

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6129

Numerische Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche und diskreten Phasenübergängen

R. Wittmaack

Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

August 1998



Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6129

**Numerische Simulation von Strömungen
mit freier Oberfläche und diskreten
Phasenübergängen***

R. Wittmaack

Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1998

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor
Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe
Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)
ISSN 0947-8620

Numerische Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche und diskreten Phasenübergängen

Zusammenfassung

Eine Methode zur Simulation dreidimensionaler Strömungen mit freier Oberfläche für ein-komponentige, inkompressible Newton-Fluide wird entwickelt und angewendet. Da die Hydrodynamik von den Fluideigenschaften abhängt, werden auch die Thermodynamik sowie diskrete Phasenübergänge simuliert. Neben dem Fluid werden Strukturmaterialien als hydrodynamisches Hindernis sowie als thermodynamische Struktur betrachtet.

Die Fluidynamik wird durch Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung mit Boussinesq-Approximation beschrieben. Volumenexpansion wird vernachlässigt, Turbulenzmodelle werden nicht verwendet. Eine Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche enthält viskose und Oberflächenspannungen. Die freie Oberfläche wird durch eine Höhenfunktion dargestellt. Zur Berechnung ihrer Dynamik dient eine Gleichung, die aus der kinematischen Randbedingung an der freien Oberfläche und der Integration der Kontinuitätsgleichung in vertikaler Richtung entsteht.

Zur numerischen Modellierung wird ein Finite-Volumen-Verfahren mit versetztem Gitter entwickelt. Dieses ist auf orthogonale, geradlinige Koordinatensysteme, bei denen eine Achse entgegen der Schwerkraft gerichtet ist, anwendbar, insbesondere auf kartesische Koordinaten und zweidimensionale Zylinderkoordinaten. Aus dem System von Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung wird eine Poissongleichung für den Druck entwickelt, die mit einer Tschebyscheff-Methode gelöst wird, woraus eine Druck-Geschwindigkeits-Iteration resultiert. Zur Darstellung freier Oberflächen dienen Polynome 2. und 0. Ordnung (Stufenprofil).

Wir stellen Anwendungen des Verfahrens auf verschiedene analytische Lösungen, die KATS-5 und -6 Thermitschmelzen-Ausbreitungsexperimente sowie die Reaktor-Anwendungen Corium-Rückhaltung in der Kaverne und Corium-Ausbreitung in den Ausbreitungsraum vor. Dabei zeigt sich Übereinstimmung mit experimentellen Daten und analytischen Lösungen innerhalb der Einschränkungen durch die Darstellung der freien Oberfläche und den Verzicht auf ein Turbulenzmodell.

Verschiedene physikalische Prozesse wie Gravitationswellen, Kriechströmungen, Naturkonvektion und thermodynamische Wechselwirkungen von Fluid, Strukturmaterial und Umgebung werden untersucht. Dabei werden Abhängigkeiten z. B. von Geometrie und Materialeigenschaften analysiert. So dient das Verfahren u. a. für Layout und Design von Experimenten und Kernschmelze-Rückhaltesystemen.

Numerical simulation of free surface flows with discrete phase transitions

Abstract

This thesis presents the development and application of a method for the prediction of three-dimensional free surface flows of a single-component, incompressible, Newtonian fluid. As the hydrodynamics are sensitive to the fluid properties, thermodynamics and discrete phase transitions are simulated too. In addition to the fluid, structural materials are considered as hydrodynamic obstacles and heat structures.

The fluid dynamics are described by the continuity- and Navier-Stokes' equation with the Boussinesq-approximation. Volume expansion is neglected, turbulence models are not used. A free surface pressure boundary condition includes viscous stress and surface tension. The free surface is represented by a height function. Its dynamics is computed by an equation resulting from the free surface kinematic boundary condition and the integration of the continuity equation in the vertical direction.

For the numerical representation, a finite volume method with a staggered grid is developed. It is applicable to any orthogonal, rectilinear coordinate system with one axis in opposite direction to the gravity, e. g. to Cartesian coordinates and two-dimensional cylindrical coordinates. From the system of continuity- and Navier-Stokes' equation a Poisson equation for the pressure is developed, which is solved by a Chebyshev method. This leads to a pressure-velocity-iteration. Two representations of the free surface are available, 2nd and 0th order polynomials.

We introduce applications of the method to several analytical solutions, the KATS-5 and -6 thermite spreading tests, as well as the reactor applications corium retention in the cavity and corium spreading into the spreading compartment. The predictions provide satisfactory representations of the experimental data and the analytical solutions, within the limitations imposed by the free surface representation and the renunciation of a turbulence model.

Different physical processes are analyzed, e. g. gravity waves, creeping flows, natural convection and thermodynamic interactions of fluid, structural material and surroundings. The dependence on, e. g., geometry and material properties is investigated. This way the method is used for layout and design of experiments and corium retention devices.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Abbildungsverzeichnis	4
Nomenklatur	6
1 Einleitung	
1.1 Problemstellung	11
1.2 Vorteile und Problematik numerischer Simulationen von Strömungsvorgängen	11
1.3 Bisherige Arbeiten auf dem Bereich Coriumströmungen	13
1.3.1 Experimente	13
1.3.2 Analytische Lösungen	14
1.3.3 Numerische Simulationen	15
1.4 Bisherige Arbeiten zur numerischen Modellierung auf den Bereichen Strömungen, Strömungen mit freier Oberfläche sowie Phasenübergängen	16
1.4.1 Modellierung von Strömungen	16
1.4.2 Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche	17
1.4.3 Modellierung von Phasenübergängen	18
1.5 Beitrag dieser Arbeit	19
2 Physikalisches Modell	
2.1 Geometrie und Koordinatensystem	21
2.2 Dynamik von Fluid und freier Oberfläche	22
2.3 Hydro- und thermodynamische Randbedingungen	24
2.3.1 Übersicht über die betrachteten Randbedingungen	24
2.3.2 Spannungs-Randbedingung an der freien Oberfläche	26
2.4 Phasenübergänge	28
2.4.1 Physikalische Grundlagen	28
2.4.2 Modell für diskrete Phasenübergänge	29
2.5 Mathematische Definition des Problems	32
3 Numerische Lösung	
3.1 Geometrie	34
3.1.1 Diskretisierung	34
3.1.2 Einströmmodell	39

3.2	Hydrodynamik	40
3.2.1	Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichung	40
3.2.1.1	Oberflächenintegrale und räumliche Diskretisierung	40
3.2.1.2	Variablen auf Zwischengitterplätzen	43
3.2.1.3	Zeitdiskretisierung und implizites Verfahren	44
3.2.1.4	Matrixform des impliziten Verfahrens	46
3.2.1.5	Eindimensionale Indizierung und allgemeine Eigenschaften	47
3.2.2	Geschwindigkeits-Randbedingungen	49
3.2.3	Druckgleichung und Druck-Geschwindigkeits-Iteration	51
3.2.4	Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche	56
3.3	Dynamik der freien Oberfläche	59
3.3.1	Freie Oberfläche als Polynom zweiten Grades	60
3.3.2	Freie Oberfläche als Polynom nullten Grades	64
3.3.3	Diskussion polynomischer Oberflächendarstellungen	65
3.4	Thermodynamik	67
3.4.1	Serielle Anordnung von Wärmewiderständen	67
3.4.2	Diskretisierung der Wärmetransportgleichung	67
3.4.3	Massen- und Wärmeaustausch an Maschen-Seitenflächen	70
3.4.4	Wärmestrahlung der freien Oberfläche	72
3.4.5	Strahlungs-Wärmeaustauschfläche der freien Oberfläche	73
3.5	Eigenschaften des gesamten Verfahrens	75
3.5.1	Reihenfolge der Berechnung dynamischer Variablen	75
3.5.2	Initialisierung verlassener und besetzter Fluidmaschen	75
3.5.3	Gemeinsame Eigenschaften der Differenzenverfahren	76
3.6	Numerische Stabilität	78
3.6.1	Methoden der Stabilitätsanalyse	78
3.6.2	Numerische Stabilität der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichung	79
3.6.3	Numerische Stabilität des Algorithmus für die Dynamik der freien Oberfläche	80
3.6.4	Numerische Stabilität der diskretisierten Wärmetransportgleichung	82

4	Anwendungen der Methode	
4.1	Ergebnisse der Simulationsrechnungen	84
4.2	Oszillation idealen Fluids in einem U-Rohr	85
4.3	Huppert's analytische Lösung für viskose Gravitationsströme	87
4.4	Wärmeleitung in einem rechtwinkligen Parallelepiped	91
4.5	KATS-5 und -6 Thermit-Ausbreitungsexperimente	93
4.6	Corium-Rückhaltung in der Kaverne eines KKW's	100
4.7	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum eines KKW's	107
5	Zusammenfassung und abschließende Betrachtungen	
5.1	Zusammenfassung der Ergebnisse	117
5.2	Perspektiven zukünftiger Weiterentwicklung	117
	Literaturverzeichnis	121
	Anhang 1 : Gaußscher Integralsatz für Tensoren zweiter Stufe	I
	Anhang 2 : Zusammenhang zwischen kovarianten und partiellen Ableitungen der physikalischen Komponenten von Tensoren erster Stufe	II
	Anhang 2 : Argument-Indikatorfunktionen	II
	Anhang 3 : Typen von Diffusion zwischen benachbarten Kontrollvolumina im Algorithmus zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung	II

Abbildungsverzeichnis

<u>Abb. Nr.</u>	<u>Titel</u>	<u>Seite</u>
2.1-1	Geometrische Anordnung.	21
2.4-1	Temperaturabhängigkeit von spezifischer Wärme und Enthalpie bei diskreten Phasenübergängen.	30
2.4-2	Vergleich der Gemischviskositäts-Modelle von Wittmaack, Thomas und Stedman.	35
3.1-1	Diskretisierung, versetztes Gitter, Darstellung der freien Oberfläche und Einströmmodell.	34
3.1-2	Maschenzentren und -schwerpunkte in der dritten Raumrichtung.	36
3.2-1	Integrationsbereiche der Navier-Stokes-Gleichung in der ersten und dritten Raumrichtung.	40
3.3-1	Zulässiger Massenaustausch bei der Berechnung des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals für die Stufendarstellung der freien Oberfläche.	64
3.4-1	Mit Fluid bedeckte Maschenlänge und Strahlungsmaschenlänge.	72
4.2-1	Oszillation idealen Fluids im U-Rohr. Geometriemodell.	85
4.2-2	Oszillation idealen Fluids im U-Rohr. Position der freien Oberfläche und mechanische Energie.	87
4.3-1	Huppert-Lösung. Freie Oberfläche und Frontpropagation.	91
4.4-1	Wärmeleitung im Parallelepipet. Vergleich von numerischer und analytischer Lösung.	93
4.5-1	Geometriemodell für KATS-5 und KATS-6.	94
4.5-2	KATS Tests. Freie Oberfläche und Frontpropagation.	97-98
4.5-3	KATS Tests. Fluidhöhe an den Thermoelementen, mechanische Energie des Fluids und Energietransfer an die Umgebung.	99
4.5-4	KATS Tests. Extremale Fluidtemperaturen und Substrattemperaturen.	100
4.6-1	Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Geometriemodell.	101
4.6-2	Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Geschwindigkeitsprofile und Isothermen der Naturkonvektion bei $t = 600$ s.	104
4.6-3	Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Temperaturen von Fluid und Tor zum Ausbreitungsraum.	105
4.6-4	Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Energiebilanz und Massenanteile der festen Phase.	106
4.7-1	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Geometriemodell.	108
4.7-2	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Spezifische Enthalpie der Coriumemulsion.	110

<u>Abb. Nr.</u>	<u>Titel</u>	<u>Seite</u>
4.7-3	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Kinetische Energie und Höhe auf der Symmetrieebene an der Außenwand des Ausbreitungsraums des Coriums bei verschiedener Torfläche.	111
4.7-4	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Dynamik der freien Oberfläche.	112-113
4.7-5	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Freie Oberfläche auf der Symmetrieebene, thermische Energiebilanz und extremale Fluidtemperaturen.	114
4.7-6	Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Vergleich von kinetischer Energie und minimaler Temperatur des Coriums bei grobem und feinem Gitter.	115
5.2-1	Massenaustausch ohne Impulsaustausch.	118

Nomenklatur

Lateinische Symbole

<u>Symbol</u>	<u>SI-Einheit</u>	<u>Beschreibung</u>	<u>Definition</u>
A	verschiedene	Quadratische reelle Matrix	
A_γ	m^2	Westliche, südliche, untere Maschenfläche (Fläche in x_γ -Richtung)	
Ac_γ	m^2	Westl., südl., untere von Fluid benetzte Maschenfläche (in x_γ -Richtung)	
Ar_3	m^2	Maschenfläche für Strahlungsaustausch mit der Umgebung	
a	verschiedene	Tensor erster oder zweiter Stufe	
a_0, a_1, a_2	m, -, m^{-1}	Koeffizienten der Darstellung der freien Oberfläche als Polynom 2. Ordnung	
Bo	-	Bondzahl	$Bo := \frac{\rho \ \bar{g}\ }{\alpha} (x_{1\ell c} - x_{10})^2$
c	-	Kopplungskonstante für Wärmeleitung	
c_p	J / (kg K)	Spezifische Wärme bei konstantem Druck	
d	s^{-1}	Tensor der Scherrate	$d_{ik} := 0.5 (\nabla_i v_k + \nabla_k v_i)$
$d\dot{V}_\gamma$	$m^3 s^{-1}$	Volumentransfer pro Zeiteinheit durch die rechte Maschenwand in x_γ -Richtung	
dp	Pa	Druckkorrektur	
dx_γ	m bzw. rad	Koordinateninkrement zwischen Maschenzentren	
dxm_3	m	Koordinateninkrement zwischen Maschenschwerpunkten in x_3 -Richtung	
\bar{F}	N	Kraft	
F_γ, \hat{F}_γ	m / s	Operator des impliziten bzw. expliziten Verfahrens zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung	
Fr	-	Froudezahl	$Fr := \frac{\ \bar{v}\ ^2}{\ell \ \bar{g}\ }$
f	$m^2, -$	Oberflächenelement, Mischungsfaktor	
f2, f2c	- bzw. m	Hilfsgrößen zur einheitlichen Darstellung bei unterschiedlicher Geometrie	
G_γ, \hat{G}_γ	m / s	Operator des impliziten bzw. expliziten Verfahrens zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung	
\bar{g}	m/s^2	Gravitationsbeschleunigung auf der Erdoberfläche	
H	J	Enthalpie	
h	J / kg	Spezifische Enthalpie	
imat	-	Materialindex	

Symbol	SI-Einheit	Beschreibung	Definition
jwn, jws	-	Nördlicher, südlicher Index für Fluideinströmung am westlichen Rand	
kmx, kmn	-	Extremale vertikale Maschenindizes der freien Oberfläche von Nachbarsäulen	$kmx_{\gamma i, i_2} := \max\{kt, kt_{i_{\gamma+1}}\}$ $kmn_{\gamma i, i_2} := \min\{kt, kt_{i_{\gamma+1}}\}$
kt	-	Vertikaler Maschenindex der Position der freien Oberfläche	
ktn	-	Vertikaler Index der obersten nicht mit Fluid gefüllten Masche unterhalb der die freie Oberfläche enthaltenden Masche	
kwu, kwl	-	Oberer, unterer Maschenindex für Fluideinströmung am westlichen Rand	
ℓ	m	Charakteristische Länge	
ℓ_{γ}	m bzw. rad	Maschenlänge in x_{γ} -Richtung	
$\tilde{\ell}_{\gamma}$	m	Krummlinige Maschenlänge in x_{γ} -Richtung	
ℓc_{γ}	m	Mit Fluid bedeckter Anteil der Maschenlänge in x_{γ} -Richtung	
ℓcd	-	Logische Variable zur Identifikation von Kontrollvolumina zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung	
$\ell f, \ell h$	-	Logische Variablen zur Identifikation von Fluidmaschen	
ℓr_{γ}	m	Anteil der Maschenlänge in x_{γ} -Richtung für Strahlung zur Umgebung	
m	kg	Masse des Fluids bzw. Strukturmaterials	
N	-	Menge direkter Nachbarmaschen von Masche (i, j, k)	
\bar{n}	-	Normalen-Einheitsvektor der freien Oberfläche	
n_{γ}	-	Anzahl der Maschen in x_{γ} -Richtung im Berechnungsbereich	
nmat	-	Anzahl der Materialien	
nv_{γ}	-	Anzahl der Variablen in x_{γ} -Richtung	
P_d	W / m ³	Leistungsdichte innerer Wärmequellen bzw. -senken	
Pr	-	Prandtlzahl	$Pr := \frac{\mu c_p}{\lambda}$
p	Pa	Druck	
Q	J	Wärme	
\dot{q}	W / m ²	Wärmestromdichte	
Ra	-	Rayleighzahl bei inneren Wärmequellen	$Ra := -\frac{(\partial_T \rho)_{T_0} \rho c_p P_d g \ell^5}{\mu \lambda^2}$
Re	-	Reynoldszahl	$Re := \frac{\ \bar{v}\ \ell}{\nu}$

Symbol	SI-Einheit	Beschreibung	Definition
r_γ	m	Hauptkrümmungsradius der Oberfläche in x_γ -Richtung	
T, T_0	K	Temperatur, Anfangstemperatur	
t, \vec{t}_γ	s ; -	Zeit, Einheitsvektor tangential zur freien Oberfläche in x_γ -Richtung	
V	m^3	Volumen des Fluids bzw. Strukturmaterials	
V_c	m^3	Volumen einer vertikalen Säule von Maschen bis zur freien Oberfläche	
V_o	m^3	Von Fluid besetztes Maschenvolumen	
\vec{v}	m / s	Geschwindigkeit	
vd_γ	m / s	'Upwind'-Geschwindigkeit in x_γ -Richtung, $\gamma \in \{1,2\}$, zur Berechnung von vh_γ bei Stufendarstellung der freien Oberfläche	
vh_γ	m^2 / s	Geschwindigkeits-Höhen-Integral in x_γ -Richtung, $\gamma \in \{1,2\}$	
vhk_γ	m^2 / s	Einzelbeiträge des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals in x_γ -Richtung, $\gamma \in \{1,2\}$	
x	m	Krummlinige, schiefwinklige Raumkoordinate, Gitterkoordinate an westl. oder südl. Seite oder am Boden einer Masche	
x_c	m	Maschenzentrums-Koordinate	
x_{fi}, x_{so}	-	Massenanteil der flüssigen, bzw. festen Phase	
<u>Griechische Symbole</u>			
α	N / m , -	Oberflächenspannungs-Koeffizient, Exponent zeitlicher Volumenänderung	
β	$W / (m^2 K)$	Konvektions-Wärmeübergangskoeffizient	
γ, δ, ϕ	-	Identifikatoren der Raumkoordinaten	
δ_h, δ_t	m	Hydro- und thermodynamische laminare Grenzschichtdicke	
Δ	-	Kleiner Beitrag	
ϵ	-	Strahlungs-Emissivität	
ϵ_h, ϵ_v	m , s^{-1}	Kleine Höhe, kleine zeitliche Veränderung des relativen Maschenvolumens	
ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2	- , m, m^2	Koeffizienten der Polynomdarstellung des Volumens einer vertikalen Säule von Maschen bei Darstellung der freien Oberfläche als Polynom 2. Ordnung	
λ	$W / (m K)$	Wärmeleitfähigkeit	
μ	Pa s	Dynamische Viskosität	
ν	m^2 / s	Kinematische Viskosität	$\nu := \frac{\mu}{\rho}$
Π	Pa	Impulsflußdichtetensor	$\Pi_{ik} := \rho_0 v_i v_k - \sigma_{ik}$

Symbol	SI-Einheit	Beschreibung	Definition
θ	m^2 / s	Kopplungskonstante der Diffusion	
ρ, ρ_0	kg / m^3	Dichte, Dichte bei Temperatur T_0	
σ	Pa	Spannungstensor und	$\sigma_{ik} := \sigma'_{ik} - p g_{ik}$
	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$	Stefan-Boltzmann-Konstante	
σ'	Pa	Viskoser Spannungstensor	
Ω	m^3	Gebiet, Kontrollvolumen	
ω	-	Überrelaxationsparameter	

ψ	$\text{W} / (\text{m}^2 \text{K})$	Effektive Wärmeleitfähigkeit	$\psi_\gamma := 2 c_\gamma \left(\frac{\ell_\gamma}{\lambda} + \frac{\ell_{\gamma i_\gamma + 1}}{\lambda_{i_\gamma + 1}} + \frac{2}{\beta_\gamma} \right)^{-1}$
--------	------------------------------------	------------------------------	--

ξ m Höhenfunktion der freien Oberfläche

Indizes die oben und unten auftreten

Symbol	Beschreibung	Definition
--------	--------------	------------

i, j, k auch i_1, i_2, i_3 ; Raumkoordinaten-Indizes; Raumdiskretisierungs-Indizes (nur unten)

ℓ, m, n Einstein-Summationsindizes für Raumkoordinaten

Untere Indizes

a Umgebung des Fluids, für Strahlung ('ambient')

b Boden des Fluids (untere Berandung)

c Fluidanteil einer vertikalen Säule von Maschen, bzw. kritisch beim
Volumenvariationsexponenten

f Fluid

ℓe Front des Fluids ('leading edge')

$\ell i, \ell s$ Flüssige Phase ('liquid'), Liquidus

o Mit Fluid besetzt ('occupied')

pt Phasenübergang ('phase transition')

s Umgebung des Fluids ('surroundings')

so, ss Feste Phase ('solid'), Solidus

γ, δ Maschenindizes für Raumkoordinaten (in, bzw. senkrecht zur Richtung der Navier-Stokes-Gleichung), $\gamma \in \underline{3} \setminus \{0\}$, $\delta \in \underline{3} \setminus \{0, \gamma\}$

Obere Indizes

n Zeitdiskretisierungs-Index

ζ Iterationsindex

Zur Vereinfachung der Notation werden die Diskretisierungsindizes i, j, k (bzw. i_1, i_2, i_3) und n nur beim ersten Auftreten einer Größe notiert und anschließend nicht mehr, wenn Verwechslungen ausgeschlossen sind.

Symbol	Beschreibung	Definition
<u>Mathematische Symbole</u>		
d	Differential	
d_t	Totale Zeitableitung	$d_t := \frac{d}{dt}$
∂	Topologischer Rand eines Gebiets	
∂_t	Partielle Zeitableitung	$\partial_t := \frac{\partial}{\partial t}$
∂_i	Partielle Ableitung in der krummlinigen Raumrichtung i	$\partial_i := \frac{\partial}{\partial x^i}$
∇_i	Kovariante Ableitung in Raumrichtung i	
δ	Kronecker Tensor ;	$\delta_j^k := 1$ für $j = k$; $\delta_j^k := 0$ für $j \neq k$
ε	Total antisymmetrischer Tensor 3. Stufe	$\varepsilon_{ijk} := \bar{g}_i (\bar{g}_j \times \bar{g}_k)$
\in	Symbol für : Ist Element der Menge	
$Gl(n, \mathfrak{R})$	Menge regulärer, reeller $n \times n$ Matrizen	
\bar{g}_i, \bar{g}^i	Ko- und kontravariante Basisvektoren in Raumrichtung i	
g	Metrischer Tensor	$g_{ik} := \bar{g}_i \bar{g}_k$; $g^{ik} := \bar{g}^i \bar{g}^k$
Γ	Christoffel-Symbol	
κ	Multiplikator für Christoffel-Symbol Terme	
	Für Zylinderkoordinaten und $i = 2$ und $j \in \{1, 2\}$:	$\kappa_{ij} = 1$
	In allen anderen Fällen :	$\kappa_{ij} = 0$
\underline{n}	Symbol zur Definition einer Menge natürlicher Zahlen	$\underline{n} := \{0, 1, \dots, n\}$
\mathfrak{N}	Menge der natürlichen Zahlen	
\mathfrak{R}	Menge der reellen Zahlen ; $\mathfrak{R}^* := \mathfrak{R} \setminus \{0\}$	
Rp, Rn	Indikatorfunktion für positives, negatives Argument	siehe Anhang 2
\setminus	Mengentheoretisches Symbol für : Mit Ausnahme von	
\neg	Logische Negation	

1 Einleitung

1.1 Problemstellung

Seit dem Reaktorunglück in Tschernobyl werden die Forschungsarbeiten im Bereich schwerer Unfälle von Kernkraftwerken intensiviert. Bei schweren Unfällen schmelzen die Reaktor-Brennelemente infolge der postulierten Funktionsuntüchtigkeit der Kühleinrichtungen. Im weiteren Unfallverlauf werden metallische Strukturen im Inneren des Reaktors durch die radioaktive Nachwärme geschmolzen, Hassmann, Hosemann und Peehs [39]. Die dabei entstehende Kernschmelze, auch Corium genannt, besteht aus nicht mischbaren oxidischen und metallischen Konstituenten.

Bei den derzeit im Einsatz befindlichen Kernkraftwerken kann das Corium bei schweren Unfällen mit Betonstrukturen des Reaktors in Kontakt kommen. Die dann einsetzende Wechselwirkung des Coriums mit dem Beton gefährdet die Integrität des Reaktors, da der Beton zersetzt wird und der Druck im Containment ansteigt. Zudem reagiert der aus dem Beton freigesetzte Wasserdampf exotherm mit dem metallischen Corium, wobei Wasserstoff erzeugt wird, was zu Bränden und Detonationen führen kann, Foit, Reimann et. al. [28].

Insbesondere bei der Auslegung zukünftiger Reaktoren möchte man die Stabilisierung und langfristige Kühlung des Coriums bei schweren Unfällen sicherstellen. Dazu ist es erforderlich, geeignete Konzepte zu erstellen und ihre Funktionstüchtigkeit zu prüfen. Da experimentelle Untersuchungen mit dem radioaktiven Corium insbesondere in großen Geometrien unerwünscht sind, bieten sich numerische Simulationen der dabei auftretenden Strömungsvorgänge an.

Ein Coriumströmungsproblem besteht aus einer Vielzahl physikalischer Prozesse wie Strömung eines mehrkomponentigen, mehrphasigen nicht-Newtonschen Fluids mit freier Oberfläche, Wärmetransportvorgängen durch Konvektion, Leitung und Strahlung sowie Schmelz- und Erstarrungsvorgängen. Obwohl bereits verschiedene Lösungsansätze für einzelne Teile des Problems existieren, ist keines der bereits vorhandenen Verfahren imstande Coriumströmungen im gesamten Umfang zu simulieren.

Um die Korrektheit und die Leistungsfähigkeit eines Simulationsverfahrens zu prüfen, ist es erforderlich, zusätzlich zu den Coriumströmungen weitere Strömungsvorgänge, deren Verlauf bekannt ist, zu simulieren. Dazu sind Experimente und analytische Lösungen geeignet, die sich auf einzelne der obigen physikalischen Prozesse beschränken. Darum besteht das Ziel dieser Arbeit darin, die Basis eines numerischen Simulationsverfahrens zu entwickeln, das auf Corium und andere Substanzen anwendbar ist.

1.2 Vorteile und Problematik numerischer Simulationen von Strömungsvorgängen

Im Vergleich zu analytischen und experimentellen Methoden bieten numerische Simulationen zahlreiche Vorteile. So sind analytische Lösungen für viele praxisrelevante Probleme nicht verfügbar.

Experimentelle Untersuchungen sind oft vergleichsweise langsam und teuer oder kaum möglich, etwa bei großen Geometrien, hohen Temperaturen, toxischen oder brennbaren Substanzen. Da numerische Analysen meist vergleichsweise wenig Aufwand erfordern, ist es möglich, eine Vielzahl ähnlicher Probleme zu untersuchen, die sich etwa in Geometrie, Anfangs- oder Randbedingungen unterscheiden, und damit die Topologie des Problems zu studieren. Auch ist die experimentelle Realisierung idealisierter Bedingungen wie idealer Fluide oder adiabatischer Berandungen schwierig.

Ein weiterer Vorteil numerischer Analysen ist die Vollständigkeit der Information, da alle Variablen im gesamten Berechnungsgebiet bekannt sind. Im Gegensatz dazu sind experimentelle Bestimmungen von Variablen oft schwierig, wie etwa bei der Strömungsgeschwindigkeit oder dem Druck. Auch bewirkt eine Messung eine Störung des Systemverhaltens, die nicht immer vernachlässigbar ist. Da bei Computersimulationen der Einfluß physikalischer Modelle auf das makroskopische Systemverhalten direkt analysiert werden kann, wie etwa in komplex wechselwirkenden Systemen, bilden sie ein Bindeglied zwischen theoretischen und experimentellen Methoden, Mouritsen [59].

Es ist jedoch wichtig, auch die Beschränkungen von Computeranalysen im Blickfeld zu behalten. Im Gegensatz zu Experimenten, die alle physikalischen Effekte der Natur enthalten, sind Computersimulationen auf ein mathematisches Modell bezogen und dadurch beschränkt. Für schwierige Probleme, die etwa durch komplexe Geometrien, starke Nichtlinearitäten, komplizierte Materialeigenschaften oder chaotisches Verhalten charakterisiert sind, ist es nicht immer möglich, eine hinreichend präzise numerische Lösung zu erzeugen. Zusätzlich kann die Genauigkeit von Simulationen durch ungeeignete numerische Umsetzung des mathematischen Modells beeinträchtigt sein.

Analytische Lösungen und experimentelle Daten bilden die Grundlage zur Verifikation und Validierung von Simulationsverfahren. Andererseits dienen Simulationsrechnungen zur Planung von Experimenten. Darum ergänzen sich experimentelle, numerische und theoretische Untersuchungsmethoden. Viele Probleme von Simulationsmethoden werden durch die Entwicklung geeigneter numerischer Verfahren sowie die Leistungssteigerung von Rechnern überwunden. Darum ist insgesamt zu erwarten, daß Simulationen zukünftig an Bedeutung gewinnen.

Besondere Schwierigkeiten ergeben sich bei der Simulation von Strömungen unter anderem dann, wenn zusätzliche Wechselwirkungen, außergewöhnlich komplexe bzw. zeitabhängige Geometrien, zeitlich veränderliche freie Oberflächen, Phasenübergänge oder aus mehreren Phasen bzw. Komponenten zusammengesetzte strömende Medien berücksichtigt werden müssen.

Zu den in Anwendungen wichtigsten Wechselwirkungen gehören chemische, z. B. Verbrennungsvorgänge, und elektromagnetische, wie in den magnetohydrodynamischen Strömungen. Zur Einbeziehung zusätzlicher Wechselwirkungen ist es erforderlich, weitere Gleichungen zu lösen,

die mit den Gleichungen der Fluidodynamik oft nichtlinear, und damit schwer analysierbar, gekoppelt sind.

Bei aus mehreren Phasen bzw. Komponenten zusammengesetzten Fluiden treten vielfältige Wechselwirkungen der verschiedenen Spezies untereinander auf, die unter anderem von dem a priori unbekanntem Verlauf der Phasentrennflächen abhängen. Darüber hinaus erschweren die dynamische Erzeugung und Vernichtung sowie Fragmentation und Koaleszenz der einzelnen Spezies die Erfassung der Phasentrennflächen. Selbst wenn alle physikalischen Prozesse hinreichend bekannt sind und genügend präzise modelliert werden können, stellt die zeitliche und räumliche Auflösung der Unstetigkeiten in Form von Phasentrennflächen in einem diskreten Gitter eine große Schwierigkeit dar.

Während einfache Strömungen bereits in den Anfängen der elektronischen Datenverarbeitung in den fünfziger Jahren numerisch simuliert wurden, sind beispielsweise Probleme mit bewegten freien Oberflächen, wie etwa Dammbüche, erst 1965 mit dem Aufkommen der 'Marker and Cell' Methode durch Harlow und Welch [38] behandelt worden. Auch die Simulation von Schmelz- und Erstarrungsvorgängen findet erst spät Eingang in die wissenschaftliche Literatur. Die erste uns diesbezüglich bekannte Veröffentlichung erschien 1977 von Sparrow, Patankar und Ramadhyani [79], welche einen zweidimensionalen Schmelzvorgang im Zusammenhang mit Naturkonvektion analysiert.

Obwohl es seit längerem Lehrbücher über numerische Strömungsmechanik und numerische Behandlung von Wärmeübertragungsprozessen gibt, wie die Bücher von Gosman et. al. [32] 1969 und Roache [68] 1972, sind die zuvor als 'schwierig' bezeichneten Probleme, mit Ausnahme der Verbrennungsvorgänge, erst später einbezogen worden. So werden freie Oberflächen erst in den Büchern von Bulgarelli et. al. [7] 1984, Oran und Boris [61] 1987, Shyy [75] 1994 und Shyy et. al. [76] 1996 behandelt.

1.3 Bisherige Arbeiten auf dem Bereich Coriumströmungen

1.3.1 Experimente

Im Folgenden geben wir eine kurze Beschreibung einiger im Zusammenhang mit Coriumströmungsproblemen wichtiger Experimente.

Das französische Kernforschungszentrum CEA in Grenoble studiert in den CORINE-Experimenten die isotherme Ausbreitung von Wasser und Glycerin in einem Zylindersegment. Zudem werden Versuche mit Erstarrungsvorgängen unter der Verwendung von Wismut-Zinn Mischungen und geschmolzenen Salzen durchgeführt, Veteau und Wittmaack [88].

Das Forschungszentrum für Technik und Umwelt in Karlsruhe führt die KATS Experimente mit Schmelzen aus 300 kg Thermit durch. Dabei analysiert man die Ausbreitung von geschmolzenem

Al_2O_3 und Fe mit Anfangstemperaturen im Bereich von etwa 1900 - 2400 K in trockenen und mit Wasser gefüllten Kanälen, Fieg, Huber, Werle und Wittmaack [23].

Zu den wenigen bislang mit coriumähnlichen Schmelzen durchgeführten Versuchen gehört das von dem Metallgießereibetrieb Siempelkamp in Krefeld durchgeführte COMAS-Programm, bei dem bis zu 3000 kg Schmelze mit Anfangstemperaturen im Bereich von 2400 K in Kanälen ausgebreitet werden. Infolge ihrer Herstellung im Induktionsofen enthalten die Schmelzen einen großen Metallanteil.

Beim europäischen Kernforschungszentrum JRC Ispra in Varese, Italien, steht die Ausführung der FARO Ausbreitungsversuche mit 200 kg Schmelze, die zu 80 % aus UO_2 und zu 20 % aus ZrO_2 besteht, kurz bevor. Die ebene Ausbreitungsfläche hat die Form eines Zylindersegments, der Volumenstrom soll etwa 10 ℓ/s betragen und die angestrebte Anfangstemperatur liegt 100 K oberhalb der Liquidustemperatur.

Das französische Kernforschungszentrum CEA in Cadarache plant im Rahmen des VULCANO Projektes Ausbreitungsexperimente mit bis zu 100 kg Kernschmelze ähnlicher Zusammensetzung wie bei FARO. Man entwickelt einen speziellen Drehofen zur Herstellung der Schmelze. Der angestrebte Volumenstrom beträgt 1 ℓ/s , die Temperatur etwa 3000 K.

