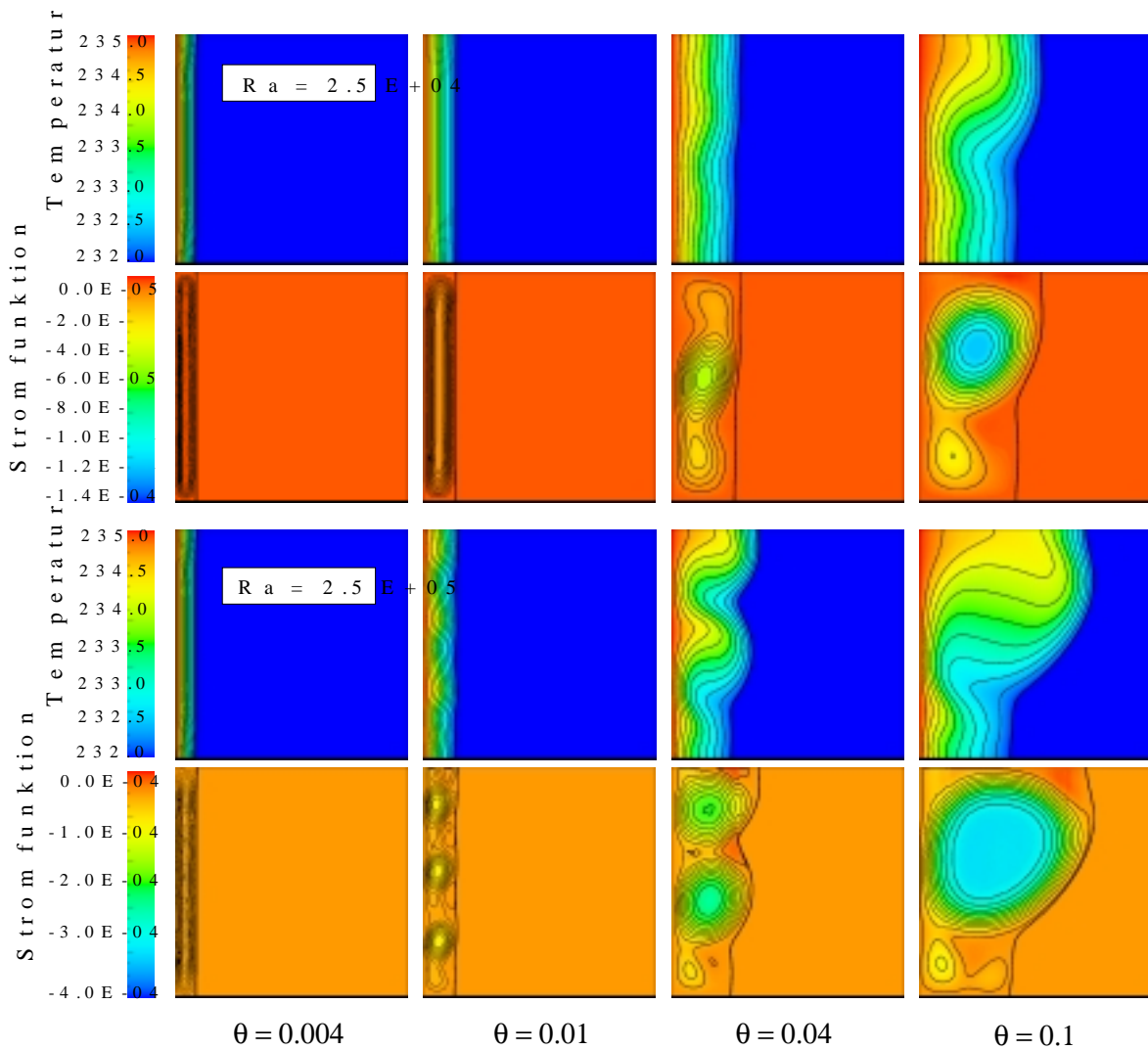


Abbildung 6.24: Ergebnisse der Benchmarkfälle 1 u. 2 ($Pr = 0.02$): Strom- und Temperaturfelder zu ausgewählten Zeiten.

Die Entwicklung der Strömungsstruktur im Benchmarkfall 2 zeigt Ergebnisse, die qualitativ den Ergebnissen aus Kapitel 6.3.2.1 entsprechen. Die dort beobachteten Strömungsin-

stabilitäten treten bei einer Rayleigh-Zahl von $2.5 \cdot 10^5$ und sehr ähnlichen Prandtl- und Stefan-Zahlen auch hier auf. Anhand der Kurve der mittleren Nusselt-Zahl über der Zeit (Abb. 6.25d) lassen sich die Zeitpunkte der Strömungsumstrukturierungen im Fall 2 festmachen. So schlägt zum Zeitpunkt $\theta_{umb} = 0.015$ die Konfiguration mit drei Rollen in eine Konfiguration mit zwei Rollen um. Unmittelbar nach dem Zeitpunkt $\theta_3 = 0.04$ erfolgt die Umbildung in eine Strömungsstruktur mit nur einer ausgeprägten Konvektionsrolle. Der zeitliche Verlauf der Strömungskonfiguration spiegelt sich nicht nur in der Topologie der Schmelzfront (siehe Abb.6.25a), sondern auch im Verlauf der lokalen Nusselt-Zahlen entlang der warmen Wand deutlich wider. Die Anzahl ausgeprägter Maxima in den Kurven in Abb. 6.25b korrespondiert zu jedem Zeitpunkt mit der Anzahl der gerade vorhandenen Konvektionswalzen.

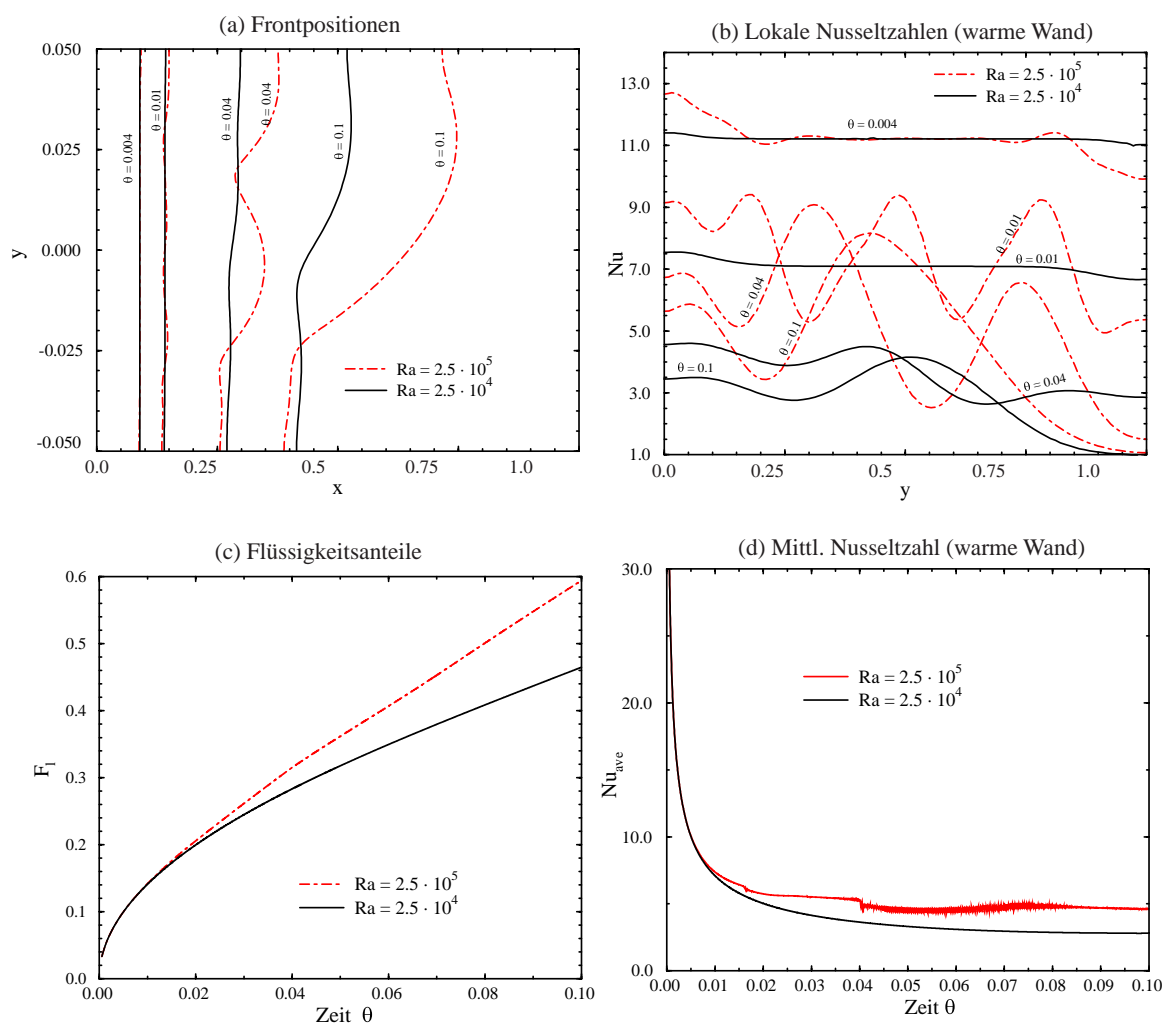


Abbildung 6.25: Ergebnisse der Benchmarkfälle 1 u. 2: (a) Frontpositionen, (b) lokale Nusselt-Zahlen entlang der warmen Wand, (c) zeitlicher Verlauf des integralen Flüssigkeitsanteils, (d) zeitlicher Verlauf der mittleren Nusselt-Zahl.

Ein vergrößerter Ausschnitt aus Abb. 6.25b offenbart in Abb. 6.26 außerdem die oszillatorische Instabilität der Strömung, die für hochfrequente Pulsationen im Strom- und Temperaturfeld sorgt. Diese Instabilität entsteht kurz vor der letzten Strömungsumbildung bei $\theta_3 \approx 0.04$. Nach einem kurzen Stadium, das durch ein Anwachsen der Störungen gekennzeichnet ist, stellt sich ein oszillatorischer Zustand mit annähernd konstanter Schwingungsamplitude ein. Für Zeiten $\theta > 0.07$ (hier nicht dargestellt) wird eine gewisse Stabilisierung der Strömung mit wieder abnehmender Schwingungsamplitude beobachtet.

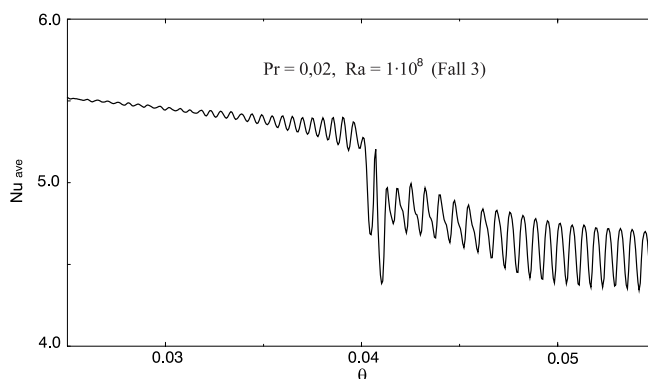


Abbildung 6.26: Entstehung der oszillatorischen Strömungsinstabilität im Benchmarkfall 2 ($Pr = 0.02$, $Ra = 2.5 \cdot 10^5$).

Sowohl diese oszillatorische Instabilität als auch die primäre Instabilität, die zu einer multizellularen Strömungskonfiguration führt, werden für den Benchmarkfall 2 ($Pr = 0.02$, $Ra = 2.5 \cdot 10^5$) auch von Le Quéré und Gobin (1999) vorausgesagt und näher untersucht. Mittels einer einfachen Skalenanalyse gelingt es den Autoren dabei, den Zeitpunkt des Einsetzens der primären Instabilität vorherzubestimmen. Unter der Annahme eines rein konduktiven, quasistationären Temperaturfeldes werden zunächst einfache Proportionalitäten für die zeitabhängige Dicke der flüssigen Phase und die maximale Vertikalgeschwindigkeit im Spalt abgeleitet:

$$\delta \sim \sqrt{2 St \kappa t} ; \quad v_{max} \sim \frac{St g \beta \Delta T t}{Pr} . \quad (6.9)$$

Mit den Beziehungen (6.9) ergibt sich für eine mit der maximal Vertikalgeschwindigkeit und der momentanen Schichtdicke gebildete Reynolds-Zahl im Spalt die Abhängigkeit

$$Re_\delta = \frac{v_{max} \delta}{\nu} = C \cdot Gr \left(\frac{t}{H^2 / \kappa St} \right)^{\frac{3}{2}} , \quad (6.10)$$

worin die Grashof-Zahl Gr mit der Schichthöhe H gebildet wird ($Gr = Ra/Pr$). Le Quéré und Gobin (1999) bestimmen mit Hilfe ihrer numerischen Ergebnisse für die Fälle 2 und 4 den Proportionalitätsfaktor C zu 0.02. Mittels der analytischen Lösung für die maximale Vertikalgeschwindigkeit im ortsfesten vertikalen Spalt bei stationärer Wärmeleitung läßt sich außerdem der Zusammenhang

$$Re_\delta = \frac{Gr_\delta}{125} \quad (6.11)$$

zwischen dieser Reynolds-Zahl und einer adäquaten Grashof-Zahl im Spalt formulieren. Die Instabilität setzt dann ein, wenn die zeitabhängige Grashof-Zahl Gr_δ gleich der kritischen Grashof-Zahl Gr_c ist. Mit den Gl. (6.10) und (6.11) ergibt sich für diese kritische Zeit die Abhängigkeit

$$t_c = 0.5 \cdot \frac{H^2}{\kappa St} \cdot \left(\frac{Gr_c}{Gr} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (6.12)$$

Das kritische Geometrieverhältnis A_c beträgt zu diesem Zeitpunkt

$$A_c = \frac{H}{\delta_c} = \left(\frac{Gr}{Gr_c} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (6.13)$$

Für eine Prandtl-Zahl von 0.02 ergibt sich für die Wärmeleitlösung im vertikalen Spalt eine kritische Grashof-Zahl von 8000 (Bergholz 1978). Mit den entsprechenden Kennzahlen berechnen sich daraus eine dimensionslose kritische Zeit $\theta_c = 0.004$ bei einem kritischen Geometrieverhältnis $A_c = 11$ für das Einsetzen der Strömungsinstabilität im Benchmarkfall 2. Bild 6.27 zeigt Momentaufnahmen der Stromfunktion im Fall 2 in einem eng begrenzten Zeitfenster um θ_c . Das Zusammenbrechen der einwirbeligen Strömungskonfiguration zu Gunsten einer Konfiguration mit vier Rollen ist deutlich sichtbar. Zeitpunkt und Geometrieverhältnis beim Auftreten der Instabilität stimmen sehr gut mit den mit Hilfe der Skalenanalyse vorhergesagten Werten überein.

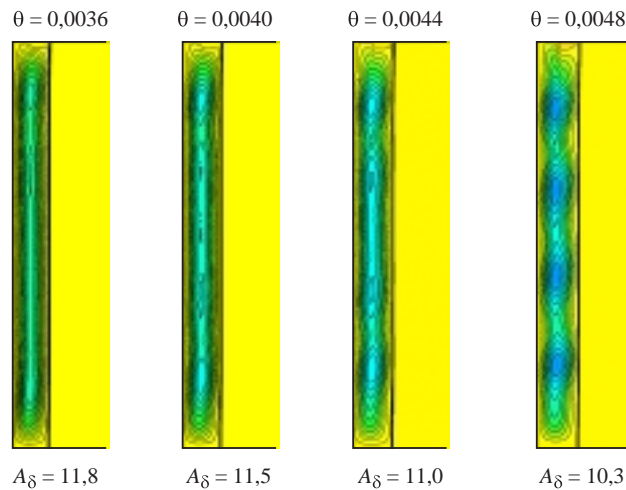


Abbildung 6.27: Einsetzen der primären Strömungsinstabilität im Benchmarkfall 2 ($Pr = 0.02$, $Ra = 2.5 \cdot 10^5$).

Im Benchmarkfall 1 ($Pr = 0.02$, $Ra = 2.5 \cdot 10^4$) wird nach obiger Skalentheorie zum Zeitpunkt $\theta_c = 0.02$ ($A_c = 5$) das Einsetzen der Instabilität erwartet. In der numerischen Simulation wird allerdings zu keiner Zeit ein vielwirbeliges Strömungsmuster beobachtet. Dies erklärt sich in der Tatsache, daß zu diesem späten Zeitpunkt der Simulation bereits eine deutliche Beeinflussung des Temperaturfeldes durch die Strömung vorhanden ist. Außerdem sind starke Verkrümmungen der Phasengrenze erkennbar, so daß weder die Voraussetzung der Parallelität der erschmolzenen Geometrie noch die eines konduktiven Temperaturfeldes erfüllt sind und die Skalentheorie damit ihren Gültigkeitsbereich verlassen hat.

Die Abb. 6.28 und 6.29 zeigen Ergebnisse für die Benchmarkfälle 3 und 4 ($Pr = 50$). Im Fall 4 (bei einer hohen Rayleigh-Zahl von 10^8) ist vor allem zu späteren Zeiten der ausgeprägte Grenzschichtcharakter des Temperaturfeldes zu sehen. Im Vergleich zu Fall 3 sorgt die intensivere Konvektionsströmung nicht nur für eine Zunahme der integralen Aufschmelzrate, sondern auch für eine wesentlich stärkere Aufweitung des flüssigen Bereichs in den oberen Regionen der Kavität. In beiden Fällen bleibt über den gesamten Zeitraum eine Strömungskonfiguration mit einer langgezogenen Konvektionsrolle erhalten. Strömungsinstabilitäten wie im Fall 2 werden hier nicht beobachtet. Bereits zu sehr frühen Zeiten tritt eine ausgeprägte horizontale Temperaturschichtung mit vertikalen Grenzschichten auf, was gleichzeitig die Anwendung der zitierten Skalentheorie (Le Quéré und Gobin 1999) verbietet.

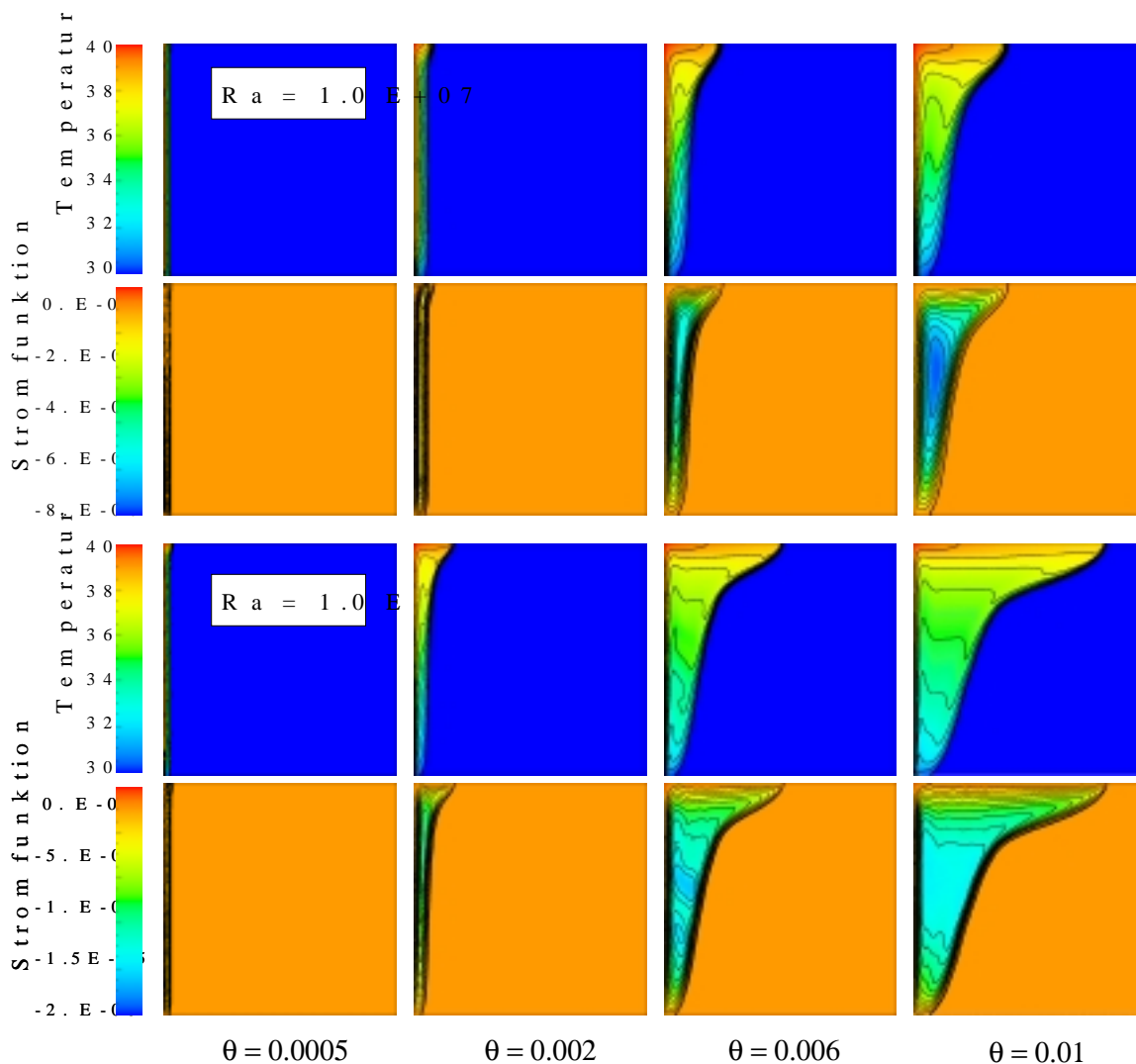


Abbildung 6.28: Ergebnisse der Benchmarkfälle 3 u. 4: Strom- und Temperaturfelder zu ausgewählten Zeiten.

Die sehr dünnen thermischen Grenzschichten erschweren im Fall 4 die numerische Handhabung. Die in Abb. 6.29d sichtbaren Oszillationen der mittleren Nusselt-Zahl im Fall 4 sind auf eine zu geringe Grenzschichtauflösung zurückzuführen. Lokale Gitteradaptionen und -

interpolationen innerhalb der Grenzschicht bedingen leichte unphysikalische Schwankungen im zeitlichen Verlauf der Nusselt-Zahl.

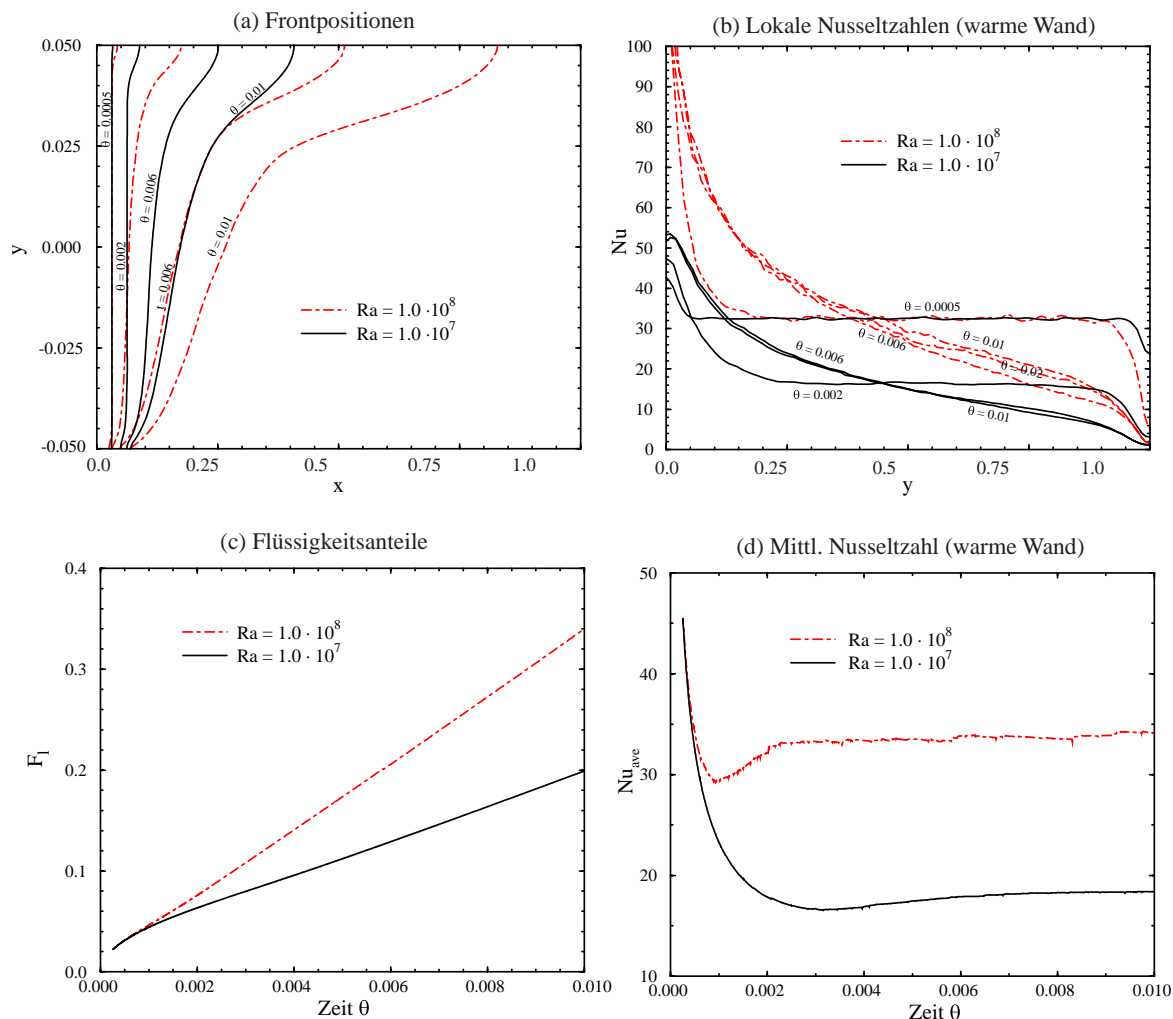


Abbildung 6.29: Ergebnisse der Benchmarkfälle 3 und 4 ($Pr = 50$): (a) Frontpositionen, (b) lokale Nusselt-Zahlen entlang der warmen Wand, (c) zeitl. Verlauf des integralen Flüssigkeitsanteils, (d) zeitl. Verlauf der mittleren Nusselt-Zahl.

Vergleich mit theoretischen Korrelationen

Jany und Bejan stellten 1988 eine theoretische Skalenanalyse vor, die zeigt, daß sich die verschiedenen Zeitskalen und Wärmeübertragungsraten des Problems als Potenzgesetze in Abhängigkeit der Rayleigh-Zahl ausdrücken lassen. Die Ergebnisse der Skalentheorie gelten zunächst nur für Prandtl-Zahlen > 1 . Die Theorie kann jedoch auf den Bereich kleiner Prandtl-Zahlen ausgedehnt werden, wenn in den nachfolgend aufgeführten Gesetzmäßigkeiten Pr jeweils durch das Produkt $RaPr$ ersetzt wird (Jany und Bejan 1988).

Ihre Untersuchungen stützen sich auf die Einteilung des Aufschmelzprozesses in vier zeitlich aufeinanderfolgende Regime:

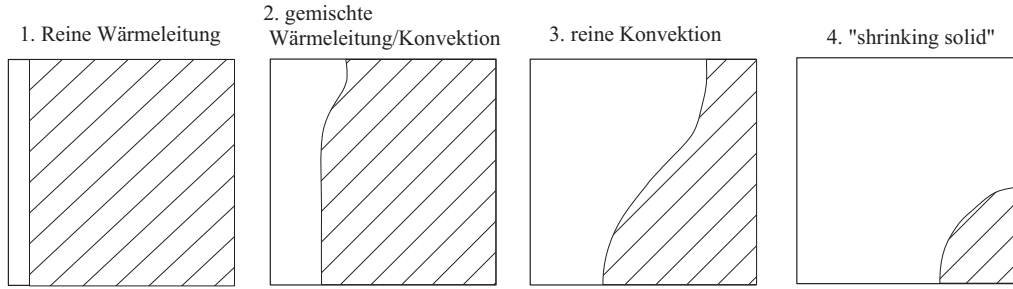


Abbildung 6.30: Unterteilung des Aufschmelzprozesses in 4 Regime (Jany und Bejan 1988).

Im Wärmeleitregime wächst die Dicke s der flüssigen Phase in Konsistenz mit der Neumannschen Lösung des Stefanproblems (Alexiades und Solomon 1993) gemäß $s \sim \theta^{1/2}$. Für die Nusselt-Zahl gilt entsprechend $Nu \sim \theta^{-1/2}$. Im gemischten Wärmeleitungs-Konvektionsregime existiert ein konduktiver und ein konvektiver Beitrag zum Wärmetransport, der durch $Nu \sim \theta^{-1/2} + Ra\theta^{3/2}$ wiedergegeben wird. Die Differentiation $\partial Nu/\partial\theta$ liefert zum Zeitpunkt θ_{min} ein Minimum der Nusselt-Zahl mit $Nu_{min} \sim Ra^{1/4}$ und $\theta_{min} \sim Ra^{-1/2}$. Im Konvektionsregime stellt sich ein quasistationärer Aufschmelzzustand mit vollständig ausgebildeter thermischer Grenzschicht ein. Die Nusselt-Zahl nähert sich asymptotisch einem Wert Nu_{∞} . Die Nusselt-Zahl Nu_{∞} genügt dem zeitunabhängigen Grenzschicht-Skalengesetz $Nu_{\infty} \sim Ra^{1/4}$.

Zur Verifikation der Skalengesetze führen Jany und Bejan (1988) numerische Berechnungen für verschiedene Rayleigh-Zahlen durch (jeweils mit $Pr = 50$, $St = 0.1$ und $A = 1.0$). In Abb. 6.31 sind neben diesen Ergebnissen auch die Ergebnisse der hier vorgestellten Simulationen eingetragen. Für alle Berechnungen ergeben sich annähernd konstante Faktoren für die skalierten Größen $Nu_{min}/Ra^{1/4}$, $\theta_{min}/Ra^{-1/2}$ und $Nu_{\infty}/Ra^{1/4}$, was für die Gültigkeit der Skalengesetze im untersuchten Parameterbereich spricht.

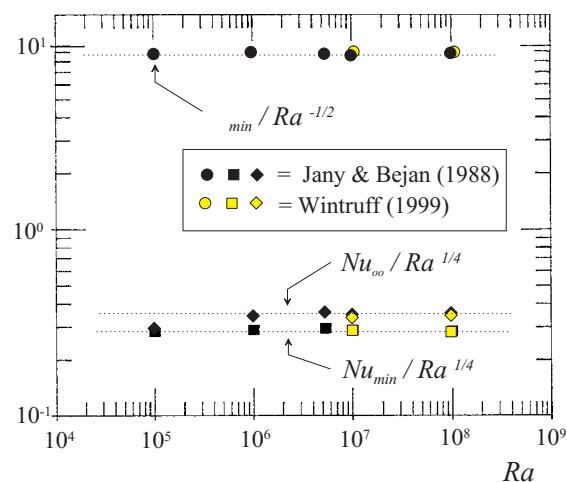


Abbildung 6.31: Numerische Verifikation der Skalengesetze von Jany und Bejan (1988) für Nu_{min} , Θ_{min} und Nu_{∞} .

Basierend auf den genannten Skalengesetzen lassen sich Korrelationen für die zeitliche Entwicklung der Nusselt-Zahl $Nu(\theta)$ und des integralen Flüssigkeitsanteils $F_l(\theta)$ während der ersten drei Regime aufstellen. Für den Bereich großer Prandtl-Zahlen geben Jany und Bejan (1988) die Beziehungen

$$Nu(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\theta}} + \frac{0.35Ra^{1/4} - 1/\sqrt{2\theta}}{\sqrt{1 + \frac{1}{(0.0175Ra^{3/4}\theta^{3/2})^{2.0}}}} \quad \text{und} \quad (6.14)$$

$$F_l(\theta) = \left[(\sqrt{2\theta})^{5.0} + (0.35Ra^{1/4}\theta)^{5.0} \right]^{0.2} \quad (6.15)$$

an, wobei die dezimalen Konstanten mit Hilfe der Ergebnisse aus numerischen Simulationen angepaßt wurden. Gobin und Bénard (1992) nennen für den Bereich sehr kleiner Prandtl-Zahlen die Korrelation

$$Nu(\theta) = 0.29Ra^{0.27}Pr^{0.18} + \frac{1}{\sqrt{2\theta}} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{(0.0175Ra^{3/4}\theta^{3/2})^{2.0}}}} \right]. \quad (6.16)$$

Lim und Bejan (1992) beschreiben den im Stadium des quasistationären Aufschmelzens konstanten Wert Nu_∞ im gesamten Prandtl-Zahlenspektrum $0 < Pr < \infty$ mit der Korrelation

$$Nu_\infty = \frac{0.35Ra^{1/4}}{[1 + (0.143/Pr)^{9/16}]^{4/9}}. \quad (6.17)$$

Die Abb. 6.32 und 6.33 zeigen die graphische Darstellung der Gl. (6.14) bis (6.16) im direkten Vergleich mit den Ergebnissen, die mit dem vorgestellten numerischen Verfahren erzielt wurden. Zu beachten ist, daß die Korrelationen nur für den Grenzfall $St \rightarrow 0$ Gültigkeit besitzen. Die Abweichungen im Nusselt-Zahlenverlauf für Fall 2 ($Pr = 0.02$, $Ra = 2.5 \cdot 10^5$) sind auf die beobachteten Instabilitäten und Instationaritäten zurückzuführen, die in der theoretischen Beziehung nicht berücksichtigt sind (siehe Abb. 6.32). Im Fall 4 ($Pr = 50$, $Ra = 10^8$) ergibt sich eine leichte Unterschätzung der mittleren Nusselt-Zahl für größere Zeiten, die auf die bereits erwähnte, zu geringe numerische Grenzschichtauflösung zurückzuführen ist (siehe Abb. 6.33).

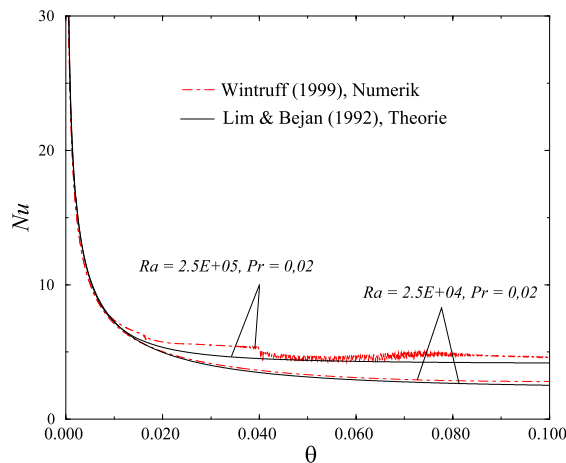


Abbildung 6.32: Vergleich der mittleren Nusselt-Zahl der Fälle 1 und 2 mit theoretischen Korrelationen.

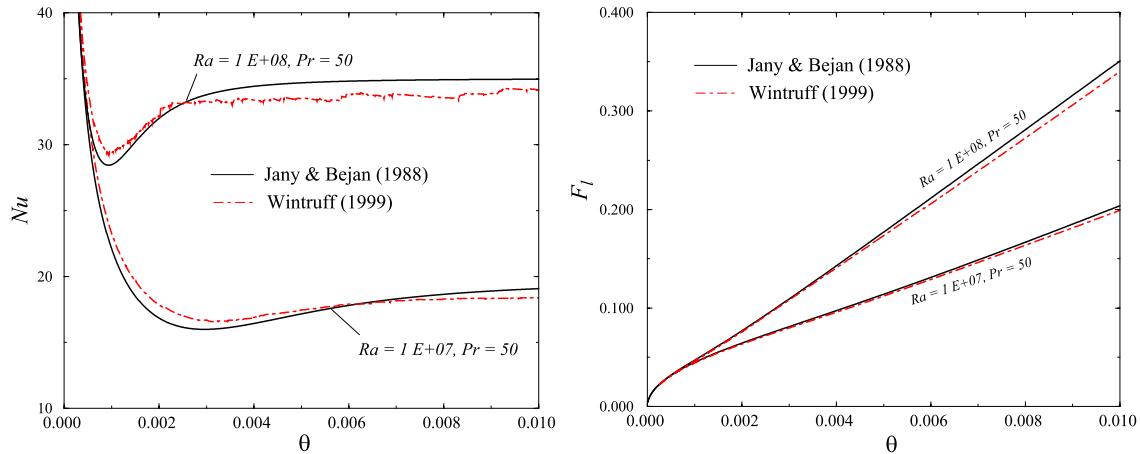


Abbildung 6.33: Vergleich der Ergebnisse der Fälle 3 und 4 mit theoretischen Korrelationen:
 (a) Nusselt-Zahl, (b) integraler Flüssigkeitsanteil.

Dennoch kann die zwischen den theoretischen Korrelationen und numerischen Simulationen erzielte Übereinstimmung als gut bezeichnet werden. Dies bestätigt zum einen die Plausibilität der vorgestellten numerischen Resultate, zum anderen spricht es für eine gewisse Allgemeingültigkeit der Korrelationen (6.14) bis (6.16) im untersuchten Parameterbereich.

Vergleich mit den Ergebnissen anderer Benchmarkteilnehmer

Ein direkter Vergleich der erzielten Ergebnisse mit den Ergebnissen anderer Autoren wird hier nur exemplarisch anhand einiger Ergebnisse für die Frontpositionen und mittleren Nusselt-Zahlen geführt. Informationen zu den einzelnen numerischen Verfahren bzw. Simulationen der hier zitierten Autoren sowie ausführlichere Ergebnisvergleiche finden sich in Gobin und Le Quéré (1999b).