1.3.2 Analytische Lösungen

In der Literatur findet man analytische Lösungen für Gravitationsströme auf ebenem Untergrund für unterschiedliche Strömungsregime. Man definiert Strömungsregime, die in der Praxis nicht immer oder nur näherungsweise angenommen werden, durch die Dominanz von Trägheits-, Gravitations-, Zähigkeits- oder Oberflächenkräften. Ebene und zylindrische hydrodynamische Gravitationsströme mit dominanten Zähigkeits- und Gravitationskräften werden 1982 von Didden und Maxworthy [14] sowie 1982 und 1986 von Huppert [42] [43] betrachtet. Daraus resultieren analytische Ausdrücke für die Propagation der Front und den Zeitpunkt des Übergangs in das betrachtete Strömungsregime. Rottman und Simpson [70] studieren die Anfangsphase ebener Gravitationsströme experimentell und mit Hilfe einer Charakteristikenanalyse. Sie zeigen, daß der Übergang in das durch Trägheits- und Gravitationskräfte bestimmte Regime zu dem Zeitpunkt erfolgt, an dem das an der Symmetrieachse reflektierte Signal die Front erreicht. Fannelop und Waldman [20] finden analytische Ausdrücke für die Ausbreitung einer Ölfront in tiefem Wasser bei Dominanz von Trägheits- und Gravitationskräften, Zähigkeits- und Gravitationskräften oder Zähigkeits- und Oberflächenkräften. Foit [29] sowie Sakimoto und Zuber [71] leiten analytische Ausdrücke für die Frontpropagation ebener und zylindrischer Gravitationsströme mit zeitabhängiger Viskosität her. Filatoff und Lasek [24] finden eine analytische Lösung für Rohrströmungen mit temperaturabhängiger Viskosität und wenden sie auf Magma an.

Zusätzlich zu den analytischen Lösungen werden Dimensionsanalysen und auf Experimenten basierende Korrelationen publiziert, z. B. von Moody [58], Ehrhard [16], Greene et. al. [33], sowie von Griffiths und Fink [35]. Die Anwendbarkeit dieser Arbeiten beschränkt sich auf einfache Geometrien. Obwohl in den genannten Arbeiten die Dynamik des Problems sowie wichtige physikalische Effekte wie Oberflächenspannung oder Thermodynamik teilweise oder gänzlich unberücksichtigt bleiben, sind sie hilfreich für Abschätzungen.

Für stationäre und instationäre Wärmeleitungsprobleme mit verschiedenen Geometrien, Anfangs- und Randbedingungen liegen analytische Lösungen vor, Kakac und Yener [46], Carslaw und Jaeger [8] sowie Gebhart [31]. Bei Carslaw und Jaeger findet man auch analytische Lösungen eindimensionaler Stefan-Probleme, d. h. von Wärmetransportproblemen mit Schmelzen bzw. Erstarren des Fluids, bei denen Wärme von der flüssigen zur festen Phase strömt, siehe Abschnitt 2.4.

1.3.3 Numerische Simulationen

Im Vergleich zu analytischen Lösungen, Dimensionsanalysen und Korrelationen ermöglichen Computer-Simulationen wesentlich umfassendere Analysen. So können heute Strömungen in komplexen, irregulären, bewegten Geometrien berechnet werden, wobei das betrachtete Fluid aus verschiedenen, miteinander wechselwirkenden Komponenten und Phasen bestehen kann. Zudem sind Kopplungen u. a. an thermodynamische und chemische Prozesse sowie Phasenübergänge simulierbar. Im Folgenden geben wir eine kurze Beschreibung einiger Simulationsverfahren von Corium- und Lavaströmungen.

Das von Farmer et. al. [21] am ANL-Forschungszentrum in Argonne, Illinois, USA, zum Studium von Reaktorunfällen entwickelte Rechenprogramm MELTSPREAD enthält ein eindimensionales Modell für inkompressible Einkomponenten-Strömung verschiedener Bestandteile mit Wärmeübergängen an die Umgebung und Krustenbildung des Fluids. Die Hydrodynamik wird durch eine Euler-Gleichung mit Reibungskorrelation und statischem Druck einfach modelliert. Als Substrat wird Beton betrachtet, darum ist die Wechselwirkung von Corium und Beton modelliert. Diese besteht aus Aufheizung des Betons mit anschließender Zersetzung, Mischung des Coriums mit Zersetzungsprodukten des Betons, Blasendurchströmung des Coriums durch die freigesetzten Gase sowie chemischen Reaktionen der metallischen Coriumbestandteile mit den freigesetzten Gasen. Da diese Prozesse erst im Bereich von Minuten wirksam werden und man andererseits davon ausgeht, daß die Ausbreitung von Schmelze bei hinreichend hohen Temperaturen in dieser Zeit bereits abgeschlossen ist, eignet sich MELTSPREAD für Studien des Langzeitverhaltens. Die einfachen Geometrie- und Hydrodynamikmodelle schränken den Anwendungsbereich für Analysen des Kurzzeitverhaltens ein.

Am Nuclear Safety Institute in Moskau wurde nach dem schweren Unfall in Tschernobyl das Rechenprogramm RASPLAV, Chudanov et. al. [12], entwickelt. Es verwendet ein Lagrangesches Finite-Elemente-Modell sowie ein Eulersches Dünnschicht-Modell für zweidimensionale

Coriumströmung und behandelt nicht-Newtonsche Fluide. Auch Wärmetransport in die Umgebung durch Wärmeleitung und -strahlung werden erfaßt.

Bardoux [2] beschreibt einen Vorläufer des CORFLOW Rechenprogramms zur Simulation zweidimensionaler Strömungen mit freier Oberfläche. Die Geometrie ist auf ebene Substrate ohne Hindernisse beschränkt und wird durch kartesische Koordinaten und ein äquidistantes Rechteckgitter modelliert. Eine stufenförmige Höhenfunktion beschreibt die freie Oberfläche. Wärmeleitung im Substrat, Wärmestrahlung zur Umgebung und Phasenübergänge werden nicht behandelt. Das explizite Differenzenverfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung beschränkt den Anwendungsbereich auf niedrigviskose Fluide, erzwingt kleine Zeitschritte und verursacht Stabilitätsprobleme.

Das von Siemens entwickelte Rechenprogramm IVA-4, Kolev [48], enthält ein dreidimensionales Finite-Volumen-Modell für Multikomponenten-Mehrphasen-Strömungen. Die umfangreiche Modellierung umfaßt Gase einschließlich inerter Komponenten, Flüssigkeiten und Festkörper sowie eine Vielzahl von Wechselwirkungen dieser Substanzen untereinander einschließlich dynamischer Fragmentation und Koaleszenz. Einer der Anwendungsbereiche ist die Corium-Wasser-Wechselwirkung einschließlich Dampfexplosionen. IVA-4 wurde auch zur Analyse niedrigviskoser Coriumströmung verwendet.

Zur Simulation von Lavaströmungen wurden Bingham-Fluid-Modelle entwickelt, u. a. durch Dragoni et al. [15] und Ishihara et al. (siehe Fink [26]). Wie bei den Newtonschen Fluiden ist der Zusammenhang zwischen Tangentialspannung und Scherrate bei Bingham-Fluiden linear. Der Unterschied besteht darin, daß beim Bingham-Fluid eine von Null verschiedene Anfangsspannung überschritten werden muß, um das Fluid in Bewegung zu setzen, während diese beim Newtonschen Fluid verschwindet, Tanner [83]. Die Analyse des Materialverhaltens von Coriumschmelzen mit Betonzusätzen ergibt gute Übereinstimmung mit Bingham-Modellen, Epstein [18].

1.4 Bisherige Arbeiten zur numerischen Modellierung auf den Bereichen Strömungen.

Strömungen mit freier Oberfläche sowie Phasenübergängen

1.4.1 Modellierung von Strömungen

Im Folgenden beschreiben wir einige zur Strömungsmodellierung gebräuchliche Verfahren.

Finite-Volumen-, Finite-Differenzen- und Finite-Elemente-Methoden dienen zur numerischen Lösung physikalischer Gleichungen. Eine wesentliche Eigenschaft der Finite-Elemente-Methoden, Mashayek und Ashgriz [57], ist ihre Flexibilität bei der Behandlung willkürlich berandeter Gebiete. Die Entwicklung von Finite-Volumen- und Finite-Differenzen-Verfahren in krummlinigen, schiefwinkligen Koordinaten ermöglicht jedoch auch bei ihnen die Modellierung komplexer Geometrien, Zang et al. [96], Tomiyama et al. [85], Sotiropoulos und Abdallah [78] oder Peric [63], wie sie oft bei freien Oberflächen auftreten.

Bei den zur numerischen Lösung von Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung verwendeten Algorithmen unterscheidet man Dichte- und Druckmethoden sowie die Verfahren, die mit Strom- und Wirbelfunktion als Variablen arbeiten. Die für kompressible Strömungen entwickelten Dichtemethoden berechnen die Dichte aus der Kontinuitätsgleichung und den Druck aus der Zustandsgleichung des Fluids. Durch Einführung einer künstlichen Kompressibilität können Dichtemethoden auf inkompressible Strömungen bei kleinen Machzahlen angewendet werden. Bei den für inkompressible Strömungen entwickelten Druckmethoden löst man statt der Kontinuitätsgleichung und der Impulsgleichung eine Druckgleichung zusammen mit der Impulsgleichung. Druckmethoden sind bei Berücksichtigung der Dichteabhängigkeit des Drucks, in Form einer Zustandsgleichung, auf kompressible Strömungen anwendbar, Shyy [75]. Für Finite-Volumen- und Finite-Differenzen-Verfahren zeigen Tamamidis, Zhang und Assanis [82], daß die Druck- gegenüber der Dichtemethode etwas exaktere Ergebnisse liefert und überschaubareres Konvergenzverhalten aufweist, jedoch geringfügig langsamer konvergiert.

Mit der Wirbelfunktion als Rotation der Geschwindigkeit kann die Navier-Stokes-Gleichung in eine Wirbeltransportgleichung überführt werden, in der der Druck eliminiert ist. Definiert man zudem eine Stromfunktion, so daß die Geschwindigkeit Rotation der Stromfunktion ist, dann können Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung bei inkompressiblen Strömungen in die Wirbeltransportgleichung und drei Laplacegleichungen für die Stromfunktion umgeformt werden, Fletcher [27]. Bei dreidimensionalen Problemen erhöht sich dadurch die Anzahl der Variablen von vier auf sechs.

1.4.2 Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche

In diesem Abschnitt beschreiben wir einige Verfahren, die zur Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche geeignet sind.

Seit der Entwicklung der 'Marker and Cell' Methode durch Harlow und Welch [38] 1965 wurden zahlreiche Verfahren zur numerischen Analyse von Strömungen mit freier Oberfläche vorgestellt. Zur mathematischen Darstellung dienen Eulersche, Lagrangesche sowie Euler-Lagrangesche Formulierungen. Bei Lagrangeschen Methoden führt die Beschreibung komplex verwundener Strömungen, im Gegensatz zu den Eulerschen, zu stark deformierten Gittern und erfordert wiederholte Gittererzeugung. Andererseits eignen sich die Lagrangeschen Methoden gut zur Modellierung der Dynamik von Unstetigkeitsflächen und damit zur präzisen Formulierung von Randbedingungen. Bei Eulerschen und Euler-Lagrangeschen Methoden existieren Relativbewegungen von Gitter und Fluid. Die konvektiven Ströme durch die Berandungen der Kontrollvolumina erfordern eine Mittelung von Strömungseigenschaften, z. B. der Materialeigenschaften. Dadurch verursacht die Erfassung der Dynamik von Unstetigkeitsflächen und die Vermeidung unerwünschter Glättung der Strömungseigenschaften zusätzlichen Aufwand.

Die 'Marker and Cell' Methode beschreibt die Bewegung von Unstetigkeitsflächen durch Markerpartikel, deren Einführung und die Berechnung ihrer Dynamik Speicherplatzbedarf und Leistungsfähigkeit des Verfahrens ungünstig beeinflussen, besonders in dreidimensionaler Geometrie. Höhenfunktionen, die u. a. von Bulgarelli et. al. [6] 1980, [7] 1984, Casulli [10] 1990, sowie Casulli und Cheng [11] verwendet werden, benötigen nur wenig Computer-Ressourcen und ermöglichen eine ökonomische Beschreibung von eindeutigen freien Oberflächen. Andererseits sind mehrdeutige Funktionen wie überschlagende Wellen oder Gasblasen auf diese Weise nicht darstellbar.

Hirt und Nichols [40] 1971 benutzen Linien-Segmente zur Darstellung mehrdeutiger Oberflächen. Probleme entstehen jedoch bei der Neuordnung der Segmente, die bei Änderungen der Topologie erforderlich wird, z. B. wenn zwei Flächen sich schneiden oder wenn eine Fläche sich über sich selbst faltet. Zudem ist die Übertragung der Methode auf dreidimensionale Geometrie nicht trivial. Diese Schwierigkeiten bereitet die von Hirt und Nichols [41] 1981 vorgestellte 'Volume of Fluid' Methode nicht, benötigt vergleichsweise wenig Speicherplatz und verursacht keine Probleme bei mehrdeutigen Oberflächen sowie bei dreidimensionaler Geometrie. Im Vergleich zu Höhenfunktionen entsteht jedoch ein erhöhter Aufwand durch die Berechnung der Funktion, welche die Information über dynamische Unstetigkeitsflächen enthält. Liang [54] sowie Ashgriz und Poo [1] beseitigen die Unstetigkeit der mittels der 'Volume of Fluid' Methode berechneten freien Oberfläche in zweidimensionalen Geometrien durch Interpolationsverfahren zur Verbindung der Oberflächensegmente.

1.4.3 Modellierung von Phasenübergängen

Mouritsen [59] beschreibt die verschiedenen zur numerischen Behandlung von Phasenübergängen gebräuchlichen Verfahren. Einen Überblick über die Methoden zur Simulation von Erstarrungsvorgängen und die Propagation von Phasentrennflächen geben Juric und Tryggvason [45]. Voller und Cross [90] erläutern den Status von Algorithmen und Computerprogrammen zur Beschreibung von Gießvorgängen.

Derzeit liegt keine einheitliche Theorie der Mikrostruktur von Erstarrungsvorgängen vor. Daher beschränken sich numerische Methoden meist auf die Modellierung qualitativer Eigenschaften. Typischerweise wird das phasenwechselnde System als Kontinuum beschrieben, ohne explizit auf die einzelnen Phasen Bezug zu nehmen. Um Erstarrungsvorgänge mit einem Einphasenmodell beschreiben zu können, verwendet man vereinfachende Annahmen wie die gleicher Geschwindigkeit beider Phasen, Voller, Brent und Prakash [89], oder die eines porösen Feststoffes, Voller und Prakash [91]. Diese Ansätze sind ökonomisch, berücksichtigen die Phasenübergangswärme und liefern den Anteil der einzelnen Phasen im Kontrollvolumen, der wiederum zur Beeinflussung der Gemischviskosität verwendet werden kann. Detailliertere Modelle, die unterschiedliche Geschwindigkeiten der einzelnen Phasen sowie Phasentrennflächen innerhalb der Kontrollvolumina

betrachten, erfordern oft erheblichen numerischen Aufwand. Dieser ist bei Einbindung der Beschreibung des Phasenübergangs in umfangreichere Modelle unerwünscht.

Die weitere Diskussion der Simulation von Phasenübergängen erfolgt im Zusammenhang mit der Darstellung physikalischer Grundlagen in Abschnitt 2.4.

1.5 Beitrag dieser Arbeit

In dieser Arbeit wird ein Verfahren zur Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche, Wärmeaustausch und Phasenübergängen vorgestellt. Es ist für Corium vom flüssigen bis in den erstarrten Zustand verwendbar, beschreibt jedoch diese Vorgänge auch bei anderen Fluiden und Feststoffen. Nachfolgend werden Voraussetzungen, Vereinfachungen und Modellannahmen erläutert.

Die physikalischen Modelle und numerischen Verfahren simulieren Strömungen mit freier Oberfläche einkomponentiger, inkompressibler, homogener Newton-Fluide in dreidimensionalen Geometrien. Das betrachtete Fluid kann dabei von Luft oder einer isothermen, idealen Flüssigkeit überdeckt sein. Zusätzlich zum Fluid werden verschiedene Strukturmaterialien betrachtet, die zur Modellierung hydrodynamischer Hindernisse und thermodynamischer Strukturen dienen.

Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung mit Boussinesq-Approximation beschreiben die Fluidodynamik. Volumenausdehnung wird vernachlässigt, ein Turbulenzmodell nicht verwendet. Eine Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche enthält viskose und Oberflächenspannungen. Die freie Oberfläche des Fluids wird durch eine Höhenfunktion dargestellt. Zur Berechnung ihrer Dynamik dient eine Gleichung, die aus der kinematischen Randbedingung an der freien Oberfläche und der Integration der Kontinuitätsgleichung in vertikaler Richtung entsteht. Damit wird die Dynamik der freien Oberfläche durch Fluidodynamik und Erhaltung der Masse eindeutig bestimmt. In weniger allgemeiner Geometrie verwenden auch Bulgarelli et. al. [6] [7] diese Methodik.

Bei temperaturabhängigen Materialeigenschaften des Fluids ist das Strömungsverhalten an thermodynamische Prozesse und an die Phasenübergänge gekoppelt. Aus diesem Grund werden interne Wärmetransportvorgänge in Form von konvektiven und diffusiven Wärmeströmen, Wärmequellen und -senken im Fluid und Wärmetransport an die Umgebung durch Wärmeleitung, Konvektion und Strahlung modelliert. Mit Ausnahme des Oberflächenspannungs-Koeffizienten werden temperaturabhängige Materialeigenschaften berücksichtigt.

Ein Modell für diskrete Phasenübergänge dient dazu, Erstarrungs- und Schmelzvorgänge des homogenen Fluids und Phasenübergänge der Strukturmaterialien simulieren zu können. Nichtlineares Materialverhalten und mechanische Stabilität von Krusten werden nicht behandelt. Bei aus flüssigen und festen Komponenten bestehenden Fluidgemischen wird angenommen, daß die feste Phase in der flüssigen Phase dispergiert vorliegt. Bei Temperaturen unterhalb der Liquidustemperatur erfolgt eine

Immobilisierung des gemischten Fluids, da dessen Viskosität stark ansteigt. Chemische Wechselwirkungen werden ausgeschlossen.

Zur numerischen Modellierung wird ein Finite-Volumen-Verfahren mit nicht äquidistantem versetztem Gitter entwickelt. Dieses ist auf orthogonale, geradlinige Koordinatensysteme, bei denen eine Achse entgegen der Schwerkraft gerichtet ist, anwendbar, insbesondere auf kartesische Koordinaten und zweidimensionale Zylinderkoordinaten, wie exemplarisch dargestellt. Die Verfahren zur Beschreibung von Wärmetransport und Phasenübergängen sind in orthogonalen, krummlinigen Koordinaten anwendbar. Zur Behandlung transienter Terme dienen implizite Differenzenverfahren in Navier-Stokes- und Oberflächen-Gleichung, sowie ein explizites Verfahren für die Wärmetransportgleichung. Zur numerischen Lösung des Systems von Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung wird eine Druckmethode verwendet. Die Poissongleichung für den Druck wird durch eine Tschebyscheff-Methode gelöst und dabei simultan Druck und Geschwindigkeit iteriert. Zur Darstellung freier Oberflächen dienen Polynome 2. und 0. Ordnung.

Die beschriebenen Modelle, zusammen mit den grob skizzierten Methoden, sind in dem Rechenprogramm CORFLOW, Wittmaack [95], enthalten, mit dem verschiedene Strömungs-, Wärmeübertragungs- und Phasenübergangsprobleme mit freier Oberfläche berechnet werden. Dazu gehören u. a. CORINE Tests mit Wasser, Glycerin und Cerrotru, Veteau und Wittmaack [88], sowie die KATS-3, -7 und -8 Thermit Experimente, bei denen die Ausbreitung von Al_2O_3 und Fe auf trockenem Substrat untersucht wird, Fieg et. al. [23].

In dieser Arbeit werden weitere Anwendungen der Methode vorgestellt. Als Anwendung auf ein von Trägheits- und Gravitationskräften dominiertes System wird die Oszillation eines idealen Fluids in einem U-Rohr studiert. Daran erkennt man durch numerische Diffusion bedingte Grenzen des Verfahrens. Zur Verifikation des Verfahrens für von Zähigkeits- und Gravitationskräften dominierte Probleme werden analytische Lösungen von Huppert zu viskosen Gravitationsströmen auf ebenem Untergrund in ebener und zylindrischer Geometrie nachgerechnet. Die Modellierung der Wärmeleitung wird zudem mit einer analytischen Lösung für dreidimensionale instationäre Wärmeleitung in einem Parallelepiped verifiziert.

In Validierungsrechnungen zu den KATS-5 und -6 Tests wird die Verwendbarkeit der Methode zur Analyse von Ausbreitungsvorgängen oxidischer und metallischer Schmelzen in Kanälen geprüft. Als Reaktor-Anwendungen werden zwei Strömungen von Kernschmelze betrachtet. Es wird die Rückhaltung oxidischen und metallischen Coriums in der Kaverne berechnet und dabei die Naturkonvektion sowie der Wärmeeintrag in die Umgebung analysiert. Zudem wird die dreidimensionale Ausbreitung Coriums von der Kaverne in den Ausbreitungsraum studiert.

2 Physikalisches Modell

2.1 Geometrie und Koordinatensystem

Wir betrachten einen Bereich, der aus zwei nicht notwendigerweise zusammenhängenden Teilbereichen besteht : Fluid und Strukturmaterialien, siehe Abb. 2.1-1. Eine Zeitabhängigkeit dieser Aufteilung ist denkbar, wird jedoch von uns nicht betrachtet. Der Fluidbereich kann von Fluid besetzt oder verlassen werden. Besetzte und unbesetzte Regionen trennt eine zeitabhängige freie Oberfläche. Nicht besetzte Teile des Fluidbereichs werden als entweder mit Luft oder isothermer, idealer Flüssigkeit gefüllt betrachtet. Strömung von Fluid in den bzw. aus dem betrachteten Bereich ist am Rand des Bereichs möglich.

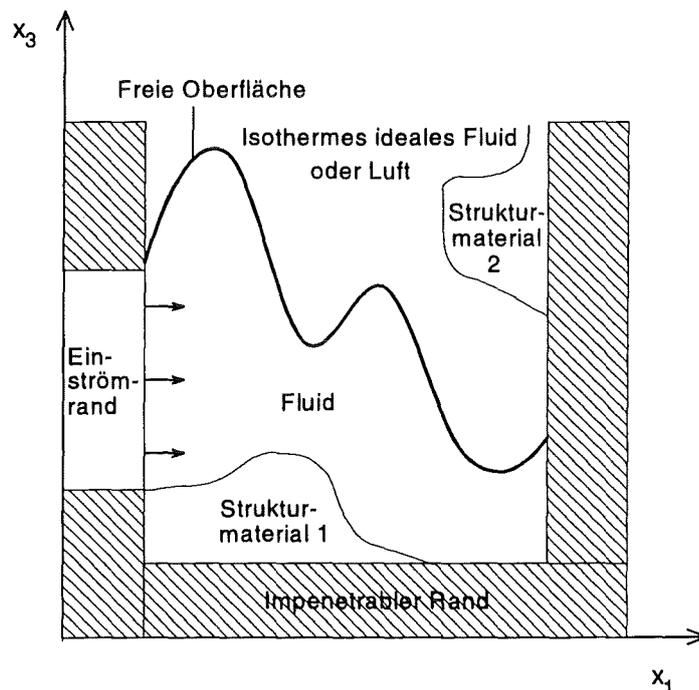


Abb. 2.1-1 : Geometrische Anordnung.

Der aus Strukturmaterialien bestehende Teilbereich dient zur Simulation von Strömungshindernissen und Feststoffen, die Wärme mit ihrer Umgebung austauschen. Dieser Teilbereich kann aus unterschiedlichen Materialien mit verschiedenen Eigenschaften und Anfangszuständen zusammengesetzt sein.

Um komplexe geometrische Bereiche und deren Berandungen betrachten zu können, werden krummlinige, schiefwinklige Koordinaten verwendet, wie von Schade [72], Klingbeil [47], Grosche et. al. [36] sowie Landau und Lifshitz [49] 1975 beschrieben. Alle Gleichungen der Hydro- und Thermodynamik sowie der Phasenübergänge werden in diesen Koordinaten geschrieben. Um die Beschreibung der Dynamik der freien Oberfläche zu vereinfachen, beschränken wir uns auf orthogonale Koordinatensysteme, bei denen die dritte Raumrichtung entgegen der Schwerkraft

gerichtet ist und verwenden eine eindeutige Höhenfunktion $\xi(x_1, x_2, t)$, welche die Position der freien Oberfläche beschreibt.

Bei solchen Koordinatensystemen haben ko- und kontravariante Basisvektoren die gleiche Richtung, jedoch unterschiedliche Länge. Darum sind die physikalischen ko- und kontravarianten Tensorkomponenten, die aus den physikalischen Komponenten durch Multiplikation mit $(g_{(\ell\ell)})^{0.5}$ bzw. $(g^{(\ell\ell)})^{0.5}$ entstehen, identisch und die Metriktensoren (g mit zwei Indizes) diagonal. Die Klammern um die doppelten Tensorindizes bedeuten dabei, daß keine Einstein-Summation erfolgen soll. Christoffel-Symbole mit mindestens einem Index 3 verschwinden.

2.2 Dynamik von Fluid und freier Oberfläche

Dieser Abschnitt stellt die dynamischen Gleichungen des Fluids und der freien Oberfläche in Eulerscher Formulierung zusammen. Bei Vernachlässigung der Volumenexpansion ist die Kontinuitätsgleichung für ein homogenes, inkompressibles Fluid

$$\nabla_m v^m = 0, \quad (2.2-1)$$

Schade [72] sowie Landau und Lifshitz [51] 1989. Wir bezeichnen die kovariante Ableitung sowie die kontravariante Geschwindigkeitskomponente in Raumrichtung m mit ∇_m , bzw. v^m und verwenden Einstein's Summationskonvention in der gesamten Arbeit für die Raumkoordinaten-Indizes ℓ, m und n . Wie schon erwähnt, wird die Volumenexpansion vernachlässigt, um die Berechnung der Dynamik der freien Oberfläche zu vereinfachen. Die räumliche Variation der Dichte braucht dann nicht berücksichtigt zu werden.

Mit der Boussinesq-Approximation nimmt die Navier-Stokes-Gleichung für inkompressibles Fluid folgende Form an :

$$\left(d_t - v g^{\ell m} \nabla_{\ell m} \right) v_i = \frac{1}{\rho_0} \left(- \nabla_i p + \rho g_i \right) \quad ; \quad \nu := \frac{\mu}{\rho_0} \quad (2.2-2a)$$

oder

$$\rho_0 \partial_t v_i + \nabla_m \Pi^m_i = \rho g_i, \quad (2.2-2b)$$

Schade sowie Landau und Lifshitz 1989. Dabei sind ρ und ρ_0 die Dichte und die Dichte bei Anfangstemperatur T_0 , μ und ν die dynamische und die kinematische Viskosität, p der Druck, Π der Impulsflußdichte-Tensor und g (mit einem Index) die Gravitationsbeschleunigung auf der Erdoberfläche. $\nabla_{\ell m}$ bezeichnet die zweite kovariante Ableitung nach den Raumkoordinaten ℓ und m . Die Boussinesq-Approximation berücksichtigt die Temperaturabhängigkeit der Dichte nur im Gravitationsterm, in Übereinstimmung mit der Vernachlässigung der Volumenexpansion.

Turbulenzmodelle werden nicht verwendet. Bei inkompressibler Strömung ist der Druck keine thermodynamische Variable, denn es existiert z. B. $p := - \left(\partial_\nu U \right)_S$ nicht, wobei V , U und S Volumen, innere Energie und Entropie bezeichnen. Aus diesem Grund wirkt der Druck lediglich als Lagrangescher Multiplikator, der eindeutig durch die Inkompressibilitäts-Bedingung bestimmt ist, Gresho und Sani [34]. Für inkompressibles Newton-Fluid ist der viskose Spannungstensor durch den Deviator $\left(\sigma'_{\ell\ell} = 0 \right)$ gegeben :

$$\sigma'_{i_m} = 2 \mu d_{i_m} \quad ; \quad d_{i_m} := 0.5 \left(\nabla_i v_m + \nabla_m v_i \right) , \quad (2.2-3)$$

Schade sowie Landau und Lifshitz 1989. Wegen der Temperaturabhängigkeit von Dichte und Viskosität sind Geschwindigkeit und Temperatur gekoppelt. Da zudem die Phase eines Zustands von der spezifischen Enthalpie h und der Temperatur T abhängt, ist die Hydrodynamik im allgemeinen mit Thermodynamik und Phasenübergängen gekoppelt. Betrachten wir internen Wärmetransport durch Konvektion und Diffusion sowie innere Wärmequellen und viskose Dissipation, so lautet die Wärmetransportgleichung

$$\rho d_t h - \nabla_\ell \left(\lambda g^{\ell m} \nabla_m T \right) = P_d + \sigma'_{\ell m} d^{\ell m} , \quad (2.2-4)$$

Schade, Landau und Lifshitz 1989 und Widder [94]. Dabei bezeichnet λ die Wärmeleitfähigkeit und P_d die Leistungsdichte innerer Wärmequellen des Fluids. Der 2. Hauptsatz der Thermodynamik ist bei nichtnegativer Viskosität erfüllt. Navier-Stokes- und Wärmetransportgleichung sind Galilei- aber nicht Lorentz-invariant, Landau und Lifshitz 1989. Beide besitzen eine unendliche Signal-Ausbreitungsgeschwindigkeit.

Um die Modellierung der freien Oberfläche zu vereinfachen, beschränken wir uns auf orthogonale Koordinatensysteme, bei denen die dritte Raumrichtung entgegen der Gravitation gerichtet ist, und nehmen an, die freie Oberfläche sei durch die eindeutige Höhenfunktion $\xi(x_1, x_2, t)$ darstellbar. In dieser Klasse von Koordinatensystemen lautet die kinematische Randbedingung an der freien Oberfläche

$$d_t \xi = \left(\partial_t + v_s^\ell \nabla_\ell \right) \xi = v_s^\ell g_{3\ell} = v_s^3 = v_{3s} , \quad (2.2-5)$$

Bulgarelli et. al. [7] 1984, wobei der Index s die Geschwindigkeit an der Oberfläche bezeichnet. Diese Form der kinematischen Randbedingung ist für numerische Simulationen weniger geeignet, da Verletzungen der Volumenerhaltung, Bulgarelli et. al. [6] 1980, und mangelnde Genauigkeit der berechneten Höhenfunktion, Mashayek und Ashgriz [57], auftreten können. Aus diesem Grund verwendet diese Studie die im Folgenden dargestellte Form. Die Integration der Kontinuitätsgleichung in vertikaler Richtung ergibt

$$0 = \int_{\xi_b}^{\xi} \nabla_m v^m dx^3 = \sum_{i=1}^2 \left[\nabla_i \int_{\xi_b}^{\xi} v^i dx^3 - v^i(x_1, x_2, \xi) \nabla_i \xi + v^i(x_1, x_2, \xi_b) \nabla_i \xi_b \right] \\ + v^3(x_1, x_2, \xi) - v^3(x_1, x_2, \xi_b),$$

wobei ξ_b die Höhe der unteren Berandung des Fluids bezeichnet. Die hierin auftretenden Parameterintegrale behandelt u. a. Fichtenholz [22]. Einbeziehung der kinematischen Randbedingung

$$v^3(x_1, x_2, \xi) - v^3(x_1, x_2, \xi_b) = (\partial_t + v^m \nabla_m)(\xi - \xi_b)$$

liefert

$$\partial_t(\xi - \xi_b) = - \sum_{i=1}^2 \nabla_i \int_{\xi_b}^{\xi} v^i dx^3.$$

Integration über eine horizontale Fläche A_3 führt auf

$$\partial_t V_f^{12} = \int_{A_3^{12}} \sqrt{g} \partial_t(\xi - \xi_b) dx^1 dx^2 = - \sum_{i=1}^2 \int_{A_3^{12}} \sqrt{g} \nabla_i \int_{\xi_b}^{\xi} v^i dx^3 dx^1 dx^2, \quad (2.2-6)$$

wobei V_f das Volumen des Fluids und g die Determinante des kovarianten Metriktensors bezeichnen. Dieses Ergebnis zeigt, daß die Kinematik der freien Oberfläche durch die Geschwindigkeit des Fluids und die Erhaltung seiner Masse determiniert wird. Da die Volumenexpansion vernachlässigt wurde (2.2-1), ist die Erhaltung der Masse äquivalent zur Erhaltung des Volumens.

In diesem Modell sind \bar{v} , p , ξ , h , T , x_{ξ_i} und x_{s_0} dynamische Variablen. Temperatur sowie Massenanteile der flüssigen und festen Phase, x_{ξ_i} und x_{s_0} , werden durch die Relation zwischen spezifischer Enthalpie und Temperatur des Fluids bestimmt, siehe Abschnitt 2.4.2.

2.3 Hydro- und thermodynamische Randbedingungen

2.3.1 Übersicht über die betrachteten Randbedingungen

Den Einfluß fester und freier Ränder des Fluidbereichs auf das Strömungsverhalten beschreiben kinematische Randbedingungen. Wir spezifizieren die Normal- und Tangential-Geschwindigkeit an festen und Einströmrändern sowie den Druck an der freien Oberfläche. Die Wärmeströme an den Rändern von Fluid- und Strukturmaterialbereichen werden durch thermodynamische Randbedingungen charakterisiert. Folgende Tabelle listet die betrachteten Randbedingungen, die anschließend näher erläutert werden :

<u>Art des Randes</u>	<u>Normalgeschwindigkeit</u>	<u>Tangentialgeschwindigkeit</u>	<u>Wärmeübergang</u>
Freie Oberfläche	Impenetrabel	Spannungs-Randbed.	Konvektion, Strahlung
Fluideinströmung	$v_m n^m = v_{1in} n^l$	Haftbedingung	Konvektion, Diffusion
Strukturmaterial	$v_m n^m = 0$	Haftbedingung	Diffusion
Leerbereich	$v_m n^m = 0$	Haftbedingung	Adiabatisch
Symmetrieebene	$v_m n^m = 0$	Keine Restriktion	Adiabatisch
Periodisch	Keine Restriktion	Keine Restriktion	Konvektion, Diffusion

Tabelle 2.3: Hydro- und thermodynamische Randbedingungen in Abhängigkeit der Art der Berandung.

An der impenetrablen freien Oberfläche definiert die im folgenden Abschnitt beschriebene Spannungs-Randbedingung die mechanische Einwirkung auf das Fluid. Falls das Fluid von einer isothermen, idealen Flüssigkeit überdeckt ist, berücksichtigen wir konvektiven Wärmeaustausch zwischen diesen Medien. Dieser konvektive Wärmeaustausch wird durch eine Randbedingung 3. Art mit einem konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten beschrieben. Zusätzlich wird Wärmestrahlung zwischen der Fluidoberfläche und einer horizontalen, isothermen Struktur in der Umgebung betrachtet.

An Rändern mit Fluideinströmung wird die physikalische Geschwindigkeitskomponente in der ersten Raumrichtung zeitabhängig vorgegeben, während alle anderen Komponenten verschwinden. Durch die Vorgabe der Temperatur des einströmenden Fluids kann der konvektive und diffusive Energieaustausch mit dem Fluidbereich am Einströmrand berechnet werden.

An den impenetrablen, festen Grenzflächen zwischen Fluid- und Strukturmaterialbereichen gilt die Haftbedingung für das Fluid. Bei innerhalb des Berechnungsbereichs befindlichen Strukturmaterialien ist die Grenzfläche kein thermodynamischer Rand ; befindet sich das betrachtete Strukturmaterial außerhalb des Berechnungsbereichs, so wird diffusiver Wärmeaustausch berechnet.

Für Leerbereiche gilt bezüglich der hydrodynamischen Randbedingungen das gleiche wie für Strukturmaterialbereiche, im Gegensatz zu diesen besitzen sie jedoch adiabatische Grenzflächen zum Fluidbereich.

An Symmetrieebenen liegen auf beiden Seiten spiegelsymmetrische Verhältnisse vor, so daß nur der halbe Bereich berechnet zu werden braucht. Da die Gravitation entgegen der dritten Raumrichtung wirkt, sind Symmetrieebenen vertikal. Aus Symmetriegründen sind sie impenetrabel, tangentialspannungsfrei und adiabatisch.

Periodische Ränder verbinden Teile des Berechnungsbereichs miteinander und sind darum keinen Randbedingungen unterworfen. Sie treten beispielsweise an der Grenzfläche zwischen den Polarwinkeln Null und 2π in Zylinderkoordinaten auf.

2.3.2 Spannungs-Randbedingung an der freien Oberfläche

Freie Oberflächen betrachten wir als masselos, dann liefert (2.2-2b) unter Vernachlässigung der Oberflächenspannung für ein Volumen Ω , das einen Teil der freien Oberfläche umschließt,

$$\int_{\Omega} \frac{F_i}{V} dV = \int_{\Omega} \nabla_m \sigma^{m_i} dV = \oint_{\partial\Omega} \sigma^{m_i} df_m = 0.$$

Dabei ist F die auf das Volumenelement wirkende Kraft, σ der Spannungstensor. Einbeziehung der Oberflächenspannung liefert im Grenzfall verschwindender Dicke der Oberfläche

$$\left(\sigma_s^{m_i} - \sigma_f^{m_i} \right) n_m = \alpha \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) n_i + \nabla_i \alpha,$$

Landau und Lifshitz [51] 1989, wobei f (Fluid) und s (Umgebung) die angrenzenden Medien, α den Oberflächenspannungs-Koeffizienten bezeichnen. Der Normalen-Einheitsvektor des Fluids \vec{n} ist aus dem Fluid heraus gerichtet. Diese Beziehung berücksichtigt die in gekrümmten Oberflächen gespeicherte Energie und den Marangoni-Effekt, Faber [19]. r_1 und r_2 sind die Hauptkrümmungsradien der Oberfläche in x_1 - und x_2 -Richtung. Für leicht deformierte Oberflächen gilt

$$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} = - g^{\ell m} \nabla_{\ell m} \xi,$$

Landau und Lifshitz 1989. Für die Normal- und die Tangential-Komponenten der auf die freie Oberfläche wirkenden Kraft pro Flächeneinheit erhält man die Normalspannungs-Bedingung

$$n^{\ell} \left(\sigma_s^{m_{\ell}} - \sigma_f^{m_{\ell}} \right) n_m = - \alpha g^{\ell m} \nabla_{\ell m} \xi$$

und die Tangentialspannungs-Bedingungen in x_{γ} -Richtung, $\gamma \in \{ 1, 2 \}$:

$$t_{\gamma}^{\ell} \left[\left(\sigma_s^{m_{\ell}} - \sigma_f^{m_{\ell}} \right) n_m - \nabla_{\ell} \alpha \right] = 0.$$

Dabei ist \vec{t}_{γ} der tangentielle Einheitsvektor der Oberfläche in x_{γ} -Richtung. Für ein Newton-Fluid und ideales Fluid der Umgebung gilt

$$\sigma_f^{m_{\ell}} = \mu g^{mn} \left(\nabla_n v_{\ell} + \nabla_{\ell} v_n \right) - p_f \delta^{m_{\ell}} \quad ; \quad \sigma_s^{m_{\ell}} = - p_s \delta^{m_{\ell}}.$$

Bislang wurden vollständig flüssige Fluide unterstellt. Erstarrt jedoch das Fluid, so verlieren viskose Spannung und Oberflächenspannung in der festen Phase ihre Bedeutung. Darum lautet die Normalspannungs-Bedingung für ein Newtonsches Fluidgemisch umgeben von idealem Fluid

$$p_f = p_s + x_{\ell i} \left\{ \mu_{\ell i} g^{mn} n^\ell n_m (\nabla_n v_\ell + \nabla_\ell v_n) - \alpha g^{\ell m} \nabla_{\ell m} \xi \right\},$$

während die Tangentialspannungs-Bedingungen

$$t_\gamma^\ell \left[\mu_{\ell i} g^{mn} n_m (\nabla_n v_\ell + \nabla_\ell v_n) + \nabla_\ell \alpha \right] = 0$$

nur auf die flüssige Phase anwendbar sind. In orthogonalen Koordinatensystemen erhält man folgende Bedingungen für physikalische Tensorkomponenten (zur Vereinfachung der Notation wird auf Sterne zur Bezeichnung physikalischer Komponenten verzichtet) :

$$p_f = p_s + x_{\ell i} \left\{ 2 \mu_{\ell i} n_\ell n_m \nabla_m v_\ell - \alpha \nabla_{(mm)} \xi \right\},$$

$$t_{\gamma \ell} \left[\mu_{\ell i} n_m (\nabla_m v_\ell + \nabla_\ell v_m) + \nabla_\ell \alpha \right] = 0.$$

In orthogonalen Koordinatensystemen mit dritter Raumrichtung entgegen der Schwerkraft sind die physikalischen Komponenten der Einheitsvektoren normal und tangential zur freien Oberfläche gegeben durch :

$$\bar{n} := \left[1 + (\nabla_1 \xi)^2 + (\nabla_2 \xi)^2 \right]^{-1/2} (-\nabla_1 \xi, -\nabla_2 \xi, 1),$$

$$\bar{t}_1 := \left[1 + (\nabla_1 \xi)^2 \right]^{-1/2} (1, 0, \nabla_1 \xi),$$

$$\bar{t}_2 := \left[1 + (\nabla_2 \xi)^2 \right]^{-1/2} (0, 1, \nabla_2 \xi).$$

Mit der Kontinuitätsgleichung (2.2-1) erhält man daraus die Normalspannungs-Bedingung

$$p_f = p_s + x_{\ell i} \left\{ \frac{2\mu_{\ell i}}{1 + (\nabla_1 \xi)^2 + (\nabla_2 \xi)^2} \left\{ \left[(\nabla_1 \xi)^2 - 1 \right] \nabla_1 v_1 - \nabla_1 \xi (\nabla_1 v_3 + \nabla_3 v_1) \right. \right. \\ \left. \left. + \left[(\nabla_2 \xi)^2 - 1 \right] \nabla_2 v_2 - \nabla_2 \xi (\nabla_2 v_3 + \nabla_3 v_2) \right. \right. \\ \left. \left. + \nabla_1 \xi \nabla_2 \xi (\nabla_1 v_2 + \nabla_2 v_1) \right\} - \alpha (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \xi \right\}, \quad (2.3-1)$$

sowie die Tangentialspannungs-Bedingungen

$$\mu_{\ell i} \left\{ 2 \nabla_1 \xi (2 \nabla_1 v_1 + \nabla_2 v_2) + \nabla_2 \xi (\nabla_2 v_1 + \nabla_1 v_2) - \left[1 - (\nabla_1 \xi)^2 \right] (\nabla_3 v_1 + \nabla_1 v_3) \right. \quad (2.3-2a)$$

$$\left. + \nabla_1 \xi \nabla_2 \xi (\nabla_3 v_2 + \nabla_2 v_3) \right\} = \left[1 + (\nabla_1 \xi)^2 + (\nabla_2 \xi)^2 \right]^{1/2} (\nabla_1 \alpha + \nabla_1 \xi \nabla_3 \alpha)$$

und

$$\mu_{ii} \left\{ 2 \nabla_2 \xi (\nabla_1 v_1 + 2 \nabla_2 v_2) + \nabla_1 \xi (\nabla_2 v_1 + \nabla_1 v_2) - \left[1 - (\nabla_2 \xi)^2 \right] (\nabla_3 v_2 + \nabla_2 v_3) \right. \\ \left. + \nabla_1 \xi \nabla_2 \xi (\nabla_3 v_1 + \nabla_1 v_3) \right\} = \left[1 + (\nabla_1 \xi)^2 + (\nabla_2 \xi)^2 \right]^{1/2} (\nabla_2 \alpha + \nabla_2 \xi \nabla_3 \alpha). \quad (2.3-2b)$$

Die Höhe des Fluids darf an Einströmrändern nicht geringer als die Höhe des Einströmbereichs sein. Weitere Randbedingungen werden an die Position der freien Oberfläche nicht gestellt. Den Kontaktpunkt des Fluids an vertikalen Berandungen errechnen wir und legen ihn nicht per Randbedingung fest. An horizontalen Berandungen werden der Kontaktpunkt sowie Dreiphasen-Kontaktwinkel nicht explizit betrachtet.

2.4 Phasenübergänge

2.4.1 Physikalische Grundlagen

Verschiedene Phasen besitzen unterschiedliche Symmetrieeigenschaften, wobei meist die bei tieferen Temperaturen stabile Phase weniger symmetrisch ist. Zur quantitativen Beschreibung von Phasenübergängen führt man Ordnungsparameter ein. Diese verschwinden in der symmetrischen, ungeordneten Phase und sind in der unsymmetrischen, geordneten Phase ein Maß der Ordnung.

Bei diskreten Phasenübergängen, auch Übergänge 1. Ordnung genannt, ändern sich der Ordnungsparameter und thermodynamische Funktionen wie Entropie und Enthalpie bei Übergangstemperatur unstetig, entsprechend einer von Null verschiedenen Umwandlungswärme. Im Gegensatz dazu ändern sie sich bei kontinuierlichen Phasenübergängen, auch Übergänge höherer Ordnung genannt, bei Übergangstemperatur stetig, allerdings mit unstetiger Temperaturableitung. Dabei wird die spezifische Wärme wie bei diskreten Übergängen unendlich, ohne daß jedoch eine Übergangswärme auftritt. Bei kontinuierlichen Übergängen führt die Verringerung der Stabilität der Phasen in der Nähe der Übergangstemperatur zu starken Fluktuationen thermodynamischer Größen, die Ursache der 'kritischen Phänomene' sind, Brenig [4], Landau und Lifshitz [50] 1980 sowie Mouritsen [59].

Wir betrachten jedoch keine kritischen Phänomene und beschränken uns damit auf diskrete Übergänge, mit dem Schwerpunkt auf dem Übergang flüssig-fest. Bei reinen Substanzen erfolgt der Phasenübergang flüssig-fest bei einer Temperatur, d. h. Liquidus- und Solidustemperatur sind identisch. Im Gegensatz dazu sind Phasenübergänge von Materialien, die aus mehreren Komponenten zusammengesetzt sind, über ein Temperaturintervall verteilt. Bei ihnen ist die Liquidus- höher als die Solidustemperatur. Zudem hängt das Erstarrungsverhalten, u. a. Liquidus- und Solidustemperatur, bei solchen Substanzen von der Konzentration der einzelnen Konstituenten ab. Um diesen Einfluß zu beschreiben, ist es erforderlich, die Konzentration der einzelnen Konstituenten zu bestimmen.

Der Übergang einer Phase in eine andere erfolgt in einer charakteristischen Zeit. Diese sogenannte Relaxationszeit wird durch die Kinetik der Keimbildung der neuen Phase bestimmt, Landau und

Lifshitz [52] 1990. Innerhalb der Relaxationszeit können Nichtgleichgewichtszustände, d. h. überhitzte oder unterkühlte Zustände, existieren. Bei Erstarrungsvorgängen bei denen Wärme aus der flüssigen in die feste Phase transportiert wird, auch Stefan-Probleme genannt, ist die Phasentrennfläche stabil gegenüber Verformungen. Bei unterkühlter Flüssigkeit kann der Wärmestrom von der festen in die flüssige Phase gerichtet sein und die Phasentrennfläche morphologisch instabil werden, Shyy [75]. Dabei können Verformungen wachsen, bis sie durch Oberflächenspannungen oder kinetische Effekte beschränkt werden, und dendritische Strukturen entstehen, siehe Juric und Tryggvason [45], die derartige Prozesse numerisch behandeln.

Unter Rheologie versteht man Studien des Deformations- und Fließverhaltens von Materie mit nichtlinearen Eigenschaften, Tanner [83]. Nicht-Newtonsches Materialverhalten wird bei vielen technisch bedeutsamen Substanzen beobachtet, unter anderem von Epstein [18] sowie Seiler und Ganzhorn [74] bei Mischungen oxidischen Coriums mit Zersetzungsprodukten silikatischen Betons im Bereich zwischen Liquidus- und Solidustemperatur.

Beim Erstarrungsvorgang wird das Fluid thermischen Spannungen ausgesetzt, die elastische oder plastische Verformungen bewirken. Dies kann z. B. den Wärmeübergang zu den umgebenden Medien beeinflussen. Bei Erstarrungsvorgängen können sich Krusten bilden, die bei mechanischer Belastung eventuell reißen oder brechen. Da Krusten die Strömung wesentlich beeinflussen können, ist die Erfassung ihrer mechanischen Belastungen und die Beschreibung ihrer Bruchmechanik wichtig.

2.4.2 Modell für diskrete Phasenübergänge

Nun gehen wir zur Beschreibung unseres Modells über. Pro Material können mehrere diskrete Phasenübergänge modelliert werden, jedoch kann nur einer von ihnen der Übergang zwischen fester und flüssiger Phase sein. Dadurch ist es beispielsweise bei Al_2O_3 möglich, zusätzlich zum Phasenübergang flüssig-fest den im festen Zustand auftretenden diskreten Übergang zu erfassen. Ein Zweiphasen-Strömungsmodell, Voller, Brent und Prakash [89], sowie Prakash und Voller [65], dient dazu, den Gemischbereich des Phasendiagramms beim Übergang flüssig-fest zu beschreiben. Bei Fluidgemisch wird angenommen, daß die feste Phase in der flüssigen Phase dispergiert vorliegt, wobei Geschwindigkeit und Dichte beider Phasen gleich sind. Dadurch reduziert sich die Zweiphasen-Strömung zur Einphasigkeit.

Aus der Wärmetransportgleichung (2.2-4) und der Beziehung zwischen spezifischer Enthalpie und Temperatur der jeweiligen Substanz ermitteln wir die Temperatur. Die Relation zwischen spezifischer Enthalpie h und Temperatur T wird aus der Beziehung zwischen spezifischer Wärme c_p und Temperatur berechnet, siehe Abb. 2.4-1.

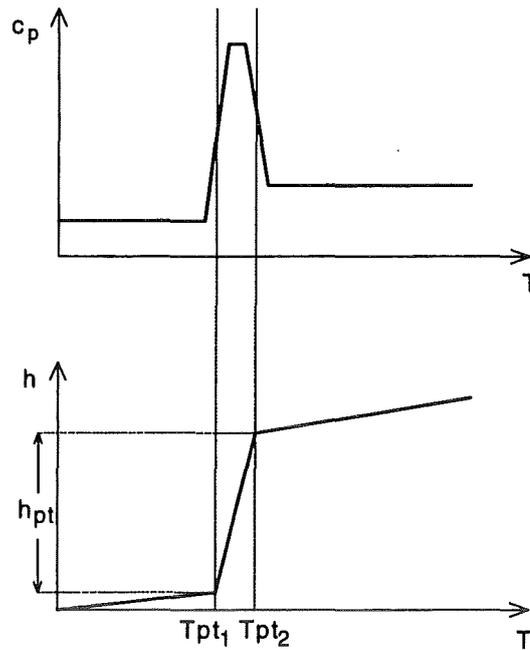


Abb. 2.4-1: Temperaturabhängigkeit von spezifischer Wärme und Enthalpie bei diskreten Phasenübergängen.

In der oberen Hälfte der Abbildung ist die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme, in der unteren diejenige der spezifischen Enthalpie bei diskreten Phasenübergängen skizziert. Dabei ist die Verknüpfung der stark erhöhten spezifischen Wärme mit der Phasenübergangswärme angedeutet. Der funktionale Zusammenhang ist

$$h(T) = \int_0^T c_p(\zeta) d\zeta \quad ; \quad h_{pt} = \int_{T_{pt1}}^{T_{pt2}} c_p(\zeta) d\zeta - \frac{c_p(T_{pt1}) + c_p(T_{pt2})}{2} (T_{pt2} - T_{pt1}), \quad (2.4-1)$$

mit der Phasenübergangswärme h_{pt} . Beim Übergang fest-flüssig ist $T_{pt1} = T_{ss}$ und $T_{pt2} = T_{\ell s}$ wobei die Indizes ss bzw. ℓs Liquidus bzw. Solidus bezeichnen.

Der Massenanteil der flüssigen Phase $x_{\ell i}$ kann eine Funktion einiger Variablen sein. In vielen Systemen ist er jedoch in guter Näherung ausschließlich temperaturabhängig. Verschiedene Relationen können zwischen dem Massenanteil der flüssigen Phase und der Enthalpie bestehen, Voller und Swaminathan [92]. Wir verwenden wahlweise aus thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen resultierende Daten $x_{\ell i}(h)$ oder den bezüglich der spezifischen Enthalpie linearen Zusammenhang

$$x_{\ell i}(h) := \max \left\{ 0, \min \left\{ 1, \frac{h - h_{ss}}{h_{pt}} \right\} \right\}. \quad (2.4-2)$$

Der Massenanteil der festen Phase ist

$$x_{so} = 1 - x_{fi}$$

In (2.4-2) setzen wir Phasengleichgewicht voraus, d. h. wir nehmen an, daß der Phasenübergang schnell abläuft, verglichen mit der Änderung der Enthalpie und vernachlässigen damit die Relaxationszeit. Dadurch beschränken wir uns auf Stefan-Probleme.

Erstarrungsvorgänge beeinflussen die Hydrodynamik über die Viskosität des Fluidgemischs. In jedem Kontrollvolumen, welches im Finite-Volumen-Verfahren dem Maschenvolumen entspricht, ermitteln wir die Gemischviskosität aus der Viskosität und dem Massenanteil der flüssigen Phase wahlweise durch

a) Vorgabe von Daten,

$$b) \mu := x_{so}^r \mu_{so} + (1 - x_{so}^r) \mu_{fi} \quad ; \quad r \in \mathbb{R}_+^* \quad , \quad (2.4-3)$$

$$c) \mu := \mu_{fi} \left[1 + 2.5 x_{so} + 10.5 x_{so}^2 + 0.00273 \exp(16.6 x_{so}) \right] \quad , \quad (2.4-4)$$

$$d) \mu := \mu_{fi} \left(1 + 0.75 \frac{f}{1-f} \right)^2 \quad ; \quad f := \frac{x_{so}}{x_{sos}} \quad ; \quad x_{sos} \in [0.35, 0.75] \quad ,$$

$$x_{so} \in [0, x_{sos}] \quad (2.4-5)$$

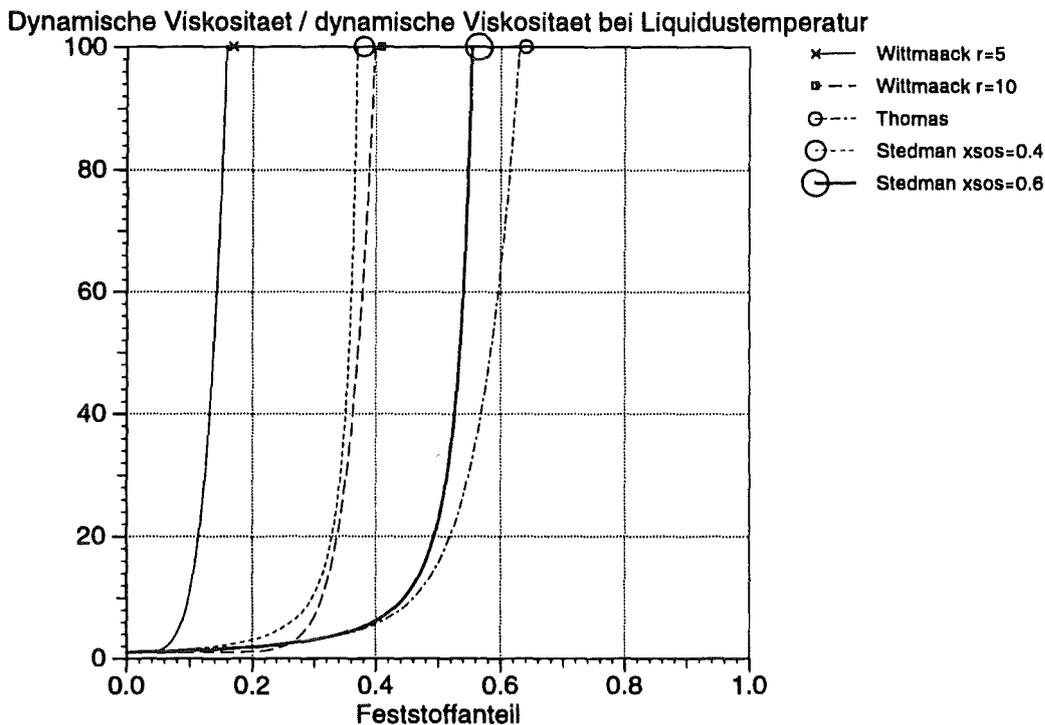


Abb. 2.4-2: Vergleich der Gemischviskositäts-Modelle von Wittmaack, Thomas und Stedman.

Im Ansatz b), den wir im Folgenden als Wittmaack-Modell bezeichnen, sind die Viskosität der festen Phase μ_{so} und der Exponent r Modellparameter, die für das jeweilige Fluid aus experimentellen Daten zu bestimmen sind. Ziel dieses Ansatzes ist, aus Interpolation der Viskositätsdaten entstehende

Ungenauigkeiten zu vermeiden. Das empirische Modell c) von Thomas [84] setzt kugelförmige feste Partikel voraus und erweitert das Einstein-Modell, Landau und Lifshitz [51], in den Bereich größerer Anteile der festen Phase. Das Modell d), Stedman et. al. [80], wurde für dendritische Partikel entwickelt. Der von der Partikelform abhängige Parameter x_{sos} definiert den Massenanteil der festen Phase, ab dem die Gemischviskosität unendlich ist. Abb. 2.4-2 vergleicht μ/μ_{fl} als Funktion des Feststoffanteils gemäß des Wittmaack-, Thomas- und Stedman-Modells für verschiedene Parameter r und x_{sos} , unter der Annahme $\mu_{\text{fl}} = 0.01 \text{ Pa s}$ und $\mu_{\text{so}} = 10^4 \text{ Pa s}$. Marsh [56] und Wallis [93] stellen weitere Methoden zur Bestimmung der Viskosität von Fluidgemischen vor, deren Leistungsfähigkeit von uns nicht untersucht wurde.

Die Viskosität wirkt als hydrodynamischer Kopplungsparameter zur Umgebung. Darum linearisiert ein Anstieg der Viskosität die Geschwindigkeit.

Wir vernachlässigen die Variation der Konzentration einzelner Konstituenten bei zusammengesetzten Substanzen. Dieser Einfluß wäre durch Einführung einer Differentialgleichung für die Konzentration erfaßbar. Auch rheologische Prozesse, Verformungen erstarrenden Fluids und die mechanische Stabilität von Krusten betrachtet unser Modell nicht.

2.5 Mathematische Definition des Problems

Ein Strömungsproblem mit freier Oberfläche wird durch ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen sowie die zugeordneten Anfangs- und Randbedingungen charakterisiert. Man bezeichnet das Problem als korrekt gestellt, falls seine Lösung existiert, eindeutig ist und stetig von Anfangswerten und Parametern abhängt. Man kann eine Lösung dahingehend untersuchen, ob sie einem bestimmten Funktionenraum angehört. Dabei spielen Räume eine wichtige Rolle, deren Elemente bestimmten Differenzierbarkeitsbedingungen genügen. Ein solcher hinreichend allgemeiner Raum ist der Banachraum. Banachräume sind vollständige, normierte, metrische Räume, z. B. die Räume stetig differenzierbarer Funktionen, Räume Hölder-stetiger Funktionen, Hilberträume oder Soboljew'sche Räume. Die Soboljew'schen Einbettungssätze besagen, daß gewisse Räume stetig differenzierbarer Funktionen und Hilberträume in Soboljew'schen Räumen eingebettet sind. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die mit verallgemeinerten Ableitungen operierenden Soboljew'schen Räume weniger restriktive Regularitätsanforderungen an die Funktionen stellen als die eingebetteten Räume, Grosche und Ziegler [36].

Die Struktur eines Lösungsraumes läßt sich durch eine Unterteilung mittels der Viskosität bzw. Reynoldszahl in vier Bereiche grob skizzieren, Joseph [44]. Bei Viskositäten oberhalb der Viskosität der Energiestabilitätsgrenze, auch als erste kritische Viskosität der Energietheorie bezeichnet, klingt die mittlere kinetische Energie jeder Störung monoton ab, und alle Lösungen konvergieren gegen eine eindeutige Lösung. Im Viskositätsbereich unterhalb der ersten kritischen Viskosität und oberhalb der Viskosität des globalen Stabilitätslimits, auch zweite kritische Viskosität genannt, klingt die mittlere

kinetische Energie jeder Störung im Limes unendlicher Beobachtungszeit ab, es ist jedoch temporäres Anwachsen möglich. Unterhalb der Viskosität des globalen Stabilitätslimits und oberhalb der Viskosität des linearen Stabilitätslimits klingt die mittlere kinetische Energie von Störungen nur dann im Limes unendlicher Beobachtungszeit ab, wenn die Störung kleiner als ein bestimmter, von der Viskosität abhängiger Wert ist. Bei Viskositäten unterhalb des linearen Stabilitätslimits klingt die mittlere kinetische Energie von Störungen im allgemeinen nicht ab, man bezeichnet diesen Bereich des Lösungsraumes auch als turbulent. In diesem Bereich verlieren Lösungen bei Reduzierung der Viskosität ihre Stabilität zugunsten komplexerer Lösungen, was man auch als überkritische Bifurkation von Lösungen bezeichnet.

Die in der Stabilitätsanalyse gebräuchlichen Grundlagen nichtlinearer Funktionalanalysis sowie deren Anwendungen zur Untersuchung der Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität von Strömungen mit freien und festen Rändern behandelt Zeidler [97]. Einen Beweis der Eindeutigkeit der numerischen Lösung von Kontinuitäts- und linearisierter Navier-Stokes-Gleichung sowie Abschätzungen des Diskretisierungsfehlers gibt Porsching [64] für 'Marker and Cell'-artige Algorithmen, Harlow und Welch [38], in Hilberträumen. Dirichlet-Randbedingungen, wie in unserem Verfahren verwendet, und von-Neumann-Randbedingungen der diskreten Poissongleichung für den Druck untersuchen Gresho und Sani [34] und zeigen deren Äquivalenz. Renardy und Renardy [67] analysieren Randbedingungen von Strömungsproblemen mit freier Oberfläche und Ein- und Ausströmung für schwache Lösungen.

Bislang wurde nicht allgemein gezeigt, daß Strömungsprobleme mit freier Oberfläche in Räumen stetig differenzierbarer Funktionen oder Hilberträumen stets korrekt gestellt werden können. Andererseits gehen die in dieser Arbeit vorgestellten numerischen Methoden davon aus, daß die Lösung ausreichend oft nach den Raum- und Zeitkoordinaten differenzierbar ist. Um dieser Schwierigkeit zu begegnen, wurde folgende Strategie für Entwicklung, Verifikation und Validierung des Verfahrens verwendet :

- Wir schließen Probleme aus, bei denen Hinweise auf nicht korrekte Problemstellung vorliegen.
- Rechenergebnisse werden mit analytischen Lösungen und experimentellen Daten verglichen.

3 Numerische Lösung

3.1 Geometrie

3.1.1 Diskretisierung

Wir überdecken das Fluid und seine Umgebung durch ein zeitunabhängiges Gitter, welches das Koordinatensystem in Finite-Volumen, auch Maschen genannt, unterteilt. Dabei spalten wir die Koordinatenintervalle in n_γ Teile auf, dies sind die Maschenausdehnungen in x_γ -Richtung, wobei $\gamma \in \{1,2,3\}$ der Raumrichtungsindex ist. Das Gitter braucht nicht äquidistant zu sein und enthält keine Untergitter, siehe Abb. 3.1-1. Es besteht aus n_γ Maschen in x_γ -Richtung des Berechnungsbereichs, umgeben von den zusätzlichen Randmaschen. Die räumlichen Indizes der Randmaschen sind 0 oder $n_\gamma + 1$. Diese raumfeste Diskretisierung entspricht einer Eulerschen Betrachtungsweise.

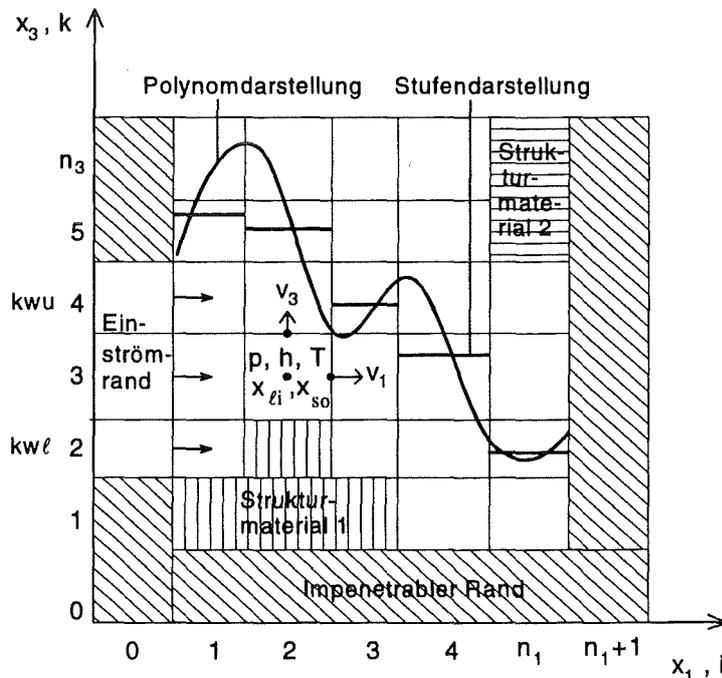


Abb. 3.1-1 : Diskretisierung, versetztes Gitter, Darstellung der freien Oberfläche und Einströmmodell.

Entsprechend der in den Abschnitten 2.1 und 2.3.1 beschriebenen Systematik ordnen wir allen Maschen, inklusive der Randmaschen, gewisse Eigenschaften zu. Der Materialindex $imat$ kennzeichnet dabei die Eigenschaften der Maschen und dient zur Steuerung des Verfahrens. Positive Werte von $imat$ identifizieren ein Material, seine Eigenschaften und seinen Anfangszustand. Bei Werten kleiner oder gleich Null kennzeichnet $imat$ dagegen einen bestimmten Typ von Randelement mit den dazugehörigen Randbedingungen. Die folgende Tabelle faßt die wichtigsten Mascheneigenschaften zusammen :

<u>Art der Masche</u>	<u>imat</u>	<u>Hydrodynamik</u>	<u>innerer Wärmetransport</u>	<u>Phasenübergänge</u>
Strukturmaterial	≥ 2	Nein	Diffusiv	Ja
Fluid , Fluid-Einströmung	1	Ja	Konvektiv, diffusiv	Ja
Leerbereich, keine Berechnung	0	Nein	Adiabatisch	Nein
Symmetrieebene	-1	Nein	Adiabatisch	Nein
Periodischer Rand	-2	Nein	Konvektiv, diffusiv	Nein

Tabelle 3.1.1-1 : Eigenschaften der Maschen des Gitters.

Unterhalb der freien Oberfläche sind Fluidmaschen mit Fluid gefüllt, oberhalb der freien Oberfläche dagegen entweder mit Luft oder idealer, isothermer Flüssigkeit. In Maschen, welche die freie Oberfläche enthalten, treten beide Anteile auf. Fluidmaschen auf dem Rand charakterisieren Einströmbereiche.

Strukturmaterial und Leerbereichsmaschen, auch leere Maschen genannt, können sowohl im Inneren als auch auf dem Rand des Gitters angeordnet sein. Leere Maschen dienen zur Definition von Berandungen des Fluidbereichs und haben die Funktion, zur Problemlösung nicht benötigte Bereiche des Gitters von der Berechnung auszuschließen und dadurch Rechenzeit einzusparen.

Strukturmaterialmaschen dienen meist zur Simulation von Festkörpern, sie sind jedoch auch zur Modellierung von Flüssigkeiten und Gasen verwendbar. So können bei der Ausbreitung und Erstarrung von Schmelzen auftretende dünne Luft- oder Gasschichten an der Kontaktfläche zum Substrat, Schwerdtfeger [73], durch Strukturmaterialmaschen modelliert werden.

Da integrale Formulierungen verwendet werden, sind die Verfahren zur Lösung der Kontinuitäts- und Wärmetransportgleichung auf jedes orthogonale, krummlinige Koordinatensystem, z. B. kartesische, zylindrische, sphärische oder hyperbolische Koordinaten anwendbar. Das Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung ist jedoch nur für geradlinige Koordinatensysteme verwendbar und der Algorithmus für die Dynamik der freien Oberfläche nur für Koordinatensysteme geeignet, bei denen die x_3 -Richtung entgegen der Schwerkraft gerichtet ist, siehe Abschnitt 2.1. Da kartesische und Zylinderkoordinaten in Anwendungen häufig auftreten, werden sie in dieser Studie explizit behandelt. Zudem kann die vorgestellte Methode auf jedes orthogonale, geradlinige Koordinatensystem, bei dem die dritte Raumrichtung entgegen der Schwerkraft gerichtet ist, angewendet werden, nachdem die betreffenden Geometriegrößen spezifiziert wurden.