Während im Fall 1 die ermittelten Frontpositionen aller Autoren (mit einer Ausnahme) auch zum Zeitpunkt θ_4 noch relativ gut übereinstimmen (Abb. 6.34a), zeigen sich im Fall 2 starke, auch qualitative Unterschiede (Abb. 6.34a). Diese Unterschiede, die analog im Vergleich des mittleren Nusselt-Zahlenverlaufs auftreten (Abb. 6.34c), sind auf die Uneinigkeit der Autoren bezüglich des Auftretens von Strömungsinstabilitäten zurückzuführen. Stabile und instabile Konfigurationen werden jeweils sowohl mit Enthalpie-Methoden als auch mit *front-tracking*-Methoden erzielt, so daß eine Abhängigkeit dieses Phänomens vom gewählten numerischen Verfahren unwahrscheinlich ist. Bemerkenswert ist allerdings, daß alle Autoren, die Instabilitäten erhalten, die instationären Navier-Stokes-Gleichungen lösen und nicht die ansonsten gängige quasistationäre Näherung anwenden. Dies wirft die Frage auf, ob für Medien kleiner Prandtl-Zahl, deren Neigung zu Instationaritäten im höheren Rayleigh-Zahlenbereich bekannt ist, die quasistationäre Näherung ein geeignetes Modell darstellt (siehe auch Gobin und Le Quéré (1999b)). Eine Anwendung der quasistationären Näherung setzt voraus, daß die Zeitskala, in der die Strömung im Fluid Stationarität erreicht, klein ist im Vergleich zur Zeitskala der Frontbewegung.

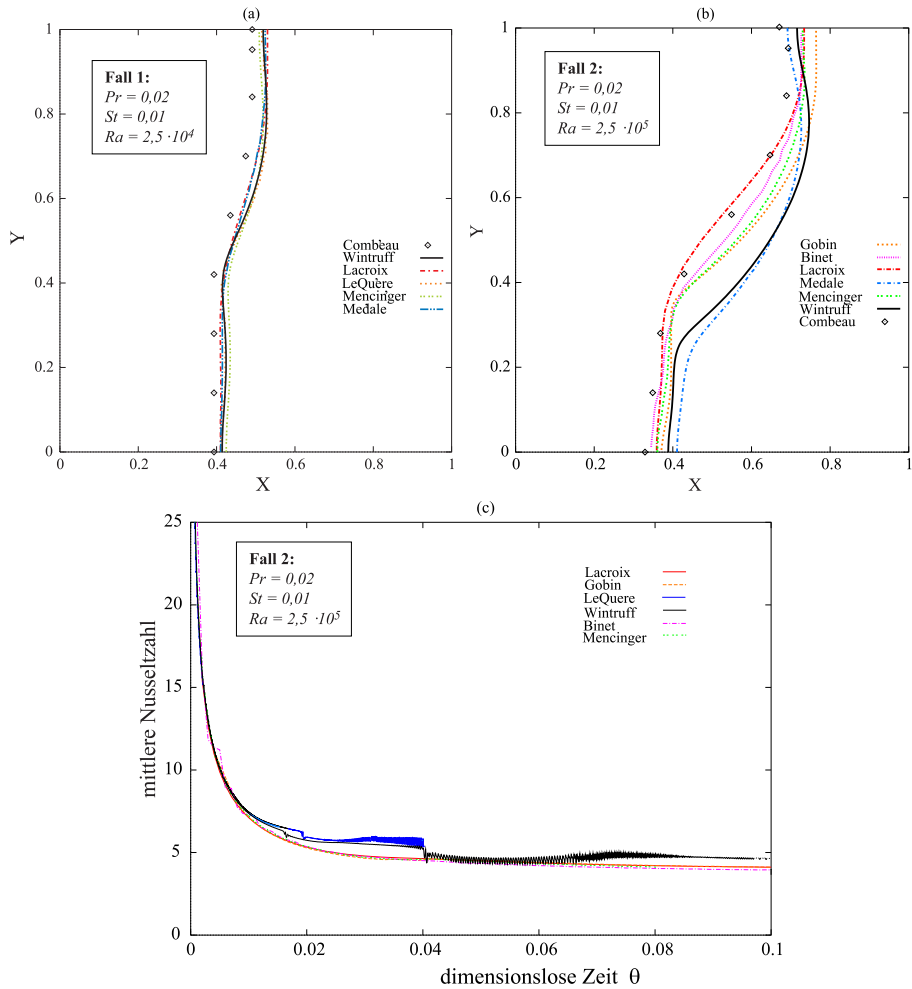


Abbildung 6.34: Vergleich mit den Ergebnissen anderer Benchmarkteilnehmer (Fälle 1 und 2): (a) Frontpositionen zum Zeitpunkt θ_3 (Fall 1), (b) Frontpositionen zum Zeitpunkt θ_4 (Fall 2), (c) zeitlicher Verlauf der mittleren Nusselt-Zahl (Fall 2).

Der Vergleich der Frontpositionen bei hohen Prandtl-Zahlen (Abb. 6.35a) zeigt zumindest im Fall 4 eine relativ breite Streuung der Kurven. Selbst wenn die Kurve mit der größten Abweichung vom Durchschnitt außer Acht gelassen wird, schwanken die lokalen Frontpositionen im oberen Bereich der Kavität bis zu 20% um einen gedachten Mittelwert aller Kurven. Hier spiegelt sich die Problematik hoher Strömungsgeschwindigkeiten und sehr dünner thermischer Grenzschichten wider. Eventuell wurden einige Simulationen mit zu geringer räumlicher und/oder zeitlicher Auflösung durchgeführt. Die integrale Größe der mittleren Nusselt-Zahl zeigt sich relativ insensitive bezüglich dieser stark unterschiedlichen Frontpositionen, was die bessere Übereinstimmung der Kurven in Abb. 6.35c bestätigt.

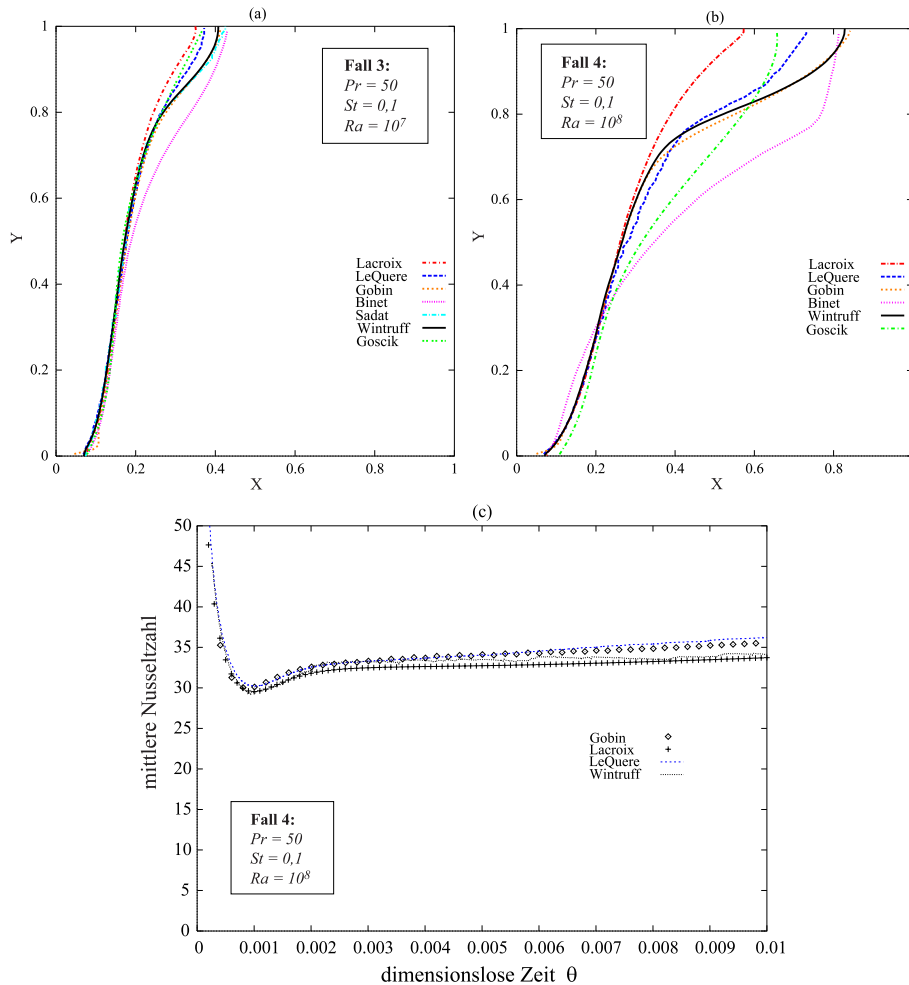


Abbildung 6.35: Vergleich mit den Ergebnissen anderer Benchmarkteilnehmer (Fälle 3 und 4): (a) Frontpositionen zum Zeitpunkt θ_3 (Fall 3), (b) Frontpositionen zum Zeitpunkt θ_4 (Fall 3), (c) zeitlicher Verlauf der mittl. Nusselt-Zahl (Fall 4).

Abschließende Bewertung der Ergebnisse

Sowohl beim Vergleich der Frontpositionen als auch beim Vergleich der Nusselt-Zahlen und der (hier nicht gezeigten) Flüssigkeitsanteile liegen die mit dem vorgestellten Verfahren erzielten Ergebnisse für große Prandtl-Zahlen jeweils nahe am Mittelwert aller Kurven. Selbstverständlich ist dies kein Beweis für die Richtigkeit der Ergebnisse. Unter Berücksichtigung der guten Ergebnisse beim Vergleich mit den theoretischen Korrelationen für die integralen Größen spricht dies aber zumindest für die Plausibilität der erhaltenen Ergebnisse.

Oben Gesagtes gilt auch für die Ergebnisse im Bereich kleiner Prandtl-Zahlen bei moderaten Rayleigh-Zahlen (Fall 1). Bei höheren Rayleigh-Zahlen bedarf die Frage des Auftretens von Strömungsinstabilitäten weiterer Klärung, weil sowohl lokale als auch integrale Kenngrößen des Aufschmelzprozesses elementar von dieser Fragestellung abhängen. Hier sind weitere experimentelle Daten unerlässlich, bevor eine Referenzlösung definiert werden kann.

6.3.3 Bénard-Konvektion unter Gefrierflächen

Während in Kavitäten mit seitlich beheizten Rändern schon geringste Temperaturdifferenzen ausreichen, um die Konvektionsströmung in Gang zu setzen, wird im Rayleigh-Bénard-Fall mit horizontalen, beheizten Wänden erst nach dem Überschreiten einer kritischen Temperaturdifferenz (kritischen Rayleigh-Zahl) konvektiver Stoff- und Wärmetransport beobachtet. Die Strömungsmuster im überkritischen Bereich hängen dabei von den geometrischen Abmessungen der Kavität, den thermischen und kinematischen Randbedingungen der begrenzenden Wände und den Stoffwerten des Fluids (Prandtl-Zahl) ab. Wird die obere Berandung einer Fluidschicht auf eine Temperatur unterhalb der Erstarrungstemperatur abgekühlt, bildet sich oberhalb der Naturkonvektionsströmung eine feste Phase aus. Der Einfluß von deformierbaren Gefrierflächen auf die Bénard-Konvektion wurde von Dietsche und Müller (1985) in einer horizontalen Schicht experimentell untersucht und wird hier als Verifikationsfall für das numerische Verfahren herangezogen. Ferner werden Berechnungen in einer quadratischen Kavität durchgeführt, die mit einer neueren numerischen Simulation von Mohamad (1998) verglichen werden.

6.3.3.1 Nachrechnung des Experiments von Dietsche und Müller (1985)

In Abb. 6.36 ist die Problemstellung skizziert, die dem Experiment von Dietsche und Müller (1985) zu Grunde liegt. Die Meßzelle der Dimension $B \times H \times T = 200 \times 10 \times 20$ mm ist vollständig mit Cyclohexan ($Pr = 18$) gefüllt. Bei konstantem Temperaturgradienten $T_m - T_0$ über der flüssigen Schicht wird die mit der Wärmeleithöhe h_{wl} gebildete Rayleigh-Zahl über Variation der Temperatur der oberen Berandung T_2 verändert. Die Biot-Zahl ist dabei ein Maß für die Dicke der festen Phase:

$$Bi = \frac{\lambda_s(T_2 - T_m)}{\lambda_l(T_m - T_1)} = \frac{h - h_{wl}}{h_{wl}}. \quad (6.18)$$

Im Schmelzpfad (=Versuchsreihe mit steigendem Flüssigkeitsvolumen) wird - ausgehend von einer erstarrten Schicht - diese Randtemperatur quasistationär in mehreren Stufen erhöht, im Gefrierpfad entsprechend stufenweise verringert. Für verschiedene Rayleigh-Zahlen werden stationäre Strömungszustände eingestellt. Strömungsmuster und Deformation der Phasentrennfläche werden mittels Kamera und Differentialinterferometer visualisiert.

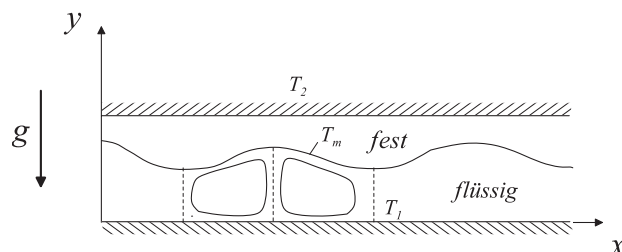


Abbildung 6.36: Bénard-Konvektion unter einer Gefrierfläche in einer horizontalen Schicht: Problemdefinition.

Experimentelle Ergebnisse

Im Schmelzpfad wird bei einer kritischen Rayleigh-Zahl von 1450 das Einsetzen der Konvektion in der flüssigen Phase beobachtet. Dieser Wert stimmt gut mit dem Wert der linearen Theorie von 1493 überein. Das Einsetzen der Konvektion ist mit einer erstmaligen Deformation der Phasentrennfläche und - infolge des stark erhöhten Wärmeübergangs - mit einer Verdoppelung der lokalen Maxima der Flüssigkeitshöhen verbunden. Es wird zunächst eine dreidimensionale Struktur der Phasengrenze beobachtet. Nach den Ergebnissen eines ähnlichen Experiments in einer Flüssigkeitsschicht großer horizontaler Erstreckung (Dietsche 1984) ist mit einer regelmäßigen Hexagonalstruktur zu rechnen, sofern der Einfluß der Seitenränder vernachlässigbar ist. Ein stationärer Konvektionszustand stellt sich dabei erst nach einer Zeitspanne von mehreren Stunden nach Einstellen der entsprechenden oberen Randtemperatur ein. Bei einer mit der gesamten Schichthöhe H berechneten Diffusionszeit von

$$t_D = \frac{H^2}{\kappa_l} = 19 \text{ min} \quad (6.19)$$

war erst nach ca. 10 Diffusionszeiten keine deutliche Veränderung in der Topologie der Phasentrennfläche mehr erkennbar. Eine weitere Erhöhung der oberen Wandtemperatur führt erwartungsgemäß zu einer Erhöhung der mittleren Flüssigkeitshöhen und damit zu einer Reduktion des Verhältnisses Flüssigkeitshöhe zu Behältertiefe. Bei Rayleigh-Zahlen um 2000 beträgt dieses Verhältnis etwa 1:4. Der erhöhte Einfluß der vertikalen Berandung führt hier zu einer Umbildung der Grenzflächenstruktur. Die dreidimensionale Polygonstruktur verschwindet zu Gunsten einer zweidimensionalen Walzenstruktur, wobei sich die Walzen entlang der kürzeren Behälterseite orientieren.

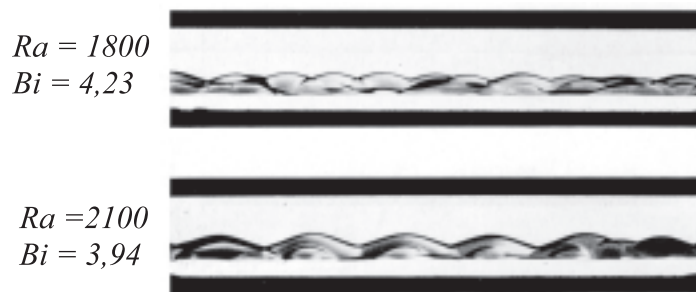


Abbildung 6.37: Experimentell beobachtete Umbildung der Grenzflächen von polygonalen (3d) in walzenförmige (2d) Strukturen.

Im weiteren Versuchsverlauf wird die Rayleigh-Zahl weiter erhöht und bei $Ra = 8000$ eine erneute Umbildung der Phasengrenze festgestellt. Als Folge einer Instabilität der Temperaturschicht an der unteren Flüssigkeitsberandung bilden sich bimodale Strömungsstrukturen aus. Diese sind zum Zeitpunkt ihrer Entstehung durch je zwei kleine Ablösewirbel im Aufstromgebiet zwischen zwei Konvektionswalzen gekennzeichnet. Die Ablösewirbel schlagen in der Folgezeit bis zur Phasentrennfläche durch und deformieren diese entsprechend. Für größere Rayleigh-Zahlen werden weitere, von der Grundform abweichende bimodale

Strömungsmuster beobachtet. Die Strömungskonfiguration ist dabei auch davon abhängig, ob der stationäre Zustand im Schmelz- oder im Gefrierpfad des Experiments erreicht wird.

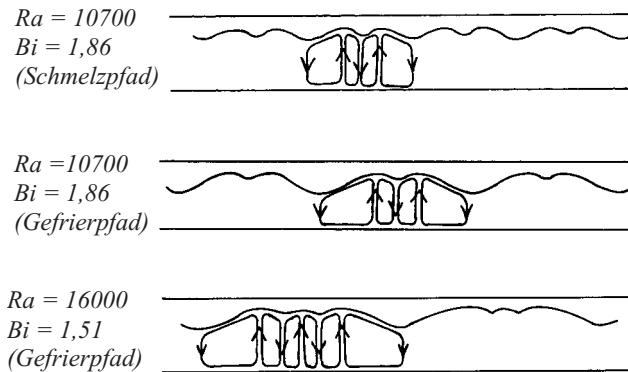


Abbildung 6.38: Schematische Darstellung experimentell beobachteter Erscheinungsformen bimodaler Strömungsstrukturen.

Erst bei noch höheren Rayleigh-Zahlen ($Ra = 31000$) wird ein Verschwinden der bimodalen Strukturen zu Gunsten einer monomodalen, stationären Walzenstruktur beobachtet.

Numerische Ergebnisse

Jeder Umbildungsvorgang zeichnet sich im Experiment durch eine sehr langsame Transiente aus. Die Umbildung der Walzenstrukturen in bimodale Strukturen bei $Ra = 8000$ ist beispielsweise erst nach ca. 130 Stunden abgeschlossen. Diese Tatsache erschwert eine direkte Nachrechnung des Experiments. Wie oben beschrieben wurde im Experiment eine Transiente abgefahren, bei der (im Schmelzpfad) durch quasistationäre Temperaturerhöhung der oberen Berandung eine bestimmte Rayleigh-Zahl eingestellt wird. Erst nach Erreichen eines stationären Strömungszustandes für diese Rayleigh-Zahl wurde die Randtemperatur weiter erhöht und auf den nächsten stationären Strömungszustand gewartet. Eine numerische Simulation, die diese experimentelle Transiente exakt nachbildet, war aus zwei Gründen nicht zu realisieren:

1. Im Rayleigh-Zahlenbereich oberhalb der kritischen Rayleigh-Zahl stellen sich dreidimensionale Strukturen ein, die mit einem zweidimensionalen numerischen Code nicht modelliert werden können.
2. Eine direkte Simulation der sehr langsam ablaufenden Umstrukturierungen der Phasengrenze übersteigt die zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten. Der Zeitschritt der numerischen Simulation wird durch die Zeitskala der Konvektionsströmung bestimmt und kann nicht beliebig erhöht werden.

Die im folgenden dargelegte Nachrechnung des Experiments beschränkt sich deswegen auf Untersuchungen bei einer bestimmten Rayleigh-Zahl. Konkret wird versucht, die experi-

mentell für $Ra = 10700$ erhaltenen bimodalen Strömungsstrukturen durch numerische Berechnungen qualitativ zu bestätigen. Dieser Rayleigh-Zahl entspricht eine stationäre obere Randtemperatur von $T_2 = 1^\circ C$. Um die bis zur Einstellung des stationären Endzustandes erforderliche Zeitspanne zu verkürzen, bediente sich die numerische Simulation unterschiedlicher Startlösungen. Diese Startlösungen sind "künstliche", überkritische Wärmeleitlösungen mit Flüssigkeitshöhen in der Nähe der zu erwartenden mittleren Flüssigkeitshöhe der bimodalen Konvektionslösung. Damit wird die zu- bzw. abzuführende Latentwärmemenge reduziert und der stationäre Endzustand schneller erreicht. Im Vergleich zum Experiment wird die Länge der Meßkammer reduziert. Um den numerischen Aufwand zu begrenzen, gleichzeitig aber den Einfluß der vertikalen Ränder gering zu halten, wird ein Geometrie-verhältnis von $L/H = 8$ gewählt. Bezogen auf die Höhe der flüssigen Schicht werden damit Längen- zu Höhenverhältnisse deutlich kleiner als 1 : 10 erreicht. Vertikale Ränder wurden als feste und adiabate Ränder modelliert. Die Modellierung periodischer vertikaler Ränder brachte in den Zeitskalen der numerischen Simulation nicht das gewünschte Ergebnis. Für alle Simulationen wurden dynamisch adaptierte Rechengitter mit expliziter Auflösung der Phasentrennfläche eingesetzt. Die räumliche Auflösung variierte von anfänglich ca. 1000 Knoten bis ca. 2500 Knoten für den stationären Endzustand. Bei einem Zeitschritt von $\Delta t = 0.2 s$ wurde nach etwa 40000 Zeitschritten der stationäre Endzustand erreicht.

Die Abb. 6.39 und 6.40 zeigen stationäre Endergebnisse zweier numerischer Simulationen in Form von Temperatur- und Stromfeldern. Ebenfalls dargestellt sind die verwendeten Startlösungen für das Temperaturfeld und die im Schmelz- bzw. Gefrier-Experiment von Dietsche und Müller (1985) erhaltenen bimodalen Strömungsmuster. Deutlich erkennbar zeigen sich in beiden Fällen in ausreichender Entfernung der vertikalen Wände bimodale Strukturen. Wie im Experiment treten dabei alternierend Wirbelpaare kurzer und langer Wellenlängen auf. Im Fall B entsteht das sekundäre Rollenpaar im Aufstromgebiet zwischen zwei Rollen größerer Wellenlängen. Zwischen den Rollen kleiner Wellenlänge ergibt sich in Konsistenz mit dem experimentellen Ergebnis ein Abstromgebiet. Im Fall A jedoch zeigt sich ein umgekehrter Drehsinn der Rollenpaare, der sich auch in der veränderten Grenzflächenstruktur abzeichnet. Die berechneten Wellenlängen stimmen in beiden Fällen gut mit den bevorzugten Wellenlängen des Experiments überein.

Diskussion der Ergebnisse

Die qualitativen Unterschiede der beiden Simulationen zeigen deren Sensitivität bezüglich der verwendeten Startlösung. Weitere, hier nicht dargestellte Simulationen mit leicht veränderten Anfangsbedingungen brachten Strömungskonfigurationen mit ähnlichen bevorzugten Wellenlängen, aber unterschiedlicher Anordnung und/oder Drehsinn der Konvektionswalzen. Diese Abhängigkeit der numerischen Lösungen von der verwendeten Startlösung begründet sich in unterschiedlichen durchlaufenen Transienten vor Erreichen des stationären Zustandes. Im Experiment wird der Übergang von einem bestimmten Strömungsmuster zu einem anderen durch eine sehr langsame, quasistationäre Temperaturerhöhung der oberen Berandung (=Erhöhung der Rayleigh-Zahl) realisiert.

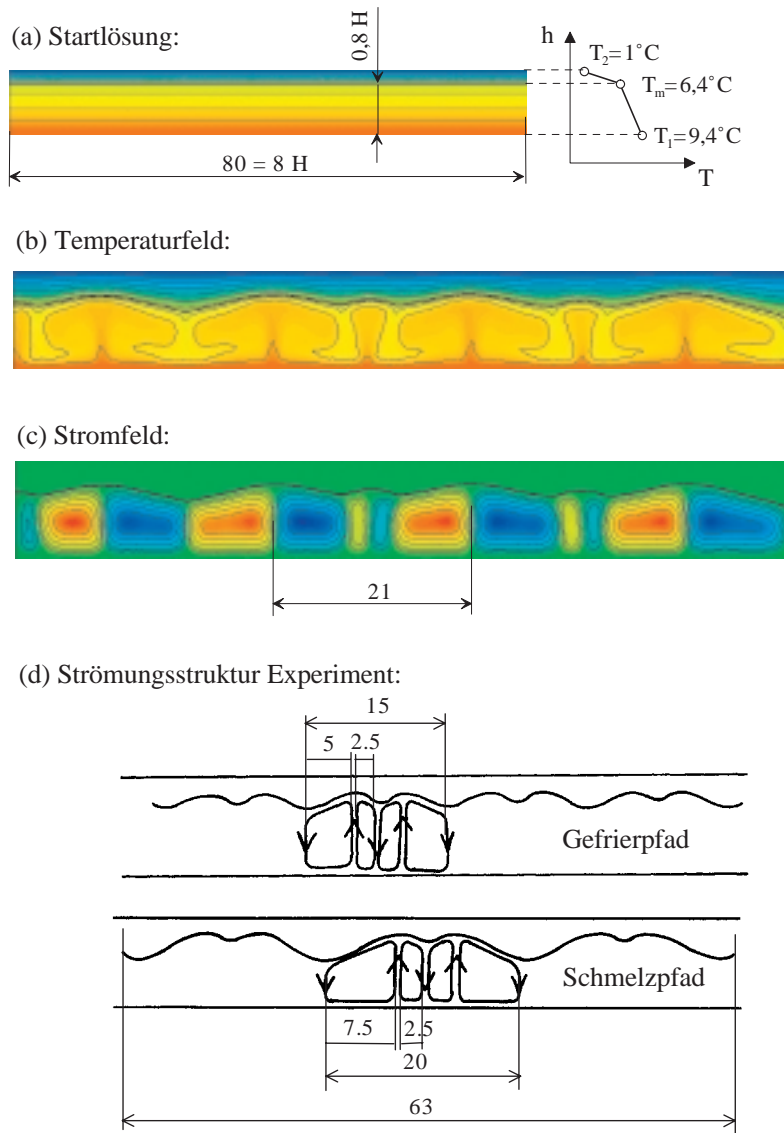


Abbildung 6.39: Vergleich numerischer Ergebnisse aus Simulation A mit dem Experiment: (a) Startlösung der numerischen Simulation, (b) stationäres Stromfeld, (c) stationäres Temperaturfeld (d) experimentell erhaltene Strömungskonfiguration (schematisch).

Nach der linearen Stabilitätstheorie werden oberhalb der minimalen kritischen Rayleigh-Zahl $Ra_{c,0}$ einer Neutralstabilitätskurve alle Wellenlängen einer beliebigen Störung angefaßt, deren (wellenlängenabhängige) kritische Rayleigh-Zahl Ra_c unterhalb der tatsächlichen Rayleigh-Zahl Ra liegt. Die Intensität der Anfaßung ist dabei proportional dem Abstand $Ra - Ra_c$ von der Kurve der Neutralstabilität (Müller 1999). Im schwach überkritischen Bereich wird nur ein schmales Wellenlängenband um die kritische Wellenlänge selektiv verstärkt. Die experimentellen Ergebnisse (z. B. bezüglich der zu erwartenden Strömungsmuster und Wellenlängen beim Einsatz der Konvektion) stimmen gut mit der linearen Theorie überein.

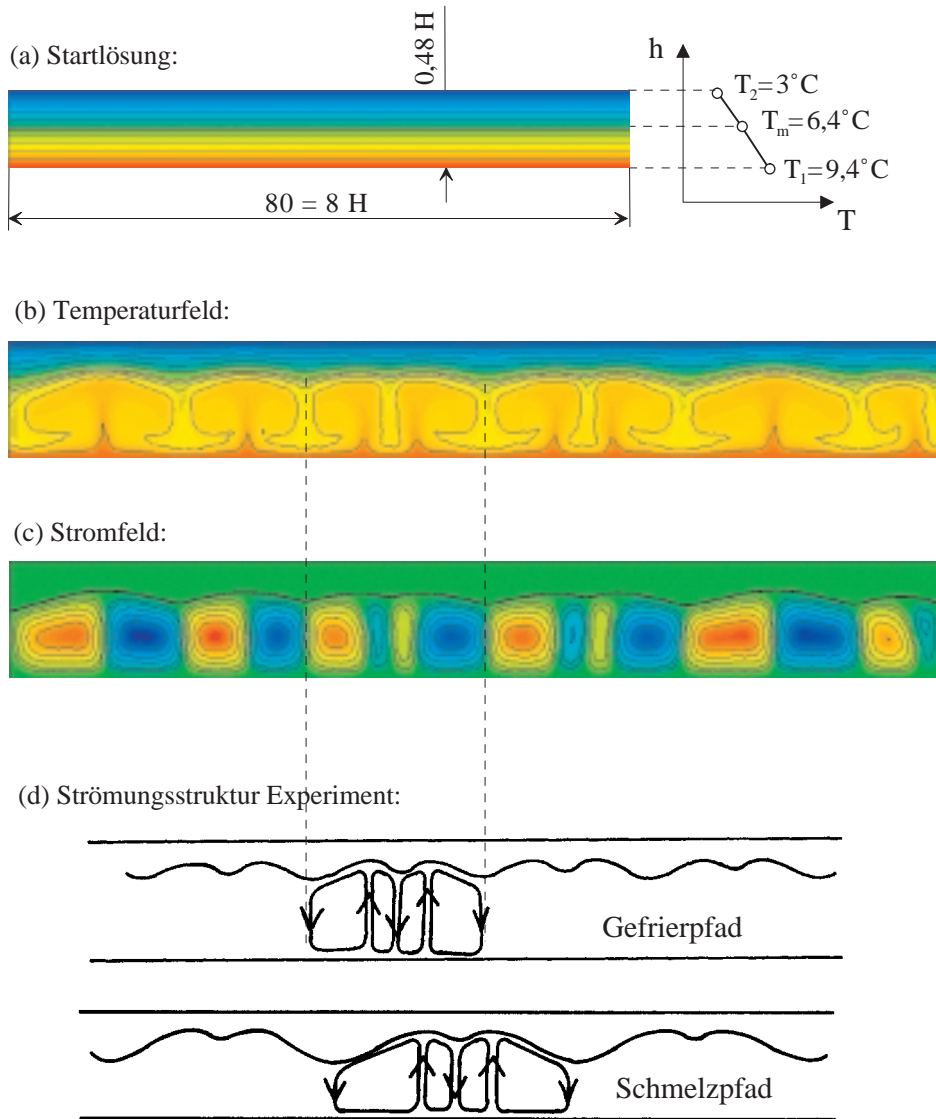


Abbildung 6.40: Vergleich numerischer Ergebnisse aus Simulation B mit dem Experiment: (a) Startlösung der numerischen Simulation, (b) stationäres Stromfeld, (c) stationäres Temperaturfeld (d) experimentell erhaltene Strömungskonfiguration (schematisch).

Wird eine bestimmte überkritische Rayleigh-Zahl jedoch nicht langsam und stufenweise (wie im Experiment), sondern sprunghaft erhöht (wie in der Simulation), liegt plötzlich ein sehr breites Wellenlängenspektrum vor, in dem Störungen angefacht werden. Nichtlineare Wechselwirkungen verschiedener Strömungsmuster innerhalb dieses Wellenlängenspektrums entscheiden letztendlich über die sich einstellende Strömungsform. Vielfältige Lösungsverzweigungen mit Lösungsästen, die sich innerhalb der Zeitskalen der Simulation als stationär und stabil erweisen, können die Folge sein. Aussagen über zu erwartende Strömungsmuster, die sich auf wellenzahlabhängige Anfacherungsraten aus der linearen Stabilitätstheorie stützen, verlieren im stark nichtlinearen Bereich ihre Gültigkeit.

Obwohl die gezeigten numerischen und experimentellen Ergebnisse durchweg stationär sind, kann die Vorgeschichte der Lösung, also die Transiente, die schließlich zu diesem Ergebnis geführt hat, nicht außer Acht gelassen werden. Unterschiedliche Transienten können trotz Identität aller dimensionsloser Kennzahlen, die das Problem beschreiben, zu unterschiedlichen Strömungskonfigurationen führen, wie auch die im Experiment beobachteten Hysteresen in Schmelz- und Gefrierpfad beweisen. Dieses Phänomen, das auch im klassischen Rayleigh-Bénard-Fall auftritt, wird durch die Existenz einer deformierbaren Phasengrenze noch verstärkt. Die Strömungskonfiguration der Vorgeschichte wird anschaulich in die Gefrierfläche eingepreßt. Wenn (wie im betrachteten Fall) die Zeitskala der Umbildung der Grenzfläche erheblich größer ist als die der Konvektionsströmung, speichert die Phasengrenze die Struktur einer schon vergangenen Strömungsform über einen bestimmten Zeitraum nach Verschwinden dieses Musters hinaus. Die Phasengrenze wirkt als eine Art Langzeitgedächtnis des Systems.

Trotz der angesprochenen Lösungsvielfalt, die sich beim Durchlaufen unterschiedlicher Transienten ergeben kann, sind in allen numerischen Simulationen diejenigen Wellenlängen zu sehen, die im Experiment für diese Rayleigh-Zahl (in Schmelz- und Gefrierpfad) beobachtet wurden. Die typische Bimodalität der Strömungsmuster kann als weitere Gemeinsamkeit zwischen Experiment und Numerik ausgemacht werden. Bestimmte Abweichungen von den experimentellen Ergebnissen, beispielsweise was die exakte geometrische Form der Phasengrenze oder Anordnung und Drehsinn der Konvektionswalzen betrifft, können nicht dem numerischen Verfahren angelastet werden, sondern sind unter Berücksichtigung der genannten Unterschiede im transienten Ablauf zwischen Experiment und Simulation zu interpretieren.

6.3.3.2 Berechnungen in einer quadratischen Kavität

Ein dem beschriebenen sehr ähnliches Problem wird von Gong und Mujumdar (1998) numerisch untersucht.

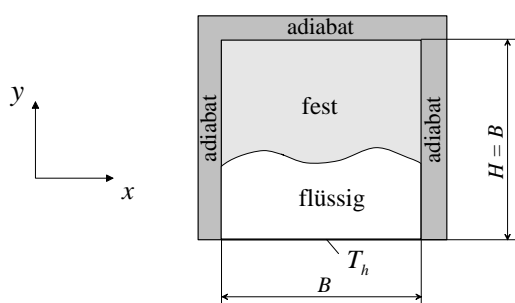


Abbildung 6.41: Bénard-Konvektion unter einer Gefrierfläche in einer quadratischen Kavität: Problemdefinition.

In der quadratischen Kavität befindet sich das Paraffin Pentahehexan mit einer Prandtl-Zahl $Pr = 46.1$. Die mit der Temperaturdifferenz $T_1 - T_m$ gebildete Stefan-Zahl beträgt $St = 0.138$. Das Problem wird für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6.44 \cdot 10^4$ untersucht (Die Rayleigh-Zahl wird mit der festen Länge H gebildet). Stoffdaten, Kennzahlen und Randbedingungen

werden in Anlehnung an die Festgitter-FEM-Simulation von Gong und Mujumdar (1998) gewählt. Experimentelle Daten, die eine direkte Vergleichbarkeit mit den experimentellen Daten zulassen, liegen nicht vor. Die Untersuchungen von Gau, Viskanta und Ho (1983) und Diaz und Viskanta (1984) zum Aufschmelzen von n -Cyclohexan in einer von unten beheizten Kavität erlauben lediglich qualitative Vergleiche mit numerischen Resultaten.

In beiden angesprochenen Experimenten wurde nach Überschreiten der kritischen Wärmeleithöhe h_c anfänglich Strömungskonfigurationen mit Hexagonal-Zellen beobachtet. Mit wachsender Höhe der Flüssigkeitsschicht konnte eine Umstrukturierung der dreidimensionalen Hexagonalmuster in zweidimensionale Rollenmuster festgestellt werden. Bei höheren Rayleigh-Zahlen ist die Walzenströmung stark instationär, die Anzahl und Orientierung der Walzen verändern sich ständig.

In Relation zur gesamten Versuchsdauer ist die Dauer, in der ausgeprägte dreidimensionale Effekte vorherrschen, eher gering. Diese Tatsache sollte die Behandlung des Problems mit einem zweidimensionalen numerischen Modell ermöglichen, auch wenn damit eine korrekte Wiedergabe der Strömungsmuster in der zeitlichen Phase direkt nach Einsetzen der Konvektion ausgeschlossen ist.

Abb. 6.42 zeigt Strom- und Temperaturfelder der numerischen Simulation in direktem Vergleich mit einer hochauflösenden numerischen Simulation von Gong und Mujumdar (1998) zu drei verschiedenen dimensionslosen Zeiten

$$Fo = \frac{\kappa t}{H^2} . \quad (6.20)$$

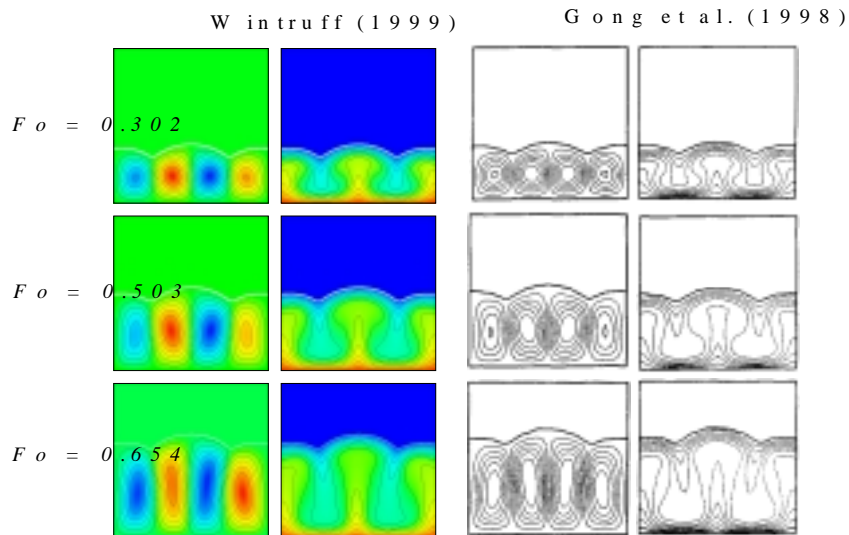


Abbildung 6.42: Bénard-Konvektion unter einer Gefrierfläche in einer quadratischen Kavität: Strom- und Temperaturfelder.

Beide numerische Simulationen sagen eine Strömungskonfiguration mit vier Konvektionsrollen voraus, die während der gesamten Simulationszeit erhalten bleibt und die Phasengrenze entsprechend deformiert. Hinsichtlich der Form der Phasentrennfläche, Isothermen und Stromlinien besteht dabei sehr gute Übereinstimmung.