Bei kartesischen Koordinaten sind die Metriktensoren g Kronecker-Tensoren und die Christoffel-Symbole Γ verschwinden. Für Zylinderkoordinaten gilt das gleiche, mit Ausnahme von

$$g_{22} = x_1^2 \quad ; \quad g^{22} = x_1^{-2} \quad ; \quad \Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2 = x_1^{-1} \quad ; \quad \Gamma_{22}^1 = -x_1. \quad (3.1.1-1)$$

Der durch das Gitter definierte Berechnungsbereich ist dreidimensional, mit horizontalem Boden und vertikalen Seitenwänden, siehe Abb. 3.1-1. Einströmung in das Berechnungsgebiet ist am westlichen Rand möglich. Die Ausströmung von Fluid wurde bislang nicht betrachtet, sie ist ähnlich wie die Einströmung beschreibbar. Unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems bezeichnen wir die Koordinaten mit (x_1, x_2, x_3) . Zur Diskretisierung der Variablen (x_1, x_2, x_3, t) verwenden wir die Indizes (i, j, k) oder (i_1, i_2, i_3) .

Gitterkoordinaten in der ersten Raumrichtung ($\gamma = 1$) wählen wir vor Beginn der Rechnung, um flexibel bezüglich des inneren Radius des Berechnungsbereichs zu sein, während die Gitterkoordinaten in den beiden verbleibenden Richtungen aus den jeweiligen Maschenausdehnungen ℓ_γ bestimmt werden ($\gamma \in \{2, 3\}$):

$$x_{\gamma 0} = -\ell_{\gamma 0}$$

$$\forall i_\gamma \in \underline{n_\gamma + 2} \setminus \{0\}: x_{\gamma i_\gamma} = x_{\gamma i_\gamma - 1} + \ell_{\gamma i_\gamma - 1}$$

Damit ist $x_{21} = x_{31} = 0$. Die Koordinaten der Maschenzentren werden wie folgt berechnet:

$$\forall i_\gamma \in \underline{n_\gamma + 1}: xc_{\gamma i_\gamma} = 0.5 (x_{\gamma i_\gamma + 1} + x_{\gamma i_\gamma})$$

Die Abstände zwischen Maschenzentren sind

$$\forall i_\gamma \in \underline{n_\gamma}: dx_{\gamma i_\gamma} = xc_{\gamma i_\gamma + 1} - xc_{\gamma i_\gamma}$$

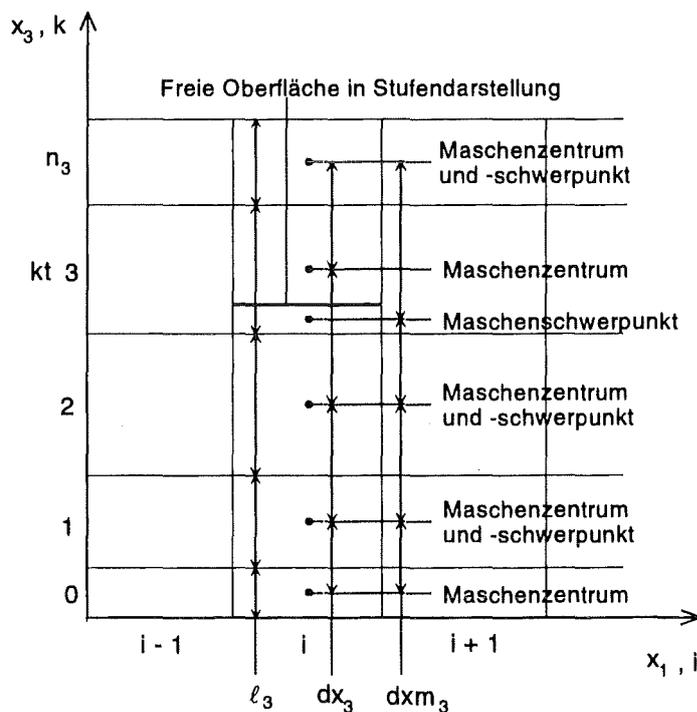


Abb. 3.1-2: Maschenzentren und -schwerpunkte in der dritten Raumrichtung.

Neben den Maschenzentren betrachten wir auch Maschenschwerpunkte, die sich nur in Maschen, welche die freie Oberfläche enthalten, von den Maschenzentren unterscheiden. siehe Abb. 3.1-2.

Unter Verwendung der Position ξ und des vertikalen Maschenindex kt_{ij}^n der freien Oberfläche definieren wir den vertikalen Abstand der Maschenschwerpunkte durch

$$\begin{aligned} \text{für } k = kt_{ij}^n: \quad dx_{m_{3ij}k} &:= 0.5 \left(\ell_{3kt+1} - \xi + x_{3kt} \right) + \ell_{3kt}, \\ \text{für } k = kt_{ij}^n - 1: \quad dx_{m_{3ij}k} &:= 0.5 \left(\xi - x_{3kt-1} \right), \\ \text{für } k < kt_{ij}^n - 1: \quad dx_{m_{3ij}k} &:= dx_3. \end{aligned} \quad (3.1.1-2)$$

Abb. 3.1-2 stellt die Maschenlängen sowie die Abstände zwischen Maschenzentren und -schwerpunkten gegenüber. In der zweiten Raumrichtung sind die Maschenkoordinaten, -ausdehnungen etc. Längen in ebener, jedoch Winkel in zylindrischer Geometrie. Um die Notation zu vereinfachen, führen wir in der ersten Raumrichtung folgende Geometriegrößen ein, die in ebener Geometrie dimensionslos sind, in zylindrischer Geometrie jedoch die Einheit Länge besitzen :

<u>Ebene Geometrie</u>	<u>Zylindrische Geometrie</u>
$f2_i = 1$	$f2_i = \max\{0, x_1\}$,
$f2c_i = 1$	$f2c_i = \max\{0, xc_1\}$.

Zusätzlich führen wir zur Vereinfachung der Notation folgende krummlinige Linienelemente ein :

$$\begin{aligned} \tilde{\ell}_{1i_1} &:= \ell_1 & d\tilde{x}_{1i_1} &:= dx_1, \\ \tilde{\ell}_{2i_1i_2} &:= f2c \ell_2 & d\tilde{x}_{2i_1i_2} &:= f2c dx_2, \\ \tilde{\ell}_{3i_3} &:= \ell_3 & d\tilde{x}_{3i_1i_2i_3} &:= dx_{m_3}. \end{aligned}$$

Die Projektionsflächen der Maschen in x_γ -Richtung und die Maschenvolumina sind im gesamten Gitter wie folgt definiert :

$$\begin{aligned} A_{1ijk} &:= f2 \ell_2 \ell_3, \\ A_{2ik} &:= \ell_1 \ell_3, \\ A_{3ij} &:= f2c \ell_1 \ell_2 = \ell_1 \tilde{\ell}_2, \\ V_{ijk} &:= A_3 \ell_3. \end{aligned}$$

Die zur numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichung erforderlichen Projektionsflächen und Kontrollvolumina auf verschobenem Gitter berechnen wir analog. Die verschobene Position ist dabei durch halbzahlige Indizes gekennzeichnet.

Der vertikale Maschenindex der freien Oberfläche kt_{ij}^n bezieht sich auf die Projektion des Maschenzentrums in die x_1 - x_2 -Ebene und ordnet der Koordinate in x_3 -Richtung $\frac{V_{cij}^n}{A_{3ij}}$ ihren

Maschenindex zu. Dabei bezeichnet V_{cij}^n vertikale Säulen von Maschen, welche in den ersten beiden Raumrichtungen jeweils eine Maschenweite umfassen, die sich vom Boden bis zur freien Oberfläche erstrecken. Bei der stetigen Polynomdarstellung 2. Grades der freien Oberfläche treten bei kt auch halbzahlige Maschenindizes auf, die sich auf die Projektion eines Maschenrandes in die x_1 - x_2 -Ebene beziehen.

Unsere Variablenanordnung im Gitter ist versetzt, d. h. p , h , T , $x_{\ell i}$ und x_{s0} befinden sich im Maschenzentrum, v_1 , v_2 und v_3 sind dagegen auf den Seitenflächen der Maschen definiert, siehe Abb. 3.1-1. Diese Variablenanordnung wurde gewählt, da sie keine Druckentkopplungs-Probleme verursacht wie etwa die Anordnung aller Variablen im Maschenzentrum oder andere kompliziertere Anordnungen, Patankar [62] oder Peric [63].

Nichtäquidistante Gitter vergrößern die Abbruchfehler, Fletcher [27] oder Hirt und Nichols [41] 1981. Aus diesem Grund verwenden wir Maschenausdehnungen, die sich um weniger als einen Faktor 0.5 bzw. 2 zwischen Nachbarmaschen unterscheiden. Wir verwenden folgende Bezeichnung der Nachbarmaschen :

<u>Maschenbezeichnung</u>	<u>Maschenindizes</u>
Ost	($i + 1$, j , k)
West	($i - 1$, j , k)
Nord	(i , $j + 1$, k)
Süd	(i , $j - 1$, k)
Oben	(i , j , $k + 1$)
Unten	(i , j , $k - 1$)

Tabelle 3.1.1-2: Bezeichnung und Definition der Menge N von Nachbarmaschen.

Unter linken oder rechten Nachbarmaschen verstehen wir links oder rechts auf der jeweiligen nach rechts ansteigenden Koordinatenachse. Links bedeutet demnach westlich, südlich oder unten, rechts dagegen östlich, nördlich oder oben.

Zur effizienten Steuerung des Verfahrens führen wir die logischen Variablen ℓf , ℓh und ℓcd ein :

$$\ell f_{i_1 i_2 i_3} \Leftrightarrow \text{imat} = 1,$$

$$\ell h_{i_1 i_2 i_3} \Leftrightarrow \text{imat} = 1 \wedge \forall \gamma \in \underline{3} \setminus \{0\}: i_\gamma \in \underline{n}_\gamma \setminus \{0\},$$

$$\ell cd_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n \Leftrightarrow \ell h \wedge \ell h_{i_\gamma+1}.$$

ℓf und ℓh spezifizieren alle Maschen des Gitters, einschließlich des Randes, die von Fluid besetzt werden können. Der Unterschied besteht darin, daß ℓf Einströmränder enthält, ℓh dagegen nicht. Die im mit Fluid besetzten Bereich definierte Variable ℓcd sagt aus, ob zwei Nachbarmaschen zu einem verschobenen Kontrollvolumen des Navier-Stokes-Algorithmus gehören.

3.1.2 Einströmmodell

Um Fluid in den Berechnungsbereich einzubringen, können entweder beliebige Teile des westlichen Randes oder der gesamte westliche Rand als Einströmbereich definiert werden, siehe Abb. 3.1-1.

Die zeitabhängige Einströmgeschwindigkeit $v_{1\text{in}}(t)$ und die Einströmtemperatur T_{in} , die auf der gesamten Einströmfläche wirksam sind, definieren dabei die hydro- und thermodynamischen Randbedingungen. Für oberhalb der freien Oberfläche befindliche Teile der Einströmfläche wird Masseneintrag ohne zugehörigen Impulstransfer in den Fluidbereich berechnet.

3.2 Hydrodynamik

In diesem Abschnitt beschreiben wir die numerischen Methoden für Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichung sowie die zugehörigen Randbedingungen.

3.2.1 Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichung

3.2.1.1 Oberflächenintegrale und räumliche Diskretisierung

Wir verwenden wir eine integrale Formulierung der Navier-Stokes-Gleichung, die auf geradlinige, orthogonale Koordinatensysteme anwendbar ist. Dazu führen wir verschobene Integrationsbereiche $\Omega_\gamma := V_{i_\gamma + \frac{1}{2}}$, sogenannte Kontrollvolumina, für die Navier-Stokes-Gleichungen in den verschiedenen Koordinatenrichtungen $\gamma \in \{1, 2, 3\}$ ein, siehe Abb. 3.2-1. Diese Kontrollvolumina bieten den Vorteil, daß die Geschwindigkeitskomponente der betrachteten Gleichung im Zentrum dieser Integrationsbereiche definiert ist.

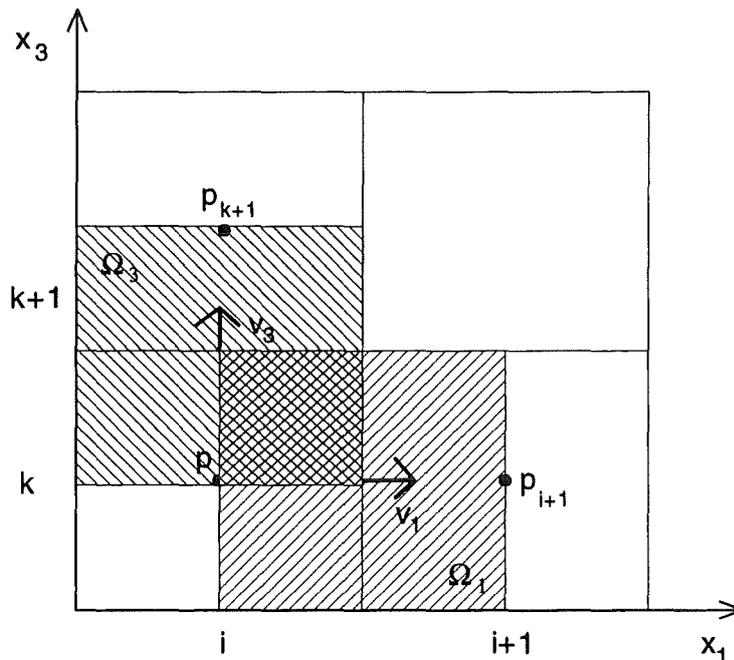


Abb. 3.2-1: Integrationsbereiche der Navier-Stokes-Gleichung in der ersten und dritten Raumrichtung.

Wir nehmen an, daß die Gradienten von Dichte und kinematischer Zähigkeit klein sind und vernachlässigen ihre Variation innerhalb des Integrationsbereichs. Dann ergibt die Integration der Navier-Stokes-Gleichung (2.2-2), unter Verwendung des Gaußschen Integralsatzes, für physikalische Tensorkomponenten auf der linken Seite

$$\int_{\Omega_\gamma} (d_t - \nu \nabla_{mm}) v_\gamma dV = \text{Vol}(\Omega_\gamma) \partial_t v_\gamma + \int_{\Omega_\gamma} v_m \nabla_m v_\gamma dV - \nu \oint_{\partial\Omega_\gamma} \nabla_m v_\gamma df_m,$$

wobei die Viskosität von Fluidgemisch gemäß Abschnitt 2.4.2 zugrundegelegt wird. df_m bezeichnet das Oberflächen-Integrationelement. Um den konvektiven Term ebenfalls mittels des Gaußschen Satzes in ein Oberflächenintegral zu transformieren, verwenden wir die Kontinuitätsgleichung (2.2-1):

$$\int_{\Omega_\gamma} v_m \nabla_m v_\gamma dV = \int_{\Omega_\gamma} \nabla_m (v_m v_\gamma) dV = \oint_{\partial\Omega_\gamma} v_m v_\gamma df_m.$$

Beim konvektiven und diffusiven Term wird der Gaußsche Integralsatz in einer Form verwendet, welche die Anwendbarkeit des Verfahrens auf geradlinige Koordinatensysteme beschränkt, siehe Anhang 1. Da nur die Verwendung dieser Form des Gaußschen Satzes die Einschränkung auf geradlinige Koordinatensysteme bedingt, werden als Basis zur Weiterentwicklung auch Ansätze zur Behandlung krummliniger Koordinatensysteme dargestellt. Diese Ansätze ergeben sich, wenn der Gaußsche Satz in der für geradlinige Koordinatensysteme gültigen Form unerlaubt in krummlinigen Koordinatensystemen verwendet wird.

Die Oberflächenintegrale werden in je sechs Integrale über die Grenzflächen zu den Nachbar-Kontrollvolumina, die man auch als Flüsse bezeichnet, zerlegt. Bei der Berechnung dieser Integrale geht man davon aus, daß der Integrand auf der gesamten Grenzfläche den Wert des Flächenmittelpunkts annimmt. Dies entspricht der Anwendung der Tangententrapezregel zur genäherten Berechnung dieser Flüsse.

Um die räumliche Diskretisierung des dissipativen Terms mit partiellen Ableitungen nach den krummlinigen Koordinaten angeben zu können, benötigt man folgenden Zusammenhang zwischen partiellen und kovarianten Ableitungen der physikalischen Komponenten von Tensoren erster Stufe, siehe Anhang 2:

$$\nabla_i^* v_j^* = \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}} \left[\left(x^{*i} \partial_i^* \sqrt{g^{(ii)}} + \sqrt{g^{(ii)}} \right)^{-1} \partial_i^* \left(\sqrt{g^{(jj)}} v_j^* \right) - \sqrt{g_{(mm)}} \Gamma_{ij}^m v_m^* \right].$$

Dabei kennzeichnen wir physikalische Komponenten ausnahmsweise mit einem Stern. Der erste der beiden Summanden enthält die partielle Ableitung, alle weiteren Christoffel-Symbole. Unter Verwendung der Metriktensoren und Christoffel-Symbole (3.1.1-1) ergibt sich damit folgende räumlich diskretisierte Form der linken Seite der Navier-Stokes-Gleichung in x_γ -Richtung, für kartesische Koordinaten und zweidimensionale Zylinderkoordinaten:

$$\text{Vol}(\Omega_\gamma) \partial_i v_\gamma + A_{\gamma i_\gamma + \frac{3}{2}} v_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}}^2 - A_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{\gamma i_\gamma - \frac{1}{2}}^2 + \sum_{\delta \in \mathbb{Z} \setminus \{0, \gamma\}} \left(A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + 1} v_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} v_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}} - A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta - 1} v_{\gamma i_\gamma - \frac{1}{2}} \right)$$

$$\begin{aligned}
& - A_{\gamma i_{\gamma} + \frac{3}{2}} v_{i_{\gamma} + 1} \left(\frac{v_{\gamma i_{\gamma} + 1} - v_{\gamma}}{\tilde{\ell}_{\gamma i_{\gamma} + 1}} + \kappa_{\gamma\gamma} \frac{v_{1 i_{\gamma} + 1} - \frac{1}{2}}{x_{c_1}} \right) \\
& - A_{\gamma i_{\gamma} + \frac{1}{2}} v \left(\frac{v_{\gamma i_{\gamma} - 1} - v_{\gamma}}{\tilde{\ell}_{\gamma}} - \kappa_{\gamma\gamma} \frac{v_{1 i - \frac{1}{2}}}{x_{c_1}} \right) \\
& - \sum_{\delta \in \mathbb{N} \setminus \{0, \gamma\}} \left[A_{\delta i_{\gamma} + \frac{1}{2} i_{\delta} + 1} v_{i_{\gamma} + \frac{1}{2} i_{\delta} + \frac{1}{2}} \left(\frac{v_{\gamma i_{\delta} + 1} - v_{\gamma}}{d\tilde{x}_{\delta i_{\gamma} + \frac{1}{2}}} - \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_{\gamma} + \frac{1}{2}}}{x_{1 i_{\delta} + 1}} \right) \right. \\
& \quad \left. + A_{\delta i_{\gamma} + \frac{1}{2}} v_{i_{\gamma} + \frac{1}{2} i_{\delta} - \frac{1}{2}} \left(\frac{v_{\gamma i_{\delta} - 1} - v_{\gamma}}{d\tilde{x}_{\delta i_{\gamma} + \frac{1}{2} i_{\delta} - 1}} + \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_{\gamma} + \frac{1}{2} i_{\delta} - 1}}{x_{1 i_{\delta} + 1}} \right) \right].
\end{aligned} \tag{3.2.1-1}$$

Dabei ist κ ein Multiplikator für Christoffel-Symbol-Terme. Für Zylinderkoordinaten, $i = 2$ und $j \in \{1, 2\}$ ist $\kappa_{ij} = 1$, für alle anderen Fälle gilt $\kappa_{ij} = 0$. Ähnliche Ausdrücke erhält man in anderen geradlinigen, orthogonalen Koordinatensystemen.

In dieser Gleichung sind die ersten sechs Terme nach dem Zeitableitungsterm konvektiv (die ersten beiden Zeilen der Gleichung), die restlichen sechs diffusiv (die letzten vier Zeilen der Gleichung). Die jeweils sechs konvektiven und diffusiven Terme bestehen aus jeweils drei Paaren. Das erste dieser Paare bezieht sich auf die Richtung der Gleichung, die anderen beiden Paare auf die dazu senkrechten Richtungen. Jedes Paar setzt sich aus einem vorwärts gerichteten, gefolgt von einem rückwärts gerichteten Anteil zusammen.

Die Geschwindigkeiten mit halbzahligen Indizes liegen nicht auf dem versetzten Gitter, ihre räumliche Diskretisierung wird im nächsten Abschnitt behandelt.

Für die rechte Seite von (2.2-2) ergibt sich

$$\frac{1}{\rho_0} \int_{\Omega_{\gamma}} -\nabla_{\gamma} p + \rho g_{\gamma} dV = \frac{\text{Vol}(\Omega_{\gamma})}{\rho_0} \left(-\nabla_{\gamma} p + \rho g_{\gamma} \right).$$

Die räumlich diskretisierte Form der rechten Seite der Navier-Stokes-Gleichung in x_{γ} -Richtung lautet dann

$$\frac{\text{Vol}(\Omega_{\gamma})}{\rho_0} \left(\frac{p - p_{i_{\gamma} + 1}}{d\tilde{x}_{\gamma}} + \rho g_{\gamma} \right).$$

3.2.1.2 Variablen auf Zwischengitterplätzen

Zur Vervollständigung der räumlichen Diskretisierung müssen die in konvektiven und Christoffel-Symbol-Termen auftretenden Variablen von (3.2.1-1), die nicht auf dem versetzten Gitter liegen, d. h. die Geschwindigkeiten in Maschenzentren und -ecken, mittels geeigneter Interpolationen durch Gittervariablen ausgedrückt werden.

Zur Interpolation der Geschwindigkeit im Maschenzentrum mittels der bekannten Werte auf den Seitenflächen verwenden wir die Kontinuitätsgleichung für eindimensionale inkompressible Strömung in x_γ -Richtung :

$$\dot{V} = A_{\gamma i_\gamma+1} v_\gamma = A_{\gamma i_\gamma+\frac{3}{2}} v_{\gamma i_\gamma+\frac{1}{2}} = A_{\gamma i_\gamma+2} v_{\gamma i_\gamma+1}.$$

Mittelung der beiden Gleichungen liefert einen zentrierten Ausdruck für die Geschwindigkeit im Maschenzentrum :

$$\left(v_{\gamma i_\gamma+\frac{1}{2}} \right)_c = \frac{A_{\gamma i_\gamma+1} v_\gamma + A_{\gamma i_\gamma+2} v_{\gamma i_\gamma+1}}{2 A_{\gamma i_\gamma+\frac{3}{2}}}.$$

Bei sogenannten 'upwind'-Ausdrücken wird nur die stromaufwärts angeordnete Gittervariable berücksichtigt. Unter Zuhilfenahme obigen Resultats erhalten wir folgenden 'upwind'-Ausdruck für die Geschwindigkeit im Maschenzentrum :

$$\left(v_{\gamma i_\gamma+\frac{1}{2}} \right)_u = \frac{1}{A_{\gamma i_\gamma+\frac{3}{2}}} \left\{ A_{\gamma i_\gamma+1} \text{Rp} \left[\left(v_{\gamma i_\gamma+\frac{1}{2}} \right)_c \right] \max\{0, v_\gamma\} + A_{\gamma i_\gamma+2} \text{Rn} \left[\left(v_{\gamma i_\gamma+\frac{1}{2}} \right)_c \right] \min\{0, v_{\gamma i_\gamma+1}\} \right\}.$$

Die zur Vereinfachung der Notation eingeführten Indikatorfunktionen für positive und negative Argumente, Rp und Rn, beschreibt Anhang 3.

Einen zentrierten Ausdruck für die Geschwindigkeit in Maschenecken liefert die Volumenstrom-Mittelung

$$\left(v_{\gamma i_\delta+\frac{1}{2}} \right)_c = \frac{A_{\gamma i_\gamma+1} v_\gamma + A_{\gamma i_\gamma+1 i_\delta+1} v_{\gamma i_\delta+1}}{A_{\gamma i_\gamma+1} + A_{\gamma i_\gamma+1 i_\delta+1}}.$$

Bei Einbeziehung der Geschwindigkeits-Randbedingungen verschwindet der zentrierte Ausdruck in gewissen Fällen oder besteht nur aus einer der beiden Geschwindigkeiten. Wir verzichten jedoch auf die Darstellung der umfangreichen, von den Eigenschaften der Nachbarmaschen abhängenden Fallunterscheidungen.

Auf dem zentrierten Ausdruck basierend, führen wir die 'upwind'-Geschwindigkeit in Maschenecken ein :

$$\left(v_{\gamma i_{\delta+\frac{1}{2}}} \right)_u = \text{Rp} \left[\left(v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} \right)_c \right] v_{\gamma} + \text{Rn} \left[\left(v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} \right)_c \right] v_{\gamma i_{\delta+1}}$$

Die positive-Koeffizienten-Regel von Patankar [62] besagt, daß die Koeffizienten a_{im} der Differenzenapproximation $a_{im} v_m = b_i$ der Bedingung

$$a_{ii} \geq 0 \quad \wedge \quad \forall j \neq i : a_{ij} \leq 0$$

genügen müssen. Zur Diskretisierung der konvektiven Terme in (3.2.1-1) verwenden wir folgende Möglichkeiten, die Patankar's Regel genügen, wobei bereits die beiden Zeitebenen der im folgenden Abschnitt beschriebenen zeitlichen Diskretisierung berücksichtigt werden :

$$\begin{aligned} \text{i) zentriert-'upwind'} \quad & v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} v_{\gamma i_{\delta+\frac{1}{2}}}^{n+1} = \left(v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} \right)_c \left(v_{\gamma i_{\delta+\frac{1}{2}}}^{n+1} \right)_u, \\ \text{ii) 'upwind-upwind'} \quad & v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} v_{\gamma i_{\delta+\frac{1}{2}}}^{n+1} = \left(v_{\delta i_{\gamma+\frac{1}{2}}} \right)_u \left(v_{\gamma i_{\delta+\frac{1}{2}}}^{n+1} \right)_u, \end{aligned}$$

wobei ausnahmsweise auch $\delta = \gamma$ betrachtet wird. Die 'upwind'-zentrierte Diskretisierung wird nicht verwendet, da sie Patankar's Regel verletzt. Im Vergleich zur 'upwind-upwind' Methode ist der lokale Abbruchfehler bei der zentriert-'upwind' Diskretisierung geringer, aber auch die numerische Stabilität.

3.2.1.3 Zeitdiskretisierung und implizites Verfahren

Mit rückwärts gerichteter Differenzennäherung der partiellen Zeitableitung ergeben sich nichtlineare implizite Verfahren der Form

$$F_{\gamma} \left(v_{\gamma}^{n+1}, v_{\delta}^{n+1}, v_{\phi}^{n+1} \right) v_{\gamma}^{n+1} = G_{\gamma} \left(v_{\gamma}, p^{n+1} \right).$$

Dabei bezeichnen γ den Richtungsindex der Navier-Stokes-Gleichung, δ und ϕ die Indizes der beiden anderen Raumrichtungen, F_{γ} und G_{γ} stetige Funktionen, die im Folgenden näher spezifiziert werden. Neben den angegebenen expliziten Abhängigkeiten sind F_{γ} und G_{γ} implizit von der Position der freien Oberfläche und über die Materialeigenschaften von der spezifischen Enthalpie abhängig.

Bei impliziter Diskretisierung ist die Signal-Ausbreitungsgeschwindigkeit unbegrenzt, was mit der Verletzung der Lorentz-Invarianz durch die Navier-Stokes-Gleichung übereinstimmt. Linearisieren wir F_{γ} und G_{γ} mit der Geschwindigkeit und dem Druck des vorigen Zeit- bzw. Iterationsschritts, siehe Abschnitt 3.2.3, so führt die implizite Diskretisierung auf folgendes lineare Gleichungssystem :

$$F_\gamma (v_\gamma, v_\delta, v_\phi) v_\gamma^{n+1} = G_\gamma (v_\gamma, p). \quad (3.2.1-2a)$$

Diese als voll-implizit bezeichnete Diskretisierung ist von 1. Ordnung in Δt , und eignet sich zur Simulation quasi-stationärer Prozesse. Für transiente Probleme verwenden wir die Crank-Nicolson Zeitdiskretisierung

$$(1 + F_\gamma) v_\gamma^{n+1} = (1 - F_\gamma) v_\gamma + 2 G_\gamma, \quad (3.2.1-2b)$$

Fletcher [27], die von 2. Ordnung in Δt ist. Die Einheitsmatrix wird hier mit 1 bezeichnet.

Bei spaltenweiser Anordnung der Variablen, dies sind die Geschwindigkeiten in x_γ -Richtung, vom Boden zur freien Oberfläche, von West nach Ost und von Süd nach Nord, treten dabei in ausschließlich aus Fluidmaschen bestehenden Geometrien folgende Variablenanzahlen auf :

Größe	Symbol	für $\gamma = 1$	für $\gamma = 2$	für $\gamma = 3$
Indizes der senkrechten Richtungen	δ, ϕ	2, 3	1, 3	1, 2
Anzahl der Variablen in x_1 -Richtung	$nv_{\gamma 1}$	$n_1 - 1$	n_1	n_1
Anzahl der Variablen in x_2 -Richtung	$nv_{\gamma 2}$	n_2	$n_2 - 1$	n_2
Anzahl der Variablen in x_3 -Richtung	$nv_{\gamma 3 i j}^n$	$k m x_1$	$k m x_2$	$kt - 1$

Tabelle 3.2.1-1: Variablenanzahlen des impliziten Verfahrens zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung.

Dabei ist kt der vertikale Maschenindex der freien Oberfläche und $k m x_{\gamma i_1 i_2}^n := \max \{ kt, kt_{i_\gamma+1} \}$ das Maximum von kt einer Säule und ihrer rechten Nachbarsäule in x_γ -Richtung. Wegen der versetzten Variablenanordnung ist nv_γ um eins reduziert. Infolge der Zeitabhängigkeit der freien Oberfläche sind die Variablenanzahlen in der dritten Raumrichtung zeitabhängig. Die Gesamtanzahl der Variablen bzw. Kontrollvolumina, in denen die Geschwindigkeit in x_γ -Richtung berechnet wird, ist

$$nv_\gamma^n := \sum_{j=1}^{nv_{\gamma 2}} \sum_{i=1}^{nv_{\gamma 1}} nv_{\gamma 3}.$$

Jedes Kontrollvolumen, das teilweise oder vollständig aus nicht-Fluid Maschen besteht, reduziert die so definierten Variablenanzahlen um eins. Mit dieser Variablenanzahl ist

$$F_\gamma \in Gl (nv_\gamma, \mathfrak{R}) \text{ und } v_\gamma, G_\gamma \in \mathfrak{R}^{nv_\gamma}.$$

Dabei bezeichnen \mathfrak{R} die Menge reeller Zahlen und $Gl(n, \mathfrak{R})$ die Menge regulärer, reeller $n \times n$ Matrizen.

$$G_\gamma^n := v_\gamma + \frac{\Delta t}{\rho_0} \left(\frac{p - p_{i_\gamma+1}}{d\tilde{x}_\gamma} + \rho g_\gamma \right), \quad (3.2.1-3a)$$

wobei $\Delta t^n := t^{n+1} - t^n$ den Zeitschritt bezeichnet.

3.2.1.4 Matrixform des impliziten Verfahrens

Da die Christoffel-Symbol Terme in (3.2.1-1) nur v_δ und nicht v_γ enthalten, behandeln wir sie als Quellterme, bringen sie daher auf die rechte Seite und ersetzen (3.2.1-3a) durch

$$G_\gamma^n := v_\gamma + \Delta t \left\{ \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{p - p_{i_\gamma+1}}{d\tilde{x}_\gamma} + \rho g_\gamma \right) - \frac{1}{V_{i_\gamma+1/2}} \left[\kappa_{\gamma\gamma} \frac{A_2}{x_{c_1}} \left(-v_{i_\gamma+1} v_{i_\gamma+1/2} + v_{i_\gamma+1/2} v_{i_\gamma} \right) + \sum_{\delta \in \mathfrak{I}\{0,\gamma\}} \kappa_{\delta\gamma} \frac{A_{2i_\gamma+1/2}}{x_{1i+1}} \left(v_{i_\gamma+1/2} v_{i_\delta+1/2} - v_{i_\gamma+1/2} v_{i_\delta-1/2} \right) \right] \right\}. \quad (3.2.1-3b)$$

Dann verbleibt für die linke Seite der Gleichung bei 'upwind-upwind' Diskretisierung konvektiver Terme,

$$F_\gamma v_\gamma^{n+1} := \left\{ 1 + \frac{\Delta t}{V_{i_\gamma+1/2}} \left[\frac{A_\gamma^2}{A_\gamma} \text{Rp} \left[\left(v_\gamma \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \max\{0, v_\gamma\} - \frac{A_\gamma^2}{A_\gamma} \text{Rn} \left[\left(v_\gamma \right)_{i_\gamma-1/2} \right] \min\{0, v_\gamma\} + \sum_{\delta \in \mathfrak{I}\{0,\gamma\}} \left(A_{\delta i_\gamma+1/2} \text{Rp} \left[\left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} - A_{\delta i_\gamma+1/2} \text{Rn} \left[\left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right) \right] \right\} v_\gamma^{n+1} + \frac{A_\gamma}{\tilde{l}_{\gamma i_\gamma+1}} v_{i_\gamma+1} + \frac{A_\gamma}{\tilde{l}_\gamma} v + \sum_{\delta \in \mathfrak{I}\{0,\gamma\}} \left(\frac{A_\delta}{d\tilde{x}_\delta} v_{i_\gamma+1/2} + \frac{A_\delta}{d\tilde{x}_\delta} v_{i_\gamma+1/2} \right) \right\} v_\gamma^{n+1}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{V_{i_\gamma+1/2}} \left\{ \left[\frac{A_\gamma^2}{A_\gamma} \frac{i_\gamma+2}{i_\gamma+3} \text{Rn} \left[\left(v_\gamma \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \min\{0, v_\gamma\}_{i_\gamma+1} - \frac{A_\gamma}{\tilde{l}_{\gamma i_\gamma+1}} v_{i_\gamma+1} \right] v_{\gamma i_\gamma+1}^{n+1} \right. \\
& \quad + \left[- \frac{A_\gamma^2}{A_\gamma} \frac{i_\gamma+1}{i_\gamma+2} \text{Rp} \left[\left(v_\gamma \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \max\{0, v_\gamma\}_{i_\gamma-1} - \frac{A_\gamma}{\tilde{l}_\gamma} v_{i_\gamma-1} \right] v_{\gamma i_\gamma-1}^{n+1} \\
& \quad + \sum_{\delta \in \mathbb{N} \setminus \{0, \gamma\}} \left\{ A_\delta \frac{i_\gamma+1}{i_\gamma+2} \frac{i_\delta+1}{i_\delta+1} \left[\text{Rn} \left[\left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] - \frac{v_{i_\gamma+1/2} i_\delta+1/2}{d\tilde{x}_\delta} v_{\gamma i_\delta+1}^{n+1} \right. \\
& \quad \left. + A_\delta \frac{i_\gamma+1}{i_\gamma+2} \left[- \text{Rp} \left[\left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] \left(v_\delta \right)_{i_\gamma+1/2} \right] - \frac{v_{i_\gamma+1/2} i_\delta-1/2}{d\tilde{x}_\delta} v_{\gamma i_\delta-1}^{n+1} \right] \left. \right\}.
\end{aligned}$$

Für zentriert-'upwind' Diskretisierung erhält man einen ähnlichen Ausdruck, auf dessen Darstellung wir hier verzichten. Koeffizienten von Nachbarelementen außerhalb des jeweiligen Berechnungsbereichs der Navier-Stokes-Gleichung in den einzelnen Raumrichtungen verschwinden allgemein. Die Ausdrücke für F_γ besitzen folgende Symmetrien :

- Konvektive Terme in Diagonal- und nicht-Diagonalelementen sind unterschiedlich.
- Diffusive Terme in Diagonal- und nicht-Diagonalelementen sind gleich, außer zu Randmaschen.
- Sowohl konvektive als auch diffusive Terme sind positiv in Diagonalelementen und negativ in nicht-Diagonalelementen, entsprechend Patankar's positive-Koeffizienten-Regel, Patankar 1980.