Abb. 6.43 zeigt lokale Wandwärmeströme entlang der beheizten Wand. Beide Simulationen berechnen in Konsistenz mit den gezeigten Temperatur- und Stromfeldern einen wellenartigen Verlauf der örtlichen Nusselt-Zahlen. Der quantitative Vergleich offenbart auch hier eine gute Übereinstimmung.

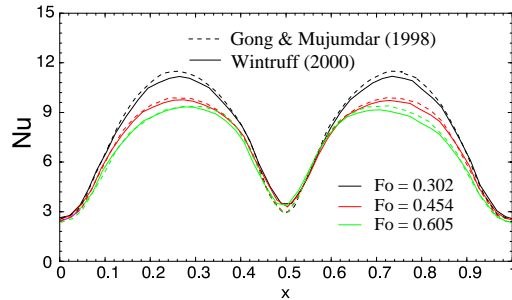


Abbildung 6.43: Bénard-Konvektion unter einer Gefrierfläche in einer quadratischen Kavität:
Lokale Wandwärmeströme entlang der beheizten Wand.

An dieser Stelle kann nicht verschwiegen werden, daß im Rahmen numerischer Experimente für das oben dargestellte Problem weitere Lösungen erzielt wurden, die qualitativ von der dargestellten Lösung abweichen. Abb. 6.44 zeigt Strömungskonfigurationen, die für identische Parametersätze, aber bei leicht veränderter räumlicher Auflösungen und/oder Anfangsbedingungen erzielt wurden. Eine eindeutige Tendenz, daß eine dieser Lösungen bei höherer räumlicher oder zeitlicher Auflösung bevorzugt würde, war nicht auszumachen. Die sich beim Einsetzen der Konvektion einstellende Rollenanzahl und -orientierung wurde jeweils während der gesamten Simulation beibehalten. Offensichtlich zeigt das System eine starke Sensitivität bezüglich der thermischen Störungen, die bei Überschreiten einer kritischen Flüssigkeitshöhe anwachsen und zur Instabilität der Wärmeleitlösung führen. Da das Wellenlängenspektrum dieser Störungen in einer numerischen Simulation zufallsbestimmt ist, ist auch die sich zunächst einstellende Strömungskonfigurationen nicht eindeutig. Innerhalb der Zeitskalen der numerischen Simulation wird dann keine Abkehr von dieser anfänglich bevorzugten Konfiguration mehr erreicht.

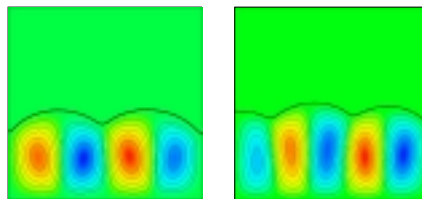


Abbildung 6.44: Bénard-Konvektion unter einer Gefrierfläche in einer quadratischen Kavität:
Weitere mögliche Strömungskonfigurationen.

Die Frage nach der wahren Strömungskonfiguration kann im Rahmen einer zweidimensionalen Simulation nicht beantwortet werden. Jede der gezeigten Möglichkeiten ist zum Zeitpunkt des Einsetzens der Instabilität falsch, da sich zunächst eine Hexagonalstruktur ausbildet. Lediglich eine 3-d Simulation, die exakt die Transiente eines entsprechenden Experiments nachbildet, könnte hier verlässliche Aussagen machen.

6.3.4 Aufschmelzen mit interner Beheizung

Während Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge, die durch äußere Wärmequellen bzw. Senken initiiert werden, sehr häufig Gegenstand numerischer oder experimenteller Untersuchungen sind, findet der Fall des Aufschmelzens infolge innerer Wärmequellen in der Literatur nur wenig Beachtung.

Das gerichtete Aufschmelzen eines Reinstoffes unter der Wirkung innerer Wärmequellen stellt ein Sonderfall des gerichteten Aufschmelzens dar. Obwohl (bei Vernachlässigung des Gibbs-Thompson-Effekts) der Phasenübergang bei einer festen Temperatur stattfindet, kann sich hier (zumindest zeitweise) ein ausgeprägter Phasenwechselbereich ausbilden, in dem flüssige und feste Materie koexistieren. Für gerichtete Phasenwechselprobleme ohne interne Beheizung ist ein vergleichbares Verhalten nur für Stoffgemische, die in einem bestimmten Temperaturintervall zwischen Liquidus- und Solidustemperatur erstarren, bekannt. Reinstoffe hingegen erschmelzen bei externer Wärmezufuhr immer diskret, also mit einer ausgeprägten und zu jeder Zeit makroskopisch ebenen Phasengrenze. Der Latentwärmeumsatz ist hier zwingend an die Existenz von Temperaturgradienten gebunden, weil einem bestimmten (zu erschmelzenden) Feststoffvolumen nur über konvektive oder diffusive Wärmeströme Energie zugeführt werden kann. Bei interner Beheizung hingegen wird dem Feststoffvolumen intern Energie zugeführt. Es kann sich prinzipiell ein dreidimensionales, isothermes Gebiet mit Schmelztemperatur ausbilden. Eine Phasengrenze im Sinne einer scharfen Trennung zwischen fest und flüssig ist dann nicht mehr sichtbar. Im Phasenübergangsbereich, der sich durch die Koexistenz von flüssigen und festen Bereichen auf makroskopischen Skalen auszeichnet, findet bei makroskopischer Betrachtungsweise ein kontinuierlicher Phasenübergang statt, der auch als inneres Aufschmelzen bezeichnet wird. Die Existenz eines solchen dreidimensionalen Phasenübergangsbereiches ist bei einem Reinstoff allerdings von rein transientem Charakter, weil die intern produzierte Wärme in einem räumlichen Gebiet mit konstanter Temperatur alleine durch die Latentwärme kompensiert wird (keine diffusiven und konvektiven Ströme). Im stationären Zustand wird jedoch keine Latentwärme mehr umgesetzt, so daß die intern produzierte Wärme dann über Temperaturgradienten kompensiert werden muß. Dies widerspricht der Definition eines *mushy*-Gebietes als isothermes Phasenwechselgebiet beim Aufschmelzen eines Reinstoffs.

Die Existenz eines räumlichen Zwei-Phasen-Gebietes beim Aufschmelzen intern beheizter Reinstoffe wird auch von Chan und Hsu (1987) und Chen, Ishii und Grolmes (1976) bestätigt. Ein analoges Verhalten zeigen optisch halbdurchlässige Feststoffe unter der Wirkung äußerer Wärmeeinstrahlung. Die Wärmestrahlung dringt in das Medium ein und ist einer inneren Wärmequelle äquivalent (Chan, Cho und Kocamustafaogullari 1983). In der Meteorologie ist die Existenz des inneren Aufschmelzens von Reinstoffen schon sehr lange bekannt. Dorsey (1968) beobachtete bereits 1968 zahlreiche kleine, mit flüssigem Wasser gefüllte Einschlüsse in einem der Sonnenstrahlung ausgesetzten Eisblock.

Die beschriebene Phänomene werden zunächst anhand eines eindimensionalen Aufschmelzfalles (ohne Konvektion) verdeutlicht, der auch als Testfall für das in Kapitel 4.2.2.2 beschriebene zweiphasige Enthalpiemodell dient und die speziellen Anforderungen an einen

mehrphasigen Code im Zusammenhang mit intern beheizten Aufschmelzvorgängen aufzeigt. Anschließend wird eine zweidimensionale Simulation vorgestellt, die gleichzeitig eine Vorausrechnung eines im Aufbau befindlichen Validierungsexperiments darstellt und auch konvektive Einflüsse beim Aufschmelzvorgang berücksichtigt.

6.3.4.1 Eindimensionales Wärmeleitproblem mit interner Beheizung

Abb. 6.45 zeigt den untersuchten Fall des gerichteten Aufschmelzens eines Reinstoffes in einer eindimensionalen, stabförmigen Geometrie. Stoffwerte und Randbedingungen wurden entsprechend einer Simulation von Chan und Hsu (1987) gewählt, um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu ermöglichen.

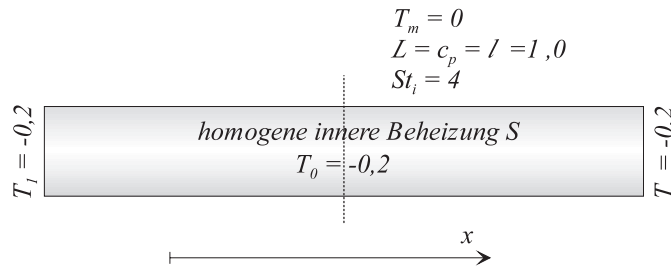


Abbildung 6.45: 1d-Aufschmelzen infolge innerer Wärmequellen: Problemdefinition mit Stoffwerten und Randbedingungen.

Das Problem wird formal durch die beiden instationären Wärmeleitungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) &= \rho c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + S \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) &= \rho c_l \frac{\partial T_l}{\partial t} + S, \end{aligned} \quad (6.21)$$

die Dirichlet-Randbedingungen an den festen Rändern und die Stefanbedingung (6.4) beschrieben. Treten jedoch ausgeprägte Phasenwechselgebiete mit sehr komplexer Grenzflächentopologie auf, gelingt eine numerische Simulation auf Basis dieser Gleichungen nur, wenn die auf mikroskopischen Skalen stattfindenden diskreten Phasenübergänge aufgelöst werden. Im Rahmen einer makroskopischen Modellierung bedient man sich der Hilfsvariable "Flüssigkeitsanteil", um kontinuierliche Phasenübergänge in *mushy*-Gebieten zu beschreiben (siehe Kapitel 4.2.2). Die Gleichungen (6.21) sind um einen Quellterm zu erweitern, der anschaulich die Latentwärmefreisetzung bei Änderung des Flüssigkeitsanteils ausdrückt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + S + \frac{\partial}{\partial t} (\rho L f_l). \quad (6.22)$$

Die Abhängigkeit des Flüssigkeitsanteils von der Temperatur wird für isotherme Phasenwechselprobleme durch Gl. (4.14) wiedergegeben und ist in Abb. 6.46a graphisch dargestellt. Entsprechend sind die Phasengrenzen fest-*mushy* bzw. *mushy*-flüssig implizit über die Grenzwerte $f_l = 0$ bzw. $f_l = 1$ bei der Temperatur T_m definiert. Die in Kapitel 4.2.2.2

beschriebene Enthalpie-Methode auf bewegten Gittern ermittelt nach jedem Zeitschritt die neue Position dieser Phasengrenzen und besetzt sie mit Gitterknoten. Sämtliche Phasen sind also zu jeder Zeit im numerischen Gitter abgebildet.

Abb. 6.46b zeigt Temperatur- und Flüssigkeitsanteilprofile aus der zweidimensionalen numerischen Simulation zu verschiedenen Zeiten t :

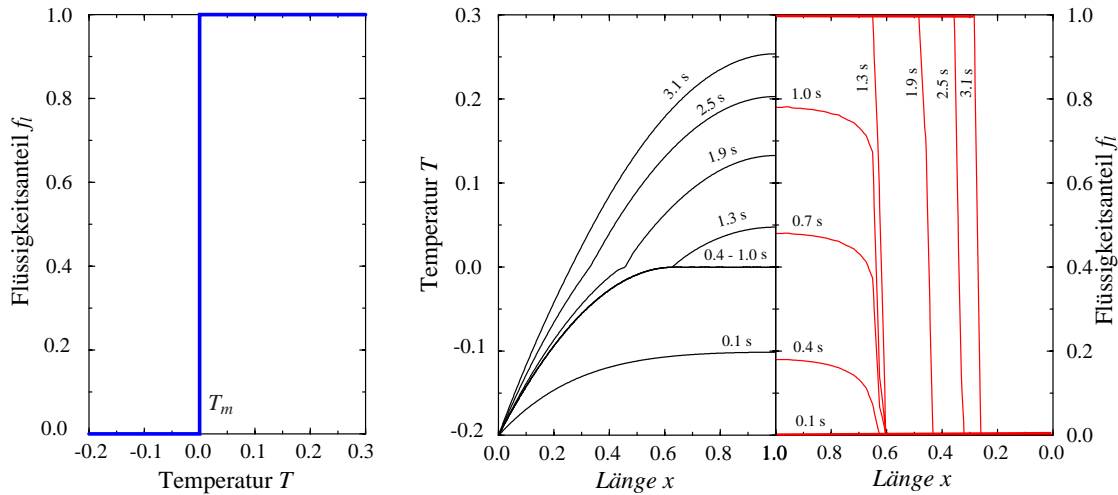


Abbildung 6.46: 1d-Aufschmelzen mit interner Beheizung: (a) Abhängigkeit des Flüssigkeitsanteils von der Temperatur, (b) transiente Temp. - und Flüssigkeitsprofile.

Der Aufschmelzprozeß läßt sich nach mit Abb. 6.46 in drei zeitliche Phasen einteilen:

1. **Transiente Wärmeleitung** ($0 - 0.4s$)

Im Festkörper steigt die Temperatur infolge der inneren Wärmeproduktion langsam an. Wärmeleitung ist der einzige Wärmetransportmechanismus.

2. **Inneres Aufschmelzen** ($0.4 - 1s$)

In einem bestimmten Bereich im Inneren des Stabes wird Schmelztemperatur erreicht. Innerhalb dieses Bereichs beginnt der Aufschmelzprozeß, während die Latentwärmeabsorption dort ein weiteres Ansteigen der Temperatur verhindert.

3. **Gerichtetes Aufschmelzen** ($1 - 5s$)

Nachdem im Kern der letzte Feststoff erschmolzen ist, findet Phasenwechsel nur noch an der diskreten Fest-Flüssig-Phasengrenze statt. Der Anteil der flüssigen Phase nimmt allmählich zu, die Grenzfläche strebt ihrer stationären Endposition entgegen.

Mit Hilfe der klassischen Enthalpie-Methode läßt sich der gesamte transiente Vorgang relativ einfach auf einem festen Gitter simulieren. Das Bewegte-Gitter-Verfahren versucht hingegen, das verwendete Phasenwechselmodell zu jedem Zeitpunkt auf die ablaufenden physikalischen Vorgänge abzustimmen. In diesem Zusammenhang kommt den Übergängen von einer zeitlichen Phase zur anderen besondere Bedeutung zu.

- *Übergang Transiente Wärmeleitung - Inneres Aufschmelzen.*

Physikalisch ist dieser Zeitpunkt mit dem erstmaligen Auftreten eines Flüssigkeitstropfen verbunden. In der Simulation ist dies mit der Entstehung einer *mushy* Phase sowie einer -Phasengrenze fest-*mushy* verknüpft. Konkret wird nach Überschreiten eines bestimmten Schwellenwertes $f_{l,u}$ die Isolinie $\alpha f_{l,u}$ berechnet und mit Gitterknoten besetzt. Der Skalar α ist dabei < 1 zu wählen, um eine zerklüftete Phasengrenze zu vermeiden. Die bewegte Phasengrenze fest-*mushy* besitzt anschließend für alle Zeiten den Flüssigkeitsanteil $\alpha f_{l,u}$ und die Temperatur T_m . In der dargestellten Simulation brachten die Werte $f_{l,u} = 0.01$ und $\alpha = 0.8$ gute Ergebnisse.

- *Übergang inneres Aufschmelzen - gerichtetes Aufschmelzen.*

Dieser Zeitpunkt ist physikalisch mit dem Übergang eines dreidimensionalen Phasenwechselgebietes auf ein zweidimensionales Phasenwechselgebiet vernachlässigbarer Tiefe verknüpft. In der Simulation ist dies mit dem Verschwinden einer *mushy* Phase verknüpft. Die zuvor vorhandenen Phasengrenzen fest-*mushy* und *mushy*-flüssig verschwinden auf Kosten einer diskreten Fest-Flüssig-Phasengrenze. Als numerisches Kriterium wird der Kehrwert einer lokalen Damköhler-Zahl im betrachteten Kontrollvolumen verwendet:

$$\left(\frac{1}{Da}\right)_{CV} = \frac{\int_{\Gamma} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} d\Gamma}{\int_{\Omega} S d\Omega} < \epsilon. \quad (6.23)$$

Werte $> \epsilon$ widersprechen der Definition der *mushy* Phase als räumlicher Bereich mit konstanter Temperatur T_m . Konkret wird die *mushy Phase* aufgelöst, wenn eine bestimmte Mindestanzahl n_{min} der innerhalb der *mushy Phase* liegender Knoten das Kriterium 6.23 verletzt. Ab diesem Zeitpunkt wird die Simulation dann mit dem diskreten Phasenwechselmodell (Bewegtes-Gitter-Modell mit explizitem Frontfortschritt auf Basis der Stefanbedingung) fortgesetzt.

Das Verhalten des Systems wird abschließend in Form eines Phasendiagramms dargestellt. Darin sind die zeitlichen Verläufe der einzelnen Phasengrenzen aufgetragen. Dargestellt sind die Ergebnisse des Bewegte-Gitter-Verfahren, einer klassischen Enthalpie-Methode und eines Simulationsergebnisses von Chan und Hsu (1987) (ebenfalls Enthalpie-Methode).

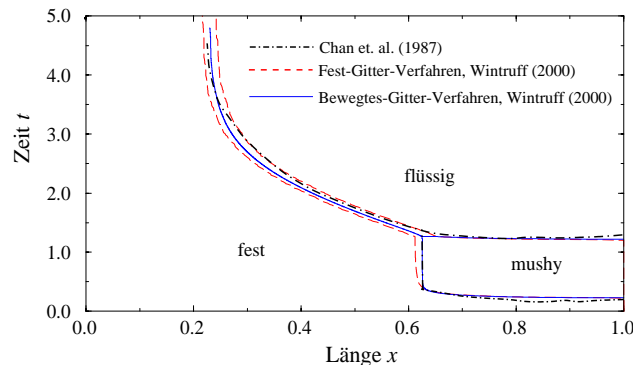


Abbildung 6.47: 1d-Aufschmelzen mit interner Beheizung; transienter Verlauf der Phasengrenzen.

Alle drei Simulationen erreichen eine gute Übereinstimmung. Zu beachten ist, daß die Fest-Flüssig-Phasengrenze in der Simulation von Chan und Hsu (1987) auf einer Rekonstruktion aus den Werten des Flüssigkeitsanteils in der (künstlichen) *mushy* Phase beruht. Auf eine entsprechende Rekonstruktion wurde bei der eigenen Simulation nach der Enthalpie-Methode verzichtet, um den unphysikalischen Verschmierungseffekt zu verdeutlichen.

Der Vorteil höherer physikalischer Relevanz wird beim Bewegte-Gitter-Verfahren mit erhöhtem Rechenaufwand und eingeschränkter Flexibilität erkaufte. Die Kriterien zur Entstehung und Vernichtung einzelner Phasen und Phasengrenzen sind keineswegs allgemeingültig, sondern sind im speziellen Fall im Zuge numerischer Experimente festzulegen. Eine Auflösung aller Phasengrenzen erscheint deswegen nicht sinnvoll. Für komplexere Probleme mit interner Beheizung hat es sich als günstig erwiesen, lediglich Phasengrenzen zwischen fest und flüssig aufzulösen. Phasengrenzen zwischen *mushy* und flüssig werden nicht aufgelöst, d. h. diese Phasen werden in Anlehnung an die klassische Enthalpie-Methode als eine Phase behandelt.

6.3.4.2 Vorausrechnung eines Modellexperiments mit interner Beheizung

Die nachfolgend dargestellte Simulation wurde unter den oben genannten Gesichtspunkten durchgeführt. Geometrie, Stoffwerte und Randbedingungen wurden in Anlehnung an ein Validierungsexperiment gewählt, das zur Zeit am Institut für Kern- und Energietechnik des Forschungszentrums Karlsruhe aufgebaut wird. Dabei wird ein halbzylinderförmiger Galliumblock elektrisch beheizt. In der Mittelebene wird die zweidimensionale Phasengrenze mittels Ultraschall visualisiert.

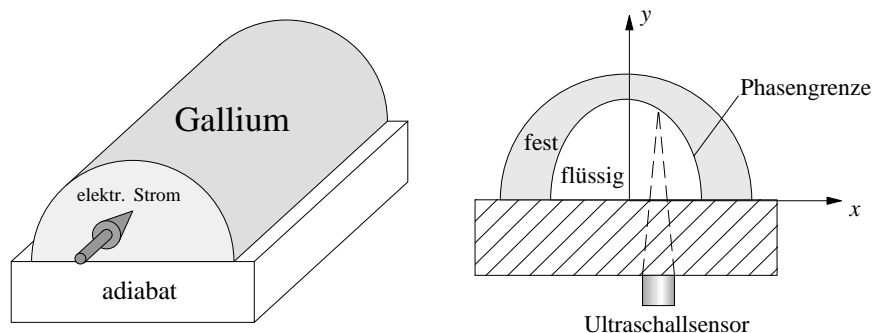


Abbildung 6.48: Modellexperiment zum Aufschmelzen mit interner Beheizung.

Der Versuchsaufbau mit elektrischer Widerstandsheizung macht eine zeitlich konstante und homogene Wärmefreisetzung in der Meßebeine unmöglich. Während eines Experiments kann entweder die Stromstärke I oder die elektrische Leistung P konstant gehalten werden (Strom- oder Leistungsregelung). Die nachfolgende numerische Berechnung simuliert ein stromgeregeltes Experiment. Die Berechnung der lokalen Wärmequellenstärken beruht auf dem Modell zweier parallel angeordneter Widerstände, die durch feste und flüssige Phasen im Meßquerschnitt repräsentiert werden.

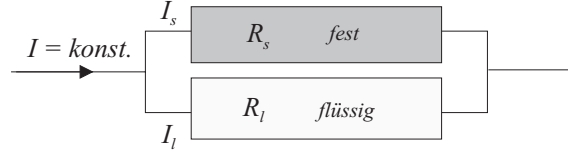


Abbildung 6.49: Modell paralleler elektrischer Widerstände zur Berechnung der lokalen Wärmequellstärke im Meßquerschnitt.

Bei konstanter Gesamtstromstärke I_{ges} berechnen sich die Stromstärken durch feste und flüssige Phase in Abhängigkeit des integralen Flüssigkeitsvolumenanteils F_l und der spezifischen Widerstände ρ_l und ρ_s mit

$$\begin{aligned} I_s &= I_{ges} \frac{\rho_l}{\rho_s \frac{F_l}{1-F_l} + \rho_l} \\ I_l &= I_{ges} \frac{\rho_s}{\rho_s + \rho_l \frac{1-F_l}{F_l}}, \end{aligned} \quad (6.24)$$

wobei

$$F_l = \frac{1}{\Omega_{ges}} \int_{\Omega_{ges}} f_l d\Omega. \quad (6.25)$$

Die volumenspezifischen Quellstärken in fester und flüssiger Phase berechnen sich daraus mit

$$\begin{aligned} S_s &= \frac{I_{ges}^2 \rho_l^2 \rho_s}{\Omega_{ges} (1 - F_l)^2 (\rho_l + \frac{F_l \rho_s}{1-F_l})^2} \\ S_l &= \frac{I_{ges}^2 \rho_l \rho_s^2}{\Omega_{ges} F_l^2 (\rho_s + \frac{(1-F_l) \rho_l}{F_l})^2}. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Die innerhalb eines finiten Dreieckselements konstante lokale Quellstärke S entsteht durch gewichtete Addition der beiden Anteile nach Gl. (6.26) entsprechend des lokalen Flüssigkeitsanteils f_l :

$$S = \frac{I_{ges}^2}{\Omega_{ges}^2} \cdot \frac{\rho_l \rho_s (\rho_l - f_l \rho_l + f_l \rho_s)}{(\rho_l - F_l \rho_l + F_l \rho_s)^2}. \quad (6.27)$$

Für diskrete Phasenübergänge kann beim Bewegte-Gitter-Verfahren die Größe f_l nur die Werte 0 und 1 annehmen. Eine zeitliche Änderung der lokalen Quellstärke innerhalb eines bestimmten Dreiecks resultiert dann allein aus der Änderung des integralen Flüssigkeitsanteils F_l . Flüssiges Gallium hat einen geringeren spezifischen elektrischen Widerstand als festes Gallium, so daß ein überproportional großer Anteil des Gesamtstroms I_{ges} auf den flüssigen Teil des Meßquerschnitts entfällt (siehe Abb. 6.49 a). Bei steigendem Flüssigkeitsanteil im Galliumblock sinkt der Widerstand des erschmolzenen Bereichs aufgrund der größer werdenden Querschnittsfläche, so daß trotz steigender Stromstärke im Flüssigen auch die Wärmeproduktion im Meßquerschnitt sinkt (siehe Abb. 6.50). Mit Ausnahme des spezifischen elektrischen Widerstandes wurden alle Stoffwerte in flüssiger und fester Phase als konstant und gleich angenommen (siehe Tab. 6.4). Ferner gelten für die numerische Simulation die in Kapitel 6.3.2 auf Seite 88 genannten Annahmen.

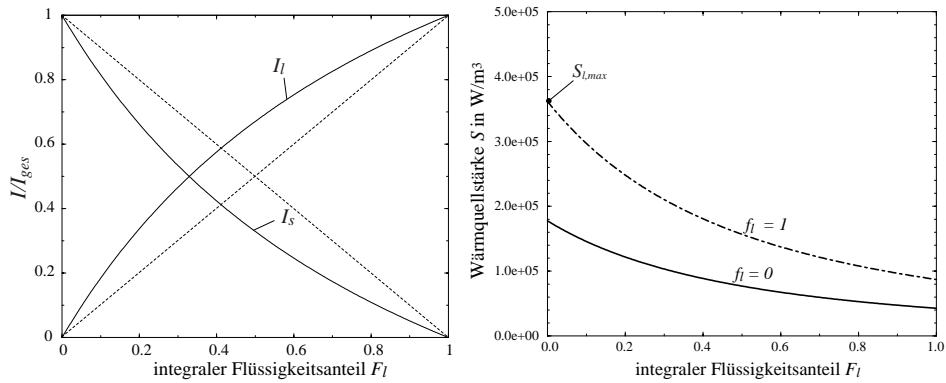


Abbildung 6.50: Abhängigkeit von Stromstärke und Wärmequellstärke vom integralen Flüssigkeitsanteil.

Abb. 6.51 nennt neben Geometrie, Randbedingungen und dimensionslosen Kennzahlen auch die elektrischen Kenngrößen des betrachteten Experiments. Innere Rayleigh- und Stefan-Zahl wurden darin mit der Höhe H als charakteristische Länge und der maximalen Wärmequellstärke $S_{l,max}$ berechnet, die sich für $F_l = 0$ und $f_l = 1$ ergibt. Der Einfluß der isothermen Wand kann mit Hilfe einer modifizierten Damköhler-Zahl ausgedrückt werden:

$$Da_m = \frac{SH^2}{4\lambda(T_m - T_0)} = \frac{T_{max,WL} - T_w}{T_m - T_w}. \quad (6.28)$$

Diese gibt das Verhältnis der sich im stationären Wärmeleitfall einstellenden maximalen Temperaturdifferenz zur Temperaturdifferenz zwischen Schmelz- und Wandtemperatur wieder und ist ein Maß für das zu erwartende Temperaturniveau im Meßquerschnitt.

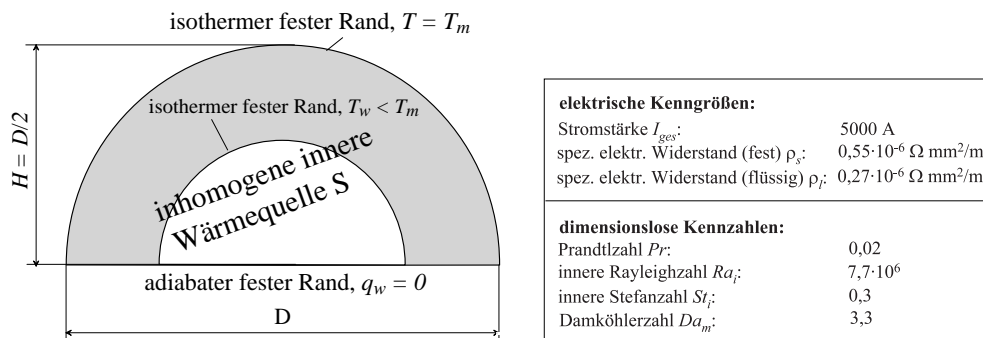


Abbildung 6.51: 2d-Aufschmelzen mit interner Beheizung: Geometrie, Randbedingungen, Stoffwerte und Kennzahlen der Simulation.

Im numerischen Verfahren werden die orts- und zeitabhängigen Wärmequellstärken S jeweils explizit auf Basis der integralen Größe F_l des letzten Zeitschrittes berechnet. Ausgehend von einem isothermen festen Zustand ($T_0 = 20^\circ C$) zeigt das System das in Kapitel 6.3.4.1 diskutierte charakteristische Verhalten. Nach einer anfänglichen Phase der transienten Wärmeleitung setzt die zeitliche Phase des inneren Aufschmelzens (bei isothermen Bedingungen im Kern) ein. Daran schließt sich die Phase des diskreten Phasenübergangs

mit scharfer Phasentrennfläche an. Nur in der letzten Phase sind Konvektionseffekte (im überhitzten Kern) vorhanden.

Das numerische Phasenwechselmodell wird im transienten Verlauf der Simulation der jeweiligen physikalischen Natur des Phasenwechselproblems angepaßt.

- Während der Phase der transienten Wärmeleitung ($t < t_1$) wird formal das einphasige Enthalpiemodell auf einem festen Gitter eingesetzt. Diese Phase endet mit der vollautomatischen Generierung eines freien Randes, sobald im Kern erstmals Werte $f_l > \epsilon$ erreicht werden.
- Während die Phase des kontinuierlichen Aufschmelzens ($t_1 < t < t_2$) kommt das mehrphasige Enthalpiemodell auf bewegten Gittern zum Einsatz. Die Phasengrenze zwischen festem und *mushy*-Gebiet, die über $f_l = 0$ und $T = T_m$ definiert ist, wird fortlaufend mit Gitterknoten besetzt. Diese Phase endet, sobald die Anzahl n_{mushy} derjenigen Elemente, die das Kriterium (6.23) erfüllen, kleiner einer Mindestanzahl n_{min} ist. Unter Beibehaltung des im Gitter aufgelösten freien Randes erfolgt dann ein - bezüglich der Gesamtenthalpie des Systems - konservativer Übergang auf das diskrete Phasenwechselmodell.
- Während der Phase des diskreten Phasenwechsels ($t > t_2$) wird das Bewegte-Gitter-Verfahren mit expliziter Anwendung der Stefanbedingung eingesetzt. Die Hilfsvariable Flüssigkeitsanteil ist dann überflüssig, der freie Rand alleine über $T = T_m$ definiert.

Abb. 6.52 zeigt zunächst instationäre Profile der Temperatur und lokalen Flüssigkeitsanteile während der transienten Phase des inneren Aufschmelzens. Kurze Zeit nach $t_1 = 100$ s hat die Temperatur in einem endlichen Kernbereich Schmelztemperatur erreicht (Abb. 6.52 a), so daß dort das Aufschmelzen beginnt und der Flüssigkeitsanteil ansteigt (Abb. 6.52 b). Im äußeren Bereich wird die innere Wärme bei annähernd isothermen Bedingungen diffusiv abtransportiert. Während des gesamten inneren Aufschmelzvorgangs bleibt dieses quasistationäre Temperaturprofil fast unverändert. Die Verkleinerung des *mushy*-Bereichs während dieser Zeit ist alleine auf den Rückgang der inneren Wärmequellen S bei steigendem integralen Flüssigkeitsanteil F_l zurückzuführen (siehe Abb. 6.50 b). Erst wenn im Kernbereich der Flüssigkeitsanteil den Wert 1 erreicht hat (kurze Zeit vor $t_2 = 2600$ s), steigt die Temperatur dort über Schmelztemperatur an (Abb. 6.52 c). Der damit verbundene Einsatz der Konvektion erfordert eine starke Erhöhung der Gitterauflösung im Kernbereich.

Zum Zeitpunkt $t_2 = 2586$ s ist im gesamten Kernbereich $f_l = 1.0$ erreicht, die *mushy* Phase ist zu Gunsten einer flüssigen Phase verschwunden. Abb. 6.53 zeigt die zeitliche Entwicklung von Temperatur- und Stromfeld für Zeiten $t > t_2$, also in der zeitlichen Phase des diskreten Aufschmelzens unter Konvektionseinfluß. Sobald sich im Kernbereich eine Maximaltemperatur $T_{max} > T_m$ einstellt, bilden sich dort zwei gegenläufig drehende Konvektionsrollen aus. Konvektionsströmung und Temperaturerhöhung sorgen mit zunehmender Zeit gleichfalls für eine Vergrößerung des flüssigen Bereichs. Obwohl die Wärmeproduktion im Flüssigen mit steigendem Flüssigkeitsanteil leicht abfällt, nimmt die Intensität der Konvektionsströmung

im Inneren aufgrund der anwachsenden Höhe stetig zu. Dies wird auch am zunehmendem Einfluß der Strömung auf das Temperaturfeld deutlich.

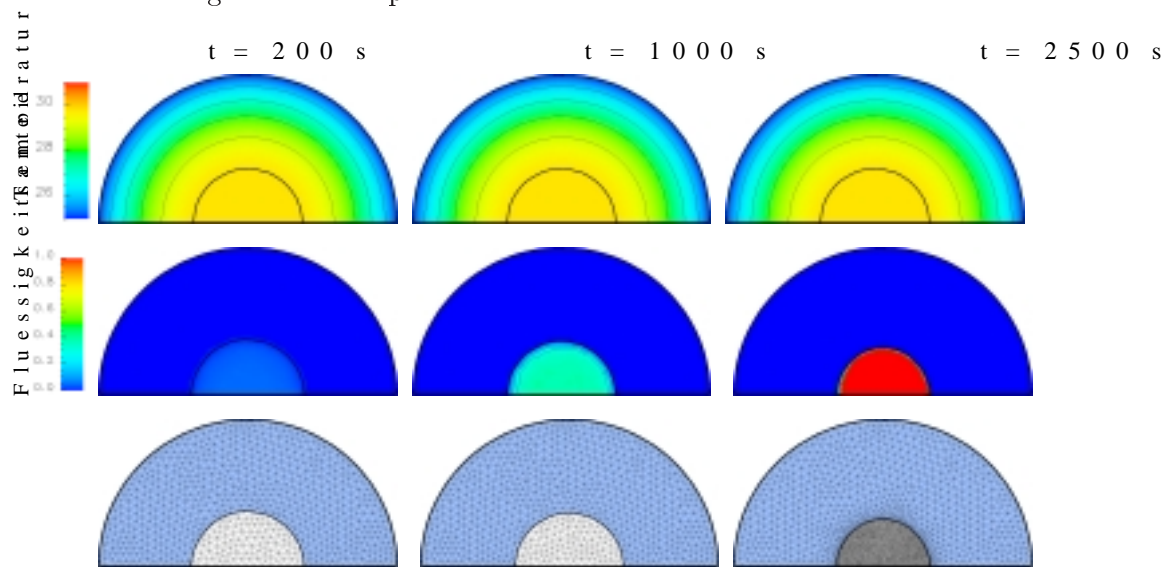


Abbildung 6.52: Temperaturen und Flüssigkeitsanteile während des inneren Aufschmelzens.

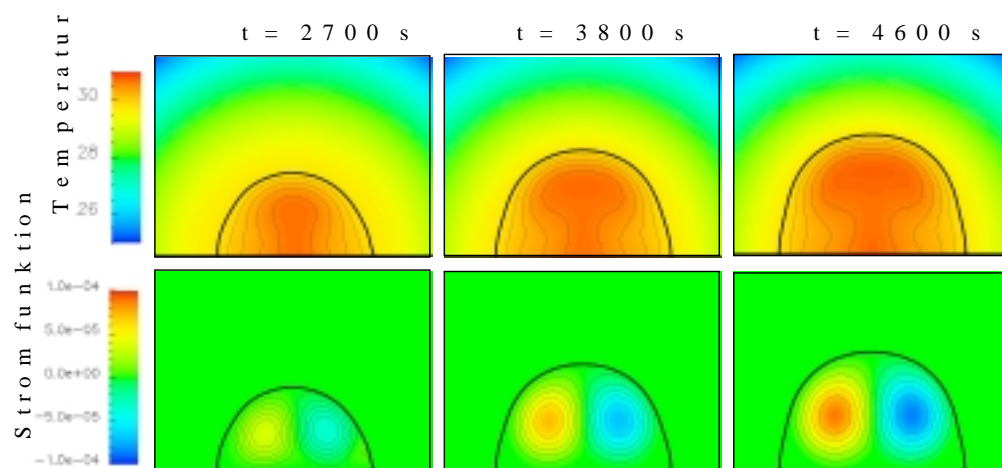


Abbildung 6.53: Temperatur- und Stromfelder während des stabilen diskreten Aufschmelzens.

Zum Zeitpunkt $t = 6900 \text{ s}$ setzt bei einem integralen Flüssigkeitsanteil von ca. 25% eine oszillatorische Strömungsinstabilität ein. Mit der tatsächlichen Wärmequellstärke $S_l(F_l = 0.33) = 228088 \text{ W/m}^3$ und einer maximalen Flüssigkeitshöhe von $H_{l,max} = 0.57 H$ errechnet sich eine effektive Rayleigh-Zahl von $Ra_{eff} = 2.9 \cdot 10^5$. Die zeitlichen Verläufe der v -Geschwindigkeit an festen Ort $x = 0, y = H/4$ und der integralen Aufschmelzrate verdeutlichen das Auftreten der Instabilität (siehe Abb. 6.54).

In der Folgezeit verursacht das Auf- und Abschwingen der Konvektionsrollen eine Symmetriebrechung, die sich auch in der Form der Phasengrenzfläche niederschlägt. Die Amplitude

der Oszillation nimmt bei zunächst weiter ansteigendem Flüssigkeitsanteil ebenfalls zu (siehe Abb. 6.55 b). Zum Zeitpunkt $t_6 = 9700 \text{ s}$ (Abb. 6.55 c) ist ein quasistationärer Schwingungszustand erreicht. Die integrale Schmelzrate pendelt bei nun konstanter Amplitude um den Mittelwert null. Im zeitlichen Mittel ist keine Vergrößerung des flüssigen Bereichs mehr zu erkennen. Infolge der beobachteten Symmetriebrechung ergibt sich eine ungleichmäßige Verteilung der Krustendicken im stationären Endzustand mit einem Dickenminimum im linken oberen Bereich. Die Simulation des Durchbrechens der Kruste bzw. der Lokalisierung des Ortes des Krustenversagens ist hier wegen der gestellten Randbedingung $T < T_m$ am gekrümmten Rand der Kavität selbstverständlich nicht möglich.