3.2.1.5 Eindimensionale Indizierung und allgemeine Eigenschaften

Für die bereits erwähnte spaltenweise Anordnung der Variablen zeigt folgende Tabelle die Beziehungen zwischen Maschen- und Variablenindizes des Verfahrens bzw. zwischen drei- und eindimensionaler Indizierung :

Maschenposition	Maschenindizes	Variablenindex
Zentral	(i , j , k)	ℓ
Östlicher Nachbar	(i + 1 , j , k)	$\ell + ne_{ijk}$
Westlicher Nachbar	(i - 1 , j , k)	$\ell - ne_{i-1jk}$
Nördlicher Nachbar	(i , j + 1 , k)	$\ell + nn_{ijk}$
Südlicher Nachbar	(i , j - 1 , k)	$\ell - nn_{ij-1k}$
Oberer Nachbar	(i , j , k + 1)	$\ell + 1$
Unterer Nachbar	(i , j , k - 1)	$\ell - 1$

Tabelle 3.2.1-2 : Beziehungen zwischen drei- und eindimensionaler Indizierung der Variablen des impliziten Verfahrens zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung.

Dabei bezeichnen ne und nn die Indexinkremente der Variablen zu den östlichen und nördlichen Nachbarmaschen. In Abwesenheit hydrodynamischer Hindernismaschen sind ne und nn unabhängig von k und es gilt

$$ne_{ij}^n = nv_{3ij}^n \quad ; \quad nn_{ij}^n = \sum_{m=i}^{nv_{y1}} nv_{3mj} + \sum_{m=1}^{i-1} nv_{3mj+1} .$$

Sind Hindernismaschen vorhanden, so müssen stattdessen die Kontrollvolumina, die vollständig aus besetzten Fluidmaschen bestehen, summiert werden, um ne und nn zu berechnen. Die Summation erstreckt sich über alle Kontrollvolumina zwischen dem Ausgangs- und dem betrachteten Nachbar-Kontrollvolumen.

Die Viskosität auf den Seitenlinien der Maschen wird durch inverse volumetrische Mittelung bestimmt, d. h.

$$v_{i_y + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} = \frac{V + V_{i_y+1} + V_{i_\delta+1} + V_{i_y+1 i_\delta+1}}{\frac{V}{v} + \frac{V_{i_y+1}}{v_{i_y+1}} + \frac{V_{i_\delta+1}}{v_{i_\delta+1}} + \frac{V_{i_y+1 i_\delta+1}}{v_{i_y+1 i_\delta+1}}} .$$

Die Pecletzahl $Pe := \frac{v \ell}{\nu}$, die hier der Reynoldszahl entspricht, charakterisiert das Verhältnis von Konvektion und Diffusion. Infolge der 'upwind' Diskretisierung konvektiver und zentraler Diskretisierung diffusiver Terme wird eine Überschätzung der Diffusion bei großen Pecletzahlen bewirkt, Patankar [62]. Diese Restriktion ist in Einklang mit dem Verzicht auf eine Modellierung der

Turbulenz. Darum ist die Methode auf turbulente Strömungen mit hohen Reynoldszahlen nicht anwendbar.

Der Algorithmus zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung behandelt Maschen im Fluidbereich des Berechnungsbereichs als seien sie vollständig gefüllt, obwohl Maschen auf und oberhalb der freien Oberfläche nur teilweise oder gar nicht mit Fluid gefüllt sind. Den Einfluß der Position der freien Oberfläche auf die Strömung beinhalten die Randbedingungen.

In Maschen mit freier Oberfläche ist der Druck nicht im Maschenzentrum, sondern im Maschenschwerpunkt definiert. Dort wird der Druck aus der Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche und dem Druck der darunterliegenden Nachbarmasche mittels linearer Interpolation bestimmt, siehe Abschnitt 3.2.4. Auf diese Weise ist der Druck in Maschen mit freier Oberfläche nicht kleiner als der Druck des Mediums oberhalb der freien Oberfläche, wenn der Druckanstieg zwischen freier Oberfläche und dem Schwerpunkt der Masche an der freien Oberfläche nicht durch die viskosen und Oberflächenspannungs-Anteile der Druckrandbedingung kompensiert wird, im Gegensatz zur Definition des Drucks im Maschenzentrum.

Der sich daraus ergebende Einfluß auf die Druckableitungen in x_1 - und x_2 -Richtung am freien Rand wird vernachlässigt. Zur Korrektur der Ableitung des Drucks in x_3 -Richtung am freien Rand verwenden wir den vertikalen Abstand zwischen Maschenschwerpunkten (3.1.1-2) auf der rechten Seite der Impulsgleichung für die dritte Raumrichtung.

3.2.2 Geschwindigkeits-Randbedingungen

Nun führen wir die numerische Form der Geschwindigkeits-Randbedingungen aus Abschnitt 2.3 ein und diskutieren sich daraus ergebende Auswirkungen auf andere Teile des Verfahrens.

Für Ränder von undurchdringlichen Maschen lautet die Normalgeschwindigkeits-Randbedingung $v_m n^m = 0$. Ihr numerisches Äquivalent ist

$$\neg \ell f \Rightarrow v_\gamma = v_{\gamma i_{\gamma-1}} = 0. \quad (3.2.2-1)$$

Die hiervon abweichende Behandlung der Einströmränder beschreibt Abschnitt 3.1.2.

Die Haftbedingung an der Grenzfläche zwischen einer Fluid- und einer impenetrablen Nachbarmasche ist äquivalent zur Tangentialgeschwindigkeits-Randbedingung $\varepsilon_{\ell m n} v^\ell n^m \bar{g}^n = \bar{0}$. Verschwindende Tangentialgeschwindigkeit an der Grenzfläche zwischen Kontrollvolumina entspricht einer imaginären Geschwindigkeit in der impenetrablen Masche von

$$v_{\gamma i_\delta \pm 1} = - \frac{\tilde{\ell}_{\delta i_\delta \pm 1}}{\tilde{\ell}_\delta} v_\gamma. \quad (3.2.2-2)$$

Die Berechnung von v_3 in Maschen mit freier Oberfläche ist notwendig für den Algorithmus zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung in x_1 - und x_2 -Richtung. Dazu verwenden wir die aus der Inkompressibilität der Masche resultierende Bedingung

$$v_{3kt} = v_{3kt-1} + \frac{A_1 v_{1i-1} - A_{1i+1} v_1 + A_2 (v_{2j-1} - v_2)}{A_3}. \quad (3.2.2-3)$$

Nun diskutieren wir die Einwirkung der Geschwindigkeits-Randbedingungen auf andere Teile des Verfahrens. Die Tabelle in Anhang 4 listet die Typen von Diffusion, die zwischen benachbarten Kontrollvolumina des Navier-Stokes-Lösungsalgorithmus auftreten sowie die zur Steuerung des Algorithmus verwendeten logischen Ausdrücke. Die Einführung der Haftbedingung (3.2.2-2) modifiziert den Diffusionsterm in vorwärts- x_δ -Richtung von

$$\left(v \nabla_\delta v_\gamma \right)_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} \rightarrow v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} \left(\frac{v_{\gamma i_\delta + 1} - v_\gamma}{d\tilde{x}_\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} - \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_\gamma + \frac{1}{2}}}{x_{1 i+1}} \right)$$

zu

$$\left(v \nabla_\delta v_\gamma \right)_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} \rightarrow -v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} \left(2 \frac{v_\gamma}{\tilde{\ell}_\delta} + \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_\gamma + \frac{1}{2}}}{x_{1 i+1}} \right).$$

In rückwärts- x_δ -Richtung ergibt sich ein ähnliches Ergebnis. Einsetzen dieser Ausdrücke in (3.2.1-2) führt zu folgenden Modifikationen des Diffusionsterms an festen Rändern des Berechnungsbereichs :

$$F_\gamma v_\gamma^{n+1} := \dots + \frac{\Delta t}{V_{i_\gamma + \frac{1}{2}}} \frac{A_\delta i_\gamma + \frac{1}{2}}{d\tilde{x}_\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta \pm \frac{1}{2}} v_\gamma^{n+1}$$

geht über in

$$F_\gamma v_\gamma^{n+1} := \dots + \frac{2 \Delta t}{V_{i_\gamma + \frac{1}{2}}} \frac{A_\delta i_\gamma + \frac{1}{2}}{\tilde{\ell}_\delta} v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta \pm \frac{1}{2}} v_\gamma^{n+1}.$$

In Vorwärtsrichtung gilt das Pluszeichen und A_δ erhält den zusätzlichen unteren Index $i_\delta + 1$, während rückwärts das Minuszeichen gilt und $d\tilde{x}_\delta$ sowie v_2 den zusätzlichen unteren Index $i_\delta - 1$ tragen.

3.2.3 Druckgleichung und Druck-Geschwindigkeits-Iteration

Die Integration der Kontinuitätsgleichung (2.2-1) über das Maschenvolumen Ω ergibt

$$\int_{\Omega} \nabla_m v^m dV = \oint_{\partial\Omega} v^m df_m = 0.$$

In orthogonalen Koordinatensystemen lautet ihre numerische Form in physikalischen Komponenten

$$A_{m_i_m+1} v_m - A_m v_{m_i_m-1} = 0. \quad (3.2.3-1)$$

In diesem Ausdruck zeigt sich ein Vorteil des versetzten Gitters im Vergleich zur Anordnung aller Variablen im Zentrum, da die Geschwindigkeitskomponenten an den Maschen-Seitenflächen direkt vorliegen und nicht durch Mittelung benachbarter Variablen erzeugt zu werden brauchen.

Um das System von Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung zu lösen, verwenden wir nachstehend erläutertes Verfahren, Bulgarelli et. al. [7] 1984. Mit dem Druck des vorangegangenen Zeit- bzw. Iterationsschritts berechnen wir zunächst eine Näherungslösung der Navier-Stokes-Gleichung. Dabei werden die nichtlinearen konvektiven Terme mit der Geschwindigkeit des vorigen Zeit- bzw. Iterationsschritts linearisiert, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben. Dann dient eine Druck-Geschwindigkeits-Iteration dazu, die divergenzfreie Geschwindigkeit und den Druck als zugeordneten Lagrangeschen Multiplikator zu bestimmen. Hierbei werden ein korrigierter Druck und eine korrigierte Geschwindigkeit so bestimmt, daß sie die linearisierte Navier-Stokes-Gleichung und die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Die Nichtlinearitäten können durch Iteration, d. h. wiederholte Berechnung der Navier-Stokes-Gleichung mit aktualisiertem Druck aus der Druck-Geschwindigkeits-Iteration, behandelt werden. In (3.2.1-3b) verwenden wir dabei, anstelle des Drucks des vorigen Zeitschritts, den Druck

$$p^{n+1/2} := 0.5 (p^n + p^{n+1}).$$

Dieser zusätzliche Aufwand hat jedoch bei vielen Problemen keinen wesentlichen Einfluß auf das Resultat.

Nun beschreiben wir die Druck-Geschwindigkeits-Iteration. Dabei gehen wir davon aus, daß die Navier-Stokes-Gleichung, linearisiert mit der Geschwindigkeit des alten Zeitschritts, anstelle von (3.2.1-2) durch das folgende explizite Verfahren gelöst sei :

$$v_{\gamma}^{n+1} = \hat{F}_{\gamma} + \hat{G}_{\gamma} \quad , \quad \gamma \in \{1,2,3\}, \quad (3.2.3-2)$$

wobei

$$\begin{aligned}
\hat{F}_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n := & v_\gamma - \frac{\Delta t}{V_{i_\gamma + \frac{1}{2}}} \left\{ A_{\gamma i_\gamma + \frac{3}{2}} v_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}}^2 - A_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{\gamma i_\gamma - \frac{1}{2}}^2 \right. \\
& + \sum_{\delta \in \mathbb{N} \setminus \{0, \gamma\}} \left(A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + 1} v_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{\gamma i_\delta + \frac{1}{2}} - A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta - 1} v_{\gamma i_\delta - \frac{1}{2}} \right) \\
& - A_{\gamma i_\gamma + \frac{3}{2}} v_{i_\gamma + 1} \left(\frac{v_{\gamma i_\gamma + 1} - v_\gamma}{\tilde{l}_{\gamma i_\gamma + 1}} + \kappa_{\gamma\gamma} \frac{v_{1 i_\gamma + 1 - \frac{1}{2}}}{x_{c_1}} \right) \\
& - A_{\gamma i_\gamma + \frac{1}{2}} v \left(\frac{v_{\gamma i_\gamma - 1} - v_\gamma}{\tilde{l}_\gamma} - \kappa_{\gamma\gamma} \frac{v_{1 i_\gamma - \frac{1}{2}}}{x_{c_1}} \right) \\
& - \sum_{\delta \in \mathbb{N} \setminus \{0, \gamma\}} \left[A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + 1} v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta + \frac{1}{2}} \left(\frac{v_{\gamma i_\delta + 1} - v_\gamma}{d\tilde{x}_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2}}} - \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_\gamma + \frac{1}{2}}}{x_{1 i_\delta + 1}} \right) \right. \\
& \left. + A_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2}} v_{i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta - \frac{1}{2}} \left(\frac{v_{\gamma i_\delta - 1} - v_\gamma}{d\tilde{x}_{\delta i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta - 1}} + \kappa_{\delta\gamma} \frac{v_{2 i_\gamma + \frac{1}{2} i_\delta - 1}}{x_{1 i_\delta + 1}} \right) \right] \left. \right\} + \Delta t \frac{\rho}{\rho_0} g_\gamma,
\end{aligned}$$

$$\hat{G}_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n := \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{p - p_{i_\gamma + 1}}{d\tilde{x}_\gamma}.$$

Die resultierende Druck-Geschwindigkeits-Iteration ist unabhängig von der Voraussetzung eines expliziten Verfahrens, sie dient nur zur Vereinfachung der Herleitung. Setzen wir (3.2.3-2) mit p^{n+1} in (3.2.3-1) ein, so erhalten wir

$$0 = A_{m i_m + 1} (\hat{F}_m + \hat{G}_m^{n+1}) - A_m (\hat{F}_{m i_m - 1} + \hat{G}_{m i_m - 1}^{n+1})$$

oder

$$\begin{aligned}
A_m \hat{F}_{m i_m - 1} - A_{m i_m + 1} \hat{F}_m &= A_{m i_m + 1} \hat{G}_m^{n+1} - A_m \hat{G}_{m i_m - 1}^{n+1} \\
&= \frac{\Delta t}{\rho_0} \sum_{\gamma=1}^3 A_{\gamma i_\gamma + 1} \frac{p^{n+1} - p_{i_\gamma + 1}^{n+1}}{d\tilde{x}_\gamma} + A_\gamma \frac{p^{n+1} - p_{i_\gamma - 1}^{n+1}}{d\tilde{x}_{\gamma i_\gamma - 1}} \\
&= \frac{\Delta t}{\rho_0} \left\{ a_{ii} p^{n+1} - \sum_{\gamma=1}^3 \left(\frac{A_{\gamma i_\gamma + 1}}{d\tilde{x}_\gamma} p_{i_\gamma + 1}^{n+1} + \frac{A_\gamma}{d\tilde{x}_{\gamma i_\gamma - 1}} p_{i_\gamma - 1}^{n+1} \right) \right\}
\end{aligned}$$

und damit

$$a_{ii} p^{n+1} - \sum_{\gamma=1}^3 \left(\frac{A_{\gamma i_{\gamma+1}}}{d\tilde{x}_{\gamma}} p_{i_{\gamma+1}}^{n+1} + \frac{A_{\gamma}}{d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} p_{i_{\gamma-1}}^{n+1} \right) = \frac{\rho_0}{\Delta t} \left(A_m \hat{F}_{m i_m-1} - A_{m i_m+1} \hat{F}_m \right),$$

mit den Diagonalelementen

$$a_{ii} := \sum_{\gamma=1}^3 \left(\frac{A_{\gamma i_{\gamma+1}}}{d\tilde{x}_{\gamma}} + \frac{A_{\gamma}}{d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} \right).$$

Dies ist eine lineare Gleichung für den unbekanntem Druck p , in Matrixform $A p = b$. Diese sogenannte Druckgleichung hat die Form einer diskreten Poissongleichung. Die Matrix A besitzt eine Struktur mit maximal sieben besetzten Elementen pro Zeile bzw. Spalte, von denen infolge der freien Oberfläche i. a. nur die direkt neben der Hauptdiagonale stehenden Elemente auf Diagonalen angeordnet sind. Bei vollständig besetzter Matrix sind die positiven Diagonalelemente a_{ii} gleich dem Negativen der Summe der Nebendiagonalelemente. Bei unvollständiger Besetzung, an Rändern des Berechnungsbereichs, ist das Diagonalelement größer als das Negative der Summe der Nebendiagonalelemente. Infolge dieser Eigenschaften kann man zeigen, daß A irreduzibel diagonaldominant ist, Hackbusch [37]. Mit Hilfe eines Korollars, Varga [86], läßt sich daraus schließen, daß A invertierbar und somit eine M-Matrix ist.

Zur Lösung dieser linearen Gleichung liegt eine Vielzahl direkter und iterativer Methoden vor. Der in dieser Studie verwendete Relaxationsalgorithmus, Finck v. Finckenstein [25], zur Lösung der linearen Gleichung lautet

$$\begin{aligned} (p^{n+1})^{\zeta+1} &= (1 - \omega^{\zeta}) (p^{n+1})^{\zeta} + \frac{\omega^{\zeta}}{a_{ii}} \left\{ \sum_{\gamma=1}^3 \left[\frac{A_{\gamma i_{\gamma+1}}}{d\tilde{x}_{\gamma}} (p_{i_{\gamma+1}}^{n+1})^{\zeta} + \frac{A_{\gamma}}{d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} (p_{i_{\gamma-1}}^{n+1})^{\zeta+1} \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\rho_0}{\Delta t} \left[A_{m i_m+1} \hat{F}_m - A_m \hat{F}_{m i_m-1} \right] \right\} \\ &= (p^{n+1})^{\zeta} - \frac{\omega^{\zeta} \rho_0}{\Delta t a_{ii}} \sum_{\gamma=1}^3 \left\{ A_{\gamma i_{\gamma+1}} \left[\hat{F}_{\gamma} - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma}} \left((p_{i_{\gamma+1}}^{n+1})^{\zeta} - (p^{n+1})^{\zeta} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + A_{\gamma} \left[-\hat{F}_{\gamma i_{\gamma-1}} + \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} \left((p^{n+1})^{\zeta} - (p_{i_{\gamma-1}}^{n+1})^{\zeta+1} \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

wobei ζ den Iterationsindex und ω den Überrelaxationsparameter bezeichnen. Dieser iterative Algorithmus ist zur simultanen Aktualisierung der Geschwindigkeit geeignet und benötigt keinen zusätzlichen Speicherplatz. Nach dem Satz von Kahan, Finck v. Finckenstein, ist $\omega \in]0, 2[$ notwendige Voraussetzung für die Konvergenz des Algorithmus. Im Vergleich zur Gauß-Seidel

Methode ($\omega = 1$) beschleunigt die Überrelaxation ($\omega \in]1, 2[$) Variablenänderungen und kann somit zur Beschleunigung der Konvergenz verwendet werden, während Unterrelaxation ($\omega \in]0, 1[$) Variablenänderungen dämpft, was bei stark nichtlinearen Problemen zur Vermeidung von Divergenz vorteilhaft sein kann.

Gemäß der Tschebyscheff-Methode, Oran und Boris [61], verwenden wir zur Beschleunigung der Konvergenz folgenden variablen Relaxationsfaktor : Sei

$$\eta := \frac{1}{4} \left[\frac{1}{n_d} \sum_{i=1}^{n_d} \cos \left(\frac{\pi}{n_i + 1} \right) \right]^2,$$

wobei $n_d \in \{2,3\}$ die Anzahl der Raumrichtungen ist, dann wird der Überrelaxationsfaktor wie folgt rekursiv definiert :

$$\omega^0 := 1 \quad ; \quad \omega^1 := (1 - 2\eta)^{-1} \quad ; \quad \text{für } \zeta \geq 2: \omega^\zeta := (1 - \eta\omega^{\zeta-1})^{-1}.$$

Damit ist der Relaxationsfaktor zu Beginn der Iteration (bei $\zeta = 1$) relativ groß und fällt monoton ab, asymptotisch auf den theoretisch optimalen Wert, wobei der Abfall bei großen Gittern langsamer erfolgt.

Simultan mit der Druckiteration wird eine Geschwindigkeitsiteration durchgeführt, die dazu dient, die in den konvektiven Termen linearisierte Navier-Stokes-Gleichung mit dem korrigierten Druck zu lösen. Dabei wird eine korrigierte Geschwindigkeit berechnet, mit dem Ziel, iterativ eine Lösung der Kontinuitätsgleichung zu bestimmen. Die Iterationsformel erhält man aus (3.2.3-2) mit dem aktualisierten Druck :

$$\begin{aligned} \left(v_\gamma^{n+1} \right)^\zeta &= \hat{F}_\gamma - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_\gamma} \left[\left(p_{i_\gamma+1}^{n+1} \right)^\zeta - \left(p^{n+1} \right)^\zeta \right], \\ \left(v_{\gamma i_\gamma-1}^{n+1} \right)^{\zeta+1/2} &= \hat{F}_{\gamma i_\gamma-1} - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma i_\gamma-1}} \left[\left(p^{n+1} \right)^\zeta - \left(p_{i_\gamma-1}^{n+1} \right)^{\zeta+1} \right]. \end{aligned}$$

In Ausdrücken mit ungleichen Iterationsindizes treten halbzahlige Iterationsindizes auf. Mit diesen Ausdrücken schreibt sich die Druckkorrektur

$$\left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1} := \left(p^{n+1} \right)^{\zeta+1} - \left(p^{n+1} \right)^\zeta$$

für $k < kt$ als

$$\left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1} := - \frac{\omega^\zeta \rho_0}{\Delta t a_{ij}} \left[A_{m i_m+1} \left(v_m^{n+1} \right)^\zeta - A_m \left(v_{m i_m-1}^{n+1} \right)^{\zeta+\frac{1}{2}} \right]. \quad (3.2.3-3a)$$

Unmittelbar, nachdem die Druckiteration in der Masche (i, j, k) abgeschlossen ist, wird folgende Geschwindigkeitsiteration durchgeführt :

$$\left(v_{\gamma}^{n+1} \right)^{\zeta+1/2} = \hat{F}_{\gamma} - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma}} \left[\left(p_{i_{\gamma+1}}^{n+1} \right)^{\zeta} - \left(p^{n+1} \right)^{\zeta+1} \right],$$

$$\left(v_{\gamma i_{\gamma-1}}^{n+1} \right)^{\zeta+1} = \hat{F}_{\gamma i_{\gamma-1}} - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} \left[\left(p^{n+1} \right)^{\zeta+1} - \left(p_{i_{\gamma-1}}^{n+1} \right)^{\zeta+1} \right].$$

Mit dem Ausdruck für $\left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1}$ kann man dafür schreiben

$$\left(v_{\gamma}^{n+1} \right)^{\zeta+1/2} = \left(v_{\gamma}^{n+1} \right)^{\zeta} + \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma}} \left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1}, \quad (3.2.3-4a)$$

$$\left(v_{\gamma i_{\gamma-1}}^{n+1} \right)^{\zeta+1} = \left(v_{\gamma i_{\gamma-1}}^{n+1} \right)^{\zeta+1/2} - \frac{\Delta t}{\rho_0 d\tilde{x}_{\gamma i_{\gamma-1}}} \left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1}. \quad (3.2.3-4b)$$

Die Druck- und Geschwindigkeitsiterationen sind miteinander gekoppelt und konvergieren gemeinsam. Bei einer Raumdimension läßt sich ihre Wirkungsweise in der Masche i wie folgt veranschaulichen :

- 1) Berechnung der Druckkorrektur in der linken Nachbarmasche : $\left(dp_{i-1}^{n+1} \right)^{\zeta+1}$
- 2) Erste Korrektur der Geschwindigkeit zwischen linker Nachbar- und betrachteter Masche :
 $\left(v_{1i-1}^{n+1} \right)^{\zeta+1/2}$
- 3) Berechnung der Druckkorrektur in der betrachteten Masche : $\left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1}$
- 4) Erste Korrektur der Geschwindigkeit zwischen rechter Nachbar- und betrachteter Masche :
 $\left(v_1^{n+1} \right)^{\zeta+1/2}$
- 5) Zweite Korrektur der Geschwindigkeit zwischen linker Nachbar- und betrachteter Masche :
 $\left(v_{1i-1}^{n+1} \right)^{\zeta+1}$
- 6) Berechnung der Druckkorrektur in der rechten Nachbarmasche : $\left(dp_{i+1}^{n+1} \right)^{\zeta+1}$
- 7) Zweite Korrektur der Geschwindigkeit zwischen rechter Nachbar- und betrachteter Masche :
 $\left(v_1^{n+1} \right)^{\zeta+1}$

Ist die Kontinuitätsgleichung exakt erfüllt, so verschwindet der Klammerausdruck [] in der Gleichung (3.2.3-3a) für $\left(dp^{n+1} \right)^{\zeta+1}$. Die Druck-Geschwindigkeits-Iteration wird fortgesetzt, bis die

Kontinuitätsgleichung (3.2.3-1) in guter Näherung erfüllt ist. Das Konvergenzkriterium limitiert die maximale zeitliche Veränderung des relativen Fluidvolumens pro Masche :

$$\epsilon_V \geq \frac{|V_o^{n+1} - V_o|}{V \Delta t} = \frac{|A_{m_{i_m+1}} v_m - A_m v_{m_{i_m-1}}|}{V},$$

wobei V_o das mit Fluid besetzte Volumen einer Masche bezeichnet. In allen von uns betrachteten Fällen hat sich das Iterationsverfahren konvergent verhalten. Wie in der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichung werden alle Maschen des Berechnungsbereichs behandelt, als seien sie vollständig mit Fluid gefüllt.

In Maschen mit freier Oberfläche wird der Druck durch eine Randbedingung vorgegeben, siehe Abschnitt 3.2.4. Da der Druck einer Masche an der freien Oberfläche vom Druck in der darunterliegenden Nachbarmasche abhängt (3.2.4-1a), ist der Druck in Maschen an der freien Oberfläche in die Druck-Geschwindigkeits-Iteration einbezogen durch

$$\left(dp_{kt}^{n+1} \right)^{\zeta+1} := \left(p_{kt}^{n+1} \right)^{\zeta+1} - \left(p_{kt}^{n+1} \right)^{\zeta} \quad \text{für } k = kt, \quad (3.2.3-3b)$$

wobei p_{kt} durch (3.2.4-1) gegeben ist. Zu Beginn der Iteration ($\zeta = 1$) entsprechen die Werte der vorangegangenen Iteration den letzten Werten des alten Zeitschritts. Darum verschwindet dp_{kt}^{n+1} nicht für $\zeta = 1$, auch wenn die Druck-Randbedingung (3.2.4-1b) vom Druck in darunterliegenden Nachbarmaschen unabhängig ist.

Den Berechnungsbereich behandelnd, als sei er vollständig mit Fluid gefüllt, führen wir die Geschwindigkeits-Iteration auch in Maschen mit freier Oberfläche durch und gewährleisten deren Inkompressibilität durch die Randbedingung (3.2.2-3). Damit werden die Iterationsalgorithmen für alle Maschen einschließlich und unterhalb derer an der freien Oberfläche benutzt.

Die resultierenden Algorithmen der Druck-Geschwindigkeits-Iteration (3.2.3-3) und (3.2.3-4) sind unabhängig von der numerischen Methode zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung. Aus diesem Grund sind sie nicht nur auf das explizite Verfahren (3.2.3-2) anwendbar, sondern ebenso auf das implizite Verfahren (3.2.1-2).

3.2.4 Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche

In diesem Abschnitt wird die, in der Druck-Geschwindigkeits-Iteration (Abschnitt 3.2.3) verwendete, Druck-Randbedingung an der freien Oberfläche beschrieben. Für ein inkompressibles Fluid mit konstantem Oberflächenspannungs-Koeffizienten, welches von einem idealen Fluid bedeckt wird, ist der Druck an der freien Oberfläche durch die Normalspannungs-Bedingung (2.3-1) gegeben. In kartesischen und Zylinderkoordinaten erhält man daraus

$$\begin{aligned}
p_f = p_s + x_{3i} \left\{ \frac{2\mu_{fi}}{1 + (\partial_1 \xi)^2 + (\partial_2 \xi)^2} \left\{ \left[(\partial_1 \xi)^2 - 1 \right] \partial_1 v_1 \right. \right. & - \partial_1 \xi (\partial_1 v_3 + \partial_3 v_1) \\
& + \left[(\partial_2 \xi)^2 - 1 \right] \partial_2 v_2 + \kappa_{22} \frac{v_1}{x_1} - \partial_2 \xi (\partial_2 v_3 + \partial_3 v_2) \\
& \left. \left. + \partial_1 \xi \partial_2 \xi \left(\partial_1 v_2 + \partial_2 v_1 - \kappa_{21} \frac{v_2}{x_1} \right) \right\} \right\} \\
& - \alpha \left(\partial_1^2 + \partial_2^2 + \kappa_{22} \frac{\partial_1}{x_1} \right) \xi \left. \right\}. \quad (2.3-1)
\end{aligned}$$

Wir definieren den Druck von Maschen an der freien Oberfläche im Schwerpunkt der Masche, siehe 3.2.1.5. Lineare Interpolation zwischen der freien Oberfläche und der darunterliegenden Masche ergibt

$$p_{kt} = q p_f + (1 - q) p_{kt-1} \quad (3.2.4-1a)$$

wobei

$$q_{ij}^n := \frac{\ell_{3kt-1} + \xi - x_{3kt}}{2(\xi - x_{c_{3kt-1}})} \in \left[\frac{1+r}{2+r}, 1 \right] \quad ; \quad r_{ij} := \frac{\ell_{3kt-1}}{\ell_{3kt}}.$$

Die Beziehung (3.2.4-1a) ist nur dann sinnvoll, falls die Masche unterhalb der Masche, welche die freie Oberfläche enthält, innerhalb des Berechnungsbereichs liegt. Ist dies nicht der Fall, so ist die darunterliegende Masche keine Fluidmasche und der Druck in ihr nicht definiert. Darum verwenden wir in solchen Fällen für die Interpolation zur Berechnung des Drucks in Maschen, welche die freie Oberfläche enthalten, den hydrostatischen Druck am Boden des Berechnungsbereichs :

$$p_{kt} = q p_f + (1 - q) \rho g (\xi - x_3).$$

Dann ist der Interpolationsparameter $q = 0.5$ und wir erhalten

$$p_{kt} = 0.5 \left[p_f + \rho g (\xi - x_3) \right]. \quad (3.2.4-1b)$$

Zur numerischen Berechnung der Druck-Randbedingung diskretisieren wir die Ableitungen von Geschwindigkeit und Höhenfunktion nach den horizontalen Raumkoordinaten durch Differenzenquotienten zweiter bzw. erster Ordnung. Die erforderlichen Fallunterscheidungen in Abhängigkeit von Werten der Höhenfunktion in Nachbarmaschen sowie der Darstellung der freien Oberfläche sind länglich, darum sei auf die Darstellung verzichtet.

Während der Relaxation besteht das Geschwindigkeitsfeld aus unterschiedlichen Iterationsstufen. Da es sich als vorteilhaft erwiesen hat, ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld mit einheitlichem Iterationsindex zugunzendulegen, verwenden wir in der Druck-Randbedingung die Geschwindigkeit des alten Zeitschritts und nicht das aktuelle Geschwindigkeitsfeld.

Obwohl die Druckgleichung als diskrete Poissongleichung elliptisch ist, braucht man keine Randwerte für den Druck, da die Druckiteration einer Masche mittels der angrenzenden Geschwindigkeiten vollzogen wird (3.2.3-3a). Diese Eigenschaft ist auf die gekoppelten Druck- und Geschwindigkeits-Iterationen zurückzuführen. Darum besteht eine Druck-Randbedingung nur an der freien Oberfläche, während an festen Rändern die Normalkomponente der Geschwindigkeit vorgegeben wird.

3.3 Dynamik der freien Oberfläche

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Darstellung und Dynamik freier Oberflächen des Fluids mit Polynomen als Höhenfunktionen. Dabei betrachten wir vertikale Säulen von Maschen, welche in den ersten beiden Raumrichtungen jeweils eine Maschenweite umfassen, die sich vom Boden bis zur freien Oberfläche erstrecken. Für die zeitliche Veränderung des mit Fluid besetzten Volumens einer solchen Säule von Maschen $V_{c,ij}^n$ liefert (2.2-6) in physikalischen Tensorkomponenten

$$\partial_i V_c = - \sum_{i=1}^2 \int_{A_3} \sqrt{g} \left(\partial_i \int_{\xi_b}^{\xi} v_i dx_3 + \int_{\xi_b}^{\xi} \sqrt{g^{(mm)}} \Gamma_{\gamma m}^{\gamma} v_m dx_3 \right) dx_1 dx_2.$$

In kartesischen und Zylinderkoordinaten erhält man daraus

$$\begin{aligned} \partial_i V_c = & \int_{x_2}^{x_{2j+1}} \left(f_2 \int_{\xi_b(x_1, x_2')} v_1 dx_3 - f_{2i+1} \int_{\xi_b(x_{1i+1}, x_2')} v_1 dx_3 \right) dx_2' \\ & + \int_{x_1}^{x_{1j+1}} \left(\int_{\xi_b(x_1', x_2)} v_2 dx_3 - \int_{\xi_b(x_1', x_{2j+1})} v_2 dx_3 \right) dx_1', \end{aligned} \quad (3.3-1)$$

für alle i und j des Berechnungsgebietes. Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, entsteht dieser Ausdruck unter Verwendung der kinematischen Randbedingung (2.2-5) durch Integration der Kontinuitätsgleichung in vertikaler Richtung über die Höhe des Fluids.