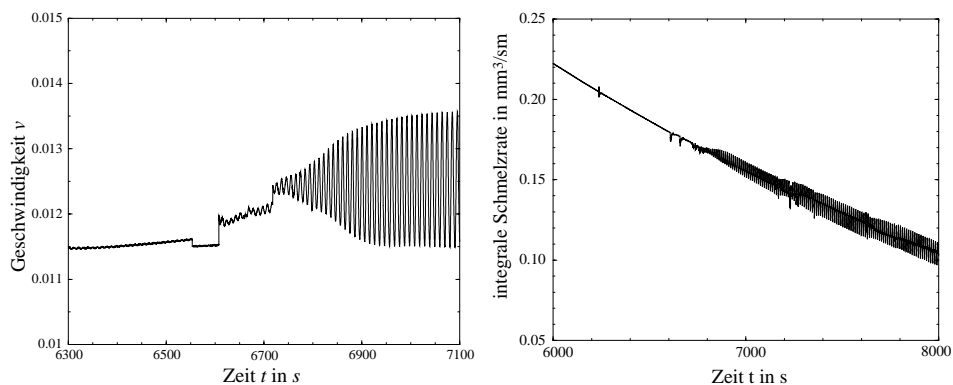


Abbildung 6.54: Einsetzen einer oszillatorischen Strömungsinstabilität: (a) v -Geschwindigkeit am Ort $x = 0, Y = H/4$, (b) integrale Schmelzrate.

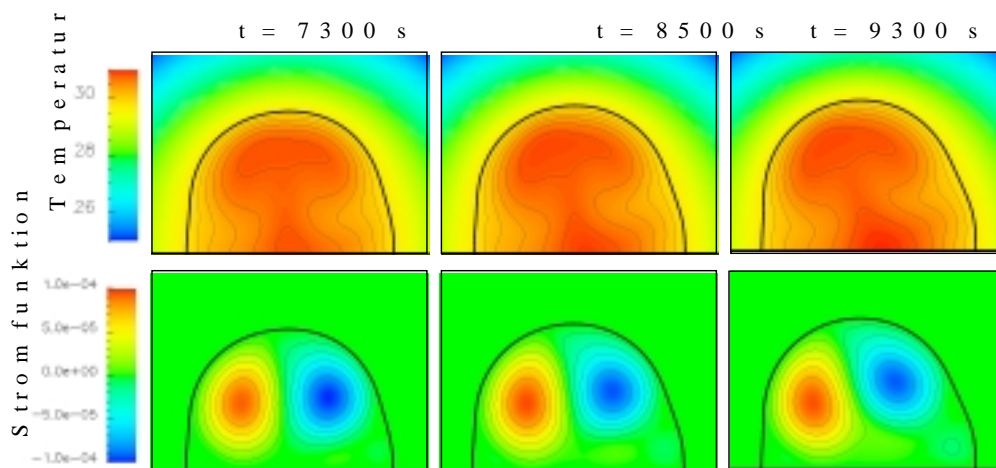


Abbildung 6.55: Temperatur- und Stromfelder während des oszillatorischen diskreten Aufschmelzens.

Abb. 6.56 zeigt neben verschiedenen Phasengrenzflächenpositionen zu ausgewählten Zeiten auch den zeitlichen Verlauf des integralen Flüssigkeitsanteils, in dem sich das oben beschriebene, charakteristische Verhalten des Systems widerspiegelt. Im Bereich des inneren Aufschmelzens ergibt sich ein leicht degressiver Anstieg des Flüssigkeitsanteils, weil die lokalen

Wärmequellstärken in festen und flüssigen Elementen mit steigendem integralen Flüssigkeitsanteil abfallen. Während des diskreten Aufschmelzens wird dieser Effekt durch zunehmenden Konvektionseinfluß zunächst überkompensiert. Mit zunehmender Größe des flüssigen Bereichs nimmt allerdings der diffusive Wärmeabtransport im Festkörper zu, so daß schon bald eine asymptotische Annäherung an den stationären Endzustand zu verzeichnen ist.

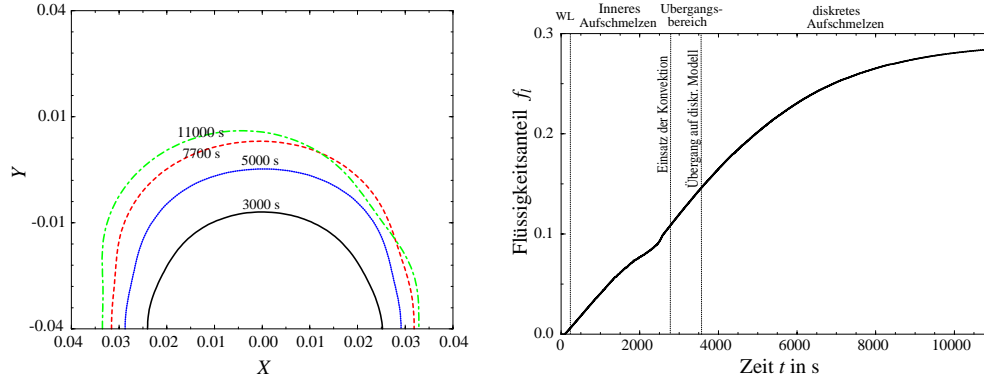


Abbildung 6.56: (a) Entwicklung der Phasengrenze während des diskreten Aufschmelzens, (b) zeitlicher Verlauf des integralen Flüssigkeitsanteil.

Weil die integrale innere Wärmeproduktion mit steigendem Flüssigkeitsanteil abnimmt, sinkt während des inneren Aufschmelzens auch die integrale Wärmeabfuhr über die isotherme Außenwand geringfügig. Die Differenz zwischen den Kurven der inneren Wärmeproduktion und der äußeren Wärmeabfuhr entspricht zu jedem Zeitpunkt der in Form von latenter und sensibler Wärme gespeicherten Energie, welche im stationären Fall zu null wird. Die integrale Damköhler-Zahl

$$Da_{int} = \frac{\dot{Q}_{in}}{\dot{Q}_{ex}} = \frac{\int_{\Omega} S d\Omega}{\int_{\Gamma} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} d\Gamma} = 1 + \frac{\int_{\Omega} (c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t}) d\Omega}{\int_{\Gamma} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} d\Gamma}, \quad (6.29)$$

die das Verhältnis von internen zu externen Wärmeströmen angibt, ist auch ein Maß für die thermische Energiespeicherung im System.

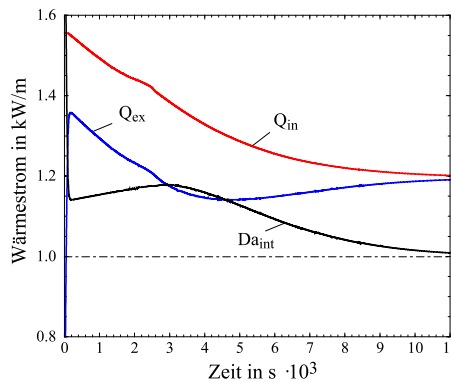


Abbildung 6.57: Zeitlicher Verlauf der integralen Wärmezu- und abfuhr sowie der integralen Damköhler-Zahl.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird ein kontrollvolumenbasiertes Finite-Elemente-Verfahren (CVFEM) auf willkürlich bewegten, unstrukturierten Dreiecksgittern vorgestellt. Das Verfahren erlaubt die numerische Simulation laminarer und inkompressibler Strömungsprobleme in komplexen zweidimensionalen Geometrien, die Phasenübergänge fest-flüssig und interne Wärmequellen beinhalten können.

Im Sinne einer gemischten Lagrange-Euler-Betrachtungsweise wird der Strömung ein willkürliches, von der eigentlichen Fluidbewegung entkoppeltes Gittergeschwindigkeitsfeld auferlegt, das direkt in den das Problem beschreibenden Erhaltungsgleichungen erscheint. Prinzipiell wird damit das erstmals 1980 von Baliga und Patankar (1980) vorgestellte Konzept eines CVFEM-Verfahrens einer klassischen Modellierung von Phasenwechselproblemen zugänglich gemacht. Diese belegt den freien Rand zu jedem Zeitpunkt mit Kanten und Knoten des numerischen Gitters und schafft so die Voraussetzung für eine explizite Anwendung der Stefanbedingung (Voller et al. 1987). *Front-tracking*-Methoden ermöglichen im Falle diskreter Phasenübergänge (mit ebenen Phasengrenzen) eine physikalischere und realitätsnähere Modellierung als gängige Fest-Gitter-Verfahren (z. B. Voller et al. 1987, Usmani et al. 1992), weil sie ohne die Einführung einer künstlichen *mushy* Zone zwischen festem und flüssigem Bereich auskommen. Im Gegensatz zu Methoden mit körperangepaßten Koordinaten (z. B. Lacroix 1992, Viswanath und Jaluria 1993) kommen Verfahren mit deformierbaren Gittern dabei ohne aufwendige Koordinatentransformationen aus.

Um unerwünschte Verzerrungen und Größenänderungen der Gitterelemente bei großskaliger Randbewegung zu vermeiden, wurde ein dynamisches Gitteradaptionstool entwickelt, das durch sukzessive *lokale* Eingriffe in die Gitterstruktur selbst bei starker Randdeformation eine gleichbleibende geometrische Gitterqualität gewährleistet. Durch eine geschickte Kombination von Verfeinerungs-, Vergrößerungs- und Entspannungsalgorithmen wird das Rechengebiet kontinuierlich dem sich verändernden Rechenraum angepaßt. Zusätzliche numerische Fehler aufgrund stark verzerrter Dreieckselemente werden vermieden. Darüberhinaus ermöglicht das adaptive Verfahren eine dynamische Steuerung und Anpassung der lokalen Auflösung, die "online" auf örtlich geänderte, physikalische Gegebenheiten (z. B. eine Änderung des Aggregatzustandes) reagieren kann.

Phasenwechselprobleme mit inneren Wärmequellen können bei makroskopischer Betrachtungsweise und Berücksichtigung der Latentwärmefreisetzung auch bei fester Schmelztemperatur kontinuierliche Phasenübergänge beinhalten, die sich durch ein (auf makroskopischen Längenskalen vorhandenes) Zweiphasengebiet (*mushy zone*) auszeichnen. Für diese Klasse von Phasenwechselproblemen wird ein Enthalpie-Modell auf bewegten Gittern vorgestellt. Basierend auf dem bewährten Festgitter-Enthalpie-Porositätsmodell von Voller et al. (1987) und einer impliziten Grenzflächendefinition über die Hilfsvariable des lokalen Flüssigkeitsanteils erfolgt dabei nach jedem Zeitschritt eine Rekonstruktion der explizit aufgelösten Phasengrenze(n). Konkret handelt es sich hier um die Weiterführung der grundlegenden Ideen von Voller und Peng (1994), die ein ähnliches Konzept am Beispiel eindimensionaler Stefanprobleme vorstellen. Ein weiterer Vorteil dieses Verfahrens ist, daß es die einfachere und flexiblere Festgitter-Enthalpie-Formulierung praktisch als einen Sonderfall beinhaltet, der bei ausgeschalteter Gitterkonvektion und Gitteradaption erreicht wird. Das Gesamtverfahren zeichnet sich somit durch hohe Flexibilität aus, wobei je nach Anwendungsfall und Problemstellung das diskrete (klassische) Phasenwechselmodell, das Enthalpie-Modell auf bewegten Gittern oder das Enthalpie-Modell auf festen Gittern gewählt werden kann.

Anhand zahlreicher Verifikations- und Anwendungsfälle wird das Potential des vorgestellten Verfahrens unter Beweis gestellt. Der Schwerpunkt wird dabei bewußt auf gerichtete Aufschmelzprobleme mit diskreten Phasenübergängen gelegt, weil hier die Vorteile der *front-tracking*-Methode am deutlichsten zum Tragen kommen. Neben dem eindimensionalen, zweiphasigen Stefan-Problem liegt das Hauptaugenmerk hier auf der Simulation zweidimensionaler Aufschmelzvorgänge unter Konvektionseinfluß mit externer Wärmezufuhr. In seitlich beheizten Kavitäten liefern Untersuchungen für Medien großer Prandtl-Zahl Resultate, die in Einklang mit theoretisch hergeleiteten Skalengesetzen stehen (Jany und Bejan 1988, Gobin und Le Quéré 1999a). Die für kleine Prandtl-Zahlen festgestellten Strömungsinstabilitäten wurden zwar im Rahmen einer Benchmarkstudie auch von anderen Autoren gefunden, eine Bestätigung durch experimentelle Daten steht aber noch aus.

Die numerischen Untersuchungen eines Aufschmelzproblems mit Beheizung von unten (Bé-*nard*-Fall) bestätigt die Existenz bimodaler Strömungsstrukturen, die von Dietsche (1984) im Experiment in einem bestimmten Rayleigh-Zahlenbereich visualisiert wurden. Diese Untersuchung zeigt aber auch die Problematik der Simulation von sehr langsam ablaufenden Phänomenen (hier: Umbildung der Grenzflächenstruktur und Einstellen eines stationären Zustandes) auf. Die exakte Transiente des experimentellen Ablaufs kann aus Gründen des numerischen Aufwands in der Simulation nicht nachempfunden werden. Aufgrund der Sensitivität der Strömungsstruktur bezüglich des vorhandenen Störungsspektrums beim Einsatz der Konvektion können sich in den Zeitskalen der Simulation mehrere Lösungen als stabil und stationär erweisen.

Weitere Anwendungsfälle offenbaren die Besonderheiten bei Aufschmelzvorgängen, die durch innere Wärmequellen initiiert werden. Nach Erreichen der Schmelztemperatur tritt hier im Reinstoff transient ein isothermes Zweiphasengebiet auf. Erst zu späteren Zeiten bildet sich eine diskrete Fest-Flüssig-Phasengrenze aus. Dieses Verhalten des Systems wird durch Veröffentlichungen anderer Autoren bestätigt. Eine Simulation eines intern beheizten

Aufschmelzfalles mit Konvektionseinfluß, die gleichzeitig eine Vorausrechnung eines Modell-experiments darstellt, beweist die Fähigkeit des Verfahrens, auch Phasenwechselprobleme mit kontinuierlichen Phasenübergängen behandeln zu können. Im besonderen ist hier die Option des Codes zu nennen, auf unterschiedliche physikalische Phänomene im transienten Zeitablauf einer Simulation mit der Anwendung unterschiedlicher numerischer Modelle reagieren zu können.

Das vorgestellte numerische Modell eines adaptiven CVFEM-Verfahrens auf bewegten Dreiecksgittern hat sich als ein attraktives und vielversprechendes Konzept zur Simulation konvektionsdominierter Aufschmelz- und Erstarrungsvorgänge in Reinstoffen erwiesen. Im jetzigen Stadium der Codeentwicklung ist die Anwendung des Codes auf *generelle* Phasenwechselprobleme noch stark eingegrenzt, weil die implementierten physikalischen und numerischen Modelle in ihrem Gültigkeitsbereich begrenzt sind. Eine Erweiterung des Codes wäre hinsichtlich mehrerer Punkte wünschenswert:

- Dreidimensionale Probleme.

Das dem numerischen Verfahren zu Grunde liegende 2d-CVFEM-Verfahren von Prakash (1986) wurde u. a. von Le Dain-Muir und Baliga (1986) erfolgreich auf drei Dimensionen erweitert. Der Übergang von Dreieckselementen auf Tetraederelemente gestaltet sich auf unbewegten Gittern als problemlos. Abstriche sind hingegen bei bewegten Gittern bezüglich der Gitteradaptionalgorithmen zu machen. Diese sind zum Teil so nicht auf drei Dimensionen erweiterbar. Außerdem besteht die Gefahr, daß der numerische Gitterbearbeitungsaufwand dann zu groß wird, so daß für dreidimensionale Probleme mit stark deformierten Rändern eventuell die Festgitter-Enthalpie-Variante zu bevorzugen ist.

- Turbulente Strömungen.

Anwendungsbeispiele für intern beheizte Kernschmelzen zeigen, daß bei realen Längenskalen sehr schnell Rayleigh-Zahlenbereiche erreicht werden, bei denen die Naturkonvektionsströmung im flüssigen Kern der Anhäufung turbulent wird. Um hier realitätsnahe Simulationen durchführen zu können, ist ein Turbulenzmodell für Auftriebsströmungen (z. B. Carteciano 1996) zu implementieren.

- Phasenwechsel in Stoffgemischen.

Die Diskretisierung einer weiteren Konvektions-Diffusionsgleichung für die Konzentration und die Berücksichtigung konzentrationsbedingter Auftriebskräfte in den Impulsgleichungen sind erforderlich, um Phasenübergänge in binären Stoffgemischen behandeln zu können. Die Anwendung des kontinuierlichen Phasenwechselmodells auf Medien, die in einem Temperaturbereich zwischen T_{sol} und T_{liq} erstarren, ist ohne zusätzlichen Programmier- und Rechenaufwand möglich.

Abschließend bleibt anzumerken, daß bereits einige der durchgeführten zweidimensionalen Simulationen auf der eingesetzten Maschine (IMB RS/6000, 512 MB RAM) bezüglich der erforderlichen CPU-Zeit an die Grenzen der Durchführbarkeit gestoßen sind. Dreidimensionale oder turbulente Rechnungen erfordern hier zwingend den Einsatz leistungsstärkerer Großrechner.

Literaturverzeichnis

- Albert, M. R. und O'Neill, K.: 1986, Moving boundary-moving mesh analysis of phase change using finite transfinite mappings, *Int. J. Num. Meth. Engg.* **23**, 591 – 601.
- Alexiades, V. und Solomon, A. D.: 1993, *Mathematical modelling of melting and freezing processes*, Hemisphere Publishing Corporation Washington - Philadelphia - London.
- Babuska, I. und Aziz, A. K.: 1976, On the angle condition in the Finite Element Method, *SIAM J. Num. Anal.* **13**, 214 – 226.
- Baliga, B. R., Pham, T. T. und Patankar, S. V.: 1983, Solution of some two-dimensional incompressible fluid flow and heat transfer problems, using a control volume finite element method, *Numer. Heat Transfer* **6**, 263 – 282.
- Baliga, B. R. und Patankar, S. V.: 1980, A new finite-element formulation for convection-diffusion problems, *Numer. Heat Transfer* **3**, 339 – 409.
- Baliga, B. R. und Patankar, S. V.: 1983, A control volume based finite element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer, *Numer. Heat Transfer* **6**, 245 – 262.
- Baliga, B. R. und Patankar, S. V.: 1988, *Elliptic Systems: Finite-element method II*, in: Handbook of Numerical Heat Transfer, eds. W. J. Minkowycz, E. W. Sparrow, R. H. Pletcher and G. E. Schneider, John Wiley, New York, pp. 421 – 461.
- Bergholz, R. F.: 1978, Instability of steady natural convection in a vertical fluid layer, *J. Fluid Mech.* **84**, 743 – 768.
- Bowyer, A.: 1981, Computing Dirichlet Tessellations, *Computer Journal* **24**(2), 162 – 166.
- Brent, A. D., Voller, V. R. und Reid, K.: 1988, Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: Application to the melting of a pure metal, *Numer. Heat Transfer* **13**, 297 – 318.
- Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A.: 1984, *Taschenbuch der Mathematik*, 21. Auflage, Verlag Harry Deutsch.
- Campbell, T. A. und Koster, J. N.: 1994, Visualization of liquid/solid interface morphology in gallium subject to natural convection, *J. Crystal Growth* **140**, 414 – 425.
- Carteciano, L. N.: 1996, *Entwicklung eines Turbulenzmodells für Auftriebsströmungen*, Dissertation, Universität Karlsruhe.