Wir verwenden zwei Darstellungen der freien Oberfläche ξ_{ij}^n mit Polynomen k -ten Grades, siehe Abb. 3.1-1, die jeweils säulenweise mittels der Koeffizienten $a_{k,ij}^n$; $k \in \underline{2}$ definiert werden :

1) Polynom zweiten Grades : Diese Darstellung betrachten wir nur für zweidimensionale $x_1 - x_3$ -Geometrien, darum treten x_2 und j nicht auf. Sie lautet im Intervall $x_1 \in [x_{1i}, x_{1i+1}]$:

$$\xi_i(x_1, t) = \sum_{k=0}^2 a_{k,i}(t) (x_1 - x_{1i})^k. \quad (3.3-2)$$

2) Polynom nullten Grades (Stufenprofil) :

$$\xi_{ij}(t) := a_{0,ij}(t).$$

Die beiden Darstellungsformen werden infolge unterschiedlicher Berechnungsmethoden einzeln beschrieben. Wir diskutieren ihre Unterschiede, andere polynomische Darstellungen und Möglichkeiten zur Verallgemeinerung der Darstellung mit Polynomen zweiten Grades auf dreidimensionale Geometrien in Abschnitt 3.3.3.

3.3.1 Freie Oberfläche als Polynom zweiten Grades

Zunächst erläutern wir die Darstellung der freien Oberfläche als stetig partiell differenzierbare Höhenfunktion mit Polynomen zweiten Grades.

Da die Höhe innerhalb einer vertikalen Säule von Maschen variiert, bestimmen wir das Volumen einer Säule durch Integration über die Maschenweite :

Ebene Geometrie

$$V_{ci}(t) = \ell_2 \int_{x_{1i}}^{x_{1i+1}} \xi(x'_1, t) dx'_1$$

Zylindrische Geometrie

$$V_{ci}(t) = \ell_2 \int_{x_{1i}}^{x_{1i+1}} x'_1 \xi(x'_1, t) dx'_1.$$

Unter Verwendung von (3.3-2) erhalten wir das Säulenvolumen als Funktion der Polynomkoeffizienten

$$V_{ci}^n = \ell_1 \ell_2 \sum_{k=0}^2 \phi_k a_k^n,$$

wobei folgende Koeffizienten ϕ_{ki} auftreten :

Ebene Geometrie

$$\phi_{ki} = \frac{\ell_1^k}{k+1}$$

Zylindrische Geometrie

$$\phi_{ki} = \frac{\ell_1^{k+1}}{k+2} + \frac{\ell_1^k x_{1i}}{k+1}.$$

Durch implizite Zeitdiskretisierung 1. Ordnung von (3.3-1) gelangt man zu n_1 Gleichungen zur Bestimmung der Polynomkoeffizienten, welche die Erhaltung des Fluidvolumens in den einzelnen Säulen ausdrücken :

$$V_{ci}^{n+1} = V_c + \Delta t \ell_2 (f2_{i-1} v_{h_{1i-1}} - f2_{i+1} v_{h_1}) = \ell_1 \ell_2 \sum_{k=0}^2 \phi_k a_k^{n+1}, \quad (3.3.1-1)$$

wobei das Geschwindigkeits-Höhen-Integral für die Polynomdarstellung zweiten Grades der freien Oberfläche definiert ist durch

$$v_{h_{1i}}^n := \int_{\xi_b(x_{1i+1})}^{\xi^{n+1}(x_{1i+1})} v_1^{n+1} dx_3 = \sum_{k=1}^{kt_{i+1/2}^{n+1}} v_{hk_{1ik}}. \quad (3.3.1-2)$$

Der halbzahlige Index $i+1/2$ von kt drückt aus, daß der vertikale Maschenindex der freien Oberfläche am rechten Maschenrand x_{1i+1} , nicht in Maschenmitte x_{c1} , gemeint ist. Der Zeitindex $n+1$ bedeutet, daß die Obergrenze des Integrals die zunächst zu bestimmende Position der freien Oberfläche ist, d. h. die Berechnung der neuen Position der freien Oberfläche setzt die Kenntnis des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals voraus und umgekehrt. Das zur iterativen Lösung dieses Problems verwendete Verfahren beschreiben wir im weiteren Verlauf dieses Abschnitts. Die Einzelbeiträge des Integrals sind

$$v h k_{1 i k}^n := \left[\min \left\{ x_{3 k+1}, \xi^{n+1} \left(x_{1 i+1} \right) \right\} - x_3 \right] v_1^{n+1}. \quad (3.3.1-2a)$$

Weitere jeweils $n_1 - 1$ Gleichungen liefern die Forderungen nach Kontinuität von $\xi(x_1)$ und $\partial_1 \xi(x_1)$ an den Maschenrändern :

$$\sum_{k=0}^2 a_k \ell_1^k = a_{0 i+1} \quad ; \quad 1 \leq i \leq n_1 - 1, \quad (3.3.1-3)$$

$$\sum_{k=1}^2 k a_k \ell_1^{k-1} = a_{1 i+1} \quad ; \quad 1 \leq i \leq n_1 - 1. \quad (3.3.1-4)$$

Der Polynomansatz (3.3-2) enthält $3 n_1$ unbekannte Koeffizienten a_0, a_1, a_2 , während (3.3.1-1), (3.3.1-3) und (3.3.1-4) aus $3 n_1 - 2$ Gleichungen bestehen. Darum sind zwei zusätzliche Gleichungen zur Bestimmung der Koeffizienten erforderlich. Folgende alternative Bedingungen an den Rändern des Berechnungsbereichs sind dafür geeignet und können wahlweise verwendet werden :

- Verschwindender Gradient der freien Oberfläche, d. h. $\left[\partial_1 \xi(x_1) \right]_{x_1=0} = \left[\partial_1 \xi(x_1) \right]_{x_1=x_{1 n_1+1}} = 0$.

- Berechnung der Dynamik der freien Oberfläche an Rändern mittels der kinematischen Randbedingung.

Die Verwendung der ersten Bedingung, daß der Gradient verschwindet, führt zu den Randbedingungen

Westlicher Rand

$$a_{2 1}^{n+1} = 0$$

Östlicher Rand

$$2 \ell_{1 n_1} a_{2 n_1}^{n+1} + a_{1 n_1}^{n+1} = 0.$$

Bei der zweiten Bedingung beginnt die Berechnung der Höhe der freien Oberfläche an den Rändern mit den Anfangswerten. Die zeitliche Entwicklung berechnen wir mit der kinematischen Randbedingung (2.2-5). An impenetrablen Rändern ergibt sich infolge $v_1 = 0$ bei impliziter Diskretisierung

Westlicher Rand

$$\xi_0^{n+1} = \max \left\{ \xi(x_{1 0}), \xi_0 + \Delta t v_{3 1 j k t}^{n+1} \right\}$$

Östlicher Rand

$$\xi_{n_1+1}^{n+1} = \xi_{n_1+1} + \Delta t v_{3 n_1 j k t}^{n+1},$$

wobei die minimale Höhe des westlichen Randes gegeben ist durch

für Einströmung am westlichen Rand : $\xi(x_{1 0}) = x_{3 k w u+1},$

ohne Einströmung : $\xi(x_{1 0}) = 0.$

Drücken wir ξ_0^{n+1} und $\xi_{n_1+1}^{n+1}$ durch Polynomkoeffizienten aus, so erhalten wir

Westlicher Rand

$$\xi_0^{n+1} = a_{0_{n_1}}^{n+1}$$

Östlicher Rand

$$\xi_{n_1+1}^{n+1} = \ell_{1_{n_1}}^2 a_{2_{n_1}}^{n+1} + \ell_{1_{n_1}} a_{1_{n_1}}^{n+1} + a_{0_{n_1}}^{n+1}.$$

Diese Ausdrücke koppeln wir an die mittlere Höhe der an den Rand grenzenden Säule. Dabei tritt der Mischungsfaktor $f \in] 0 , 1]$ auf, der in Anwendungen mit 0.9 angesetzt wird :

Westlicher Rand

$$\xi_0^{n+1} = f \max \left\{ \xi(x_{1,0}), \xi_0 + \Delta t v_{3_{1,j}kt}^{n+1} \right\} + (1 - f) \frac{V_{c_{1j}}^{n+1}}{A_{3_{1j}}}, \quad (3.3.1-5a)$$

Östlicher Rand

$$\xi_{n_1+1}^{n+1} = f \left(\xi_{n_1+1} + \Delta t v_{3_{n_1,j}kt}^{n+1} \right) + (1 - f) \frac{V_{c_{n_1j}}^{n+1}}{A_{3_{n_1j}}}. \quad (3.3.1-5b)$$

Nun fassen wir alle Bedingungen an die Polynomkoeffizienten in der linearen Gleichung

$$C y = d \quad ; \quad y := (a_{2_i}, a_{1_i}, a_{0_i})_{i \in \underline{n_1}} \quad ; \quad y \in \mathfrak{R}^{3 n_1} \quad (\text{Vektor der Polynomkoeffizienten})$$

zusammen. Die quadratische Matrix C mit $3 n_1$ Zeilen und Spalten ist reell, regulär, tridiagonal und besitzt folgende nichtverschwindende Elemente :

$$c_i \quad 3 i - 2 = \phi_2 \quad \}$$

$$c_i \quad 3 i - 1 = \phi_1 \quad \} \quad \text{Erhaltung des Volumens}$$

$$c_i \quad 3 i = \phi_0 \quad \}$$

$$c_{n_1+i} \quad 3 i - 2 = \ell_1^2 \quad \}$$

$$c_{n_1+i} \quad 3 i - 1 = \ell_1 \quad \} \quad \text{Kontinuität von } \xi(x_1)$$

$$c_{n_1+i} \quad 3 i = 1 \quad \}$$

$$c_{n_1+i} \quad 3 i + 3 = -1 \quad \}$$

$$c_{2 n_1 - 1 + i} \quad 3 i - 2 = 2 \ell_1 \quad \}$$

$$c_{2 n_1 - 1 + i} \quad 3 i - 1 = 1 \quad \} \quad \text{Kontinuität von } \partial_1 \xi(x_1)$$

$$c_{2 n_1 - 1 + i} \quad 3 i + 2 = -1 \quad \}$$

$$c_{3 n_1 - 1} \quad 2 = 1 \quad \} \quad \text{Westliche Randhöhe bei verschwindendem Gradienten}$$

$$c_{3 n_1 - 1} \quad 3 = 1 \quad \} \quad \text{Westliche Randhöhe bei Berechnung der Randhöhe}$$

$$c_{3 n_1} \quad 3 n_1 - 2 = 2 \ell_{1 n_1} \quad \}$$

$$c_{3 n_1} \quad 3 n_1 - 1 = 1 \quad \} \quad \text{Östliche Randhöhe bei verschwindendem Gradienten}$$

$$c_{3 n_1} \quad 3 n_1 - 2 = \ell_{1 n_1}^2 \quad \}$$

$$\left. \begin{array}{l} c_{3 n_1} \quad 3 n_1 - 1 = \ell_{1 n_1} \\ c_{3 n_1} \quad 3 n_1 = 1 \end{array} \right\} \text{ Östliche Randhöhe bei Berechnung der Randhöhe}$$

Der Vektor $d \in \mathfrak{R}^{3 n_1}$ hat folgende nichtverschwindende Komponenten :

$$d_i = \frac{V_c^{n+1}}{\ell_1 \ell_2}, \quad 1 \leq i \leq n_1,$$

$$d_{3 n_1 - 1} = f \max \left\{ \xi(x_{1,0}), \xi_0 + \Delta t v_{3 1 j k t}^{n+1} \right\} + (1 - f) \frac{V_{c 1 j}^{n+1}}{A_{3 1 j}},$$

$$d_{3 n_1} = f \left(\xi_{n_1+1} + \Delta t v_{3 n_1 j k t}^{n+1} \right) + (1 - f) \frac{V_{c n_1 j}^{n+1}}{A_{3 n_1 j}}.$$

Die letzten beiden Komponenten besitzt d nur, wenn die Randhöhen berechnet werden, nicht wenn die Option verschwindenden Gradients verwendet wird.

Zur numerischen Bestimmung des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals (3.3.1-2) müssen die Höhen an den vertikalen Gitterlinien $\xi^{n+1}(x_{1 i+1})$ zum neuen Zeitschritt bestimmt werden. Bei Verwendung dieser Höhen zum alten Zeitschritt würden von Fluid unbesetzte Regionen kaum geflutet. Dies geschieht nur aufgrund des Effekts, daß $V_c = 0$ in der Darstellung als Polynom zweiten Grades $\xi(x_1) > 0$ oder $\xi(x_{1 i+1}) > 0$ ermöglicht, im Gegensatz zur polynomischen Darstellung nullten Grades.

Die Berechnung von Schätzwerten der Höhen an den Gitterlinien erfolgt mittels der kinematischen Randbedingung (2.2-5). Bei impliziter Diskretisierung erhält man daraus

$$\xi^{n+1}(x_{1 i+1}) = a_{0 i+1} + \Delta t \left[-v_{1 k m n_1}^{n+1} a_{1 i+1} + 0.5 \left(v_{3 k m n_1}^{n+1} + v_{3 i+1 k m n_1}^{n+1} \right) \right].$$

Nachdem die neue Oberfläche berechnet wurde, wird überprüft, ob

$$\left| \xi^{n+1}(x_{1 i+1}) - a_{0 i+1}^{n+1} \right| < \varepsilon_h, \quad (3.3.1-6)$$

mit einer vom Benutzer vorgegebenen Schranke ε_h . Ist diese Konsistenzbedingung nicht erfüllt, wird die Iteration

$$\left(\xi^{n+1}(x_{1 i+1}) \right)^{\zeta+1} = \max \left\{ 0, \left(a_{0 i+1}^{n+1} \right)^{\zeta} \right\}$$

verwendet. Konvergiert dieses Verfahren nicht, so wird es mit dem nach zehn Iterationen erreichten Ergebnis abgebrochen. Nachdem $\xi^{n+1}(x_{1 i+1})$ bekannt ist, kann das Geschwindigkeits-Höhen-Integral numerisch ausgewertet werden mittels

$$vh_{1i}^n = \sum_{k=1}^{kt_{i+1/2}^{n+1} - 1} \ell_3 v_1^{n+1} + \left[\xi^{n+1}(x_{1i+1}) - x_3(kt_{i+1/2}^{n+1}) \right] v_1^{n+1}.$$

3.3.2 Freie Oberfläche als Polynom nullten Grades

Nun betrachten wir die Darstellung der Höhenfunktion als Stufenfunktion, bei der sich die Berechnung der Dynamik vereinfacht. Da die Höhe in jeder vertikalen Säule von Maschen konstant ist, sind Säulenvolumen und -höhe proportional :

$$\partial_t V_c = A_3 \partial_t \xi.$$

Dies ermöglicht es, die zeitliche Änderung der Höhe mittels (3.3-1) direkt zu bestimmen :

$$\partial_t \xi = \frac{1}{A_3} \left\{ \ell_2 \left(\int_{\xi_b(x_1, x_2)}^{\xi(x_1, x_2)} v_1 dx_3 - \int_{\xi_b(x_{1i+1}, x_{2i+1})}^{\xi(x_{1i+1}, x_{2i+1})} v_1 dx_3 \right) + \ell_1 \left(\int_{\xi_b(x_{c1}, x_2)}^{\xi(x_{c1}, x_2)} v_2 dx_3 - \int_{\xi_b(x_{c1}, x_{2j+1})}^{\xi(x_{c1}, x_{2j+1})} v_2 dx_3 \right) \right\}. \quad (3.3.2-1)$$

Infolge der Unstetigkeit des Stufenprofils an vertikalen Gitterlinien, verwenden wir eine 'upwind'-Methode zur Berechnung des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals

$$vh_{\gamma i_1 i_2}^n := \int_0^{\xi(x_{\gamma i_1+1}, x_{c_2})} v_\gamma^{n+1} dx_3. \quad (3.3.2-2)$$

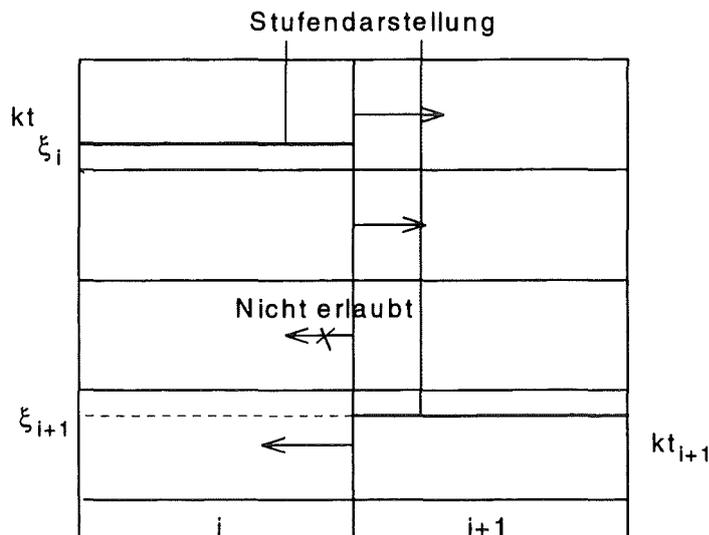


Abb. 3.3-1 : Zulässiger Massenaustausch bei der Berechnung des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals für die Stufendarstellung der freien Oberfläche.

Wie in Abb. 3.3-1 dargestellt, ist horizontaler Massenaustausch in beiden Richtungen zwischen zwei benachbarten Fluidsäulen nur unterhalb der niedrigeren der beiden Säulen erlaubt. Im Bereich zwischen der geringeren und der größeren Höhe (in der Abbildung zwischen ξ_i und ξ_{i+1}) ist der

horizontale Massenaustausch nur zugelassen, sofern er von der höheren zur niedrigeren Säule gerichtet ist.

Diese Methode ermöglicht die Verwendung des Höhenmaximums benachbarter Säulen des alten Zeitschritts als obere Grenze des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals, ohne die Flutung leerer Säulen zu behindern.

Mit der 'upwind' Geschwindigkeit vd_γ

$$\text{für } \xi \geq \xi_{i_\gamma+1} : \quad vd_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n := \max\{0, v_\gamma\},$$

$$\text{für } \xi < \xi_{i_\gamma+1} : \quad vd_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n := \min\{0, v_\gamma\},$$

ergibt sich das Geschwindigkeits-Höhen-Integral

$$\begin{aligned} vh_\gamma &= \sum_{k=1}^{k_{mn_\gamma}-1} \ell_3 v_\gamma + \left(\xi_{mn_\gamma} - x_{3 k_{mn_\gamma}} \right) v_{\gamma k_{mn_\gamma}} + \left(x_{3 k_{mn_\gamma+1}} - \xi_{mn_\gamma} \right) vd_{\gamma k_{mn_\gamma}} & (3.3.2-2a) \\ + \sum_{k=k_{mn_\gamma+1}}^{k_{mx_\gamma}-1} \ell_3 vd_\gamma + \left(\xi_{mx_\gamma} - x_{3 k_{mx_\gamma}} \right) vd_{\gamma k_{mx_\gamma}} - \delta_{kt \ kt_{i_\gamma+1}} \ell_{3 kt} vd_{\gamma kt} &= \sum_{k=1}^{k_{mx_\gamma}} v h k_{\gamma i j k}, \end{aligned}$$

$$\text{wobei } k_{mn_{\gamma i_1 i_2}}^n := \min\{kt, kt_{i_\gamma+1}\}, \quad \xi_{mn_{\gamma i_1 i_2}}^n := \min\{\xi, \xi_{i_\gamma+1}\}, \quad \xi_{mx_{\gamma i_1 i_2}}^n := \max\{\xi, \xi_{i_\gamma+1}\}.$$

Den zulässigen Massenaustausch bei der Berechnung dieses Integrals erläutert Abb. 3.3-1. Die Terme mit Geschwindigkeit v_γ beschreiben den Massentransfer unterhalb des Minimums der Höhe in den benachbarten Säulen, die Terme mit Geschwindigkeit vd_γ den Massentransfer darüber.

Die vorwärts gerichtete Differenzennäherung der Zeitableitung führt auf das explizite Verfahren

$$\xi^{n+1} = \xi + \frac{\Delta t}{A_3} \left\{ \ell_2 \left(f_2 v h_{1 i-1} - f_2 v h_{1 i} \right) + \ell_1 \left(v h_{2 j-1} - v h_{2 j} \right) \right\} \quad (3.3.2-3)$$

zur Aktualisierung der Oberflächenposition.

3.3.3 Diskussion polynomischer Oberflächendarstellungen

Neben den betrachteten Polynomdarstellungen sind weitere denkbar. Die Darstellung mit Polynomen ersten Grades benötigt neben Analoga der Gleichungen (3.3.1-1) und (3.3.1-3) eine weitere Gleichung zur Bestimmung der Polynomkoeffizienten. Benutzt man dazu eine Bedingung an einem der Ränder wie bei Polynomen zweiter Ordnung, so ergibt sich eine unphysikalische Asymmetrie. Bei Polynomordnungen größer als zwei sind zusätzliche Bestimmungsgleichungen gegenüber dem Fall zweiter Ordnung erforderlich. Eine wichtige physikalische Zusatzbedingung ist die Impenetrabilität nicht zum Fluidbereich gehöriger Maschen. Es ist bislang nicht gelungen, diese Zwangsbedingung als algebraische Bestimmungsgleichung zu formulieren.

Aufgrund möglicher Penetration hydrodynamischer Hindernismaschen ist die Darstellung der freien Oberfläche mit Polynomen zweiter Ordnung nicht für alle Probleme mit Hindernismaschen geeignet. Zudem werden zweidimensionale freie Oberflächen mit dieser Darstellung nicht betrachtet, da eine stetig differenzierbare polynomische Darstellung zweiter Ordnung zweidimensionaler Oberflächen mathematisch wesentlich komplizierter ist. Eine zweidimensionale Darstellung ist jedoch einfach, wenn man stetig-partielle Differenzierbarkeit nur entlang bestimmter Linien, etwa der Koordinatenlinien durch die Maschenzentren, verlangt. Eine derartige in den Maschenecken unstetige Oberfläche kann mittels des vorgestellten Verfahrens, bei analoger Anwendung auf die zweite Raumrichtung, beschrieben werden. Aus diesen Gründen verwenden wir für dreidimensionale geometrische Bereiche oder solche, die impenetrable Maschen enthalten, die Stufendarstellung der freien Oberfläche.

Vorteile der Polynom- gegenüber der Stufendarstellung resultieren aus der detaillierteren Beschreibung der Oberflächenform, die stetig differenzierbar ist, siehe Abb. 3.1-1. Eine wichtige Konsequenz ist, daß die Kontinuität der freien Oberfläche zu einer wohldefinierten oberen Grenze des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals führt, während bei der Stufendarstellung die 'upwind'-Methode benötigt wird. Zudem ermöglicht die Polynomdarstellung eine sensiblere Formulierung von Randbedingungen an der freien Oberfläche, wie der Druckrandbedingung, Oberflächenspannungseffekten oder des Kontaktwinkels. Auch unterliegt die implizite Zeitdiskretisierung der Polynomdarstellung keiner stabilitätsbedingten Zeitschrittlimitierung, im Gegensatz zur expliziten Diskretisierung der Stufendarstellung, wie in Abschnitt 3.6.3 näher erläutert.

Ein Problem der Polynomdarstellung besteht im Auftreten räumlicher Oszillationen mit Wellenlänge $2 dx_1$, deren Ursache darin besteht, daß der Polynomansatz der Oberfläche nicht physikalisch motiviert ist. Diese Oszillationen können die physikalische Zwangsbedingung, daß feste Strukturen nicht penetriert werden dürfen, verletzen. Bei geringen Höhen der freien Oberfläche können alternierende Höhen an vertikalen Gitterlinien die horizontale Propagation des Fluids verfälschen.

Ein weiterer Nachteil der Polynomdarstellung besteht im großen Aufwand, der für die Berechnung etwa des von Fluid besetzten Anteils des Maschenvolumens erforderlich ist. Während die exakte Bestimmung dieser Größe bei der Stufendarstellung unkompliziert ist, brauchen bei der Polynomdarstellung die Maschen unterhalb bzw. oberhalb der Masche, welche die freie Oberfläche enthält, nicht vollständig mit Fluid gefüllt bzw. leer zu sein, siehe Abb. 3.1-1, was eine genaue Berechnung erschwert. Aus diesem Grund bestimmen wir diese Größe näherungsweise.

3.4 Thermodynamik

3.4.1 Serielle Anordnung von Wärmewiderständen

Vor der Diskussion der diskreten Wärmetransportgleichung führen wir eine 'effektive' Wärmeleitfähigkeit zwischen zwei Maschenmittelpunkten ein, um folgende unterschiedliche physikalische Phänomene in einem Ausdruck zu kombinieren :

- Adiabatische Randbedingungen,
- Wärmeleitung benachbarter Fluid- und Strukturmaterialmaschen,
- Konvektiver Wärmeübergang zwischen Fluid- bzw. Strukturmaterialmaschen und der das Fluid bedeckenden isothermen Flüssigkeit.

Unter Verwendung der Kopplungskonstante $c_{\gamma i_1 i_2 i_3} \in \{0,1\}$, die dazu dient, festzulegen, ob eine Masche (i, j, k) bezüglich der Wärmeleitung an ihre Umgebung ankoppelt, definieren wir die 'effektive' Wärmeleitfähigkeit pro Längeneinheit

$$\Psi_{\gamma i_1 i_2 i_3}^n := 2 c_{\gamma} \left(\frac{\ell_{\gamma}}{\lambda} + \frac{\ell_{\gamma i_{\gamma+1}}}{\lambda_{i_{\gamma+1}}} + \frac{2}{\beta_{\gamma}} \right)^{-1}. \quad (3.4.1-1)$$

Dabei bezeichnet $\beta_{\gamma i_1 i_2 i_3}$ den Konvektions-Wärmeübergangskoeffizienten. Mit dieser Definition können adiabatische, diffusive oder konvektive Randbedingungen spezifiziert werden, indem man mindestens eine der Größen $\lambda_{i_{\gamma+1}}$ und β_{γ} als unendlich und die Kopplungskonstante, außer im adiabatischen Fall, mit eins ansetzt.

3.4.2 Diskretisierung der Wärmetransportgleichung

Der Algorithmus zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung (Abschnitt 3.2.1) behandelt die Fluidmaschen des Berechnungsbereichs als seien sie vollständig mit Fluid gefüllt. Bei der Wärmetransportgleichung ist dieser Ansatz problematisch, da die konvektiven Wärmeströme an der Oberfläche genau erfaßt werden müssen. Darum verwenden wir hier ein detaillierteres Modell mit partiell gefüllten Fluidmaschen. Mit Strukturmaterialien belegte Maschen betrachten wir gemäß der in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Systematik als vollständig gefüllt.

Unter Vernachlässigung der Volumenexpansion ist die Enthalpievariation von Strukturmaterial- und vollständig gefüllten inkompressiblen Fluidmaschen

$$dH = d(\rho V h) = \rho V dh = dQ.$$

In teilweise gefüllten Fluidmaschen erhalten wir bei Variation der Masse und unter Vernachlässigung der Volumenexpansion

$$dH = m dh + h dm = \rho (V dh + h dV) = \rho d(V h).$$

Die Variation der spezifischen Enthalpie in einem Volumen Ω mit Volumeninhalt V besteht aus Wärmequellen und -senken :

$$V dh = \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} (-\nabla_m \dot{q}^m + P_d + \sigma'_{\ell m} d^{\ell m}) dV dt,$$

wobei \dot{q} die diffusive Wärmestromdichte, P_d die Leistungsdichte innerer Wärmequellen, σ' den viskosen Spannungstensor und d den Tensor der Scherrate bezeichnen.

Die Volumenvariation enthält den konvektiven Wärmetransport, bei dem wir den in das betrachtete Volumen einströmenden von dem ausströmenden Anteil trennen :

$$h dV = (h dV)_{\text{ein}} - h dV_{\text{aus}},$$

wobei die Klammer des Einströmterms andeutet, daß die spezifische Enthalpie des einströmenden Mediums zu verwenden ist.

Die dissipative Aufheizung vernachlässigen wir, da ihr Beitrag in der Regel klein gegenüber den anderen Wärmequellen bzw. -senken ist, insbesondere im Vergleich zur Nachzerfallsleistung von Corium, sowie infolge der aufwendigen Diskretisierung dieses Terms. Dann ist die totale Änderung der Enthalpie im Kontrollvolumen in orthogonalen Koordinatensystemen und physikalischen Tensorkomponenten, mit Fourier's Ansatz $\dot{q}^m := -\lambda g^{mn} \nabla_n T$ und Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf den Beitrag der diffusiven Wärmestromdichte :

$$d(V h) = (h dV)_{\text{ein}} - h dV_{\text{aus}} + \frac{1}{\rho} \left(\oint_{\partial\Omega} \lambda \nabla_m T df_m + \int_{\Omega} P_d dV \right) dt. \quad (3.4.2-1)$$

Mit Hilfe dieses Ausdrucks definieren wir ein explizites Differenzenverfahren. Explizite Verfahren haben die Nachteile stabilitätsbedingter Zeitschrittbegrenzung, Patankar [62], und reduzierter Stabilität bei nichtlinearen Problemen, wenn eine auf linearer Stabilitätstheorie basierende Zeitschrittsteuerung verwendet wird, siehe Abschnitt 3.6. Trotzdem ist ein explizites Verfahren bei einer Enthalpieformulierung der Wärmetransportgleichung vorteilhaft, da der Diffusionsterm die a priori unbekannt Funktion $T(h)$ enthält und nicht h selbst. Zudem besitzt die konvektive Enthalpieübertragung an der freien Oberfläche eine komplexe Nachbarmaschen-Kopplung, die in einem expliziten Verfahren einfacher beschreibbar ist. Wir nähern (3.4.2-1) durch folgendes Differenzenverfahren an :

$$V_o^{n+1} h^{n+1} = V_o h + \sum_{j \in N} (h \Delta V)_{\text{ein}j} - h \Delta V_{\text{aus}} + \frac{\Delta t}{\rho} \left\{ \sum_{\gamma=1}^3 \left[Ac_{\gamma i_{\gamma+1}} \Psi_{\gamma} (T_{i_{\gamma+1}} - T) + Ac_{\gamma} \Psi_{\gamma i_{\gamma-1}} (T_{i_{\gamma-1}} - T) \right] + P_d V_o^{n+1} \right\}.$$

Darin bezeichnet Ac_{γ} die von Fluid benetzte linke Seitenfläche der Masche in x_{γ} -Richtung. Die Menge N der Nachbarmaschen-Indizes der Masche (i, j, k) definiert Tabelle 3.1.1-2.

Infolge der unterschiedlichen spezifischen Enthalpien der Nachbarmaschen summieren wir im konvektiven Term über die Einzelbeiträge der Einströmung, während dies bei dem ausströmenden Anteil nicht erforderlich ist. Ein- und ausströmende Volumina sind durch die Erhaltung des besetzten Fluidvolumens innerhalb einer Masche gekoppelt :

$$V_o^{n+1} = V_o + \sum_{j \in N} \Delta V_{\text{ein}j} - \Delta V_{\text{aus}} ; \Delta V_{\text{ein}j} \geq 0, \Delta V_{\text{aus}} \geq 0.$$

Darum können ausströmende Volumina durch einströmende ausgedrückt werden :

$$V_o - \Delta V_{\text{aus}} = V_o^{n+1} - \sum_{j \in N} \Delta V_{\text{ein}j}.$$

Bei Voraussetzung schwacher Temperaturabhängigkeit der Materialeigenschaften λ , ρ und c_p verwenden wir Materialeigenschaften zur Temperatur des alten Zeitschritts. Um das Auftreten verschwindender besetzter Maschenvolumina zu vermeiden, betrachten wir im Diffusionsterm ausschließlich vollständig gefüllte Maschen, d.h. bezüglich Wärmeleitung behandeln wir Fluidmaschen im Bereich und unterhalb der freien Oberfläche, als seien sie vollständig gefüllt. Damit ergibt sich

$$h^{n+1} = \left(1 - \frac{\sum_{j \in N} \Delta V_{\text{ein}j}}{V_o^{n+1}} \right) h + \frac{\sum_{j \in N} (h \Delta V)_{\text{ein}j}}{V_o^{n+1}} + \frac{\Delta t}{\rho} \left\{ \frac{1}{V} \sum_{\gamma=1}^3 \left[Ac_{\gamma i_{\gamma+1}} \Psi_{\gamma} (T_{i_{\gamma+1}} - T) + Ac_{\gamma} \Psi_{\gamma i_{\gamma-1}} (T_{i_{\gamma-1}} - T) \right] + P_d \right\}. \quad (3.4.2-2)$$

Dieser Algorithmus wird für alle gefüllten Fluid- und Strukturmaterialmaschen verwendet, falls der besetzte Volumenanteil nicht verschwindet. Als Übertragungsfläche der Wärmeleitung verwenden wir die Seitenflächen der Maschen, außer zwischen unvollständig gefüllten Fluid- und darüberliegenden Strukturmaterialmaschen, bei denen wir die Wärmeleitung dadurch unterdrücken, daß wir die Übertragungsfläche zu Null setzen.

In der Zeitschleife wird das hydrodynamische Problem vor der Wärmetransportgleichung gelöst, siehe Abschnitt 3.5.1. Darum benutzen wir in (3.4.2-2) die aktualisierte Geschwindigkeit (v^{n+1}) . Die Bestimmung der Volumen- und Enthalpieeinströmung einer Masche ist in Abschnitt 3.4.3, das Strahlungs-Wärmeübergangsmodell der freien Oberfläche in den Abschnitten 3.4.4 und 3.4.5 beschrieben.

Die Temperatur (T^{n+1}) wird aus der Relation zwischen spezifischer Enthalpie und Temperatur berechnet. In leeren Maschen, in Fluidmaschen oberhalb der freien Oberfläche sowie in Randmaschen, mit Ausnahme der Fluid-Randmaschen, bleiben die Temperaturen erhalten $(T^{n+1} = T)$.

3.4.3 Massen- und Wärmeaustausch an Maschen-Seitenflächen

In diesem Abschnitt beschreiben wir die in der diskretisierten Wärmetransportgleichung benutzten Modelle zur Bestimmung konvektiver Massen- und Wärmeströme im Fluid.

Die Volumeneinströmung einer gefüllten Fluidmasche ist

$$\sum_{j \in N} \Delta V_{\text{ein}j} = \Delta t \sum_{\gamma=1}^3 \left(\max\{0, d\dot{V}_{\gamma i_{\gamma-1}}\} - \min\{0, d\dot{V}_{\gamma}\} \right). \quad (3.4.3-1)$$

Dabei bezeichnet $d\dot{V}_{\gamma}$ den Volumentransfer pro Zeiteinheit durch die rechte Seitenwand der Masche in x_{γ} -Richtung. Wir definieren den Volumentransfer, sofern mindestens eine der benachbarten Maschen gefüllt ist, in der ersten und zweiten Raumrichtung zwischen benachbarten Fluidmaschen durch

$$\begin{aligned} d\dot{V}_{1ijk}^n &:= f_{2i+1} \ell_2 \text{vhk}_1, \\ d\dot{V}_{2ijk}^n &:= \ell_1 \text{vhk}_2. \end{aligned}$$

Das Geschwindigkeits-Höhen Integral vhk_{γ} ist durch (3.3.1-2a) für Polynom- und durch (3.3.2-2a) für Stufenoberfläche gegeben. Nach der Bestimmung von $d\dot{V}_1$ und $d\dot{V}_2$ ist der Volumentransfer zwischen benachbarten Maschen in der dritten Raumrichtung $d\dot{V}_3$ durch die Erhaltung des Volumens eindeutig festgelegt und wird rekursiv berechnet: Für $k=0$, sowie für $k=kt$ wenn die im Folgenden definierte Volumeneinströmung von Nachbarsäulen in Maschen an der freien Oberfläche $d\dot{V}_u$ verschwindet, setzen wir $d\dot{V}_{3ijk}^n := 0$,

in allen anderen Fällen
$$d\dot{V}_{3ijk}^n := \frac{\max\left\{V_s - V, \min\left\{V_s, V_s - V_o^{n+1}\right\}\right\}}{\Delta t},$$

mit der Abkürzung
$$V_{sijk}^n := V_o + \Delta t \left(\sum_{\gamma=1}^3 d\dot{V}_{\gamma i_{\gamma-1}} - \sum_{\gamma=1}^2 d\dot{V}_{\gamma} \right).$$

Maximum- und Minimumfunktion treten infolge der Restriktionen auf, daß das besetzte Maschenvolumen nicht verschwinden bzw. größer als das Maschenvolumen werden darf. Die Volumeneinströmung von Nachbarsäulen in Maschen an der freien Oberfläche ist

$$d\dot{V}_{u_{i_1 i_2}}^n := \sum_{\gamma=1}^2 \sum_{k=kl}^{ku_{i_{\gamma-1}}} \max\left\{0, d\dot{V}_{\gamma i_{\gamma-1}}\right\} - \sum_{k=kl}^{ku_{\gamma}} \min\left\{0, d\dot{V}_{\gamma}\right\},$$

wobei ku bei Polynomdarstellung den vertikalen Index der Höhe an der vertikalen Gitterlinie, bei Stufendarstellung das Maximum der vertikalen Maschenindizes der freien Oberfläche benachbarter Säulen, vor der Aktualisierung der Höhe bezeichnet. Diese Volumeneinströmung entspricht der Einströmung von oben und enthält keine Beiträge östlicher, westlicher, nördlicher oder südlicher Nachbarmaschen.

Die Enthalpieeinströmung h/ρ einer gefüllten Fluidmasche wird durch ein ähnliches Verfahren wie die Volumeneinströmung berechnet :

$$\sum_{j \in N} (h \Delta V)_{\text{ein},j} = \Delta t \sum_{\gamma=1}^3 \left(\max\left\{0, h_{i_{\gamma-1}} d\dot{V}_{\gamma i_{\gamma-1}}\right\} - \min\left\{0, h_{i_{\gamma+1}} d\dot{V}_{\gamma}\right\} \right).$$

Die hier betrachteten Einströmenthalpien h^n beziehen sich auf die nicht aktualisierte Position der freien Oberfläche ξ^n . Darum ist es erforderlich, die spezifische Enthalpie von Nachbarmaschen zu bestimmen, die sich vor der Aktualisierung der Höhe oberhalb der freien Oberfläche befanden und anschließend darauf oder darunter liegen. Bei solchen Maschen aus Nachbarsäulen verwenden wir dazu die Enthalpie derjenigen Masche der Nachbarsäule, die sich vor der Aktualisierung der Höhe an der Oberfläche befand. Für Maschen der betrachteten Säule berechnen wir die Enthalpie mittels obiger Volumeneinströmung von Nachbarsäulen in Maschen an der freien Oberfläche $d\dot{V}_u$:

$$h_{u_{i_1 i_2}}^n = \frac{1}{d\dot{V}_u} \sum_{\gamma=1}^2 \sum_{k=kl}^{ku_{i_{\gamma-1}}} \max\left\{0, h_{i_{\gamma-1}} d\dot{V}_{\gamma i_{\gamma-1}}\right\} - \sum_{k=kl}^{ku_{\gamma}} \min\left\{0, h_{i_{\gamma+1}} d\dot{V}_{\gamma}\right\}.$$

Einströmung westlicher, östlicher, südlicher und nördlicher Nachbarmaschen oberhalb der freien Oberfläche tritt nur bei der Stufendarstellung der Oberfläche auf, siehe (3.3.2-2a) oder Abb. 3.3-1.

3.4.4 Wärmestrahlung der freien Oberfläche

Als Randbedingung zur Wärmetransportgleichung betrachten wir den Wärmeübergang durch Strahlung zwischen der Fluidoberfläche und einer oberhalb des Fluids befindlichen isothermen Struktur. Das Strahlungsmodell approximiert die freie Oberfläche und eine umgebende Struktur durch parallele Platten, deren Ausdehnungen wesentlich größer sind als der Plattenabstand. Unter dieser Annahme ist die Leistung des Wärmeübergangs von der umgebenden Struktur, mit Index a, zur Fluidoberfläche, mit Index f,

$$P_{af} = c_{af} A_3 (T_a^4 - T_f^4) \quad , \quad c_{af} := \frac{\sigma}{\frac{1}{\epsilon_a} + \frac{1}{\epsilon_f} - 1} \quad (3.4.4-1)$$

VDI [87], wobei folgende Bezeichnungen verwendet werden :

A_3 Oberfläche von Fluid und umgebender Struktur

σ Stefan-Boltzmann-Konstante : $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$

ϵ Emissivität der Oberflächen von Fluid und umgebender Struktur

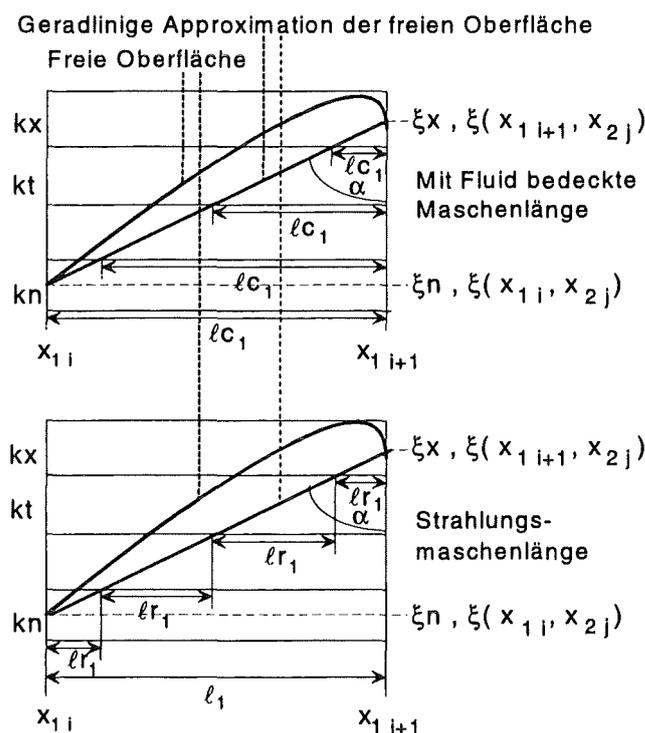


Abb. 3.4-1 : Mit Fluid bedeckte Maschenlänge und Strahlungsmaschenlänge.

Um Strahlungs-Wärmeübergang in allen Maschen einer vertikalen Säule, die nicht vollständig mit Fluid gefüllt sind, zu ermöglichen, wird die Fläche A_3 zwischen diesen Maschen aufgespalten. Diese Aufspaltung ist im unteren Teil der Abb. 3.4-1 angedeutet, der die horizontalen Strahlungsmaschenlängen lr_1 innerhalb einer vertikalen Säule darstellt.

Das Verfahren zur Bestimmung der Strahlungsflächen Ar_3 mit Hilfe der Strahlungsmaschenlängen ist im folgenden Abschnitt erläutert. Die Aufspaltung der Strahlungsfläche einer vertikalen Säule hat die Form

$$A_{3ij} = \sum_{k=kn}^{kt} Ar_{3ijk}.$$

kn bezeichnet das Minimum der Indizes der freien Oberfläche an den Maschenrändern, wobei das Strahlungsmodell eine im folgenden Abschnitt erläuterte geradlinige Oberflächenapproximation zugrundelegt. Es wird angenommen, daß jedes strahlende Flächenelement Ar_3 der freien Oberfläche ein paralleles Gegenstück in der Umgebung besitzt. Das Modell zur Berechnung der Strahlungsfläche der Maschen Ar_3 beschreibt Abschnitt 3.4.5.

Im numerischen Modell wird der Strahlungswärmeübergang als zusätzlicher Quellterm für Maschen an der freien Oberfläche behandelt. Bei Strahlungswärmeübergang addieren wir folgenden Term auf der rechten Seite von (3.4.2-2), wobei die Indizes a und f die Oberflächen von umgebender Struktur und Fluid kennzeichnen :

$$\frac{2 \Delta t}{\rho V} c_{af} Ar_3 (T_a^4 - T_f^4).$$

In diesem Modell betrachten wir die dem Strahlungs-Wärmeaustausch unterliegenden Maschen als zur Hälfte mit Fluid gefüllt, durch Verwendung von $V/2$ anstelle von V_0^{n+1} im Nenner. Die Befüllung bis zum halben Maschenvolumen entspricht der mittleren Besetzung von Maschen an der freien Oberfläche und gewährleistet, daß das Maschenzentrum, in dem die Temperatur definiert ist, sich auf dem Rand befindet. Zudem umgehen wir mit dieser Annahme verschwindende besetzte Maschenvolumina.

3.4.5 Strahlungs-Wärmeaustauschfläche der freien Oberfläche

Zur Berechnung der Maschenfläche für Strahlungs-Wärmeaustausch zerlegen wir die gesamte freie Oberfläche in n_2 Segmente, für die wir die vereinfachende Annahme verwenden, daß die Oberfläche in der ersten Raumrichtung eine Gerade ist, die $\xi(x_1, x_2)$ und $\xi(x_{1+i}, x_2)$ miteinander verbindet, siehe Abb. 3.4-1. Für die Stufendarstellung definieren wir dabei

$$\xi(x_1, x_2) := \max\{0.5(\xi_{i-1} + \xi), x_{3ktn+1}\}$$

als Höhe der freien Oberfläche an vertikalen Gitterlinien, wobei ktn den vertikalen Index der obersten nicht mit Fluid gefüllten Masche unterhalb der die freie Oberfläche enthaltenden Masche bezeichnet. Zudem führen wir als Abkürzungen die Maxima und Minima der geradlinigen Oberfläche von westlichem und östlichem Maschenrand ein,

$$\xi_{x_{ij}}^n := \max \left\{ \xi^{n+1}(x_1, x_2), \xi^{n+1}(x_{1+i}, x_2) \right\},$$

$$\xi_{n_{ij}}^n := \min \left\{ \xi^{n+1}(x_1, x_2), \xi^{n+1}(x_{1+i}, x_2) \right\}$$

sowie die dazu zugehörigen Maschenindizes in der dritten Raumrichtung, k_x und k_n .

Ist der vertikale Index der freien Oberfläche gleich k_x und gleich k_n , so ist keine Aufspaltung der Strahlungsfläche einer vertikalen Säule erforderlich. In diesem Fall ist $Ar_3 = A_3$ für die Masche an der freien Oberfläche, während alle darunter befindlichen Maschen keinen Strahlungswärmeaustausch besitzen, d. h. bei ihnen ist $Ar_3 = 0$.

Ist dagegen k_x größer als k_n , so wird die Strahlungsfläche einer vertikalen Säule auf die Maschen mit $k_n \leq k \leq k_x$ aufgespalten. Sei l_{r_1} die für den Strahlungsaustausch nach oben effektive Maschenlänge in x_1 -Richtung. Diese Maschenlänge ist in Abb. 3.4-1 zusammen mit der von Fluid bedeckten Maschenlänge l_{c_1} , aus der sie berechnet wird, dargestellt. Für ebene Geometrie ergibt sich die Strahlungsfläche

$$Ar_{3ijk}^n := l_{r_1} l_2,$$

während die Definition bei zylindrischer Geometrie davon abhängt, in welchem Teil von l_1 l_{r_1} sich befindet :

$$\text{Für } \xi^{n+1}(x_1, x_2) > \xi^{n+1}(x_{1+i}, x_2) : Ar_{3ijk}^n := l_{r_1} l_2 \left[x_1 + l_{c_1} - \frac{l_{r_1}}{2} \right],$$

$$\text{für } \xi^{n+1}(x_1, x_2) < \xi^{n+1}(x_{1+i}, x_2) : Ar_{3ijk}^n := l_{r_1} l_2 \left[x_{1+i} - l_{c_1} + \frac{l_{r_1}}{2} \right],$$

wobei l_{c_1} die mit Fluid benetzte Länge am Boden einer Masche in der ersten Raumrichtung bezeichnet. Die Berechnung von l_{c_1} ist nur in der partiell bedeckten Region erforderlich. Aus den in Abb. 3.4-1 dargestellten geometrischen Bedingungen ermitteln wir

$$l_{c_1ijk}^n := l_1 \frac{\xi_x - x_3}{\xi_x - \xi_n}.$$

Die Berechnung von l_{r_1} wird benötigt, wenn die Strahlungs-Austauschfläche auf mehrere Maschen aufgespalten wird. Mit den geometrischen Bedingungen aus Abb. 3.4-1 bestimmen wir für

$$k_n < k = k_t : l_{r_1ijk}^n := \frac{l_1}{\xi_x - \xi_n} (\xi_x - x_3) = l_{c_1},$$

$$\text{für } k_n < k < k_t : l_{r_1ijk}^n := \frac{l_1}{\xi_x - \xi_n} l_3,$$

$$\text{für } k_n = k < k_t : l_{r_1ijk}^n := \frac{l_1}{\xi_x - \xi_n} (x_{3k+1} - \xi_n).$$

3.5 Eigenschaften des gesamten Verfahrens

3.5.1 Reihenfolge der Berechnung dynamischer Variablen

In diesem Abschnitt beschreiben wir die Reihenfolge, mit der die einzelnen dynamischen Variablen innerhalb einer Zeitebene bestimmt werden. Die Form der Reihenfolge ist nicht zwingend, eine eindeutige Festlegung jedoch wichtig.

Der konvektive Wärmeaustausch benachbarter Fluidmaschen wird von der Bewegung der freien Oberfläche beeinflusst. Die Position der freien Oberfläche hängt wiederum primär von den Eigenschaften der Strömung ab. Aus diesem Grund berechnen wir die hydrodynamischen Vorgänge in jedem Zeitschritt vor den thermodynamischen, die Phasenübergänge dagegen zuletzt und verwenden damit die gleiche Reihenfolge wie in der Beschreibung des numerischen Verfahrens. Im einzelnen wird folgende Berechnungsreihenfolge der dynamischen Variablen verwendet :

- 1) Hydrodynamik :
 - a) Geschwindigkeit und Druck
 - b) Position der freien Oberfläche
- 2) Thermodynamik :
 - a) Spezifische Enthalpie
 - b) Temperatur
- 3) Phasenübergänge :
 - a) Massenanteile der flüssigen und festen Phase

3.5.2 Initialisierung verlassener und besetzter Fluidmaschen

Nach der Bestimmung der neuen Position der freien Oberfläche ξ^{n+1} , werden die Variablen aller Fluidmaschen oberhalb der Oberfläche initialisiert. Dabei setzen wir Geschwindigkeit und spezifische Enthalpie zu null und den Massenanteil der flüssigen Phase auf eins. Druck und Temperatur nehmen die konstanten, vom Benutzer definierten, Werte des umgebenden Mediums an, d. h. von Luft oder isothermer idealer Flüssigkeit.

Da das Geschwindigkeits-Höhen Integral (3.3.2-2) bei Stufendarstellung der freien Oberfläche mit der alten Oberflächenposition berechnet wird, kann bei der Berechnung des konvektiven Wärmetransports auf Enthalpien von Maschen oberhalb der neuen Oberfläche Bezug genommen werden. Darum darf die spezifische Enthalpie, bei Stufendarstellung der freien Oberfläche, nicht vor der Berechnung des konvektiven Wärmetransports initialisiert werden.

Neu besetzte Maschen initialisieren wir mit der spezifischen Enthalpie und Temperatur der darunterliegenden Maschen der Säule, die sich vorher an der Oberfläche befand.

3.5.3 Gemeinsame Eigenschaften der Differenzenverfahren

In diesem Abschnitt diskutieren wir Eigenschaften verschiedener Verfahren zur Beschreibung der Flüsse zwischen benachbarten Kontrollvolumina, siehe Abschnitt 3.2.1.1, und beschreiben anschließend gemeinsame Eigenschaften der von uns verwendeten Diskretisierungen für die Navier-Stokes- und die Wärmetransportgleichung.

Einige wünschenswerte Eigenschaften eines numerischen Verfahrens zur Lösung einer partiellen Differentialgleichung, zur Bestimmung einer physikalisch sinnvollen Lösung, lassen sich mit den Begriffen Konservativität, Beschränktheit und Transportivität charakterisieren.

Unter Konservativität versteht man die Erfüllung integraler Erhaltungsgleichungen, der Masse, Energie etc., an den Rändern der Kontrollvolumina sowie auf dem Rand des gesamten betrachteten Bereichs. Zur Gewährleistung dieser Eigenschaft ist es erforderlich, daß die Flüsse zwischen zwei benachbarten Maschen so beschaffen sind, daß genau der Anteil einer erhaltenen Größe, der eines der beiden Kontrollvolumina verläßt, im benachbarten Kontrollvolumen eintrifft.

Die Beschränktheit eines numerischen Verfahrens besagt, daß es physikalische Beschränkungen erhält. So ist beispielsweise die Temperatur im Inneren eines Kontrollvolumens bei stationärer Wärmeleitung ohne innere Quellen physikalisch auf Werte zwischen dem Minimum und dem Maximum der Temperaturen der Umgebung beschränkt. Bei gewissen Diskretisierungen, etwa bei der von uns verwendeten, ist die Erfüllung der positive-Koeffizienten-Regel von Patankar [62], siehe Abschnitt 3.2.1.3, hinreichend für die Beschränktheit. Verletzungen des Beschränktheitskriteriums rufen unphysikalische Oszillationen hervor.

Die Transportivität von Algorithmen bedeutet, daß die konvektiven und diffusiven Transporteigenschaften der Differentialgleichung richtig wiedergegeben werden.

Beim Vergleich der zur Diskretisierung von Flüssen gebräuchlichen Verfahren zentraler Diskretisierung, 'upwind' Diskretisierung erster Ordnung, linearer, Peric [63], quadratischer (QUICK), Leonard [53] und 'skew-upwind' Diskretisierung, Raithby [66], stellt sich heraus, daß allein die 'upwind' Methode erster Ordnung alle drei der wünschenswerten Eigenschaften Konservativität, Beschränktheit und Transportivität besitzt, Peric. Während alle verglichenen Methoden konservativ und, mit Ausnahme von QUICK, transportiv sind, erfüllt nur die 'upwind' Diskretisierung erster Ordnung bedingungslos das Beschränktheitskriterium. Auch der systematische Vergleich der Stabilität von 'upwind' Verfahren erster bis dritter Ordnung an einer Modellgleichung und einem zwei-Fluid-Modell, Ohkawa und Tomiyama [60], belegt die hervorragende numerische Stabilität des Verfahrens erster Ordnung gegenüber Methoden höherer Ordnung.

Nachteilig ist dagegen seine im Vergleich zu Verfahren höherer Ordnung große numerische Diffusion, deren Reduzierung feine, in Strömungsrichtung ausgerichtete Gitter erfordert, Patankar.

Um die positiven Eigenschaften von Verfahren höherer Ordnung mit denen der 'upwind' Methode erster Ordnung zu kombinieren, wurden Methoden zur Mischung der jeweiligen Anteile der Flüsse entwickelt. Bei gesteigertem Rechenaufwand ermöglicht dies eine Erhöhung der Rechengenauigkeit bei gegebenem Gitter bzw. gleiche Genauigkeit bei größerem Gitter, Peric.

Da wir besonderen Wert auf die Stabilität unseres Verfahrens legen, verwenden wir die 'upwind' Diskretisierung erster Ordnung für konvektive und zentrale Diskretisierung diffusiver Terme und verzichten auf eine Mischung der berechneten Flüsse mit Anteilen von Verfahren höherer Ordnung.

Dies bewirkt eine Überschätzung der Diffusion bei großen Pecletzahlen $Pe = \frac{\rho v \ell}{\theta}$, wobei θ die

Kopplungskonstante der Diffusion bezeichnet, Patankar.

3.6 Numerische Stabilität

Numerische Stabilität ist eine notwendige Voraussetzung für die Konvergenz der Lösung eines Differenzenverfahrens gegen die Lösung der zugrundeliegenden Differentialgleichung. Für lineare Differenzenapproximationen korrekt gestellter linearer Anfangswertprobleme besagt das Lax'sche Äquivalenztheorem, daß Stabilität und Konsistenz eines Verfahrens äquivalent zu seiner Konvergenz sind, Smith [77]. Unter Konsistenz versteht man dabei, daß das Differenzenproblem für verschwindende Maschenlängen in das Differentialgleichungsproblem übergeht. Verletzung der aus Stabilitätsanalysen resultierenden Kriterien führt zu physikalisch nicht sinnvollen Ergebnissen.

Da das Lösungsverfahren der Navier-Stokes-Gleichung nur die Wechselwirkung direkter Nachbarmaschen berücksichtigt, begrenzt das Kriterium von Courant, Friedrichs und Lewy [13] den Zeitschritt. Auch ergeben Stabilitätsuntersuchungen der expliziten Verfahren zur Dynamik der freien Oberfläche, bei Stufendarstellung, und der Wärmetransportgleichung Limitierungen des maximalen Zeitschritts. Eine zusätzliche Restriktion des Zeitschritts bedingt die Propagation von Gravitationswellen.

Unser Verfahren arbeitet mit einem einheitlichen Zeitschritt, darum verwenden wir in den Berechnungen das Minimum der Zeitschritte, die sich aus den verschiedenen Stabilitätsbetrachtungen ergeben.

Da die limitierenden Kriterien u. a. geschwindigkeitsabhängig sind, verwenden wir das Minimum sukzessiver Zeitschritte :

$$\Delta t_{\max} = \min \left\{ \Delta t_{\max}(\bar{v}), \Delta t_{\max}(\bar{v}^{n+1}) \right\}.$$

Darum wiederholen wir die Berechnung eines Zeitschritts, falls der maximale Zeitschritt zur aktualisierten Geschwindigkeit geringer ist als der mit der alten Geschwindigkeit bestimmte.

3.6.1 Methoden der Stabilitätsanalyse

Zur Analyse der Stabilität von Differenzenapproximationen partieller Differentialgleichungen werden u. a. Matrizenmethoden und die Methode nach John von Neumann verwendet, Smith oder Marsal [55]. Wir verwenden im Folgenden eine Matrizenmethode und geben dazu anschließend eine kurze Einführung.

Die Gleichungen zur numerischen Lösung von Navier-Stokes-, freier Oberflächen- und Wärmetransportgleichung sind von der Form

$$x^{n+1} = A(x^n) x^n + b(x^n) = A^n x^n + b^n, \quad (3.6.1-1)$$

wobei A eine quadratische reelle Matrix mit Kantenlänge m ist, x und b Vektoren der Dimension m sind. Auf die Anfangswerte x^0 bezogen ergibt sich

$$x^{n+1} = \prod_{i=1}^{n+1} A^i x^0 + \sum_{i=1}^{n+1} \prod_{j=i}^n A^{n-j+1} b^i.$$

Wir betrachten nun eine von der exakten numerischen Lösung x abweichende Lösung y , die etwa durch Rundungsfehler entstanden sein kann, definieren damit die Störung

$$e^n := x^n - y^n$$

und analysieren anschließend die zeitliche Entwicklung dieser Störung.

Wegen der mit der Behandlung der numerischen Stabilität nichtlinearer Algorithmen verbundenen Schwierigkeiten diskutieren wir die Stabilität linearisierter Algorithmen, die bei Vernachlässigung der x -Abhängigkeit von A entstehen. Mit dieser Annahme ist der Fehler

$$e^{n+1} = \prod_{i=1}^{n+1} A^i e^0.$$

Für miteinander kompatible Vektor- und Matrixnormen gilt

$$\|e^{n+1}\| \leq \prod_{i=1}^{n+1} \|A^i\| \|e^0\|,$$

Smith. Der Algorithmus ist stabil im Sinne von Lax-Richtmyer, wenn für alle $n \geq 1$

$$\|A^n\| \leq 1, \quad (3.6.1-2)$$

Smith oder Marsal. Dies ist ein notwendiges und hinreichendes Kriterium für die Stabilität linearisierter Algorithmen wenn der zeitliche Anstieg von x kleiner als exponentiell ist. Eine für unsere Stabilitätsanalysen geeignete Matrixnorm ist die Unendlichkeitsnorm

$$\|A\|_\infty := \max_\ell \left(\sum_m |a_{\ell m}| \right). \quad (3.6.1-3)$$

3.6.2 Numerische Stabilität der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichung

Da das implizite Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung (3.2.1-2) nur Wechselwirkungen nächster Nachbarn betrachtet, muß das Kriterium von Courant, Friedrichs und Lewy [13] erfüllt werden, d. h. in einem Zeitschritt darf die Strömung um nicht mehr als eine Maschenlänge propagieren. Dies gilt sicher, falls

$$\Delta t_c^n \leq 0.3 \min_{\gamma \in \{1,2,3\}} \left\{ \Delta t_{c\gamma}^n \right\}, \quad \text{mit} \quad \Delta t_{c\gamma}^n := \min_{(i,j,k)} \left\{ \frac{\min \{ \tilde{\ell}_\gamma, \tilde{\ell}_{\gamma i_\gamma+1} \}}{|v_\gamma|} \right\}.$$

wobei das Minimum über alle gefüllten Fluidmaschen genommen wird. Den Reduktionsfaktor 0.3 verwenden wir aufgrund der Vernachlässigung der Variation von Dichte und Viskosität innerhalb

eines Kontrollvolumens in der Herleitung der diskretisierten Navier-Stokes-Gleichung. Dadurch wird gewährleistet, daß nicht mehr als 90 Prozent des Volumens einer gefüllten Fluidmasche innerhalb eines Zeitschritts ersetzt wird.

Bei räumlich konstanter dynamischer Viskosität beinhaltet unser Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung keine Zeitschrittbeschränkungen durch den Diffusionsterm. Ist sie nicht konstant, so kann der diffusive Term der Impulsgleichung wie folgt aufgespalten werden :

$$\frac{\nabla_m \sigma^{m_i}}{\rho_0} = 2 d^{m_i} \nabla_m v + v g^{m\ell} \nabla_\ell \nabla_m v_i.$$

Da der Tensor der Scherrate aus räumlichen Geschwindigkeitsableitungen besteht, kann der erste dieser Summanden als konvektiver Term aufgefaßt werden, mit der Geschwindigkeit $\nabla_\gamma v$. Darum erhält man bei Anwendung des Courant-Friedrichs-Lewy-Kriteriums die Zeitschrittbeschränkung

$$\Delta t_d^n \leq \min_{\gamma \in \{1,2,3\}} \left\{ \Delta t_{d\gamma}^n \right\}, \text{ wobei } \Delta t_{d\gamma}^n := \min_{(i,j,k)} \left\{ \frac{dx_{\gamma i_{\gamma+1}}}{|\nabla_\gamma v|} \right\}.$$

3.6.3 Numerische Stabilität des Algorithmus für die Dynamik der freien Oberfläche

Bei Stufendarstellung der freien Oberfläche wird ihre zeitliche Änderung durch (3.3.2-3) beschrieben :

$$\xi^{n+1} = \xi + \frac{\Delta t}{A_3} \left\{ \ell_2 (f_2 v h_{1i-1} - f_{2i+1} v h_1) + \ell_1 (v h_{2j-1} - v h_2) \right\}.$$

Mit dem Geschwindigkeits-Höhen-Integral vh_γ (3.3.2-2a) erhalten wir für $\xi_{i_\gamma-1} > \xi > \xi_{i_\gamma+1}$, (siehe Abschnitt 3.6.1) :

$$\begin{aligned} \|A\|_\infty = \max_i \left\{ \left| 1 + \frac{\Delta t}{A_3} \left\{ \ell_2 \left[f_2 (v_{1i-1 k m n_{1i-1}} - v_{d_{1i-1 k m n_{1i-1}}}) - f_{2i+1} v_{d_{1 k m x_1}} \right] \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \ell_1 \left[v_{2j-1 k m n_{2j-1}} - v_{d_{2j-1 k m n_{2j-1}}} - v_{d_{2 k m x_2}} \right] \right\} \right| \\ + \frac{\Delta t}{A_3} \left\{ \ell_2 \left[f_2 \left| v_{d_{1i-1 k m x_{1i-1}}} \right| + f_{2i+1} \left| v_{1 k m n_1} - v_{d_{1 k m n_1}} \right| \right] \right. \\ \left. \left. + \ell_1 \left[\left| v_{d_{2j-1 k m x_{2j-1}}} \right| + \left| v_{2 k m n_2} - v_{d_{2 k m n_2}} \right| \right] \right\} \right\}. \end{aligned}$$

Die Bedingung $\|A\|_\infty \leq 1$ liefert einen Ausdruck der Form

$$|1 + \Delta t x| + \Delta t y \leq 1 \quad ; \quad x \in \mathfrak{R}, y \in \mathfrak{R}_+.$$

Um diesem Ausdruck zu genügen und damit die Stabilität des Algorithmus zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung der freien Oberfläche in Stufendarstellung zu gewährleisten, sind folgende Bedingungen notwendig :

$$\text{I) } \Delta t x \in [-2, 0] \Rightarrow x \leq 0,$$

$$\text{II) } \Delta t y \leq 1 \Rightarrow \Delta t \leq y^{-1}.$$

Zu einem hinreichenden Kriterium gelangen wir unter der Annahme $\Delta t x \in [-1, 0]$. Dann müssen folgende Bedingungen gelten :

$$\text{III) } x \leq 0,$$

$$\text{IV) } \Delta t \leq \frac{1}{-x},$$

$$\text{V) } |1 + \Delta t x| + \Delta t y = 1 + \Delta t (x + y) \leq 1 \Rightarrow y \leq -x.$$

III) bis V) können zu dem hinreichenden Kriterium

$$\Delta t \leq \max \left\{ 0, \frac{1}{-x} \right\} \leq \frac{1}{y}$$

kombiniert werden. Bedingung II) liefert folgendes notwendige Kriterium für den Zeitschritt :

$$\Delta t_h^n \leq \min_{i,j} \left\{ A_3 \left\{ \ell_2 \left[f_2 \left| \text{vd}_{1\ i-1\ kmx_{1-1}} \right| + f_{2\ i+1} \left| v_{1\ kmn_1} - \text{vd}_{1\ kmn_1} \right| \right] \right. \right. \\ \left. \left. + \ell_1 \left[\left| \text{vd}_{2\ j-1\ kmx_{2j-1}} \right| + \left| v_{2\ kmn_2} - \text{vd}_{2\ kmn_2} \right| \right] \right\}^{-1} \right\}.$$

Andere Orientierungen der freien Oberfläche ergeben ähnliche Bedingungen. Da

$$\left| v_\gamma - \text{vd}_\gamma \right| \in \{ 0, |v_\gamma| \} \quad \text{und} \quad \left| \text{vd}_\gamma \right| \in \{ 0, |v_\gamma| \}, \quad \gamma \in \{1,2\},$$

kann man unter der Voraussetzung, daß v_γ in den Maschen mit vertikalen Indizes kt , kx und kn etwa gleich groß ist, folgende notwendige Bedingung für den Zeitschritt abschätzen :

$$\Delta t_h^n \leq 0.5 \min_{i,j} \left\{ A_3 \left[\ell_2 f_{2\ i+1} |v_{1\ kt}| + \ell_1 |v_{2\ kt}| \right]^{-1} \right\}.$$

Die charakteristische Geschwindigkeit von Gravitationswellen an der freien Oberfläche

$$v_w^n = \left(\|\bar{g}\| \max_{i,j} \{ \xi - \xi_b \} \right)^{\frac{1}{2}},$$

Landau und Lifshitz [51] 1989, liefert eine zusätzliche Restriktion des Zeitschritts :

$$\Delta t_w^n \leq \frac{\min_{i,j} \{ \ell_1, f2c_1, \ell_2 \}}{v_w}.$$

Verletzung dieser Bedingung kann Druck-Geschwindigkeits-Oszillationen hervorrufen. Unter Verwendung des Sicherheitsfaktors 0.5 zur Berücksichtigung der Höhenabhängigkeit der Matrix $A = A(v_1(\xi))$ der Stabilitätsanalyse erhalten wir letztlich folgendes Zeitschrittkriterium für den Algorithmus bei Stufendarstellung der freien Oberfläche :

$$\Delta t^n \leq 0.5 \min_{i,j} \{ \Delta t_h, \Delta t_w \}.$$

Das implizite Verfahren zur Berechnung der zeitlichen Änderung der freien Oberfläche in polynomischer Darstellung zweiter Ordnung wird als uneingeschränkt stabil eingeschätzt. Aus diesem Grund fordern wir für die Polynomdarstellung nur, daß Gravitationswellen um nicht mehr als eine Maschenlänge pro Zeitschritt propagieren dürfen :

$$\Delta t^n \leq 0.5 \min_{i,j} \{ \Delta t_w \}.$$

3.6.4 Numerische Stabilität der diskretisierten Wärmetransportgleichung

Zur Untersuchung der numerischen Stabilität linearisieren wir den Algorithmus der Wärmetransportgleichung (3.4.2-2) durch die Annahme konstanter spezifischer Wärme und betrachten ausschließlich vollständig gefüllte Maschen unterhalb der freien Oberfläche. Die Stabilität des Algorithmus wird ausschließlich durch die explizite Diskretisierung des konvektiven und diffusiven Terms determiniert, Casulli [9] 1987. Bei Verwendung der 'upwind' Diskretisierung konvektiver Terme hat die Unendlichkeitsnorm (3.6.1-3) der Matrix A (siehe 3.6.1-1) die Form

$$\| A \|_{\infty} = \max_i (| 1 - z | + z),$$

wobei

$$z := \frac{\Delta t}{V} \left[A_{m i_m+1} | v_m | + \frac{1}{\rho c_p} (A_m \psi_{m i_m-1} + A_{m i_m+1} \psi_m) \right].$$

Für $z \in [0, 1]$ ist

$$\| A \|_{\infty} = \max_i (1 - z + z) = 1.$$

Bei $z \in] 1, \infty [$ erhalten wir dagegen

$$\| A \|_{\infty} = \max_i (z - 1 + z) = \max_i (2z - 1) > 1.$$

Bei Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit der Matrix $A = A(\bar{v}(v(T)), \rho(T), c_p(T))$ in der Stabilitätsanalyse ist der Algorithmus der Wärmetransportgleichung entsprechend Bedingung (3.6.1-2) stabil, falls

$$\Delta t^n \leq \min_{(i_1, i_2, i_3)} \left\{ V \left[A_{m i_m+1} |v_m| + \frac{1}{\rho c_p} (A_m \Psi_{m i_m-1} + A_{m i_m+1} \Psi_m) \right]^{-1} \right\},$$

wobei das Minimum über alle gefüllten Fluid- oder Strukturmaterialmaschen genommen wird. Mit dem Sicherheitsfaktor 0.3, aufgrund der Temperaturabhängigkeit von A, und der Abschätzung

$\tilde{\ell}_\gamma \leq \frac{V}{A_\gamma}$, um die numerische Berechnung zu vereinfachen, verschärfen wir abschließend das

Kriterium zu

$$\Delta t^n \leq 0.3 \min_{(i_1, i_2, i_3)} \left\{ \left[\sum_{\gamma=1}^3 \frac{1}{\tilde{\ell}_\gamma} \left(|v_\gamma| + \frac{\Psi_{\gamma i_\gamma-1} + \Psi_\gamma}{\rho c_p} \right) \right]^{-1} \right\}.$$

4 Anwendungen der Methode

Im ersten Abschnitt werden allgemein die Ergebnisse zusammengestellt, die mit dem Verfahren erzielt werden können. Anschließend betrachten wir zur Verifikation des Verfahrens zunächst analytische Lösungen isothermer Strömungen idealer und viskoser Fluide sowie eines Wärmeleitungsproblems. Anhand dieser Beispiele prüfen wir die Wirkungsweise einzelner Teile unserer Modellierung.