- Chan, S. H., Cho, D. H. und Kocamustafaogullari, G.: 1983, Melting and solidification with internal radiative transfer - a generalized phase change model, *Int. J. Heat Mass Trans.* **26**(4), 621 – 633.
- Chan, S. H. und Hsu, K. Y.: 1987, Generalized phase change model for melting and solidification with internal heat generation, *J. Thermophysics* **1**(2), 171 – 174.
- Chapman, M.: 1981, Fram-nonlinear damping algorithms for the continuity equation, *J. Comp. Phys.* **44**, 84 – 103.
- Chen, W. L., Ishii, M. und Grolmes, M. A.: 1976, Simple heat conduction model with phase change for reactor fuel pin, *Nucl. Sc. Eng.* **60**, 452 – 460.
- Crank, J.: 1984, *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford.
- Dalhuijsen, A. J. und Segal, A.: 1986, Comparison of finite element techniques for solidification problems, *Int. J. Num. Meth. Engg* **23**, 1807 – 1829.
- Dantzig, J. A.: 1989, Modelling liquid-solid phase changes with melt convection, *Int. J. Num. Meth. Engg* **28**, 1769 – 1785.
- Demirdzic, I. und Peric, M.: 1988, Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow, *Int. J. Num. Meth. Fluids* **8**, 1037 – 1050.
- Diaz, L. A. und Viskanta, R.: 1984, Visualization of the solid-liquid interface morphology by natural convection during melting of a solid from below, *Int. Comm. Heat Mass Transfer* **11**, 35 – 43.
- Diepers, H.-J., Beckermann, C. und Steinbach, I.: 1997, *A phase-field method for alloy solidification with convection*, in: Solidification Processing, eds. J. Beech and H. Jones, Dept. Engineering Materials, University of Sheffield, Sheffield, UK, pp. 426 – 430.
- Dietsche, C.: 1984, *Einfluß der Bénard-Konvektion auf Gefrierflächen*, Dissertation, Universität Karlsruhe.
- Dietsche, C. und Müller, U.: 1985, Influence of Bénard convection on solid-liquid interfaces, *J. Fluid Mech.* **161**, 249 – 268.
- Dirichlet, G. L.: 1850, Über die Reduktion der positiven quadratischen Formen mit drei unbestimmten Zahlen, *Z. reine angew. Math.* **40**(3), 209 – 227.
- Dorsey, N. E.: 1968, *Properties of ordinary water substance*, Hafner New York.
- Elkaim, D., Reggio, M. und Camarero, R.: 1992, Simulating two-dimensional turbulent flow by using the k - ϵ -model and the vorticity-streamfunction formulation, *Int. J. Num. Meth. Fluids* **14**, 961 – 980.
- ESSL - Engineering and scientific subroutine library, release 4*: 1990, IBM Corporation, New York.

- Fang, C. C., Sheu, T. W. H. und Tsai, S. F.: 1997, On a monotonic convection-diffusion scheme in adaptive meshes, *Num. Heat Transfer, Part B* **32**, 351 – 368.
- Ferziger, J. H. und Peric, M.: 1996, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York.
- Field, D. A.: 1988, Laplacian smoothing and Delaunay triangulations, *Comm. Appl. Num. Meth.* **4**, 709 – 712.
- Finlayson, B. A.: 1972, *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*, Academic Press, New York.
- Fox, R. W. und Donald, A. T. M.: 1982, *Introduction to fluid mechanics*, Wiley, New York.
- Franka, A. S. und Haghghi, K.: 1996, Error estimation and adaptivity in finite element analysis of convective heat transfer problems, part i: Theoretical considerations, *Num. Heat Transfer, Part B* **29**, 479 – 490.
- Frey, W. H. und Field, D. A.: 1991, Mesh relaxation: A new technique for improving triangulations, *Int. J. Num. Meth. Eng.* **31**, 1121 – 1133.
- Gadgil, A. und Gobin, D.: 1984, Analysis of two-dimensional melting in rectangular enclosures in presence of convection, *J. Heat Transfer* **106**, 20 – 26.
- Gau, C. und Viskanta, R.: 1986, Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall, *J. Heat Transfer* **108**, 174 – 181.
- Gau, C., Viskanta, R. und Ho, C.-J.: 1983, Flow visualization during solid-liquid phase change heat transfer ii. melting in a rectangular cavity, *Int. Comm. Heat Mass Transfer* **10**, 183 – 190.
- George, P. L.: 1996, *Automatic mesh generation and Finite Element computation*, in: Handbook of numerical analysis, Vol. IV, eds. P. G. Ciarlet and J. L. Lions, Elsevier Science B. V., pp. 69 – 190.
- Gibbs, N. E.: 1976, A hybride profile reduction algorithm, *ACM Trans. Math. Softw.* **2**(4), 378 – 387.
- Günther, C.: 1997a, Eine kleine Upwindfibel oder was es mit der künstlichen Diffusion auf sich hat, unveröffentlicht.
- Günther, C.: 1997b, Finite-Volumen-Methoden (FVM) für Erhaltungsgleichungen, Vorlesungsscriptum Universität Karlsruhe, Sommersemester 1997.
- Gobin, D. und Bénard, C.: 1992, Melting of metals driven by natural convection in the melt: Influence of prandtl and rayleigh numbers, *J. Heat Transfer* **114**, 521 – 524.
- Gobin, D. und Le Quéré, P.: 1999a, Melting driven by convection. A comparison exercise: first results, *Int. J. Thermal Sciences* **38**, 5–26.

- Gobin, D. und Le Quéré, P.: 1999b, Melting from an isothermal vertical wall. Synthesis of a numerical comparison exercise, *submitted to Comp. Ass. Mech. Eng. Sci.*
- Gong, Z.-X. und Mujumdar, A. S.: 1998, Flow and heat transfer in convection-dominated melting in a rectangular cavity, *J. Heat Mass Transfer* **41**(17), 2573 – 2580.
- Henkes, R. A. W. M. und Le Quéré, P.: 1996, Three-dimensional transition of natural-convection flows, *J. Fluid. Mech.* **319**, 281 – 303.
- Hirt, C. W. und Nichols, B. D.: 1981, Volume of fluid method (VoF) for the dynamic of free boundaries, *J. Comp. Phys.* **39**, 201 – 225.
- Ho, C. J. und Viskanta, R.: 1984, Heat transfer during melting from an isothermal vertical wall, *J. Heat Transfer* **106**, 12 – 19.
- Ho-Le, K.: 1988, Finite element mesh generation methods: A review and classification, *Computer-aided Design* **20**(1), 27 – 38.
- Hong, Z. C. und Liou, J. H.: 1998, Predicting natural-convection-dominated phase change problems by control volume unstructured triangular grid: Application to the melting of pure metal, *Numer. Heat Transfer, Part A* **33**, 299 – 314.
- Hookey, N. A., Baliga, B. R. und Prakash, C.: 1988, Evaluation and enhancement of some control volume finite element methods - part 1: Convection-diffusion problems, *Numer. Heat Transfer* **14**, 255 – 272.
- Hookey, N. A. und Baliga, B. R.: 1988, Evaluation and enhancement of some control volume finite element methods - part 2: Fluid-flow problems, *Numer. Heat Transfer* **14**, 273 – 293.
- Hsu, C. F., Sparrow, E. M. und Patankar, S. V.: 1981, Numerical simulation of moving boundary problems by boundary immobilization and an control-volume-based finite-difference scheme, *Int. J. Heat Mass Transfer* **24**(8), 1335 – 1343.
- Hurle, D. T. J., Jakeman, E. und Johnson, C. P.: 1974, Convective temperature oscillations in molten gallium, *J. Fluid Dynamics* **64**, 565 – 576.
- Issa, R. I., Gosman, A. D. und Watkins, A. P.: 1986, The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme, *J. Comp. Phys.* **62**, 66 – 82.
- Jang, D. S., Jetli, R. und Acharya, S.: 1986, Comparison of the piso, simpler and simplec algorithms for the treatment of the pressure-velocity coupling in steady flow problems, *Numer. Heat Transfer* **10**, 209 – 228.
- Janssen, R. J. A. und Henkes, R. A. W. M.: 1995, Influence of Prandtl number on instability mechanism and transition in a differentially heated square cavity, *J. Fluid. Mech.* **290**, 319 – 344.

- Jany, P. und Bejan, A.: 1988, Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure, *Int. J. Heat Mass Transfer* **31**(6), 1221 – 1235.
- Jayaraman, V., Udaykumar, H. S. und Shyy, W. S.: 1997, Adaptive unstructured grid for three-dimensional interface representation, *Num. Heat Transfer B* **32**, 247–265.
- Joe, B.: 1991, Geompack - a software package for the meshes using geometric algorithms, *Adv. Eng. Software* **13**(5/6), 325 – 331.
- Kurz, W. und Fisher, D.: 1986, *Fundamentals of solidification*, Trans Tech Publications Switzerland - Germany - UK - USA.
- Lacroix, M.: 1992, Prediction of natural-convection-dominated phase-change problems by the vorticity-velocity-formulation of the Navier-Stokes-equations., *Numer. Heat Transfer, Part B* **22**, 79 – 93.
- Larreteguy, A.: 1995, An equal order control-volume finite-element method for fluid flow in arbitrary triangulations, *Num. Heat Transfer, Part B* **28**, 401 – 413.
- Le Dain-Muir, B. und Baliga, B. R.: 1986, Solution of three-dimensional convection-diffusion problems using tetrahedral elements and flow-orientated upwind interpolation functions, *Num. Heat Transfer* **9**, 143 – 162.
- Le Quéré, P. und Alziary de Roquefort, T.: 1985, Transition to unsteady natural convection of air in differentially heated cavities, *Num. Meth. in Laminar and Turbulent Flows* **10**, 841 – 852.
- Le Quéré, P. und Gobin, D.: 1999, A note on possible flow instabilities in melting from the side, *Int. J. Thermal Sciences* **38**, 595 – 600.
- Lee, Y. und Korpela, A.: 1983, Multicellular natural convection in a vertical slot., *J. Fluid Dynamics* **126**, 91 – 121.
- Lewis, R. W., Huang, H. C., Usmani, A. S. und Cross, J. T.: 1991, Finite element analysis of heat transfer and flow problems using adaptive remeshing including application to solidification problems., *Int. J. Num. Meth. Eng.* **32**, 767 – 781.
- Lim, J. S. und Bejan, A.: 1992, The Prandtl number effect on melting dominated by natural convection., *J. Heat Transfer* **114**, 784 – 787.
- Lynch, D. R.: 1982, Unified approach to simulation on deforming elements with application to phase change problems., *J. Comp. Phys.* **47**, 387 – 411.
- Masson, C., Saabas, H. J. und Baliga, B. R.: 1994, Co-located equal-order control-volume finite element method for two-dimensional axisymmetric incompressible fluid flow, *Int. J. Num. Meth. Fluids* **18**, 1 – 26.
- Mavriplis, D. J.: 1996, *Mesh generation and adaptivity for complex geometries and flows*, Academic Press, pp. 417 – 460.

- Mitchell, W. F.: 1989, A comparison of adaptive refinement techniques for elliptic problems, *ACM Trans. Math. Software* **15**(4), 326 – 347.
- Müller, U.: 1999, Instabilitäten und nichtlineare Strukturbildung in Strömungen., Vorlesungsskriptum Universität Karlsruhe, Wintersemester 1998/99.
- Mohamad, A. A.: 1998, Benchmark solution for unsteady state CFD problems, *Num. Heat Transfer Part A* **34**, 653–672.
- Mohamad, A. A. und Viskanta, R.: 1991, Transient natural convection of low-Prandl-number fluid in a differentially heated cavity, *Int. J. Num. Meth. Fluids* **13**, 61–81.
- Mullins, W. W. und Sekerka, R. F.: 1964, Stability of aplanar interface during solidification of a dilute binary allow, *J. Appl. Phys.* **35**, 444–451.
- Nannsteel, M. W. und Greif, R.: 1981, Natural convection Heat Transfer in undivided and Analysis partially devided rectangular enclosures, *ASME J. Heat Transfer* **103**, 623 – 629.
- Oden, J. T., Demkowicz, L., Strouboulis, T. und Devloo, P.: 1986, *Adaptive methods for problems in solid and fluid mechanics.*, in: Acuracy estimates and adaptive refinement in Finite Element computations, eds. I. Babuska, O. C. Zienkiewicz, J. Gago and E. R. de A. Oliviera, John Wiley & Sons Ltd., New York, pp. 249 – 278.
- Oertel, H.: 1982, *Thermal Instabilities*, in: Convective Transport and Instability Phenomena, eds. J. Zierep and H. Oertel, G. Braun, Karlsruhe, pp. 3 – 24.
- Oertel, H. und Laurien, E.: 1995, *Numerische Strömungsmechanik*, Springer Verlag Berlin Heidelberg.
- Padra, C. und Larreteguy, A.: 1995, A-posteriori error estimator for the control-volume finite-element method as applied to convection-diffusion problems, *Num. Heat Transfer, Part B* **27**, 63 –80.
- Pamplin, B. R. und Bolt, G. H.: 1976, Temperature oscillation, induced in a mercury bath by horizontal heat flow, *J. Phys. D. Appl. Phys.* **9**, 145 – 149.
- Paolucci, S. und Chenoweth, D. R.: 1989, Transition to chaos in a differentially heated vertical cavity, *J. Fluid. Mech.* **201**, 379 – 410.
- Patankar, S. V.: 1980, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corp. Washington DC.
- Patankar, S. V.: 1985, A calculation procedure for two dimensional elliptic situations, *Num. Heat Transfer* **14**, 409 – 425.
- Patankar, S. V. und Spalding, D. B.: 1972, A calculation procedure for heat, mas and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat and Mass Transfer* **15**, 1787–1806.

- Peraire, J., Morgan, K. und Peiro, J.: 1990, *Numerical grid generation*, Lecture series 1990-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Brussels.
- Peraire, J., Vahdati, M., Morgan, K. und Zienkiewicz, O. C.: 1987, Adaptive remeshing for compressible flow computations, *J. Comput. Phys.* **72**, 1 – 1.
- Prakash, C.: 1986, An improved control volume finite element method for heat and mass transfer and for fluid flow using equal-order velocity-pressure interpolation, *Numer. Heat Transfer* **9**, 253 – 276.
- Prakash, C. und Patankar, S. V.: 1985, An control volume finite element method for solving the Navier-Stokes equations using equal-order velocity-pressure interpolation, *Numer. Heat Transfer* **8**, 259 – 280.
- Ramachandran, N. und Gupta, J. P.: 1982, Thermal and fluid flow effects during solidification in a rectangular enclosure, *Int. J. Heat Mass Transfer* **25**(2), 187 – 194.
- Rexroth, C.-H.: 1996, *Methoden zur effizienten Berechnung komplexer Strömungen auf unstrukturierten Gittern*, Dissertation, Universität Karlsruhe, Fakultät für Maschinenbau.
- Roache, P. J.: 1997, Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics, *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **29**, 123 – 160.
- Roux, B.: 1990, *Numerical Simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids*, Vieweg u. Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig.
- Ruan, Y. und Zabarar, N.: 1990, Moving and deforming finite element simulation of two-dimensional Stefan problems, *Comm. Appl. Num. Meth.* **16**, 495 – 506.
- Rubenstein, L.: 1971, *The Stefan Problem*, American Mathematical Society.
- Rutter, J. W. und Chalmers, B.: 1953, Prismatic substructure, *Can. J. Phys.* **31**, 15 – 39.
- Saabas, H. J. und Baliga, B. R.: 1994, Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible fluid flow - part i: Formulation, *Num. Heat Transfer* **26**, 381 – 407.
- Samarskii, A. A., Vabishchevich, P. N., Iliev, O. P. und Churbanov, A. G.: 1993, Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems - a review, *Int. J. Heat Mass Transfer* **36**, 4095 – 4106.
- Schneider, G. E. und Raw, M. J.: 1987, Control volume finite element method for heat transfer and fluid flow using colocated variables - 1. Computational procedure, *Num. Heat Transfer* **11**, 363 – 390.
- Shyy, W., Udaykumar, H. S., Rao, M. M. und Smith, R. W.: 1996, *Computational Fluid Dynamics with moving Boundaries*, Taylor and Francis, Washington DC.
- Tönhardt, R. und Amberg, G.: 1998, Phase-field simulation of dendritic growth in a shear flow, *J. Crystal Growth* **194**, 406 – 425.

- Usmani, A. S., Lewis, R. W. und Seetharamu, K. N.: 1992, Finite element modelling of natural-convection-controlled change of phase, *Int. J. Num. Meth. Fluids* **14**, 1019 – 1036.
- Van Doormal, J. P. und Raithby, G. D.: 1984, Enhancement of the simple method for predicting incompressible fluid flow, *Numer. Heat Transfer* **7**, 147 – 163.
- Viswanath, R. und Jaluria, Y.: 1993, A comparison of different solution methodologies for melting and solidification problems in enclosures, *Numer. Heat Transfer, Part B* **24**, 77 – 105.
- Voller, V.: 1997, An overview of numerical methods for solving phase change problems, *In: Advances in Numerical Heat Transfer* **1**, 341 – 380.
- Voller, V. R., Cross, M. und Markatos, N. C.: 1987, An enthalpy method for convection/diffusion phase change, *Int. J. Num. Meth. Eng.* **24**, 271 – 284.
- Voller, V. R. und Prakash, C.: 1987, A fixed grid numerical modelling methodology for convection/diffusion mushy region phase change, *Int. J. Num. Meth. Eng.* **30**, 1709 – 1719.
- Voller, V. und Peng, S.: 1994, An enthalpy formulation based on an arbitrary deforming mesh for solution of the Stefan problem, *Computational Mechanics* **14**, 492 – 502.
- Watson, D. F.: 1981, Computing the n-dimensional Delaunay tessellation with application to Voronoi polytopes, *The Computer Journal* **24**(2), 167 – 172.
- Weatherill, N. P.: 1990, *Numerical grid generation*, Lecture series 1990-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Brussels.
- Webb, B. W. und Viskanta, R.: 1986, Analysis of heat transfer during melting of a pure metal from an isothermal vertical wall, *Numer. Heat Transfer* **9**, 539 – 558.
- Winters, K. H.: 1988, Oscillatory convection in liquid metals in a horizontal temperature gradient, *Int. J. Num. Meth. Engg.* **25**, 401 – 414.
- Wolff, F. und Viskanta, R.: 1988, Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat, *Int. J. Heat Mass Transfer* **31**, 1735–1744.
- Zienkiewicz, O. C.: 1977, *The Finite Element Method*, Mc Graw-Hill, London.
- Zienkiewicz, O. C. und Zhu, J. Z.: 1987, A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *Int. J. Num. Meth. Eng.* pp. 337 – 357.