Danach analysieren wir die Verwendbarkeit des Verfahrens für zwei KATS Ausbreitungsexperimente mit Aluminiumoxid- bzw. Eisenschmelze.

Nach diesen Studien zur Verwendbarkeit und Genauigkeit unserer Modelle untersuchen wir einige Probleme aus dem Bereich schwerer Reaktorunfälle. So wird die Rückhaltung oxidischen und metallischen Coriums in der Kaverne und die Ausbreitung des Coriums von der Kaverne in den Ausbreitungsraum analysiert.

4.1 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

Bei einer Simulationsrechnung werden alle dynamischen Variablen im gesamten Berechnungsgebiet bestimmt, d. h. zeitabhängige Geschwindigkeit und Druck im Fluid sowie Enthalpie, Temperatur und Massenanteil flüssiger und fester Phasen in Fluid und Strukturmaterial. Zusätzlich liegen die Frontpropagation und die zeitabhängige freie Oberfläche des Fluids vor. Auch integrale Variablen werden berechnet, etwa die zeitabhängige kinetische, potentielle und innere Energie des Fluids sowie die innere Energie des Strukturmaterials. Innere Wärmeströme und Wärmeströme an die Umgebung dienen dazu, die thermische Belastung der Umgebung durch Wärmeleitung, Konvektion oder Strahlung zu ermitteln.

Die Ausgabe der Ergebnisse des Rechenprogramms CORFLOW erfolgt einerseits schriftlich durch eine Ausgabeliste sowie durch verschiedene Formen graphischer Informationsverarbeitung mit Diagrammen, Vektorfeld- und Isoliniendarstellungen. Zudem werden während einer Rechnung mehrere Filme erstellt, die zur Visualisierung der Simulation dienen. Die Filme zeigen z. B. den zeitlichen Ablauf der Bewegung der zweidimensionalen freien Oberfläche, des Vektorfeldes der Geschwindigkeit in einer Ebene, der Isobaren, Isothermen oder Isolinien des Massenanteils der flüssigen und festen Phase. Auf diese Weise läßt sich der berechnete zeitliche Ablauf komplexer Strömungsvorgänge in überschaubarer, allgemeinverständlicher Form darstellen.

In Abhängigkeit von der Zähigkeit des Fluids sind unterschiedliche Phänomene an der freien Oberfläche beobachtbar. Bei geringer Viskosität treten Gravitationswellen mit Ausbreitungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Viskosität sowie Wellen-Reflexionen an hydrodynamischen Widerständen in Erscheinung. Im Gegensatz dazu beobachtet man bei hoher Zähigkeit Kriechbewegungen der Oberfläche. Bei Problemen in mechanischem Gleichgewicht, das

infolge thermischer Einwirkung destabilisiert, z. B. bei Bénard-Konvektion, kann man die geometrische Konfiguration sowie den zeitlichen Ablauf der Ausbildung von Rollzellen der Konvektionsströmung verfolgen.

Aufgrund der Vielzahl der in einem Strömungsproblem mit freier Oberfläche auftretenden Anfangs- und Randwerte sowie Parameter ist es hilfreich, deren Einwirkung auf das Strömungs-, Wärmeübergangs- und Phasenübergangsproblem mit Hilfe von Simulationsrechnungen differenziert analysieren zu können. Dies betrifft unter anderem den Einfluß von Geometrie, Materialeigenschaften und Anfangstemperatur. Auch ist es durch Simulationen möglich, den Einfluß einzelner Teile der Modellierung, wie z. B. der Oberflächenspannung, Wärmestrahlung oder Phasenübergänge, auf das Systemverhalten zu erfassen.

4.2 Oszillation idealen Fluids in einem U-Rohr

Zur Überprüfung der hydrodynamischen Modelle idealer Fluide verwenden wir ein System, dessen Dynamik nur von Trägheits- und Gravitationskräften bestimmt wird und vergleichen die numerische mit einer analytischen Lösung. Wir betrachten ein rechtwinkliges U-Rohr mit quadratischer Querschnittsfläche $A = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$, bei dem anfänglich nur eine Säule bis $\xi_i = 0.1 \text{ m}$ mit Fluid gefüllt ist. Die Höhe der freien Oberfläche im mechanischen Gleichgewicht bezeichnen wir mit ξ_0 , siehe Abb. 4.2-1.

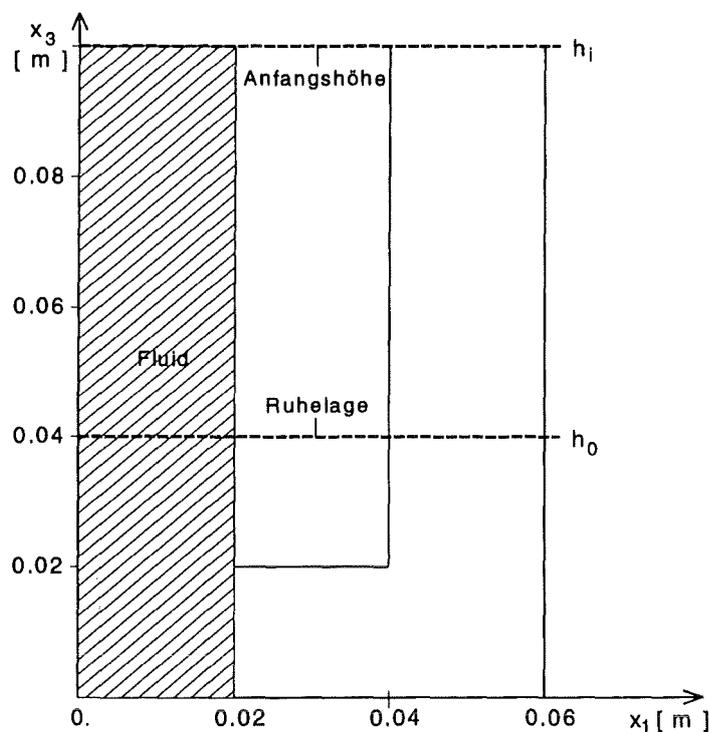


Abb. 4.2-1: Oszillation idealen Fluids im U-Rohr. Geometriemodell.

Bei Vernachlässigung der Oberflächenspannung sind kinetische und potentielle Energie des idealen Fluids

$$T = 0.5 \rho A \xi_i \dot{\xi}^2, \quad U = \rho \|\bar{g}\| A \hat{\xi}^2,$$

wobei wir die Variable $\hat{\xi} := \xi - \xi_0$ verwenden. Daraus erhalten wir die Lagrangefunktion

$$L = T - U = \rho A \left(0.5 \xi_i \dot{\xi}^2 - \|\bar{g}\| \hat{\xi}^2 \right).$$

Die Bewegungsgleichung ist

$$0 = \left(d_t \partial_{\dot{\xi}} - \partial_{\xi} \right) L = \rho A \left(\xi_i \ddot{\xi} - 2 \|\bar{g}\| \hat{\xi} \right).$$

Mit der Eigenfrequenz und Oszillationszeit

$$\omega_0 := \left(\frac{2 \|\bar{g}\|}{\xi_i} \right)^{0.5} = 14 \text{ s}^{-1}; \quad T := \frac{\omega_0}{2 \pi} = 0.45 \text{ s},$$

lautet die allgemeine Lösung

$$\xi(t) = \xi_0 + a \cos(\omega_0 t) + b \sin(\omega_0 t).$$

Die Anfangsbedingung $\xi(0) = \xi_i$; $\dot{\xi}(0) = 0$ führt auf die spezielle Lösung

$$\xi(t) = \xi_0 + \xi_i \cos(\omega_0 t),$$

In der zweidimensionalen numerischen Simulation auf einem Gitter mit 24x1x20 Maschen verwenden wir folgende Daten :

Dichte	1	kg / m ³
Dynamische Viskosität	10 ⁻²⁰	Pa s
Maschenlänge in horizontaler Richtung	2.5	mm
Maschenlänge in vertikaler Richtung	5	mm
Zeitschritt	1 - 2	ms

Tabelle 4.2-1: In der numerischen Simulation der U-Rohr-Oszillation verwendete Daten.

Im Gegensatz zur analytischen Lösung, bei der Amplitude der Oszillation und Gesamtenergie konstant sind, zeigt Abb. 4.2-2 die rasche, durch numerische Diffusion bedingte Reduzierung der Gesamtenergie in der Simulation. Die Oszillationszeit stimmt dagegen gut mit dem analytischen Resultat von $T = 0.45 \text{ s}$ überein.

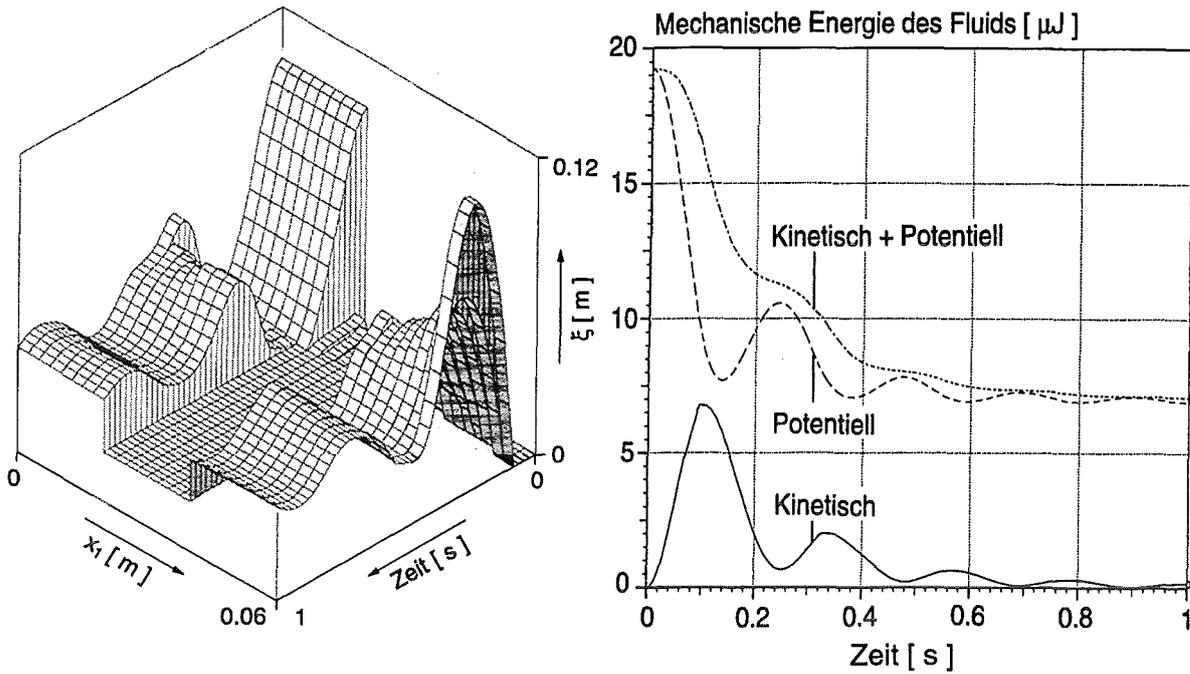


Abb. 4.2-2 : Oszillation idealen Fluids im U-Rohr. Position der freien Oberfläche (links),
und mechanische Energie (rechts).

4.3 Huppert's analytische Lösung für viskose Gravitationsströme

Huppert [42] [43] gab 1982 und 1986 analytische Lösungen für ebene und zylindrische, viskose Gravitationsströme auf ebenen, horizontalen Oberflächen an. Wir verwenden sie zur Verifikation der Modelle für die Hydrodynamik und die Dynamik der freien Oberfläche bei Dominanz von Zähigkeits- und Gravitationskräften.

Mit dem Ansatz, daß sich das Fluidvolumen durch Einströmung zeitlich entwickelt wie

$$V = Q t^\alpha ; Q, \alpha \in \mathbb{R}_+ ; Q [m^3 s^{-\alpha}] \quad (\text{für ebene Geometrie gilt } Q = l_2 q),$$

gelangt Huppert zu Lösungen der stationären Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung. Der Druck wird hydrostatisch angesetzt, die Oberflächenspannung vernachlässigt. Am Boden wird die Haftbedingung verwendet (siehe 2.3). An der freien Oberfläche liefert die Kontinuität der Scherspannung die Randbedingung für den Fall, daß das Fluid nicht von einem anderen Fluid bedeckt ist,

$$(\partial_3 v_1) \Big|_{\xi(x_1, t)} = 0.$$

Da Huppert's Lösungen zweidimensional sind, tritt die Koordinate der zweiten Raumrichtung nicht auf.

Infolge der Vernachlässigung des transienten und des konvektiven Terms gilt die Theorie nur, falls die viskosen Kräfte deutlich größer als die Trägheitskräfte sind. Für Volumenvariations-Exponenten α unterhalb des kritischen Wertes α_c gilt sie nur zu Zeiten, die wesentlich größer sind als die Zeit t_1

des Gleichgewichts von Trägheits- und viskosen Kräften, da in diesem Fall die Trägheitskräfte anfänglich groß sind. Ist dagegen α größer als α_c , so gilt Huppert's Theorie nur für Zeiten, die wesentlich kleiner sind als t_1 , da in diesem Fall die Trägheitskräfte anfänglich unbedeutend sind und später dominant werden. Die Ausdrücke für t_1 und die Werte für α_c in den betrachteten Geometrien stellt nachfolgende Tabelle zusammen :

Variable	SI-Einheit	Ebene Geometrie	Zylindrische Geometrie
t_1	s	$\left(\frac{q^4}{g^2 v^3}\right)^{\frac{1}{7-4\alpha}}$	$\left(\frac{Q}{g v}\right)^{\frac{1}{3-\alpha}}$
α_c	-	7 / 4	3

Tabelle 4.3-1 : Charakteristische Übergangszeit und kritischer Volumenvariations-Exponent.

Bei Erfüllung obiger Voraussetzungen ist die Propagation der Front gegeben durch

Variable	SI-Einheit	Ebene Geometrie	Zylindrische Geometrie
x_{1te}	m	$c(\alpha) \left(\frac{g q^3}{3 v}\right)^{\frac{1}{5}} t^{\frac{3\alpha+1}{5}}$	$c(\alpha) \left(\frac{g Q^3}{3 v}\right)^{\frac{1}{8}} t^{\frac{3\alpha+1}{8}}$

Tabelle 4.3-2 : Huppert's analytischer Ausdruck für die Frontpropagation.

mit von α abhängigen Faktoren $c(\alpha)$. Die Einströmung erfolgt bei $x_1 = 0$. CORFLOW Rechnungen ebener und zylindrischer Gravitationsströme wurden durchgeführt für :

Variable	SI-Einheit	Funktionswert
α	-	1
\dot{V}	m^3 / s	1
v	m^2 / s	$g / 3 = 3.27$

Tabelle 4.3-3 : Den Simulationsrechnungen der Huppert-Lösung zugrundeliegende Daten.

Ebenso wie Huppert vernachlässigen wir die Oberflächenspannung. Dies führt auf

Variable	SI-Einheit	Ebene Geometrie	Zylindrische Geometrie
$c(\alpha)$	-	1	0.72
t_1	s	0.067	0.177
$x_{1\ell e}$	m	$t^{0.8}$	$0.72 t^{0.5}$

Tabelle 4.3-4 : Ergebnisse der Huppert'schen Theorie für den von uns betrachteten Fall.

Dabei entnehmen wir die Werte für $c(\alpha)$ aus Abb. 3 in Huppert's Arbeit aus dem Jahr 1982. Eine Abschätzung von Einströmhöhe ξ_{in} und -geschwindigkeit v_{in} erhält man aus der charakteristischen Ausbreitungsgeschwindigkeit von Gravitationsströmen idealen Fluids, siehe Landau und Lifshitz [51] 1989. Für lange Gravitationswellen, deren Wellenlänge wesentlich größer als die Höhe des idealen inkompressiblen Fluids ist, gilt

$$v_{in, id} = \frac{\dot{V}}{\ell_2 h_{in, id}} = \left(\frac{\dot{V}}{\ell_2^2} \xi_{in, id} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \xi_{in, id} = \left(\frac{\dot{V}^2}{\ell_2^2} \right)^{\frac{1}{3}},$$

wobei der Index id sich auf die Annahme idealen Fluids bezieht. Wegen der hohen Zähigkeit ist die Annahme idealen Fluids nicht sachgerecht und führt zu überhöhter Einströmgeschwindigkeit, trotzdem ist der Ausdruck als obere Schranke brauchbar. Gleichsetzen von Einströmgeschwindigkeit und zeitlich gemittelter Propagationsgeschwindigkeit der Front liefert für ebene Geometrie ebenfalls eine Abschätzung, die wir mit dem Index ℓe kennzeichnen. Da die Höhe des Fluids im Einströmbereich zeitabhängig ist, stellen konstante Einströmhöhen ohnehin nur eine Approximation dar. Aus diesem Grund sind zeitliche Mittelwerte der Höhe der freien Oberfläche im Einströmbereich eine geeignete Approximation. Folgende Tabelle listet die Abschätzungen sowie die den Rechnungen zugrundeliegenden Daten für 10 s Problemzeit :

Variable	SI-Einheit	Ebene Geometrie	Zylindrische Geometrie
$\xi_{in, id}$	m	0.467	0.637
$\xi_{in, \ell e}$	m	1.587	-
ξ_{in}	m	2	0.7
$v_{in, id}$	m / s	2.14	2.5
$v_{in, \ell e}$	m / s	0.63	-
v_{in}	m / s	0.5	2.274

Tabelle 4.3-5 : Einströmhöhen und -geschwindigkeiten zur Simulation der Huppert-Lösung.

Für $\alpha \in \{0,1\}$ beobachtete Huppert Übereinstimmung seiner Theorie und zylindrischen Ausbreitungstests mit Silikonölen verschiedener Viskosität. Eine bemerkenswerte Eigenart der Huppertschen Theorie besteht darin, daß die Bedingungen an der Front weder die Ausbreitungsgeschwindigkeit noch die Form der Gravitationsströme beeinflussen. Infolge dieses Mangels an Abhängigkeit von den Bedingungen an der Front liefert die Theorie nur dann richtige Ergebnisse, wenn die Reynoldszahl niedrig und die Bondzahl hoch ist. Diese Voraussetzungen liegen im hier betrachteten Fall vor, da die kinematische Viskosität sehr hoch ist und die Oberflächenspannung vernachlässigt wurde.

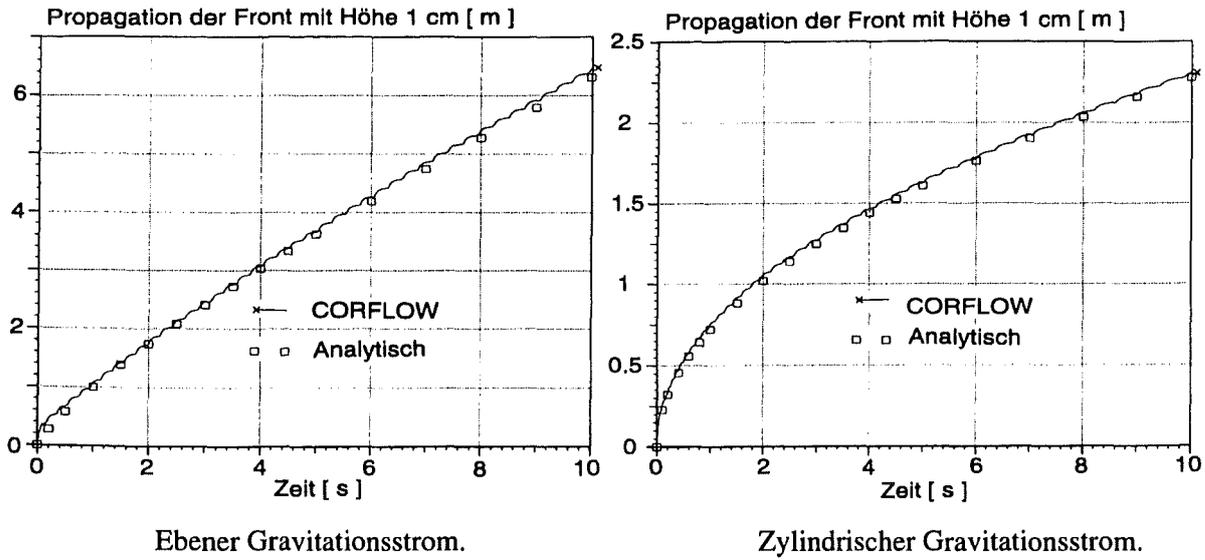
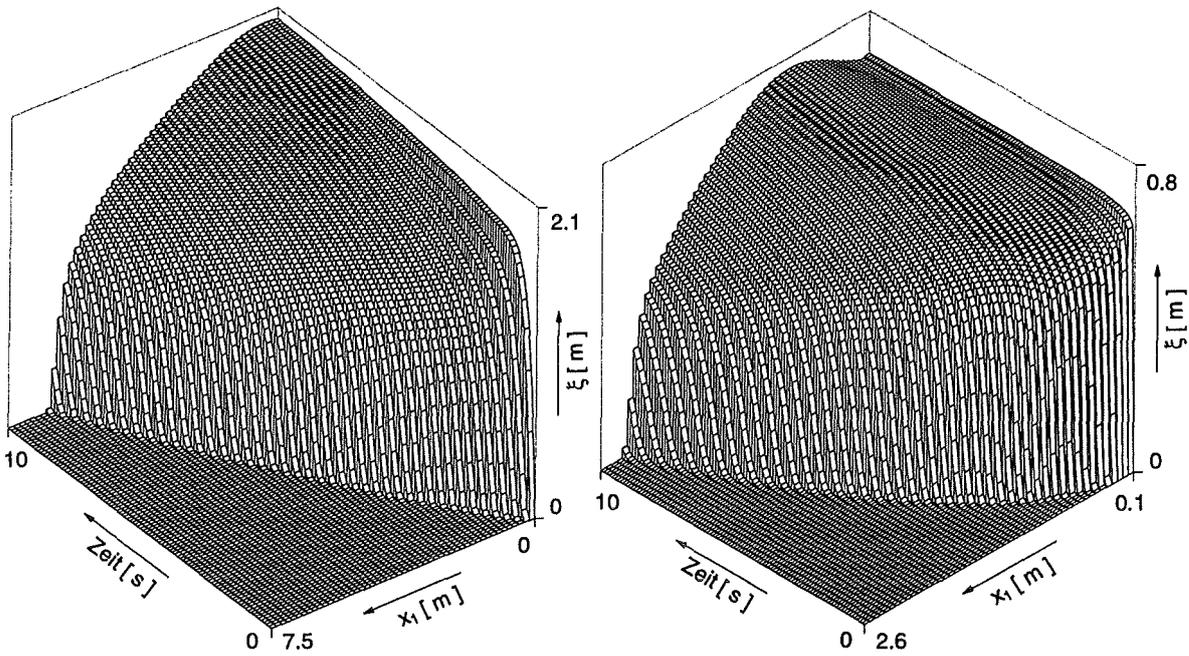
Folgende nicht in Huppert's Theorie auftretende Größen wurden den Rechnungen zugrundegelegt, wobei die ersten beiden physikalischen Ursprung haben und die folgenden die Diskretisierung auf Gittern mit 50x1x25 Maschen betreffen :

<u>Variable</u>	<u>SI-Einheit</u>	<u>Ebene Geometrie</u>	<u>Zylindrische Geometrie</u>
ρ	kg / m ³	1	1
μ	Pa s	$g / 3 = 3.27$	$g / 3 = 3.27$
ℓ_1	mm	150	50
ℓ_3	mm	100	100
Δt	ms	15	4

Tabelle 4.3-6 : In der Simulation der Huppert-Lösung verwendete Daten.

Die ungebräuchliche Kombination von Materialeigenschaften vereinfacht den analytischen Ausdruck von $x_{1\ell e}$ und reduziert t_1 . Da die Normalspannung an der freien Oberfläche in Huppert's Lösung nicht eingeht, rechnen wir ohne den viskosen Anteil der Normalspannungs-Bedingung.

Die Abbildungen 4.3-1 und 4.3-2 vergleichen die Profile der freien Oberfläche und die Frontausbreitung ebener und zylindrischer Ströme von Huppert's und numerischer Lösung. Da die Höhen des Fluids im Einströmbereich nur wenig von den Einströmhöhen abweichen, erkennt man, daß die Einströmhöhen geeignet gewählt wurden. Die 'schrittweise' Frontpropagation ist durch die grobe Berechnung der Frontposition aus der Oberfläche bedingt und keine Eigenart des Verfahrens. Es handelt sich um Kriechströmungen, bei denen die Reynoldszahl von der Größenordnung eins ist und die hydrodynamische Grenzschichtdicke der Fluidhöhe entspricht. Für den ebenen bzw. zylindrischen Fall beobachten wir Übereinstimmung zwischen Rechnung und analytischer Lösung für Problemzeiten größer als 1 s. Dies paßt zur Übergangszeit vom durch Trägheits- und Gravitationskräfte dominierten zum durch viskose und Gravitationskräfte dominierten Regime, die von der Größenordnung $t_1 = 0.067$ s bzw. $t_1 = 0.18$ s ist.



Ebener Gravitationsstrom.

Zylindrischer Gravitationsstrom.

Abb. 4.3-1 : Huppert-Lösung. Freie Oberfläche (oben) und Frontpropagation (unten).

4.4 Wärmeleitung in einem rechtwinkligen Parallelepiped

Um die Wärmeleitungsmodelle zu verifizieren, vergleichen wir anhand eines speziellen Beispiels die numerische mit einer analytischen Lösung. Dazu betrachten wir ein rechtwinkliges Parallelepiped der Länge a_1 , Breite a_2 und Höhe a_3 mit Anfangstemperatur T_0 . Drei Oberflächen des Epipeds ($x_1 = a_1$, $x_2 = a_2$ und $x_3 = a_3$) sind isotherm mit Temperatur T_b für $t > 0$, die drei anderen Oberflächen adiabatisch. Dieses und ähnliche Probleme werden von Kakac und Yener [46], Carslaw und Jaeger [8] sowie Gebhart [31] untersucht. Die analytische Lösung ist

$$\frac{T(\bar{x}, t) - T_b}{T_0 - T_b} = \left(\frac{4}{\pi}\right)^3 \prod_{\gamma=1}^3 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)} \exp\left[-\left(\pi \frac{2n+1}{2a_\gamma}\right)^2 \chi t\right] \cos\left[\pi \frac{(2n+1)x_\gamma}{2a_\gamma}\right].$$

Mit den Problemdata

a_1	Ausdehnung des Epipeds in x_1 -Richtung	1 m,
a_2	Ausdehnung des Epipeds in x_2 -Richtung	0.3 m,
a_3	Ausdehnung des Epipeds in x_3 -Richtung	0.8 m,
T_0	Anfangstemperatur	100 K,
T_b	Randtemperatur	0 K,
χ	Wärmeleitfähigkeit	0.01 m^2/s

Tabelle 4.4-1 : Daten des simulierten Wärmeleitungsproblems.

und den Eigenschaften der Rechnung

ℓ_r	Maschenlänge in allen Richtungen	33 mm,
Δt	Zeitschritt	3 ms,

Tabelle 4.4-2 : Diskretisierung des simulierten Wärmeleitungsproblems.

erhalten wir auf einem Gitter mit $24 \times 9 \times 24$ Maschen folgendes Ergebnis :

Ort Nr.	Ort [m]	Zeit [s]	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
1	x = 0.05	Exakte Temperatur [K]	90.96	70.85	53.86	40.6	30.34	22.49	16.55	12.10
	y = 0.05	Errechnete Temperatur [K]	90.98	71.00	54.02	40.73	30.46	22.59	16.63	12.17
	z = 0.05	Fehler [%]	0.02	0.15	0.16	0.13	0.12	0.10	0.08	0.07
2	x = 0.75	Exakte Temperatur [K]	77.47	44.08	25.91	15.95	10.17	6.65	4.44	3.0
	y = 0.05	Errechnete Temperatur [K]	77.54	44.25	26.03	16.03	10.23	6.69	4.46	3.02
	z = 0.55	Fehler [%]	0.07	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.02	0.02
3	x = 0.85	Exakte Temperatur [K]	35.89	15.62	8.36	4.91	3.04	1.95	1.28	0.86
	y = 0.15	Errechnete Temperatur [K]	36.30	15.74	8.41	4.94	3.06	1.96	1.29	0.86
	z = 0.65	Fehler [%]	0.41	0.12	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
4	x = 0.95	Exakte Temperatur [K]	2.11	0.75	0.38	0.22	0.13	0.08	0.05	0.04
	y = 0.25	Errechnete Temperatur [K]	2.16	0.76	0.38	0.22	0.13	0.08	0.06	0.04
	z = 0.75	Fehler [%]	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00

Tabelle 4.4-3 : Vergleich von analytischer und numerischer Lösung des Wärmeleitungsproblems.

Der Fehler ist dabei definiert durch

$$\text{Fehler} := \frac{T_{\text{numerisch}} - T_{\text{analytisch}}}{T_0 - T_b}$$

Die Differenz von Anfangs- und Randtemperatur beträgt 100 K, somit ist der dimensionslose relative Fehler, bei der Angabe in Prozent, zahlenmäßig gleich dem absoluten Fehler in Kelvin.

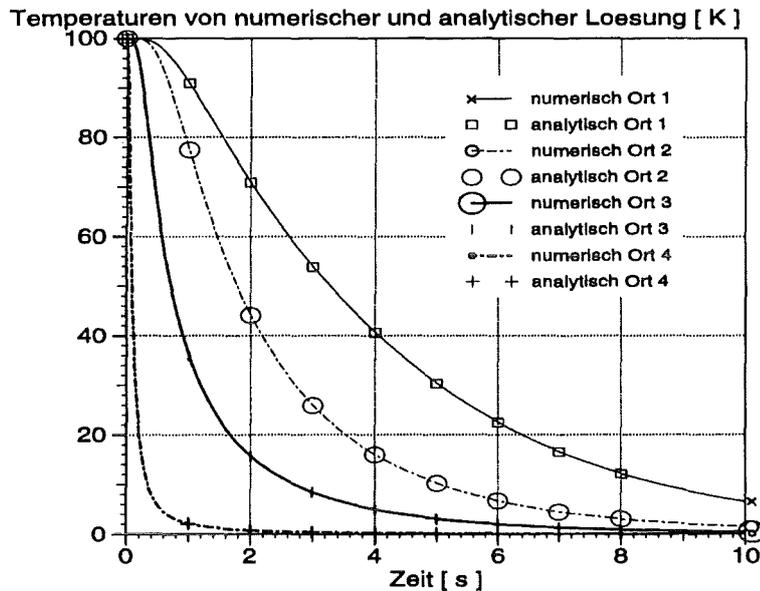


Abb. 4.4-1 : Wärmeleitung im Parallelepiped. Vergleich von numerischer und analytischer Lösung.

Die größten Fehler entstehen bei Temperaturen, die in der Mitte zwischen Anfangs- und Randwert liegen. Da der Fehler an allen betrachteten Orten kleiner als 0.5 % ist, liefert das Rechenergebnis eine gute Näherung des analytischen Ausdrucks. Die Genauigkeit der Rechnung kann durch Verfeinerung des Gitters weiter verbessert werden. Abb. 4.4-1 zeigt einen Vergleich der zeitlichen Temperaturvariation zwischen numerischer und analytischer Lösung an den gleichen Orten wie die Tabelle.

4.5 KATS-5 und -6 Thermit-Ausbreitungsexperimente

Nach der Überprüfung einzelner Modelle unseres Verfahrens analysieren wir zur Verifikation nun seine Verwendbarkeit zur Beschreibung des Ausbreitungsvorgangs in Experimenten mit Thermitschmelzen. Dazu betrachten wir die KATS-5 und KATS-6 Versuche, siehe Abschnitt 1.3.1 sowie Fieg et. al. [23] und Wittmaack [95]. Bei diesen handelt es sich um die Ausbreitung von infolge einer Thermitreaktion aufgeheiztem Al_2O_3 bzw. Fe auf trockenem, ebenem Substrat in Kanalform mit anschließender Erstarrung. Vorausrechnungen mit CORFLOW dienten zur Unterstützung der geometrischen Auslegung der Ausbreitungskanäle und der Anordnung der Thermolemente, die als Detektoren für die Frontpropagation und zur Temperaturmessung verwendet werden.

Nach Ablauf der Thermit-Reaktion werden Oxid- und Metallphase in separate Vorratsbehälter geleitet. Das Öffnen von Toren initiiert die Einströmung in die beiden Ausbreitungskanäle. Der Ausbreitungsvorgang wird durch Trägheits- und Gravitationskräfte dominiert. Die charakteristische Zeit für den Übergang des Ausbreitungsvorgangs eines konstanten Volumens vom durch Trägheits- und Gravitationskräfte beherrschten zum von Zähigkeits- und Gravitationskräften dominierten Strömungsbereich,

$$t \propto \left(\frac{V^4}{\ell_2^4 g^2 m^3} \right)^{\frac{1}{7}},$$

Huppert [42] 1982, ist von der Größenordnung 25 s für KATS-5, bzw. 60 s für KATS-6. In diesen Zeiten sind die Ausbreitungsprozesse bereits abgeschlossen.

Unser dreidimensionales Geometriemodell des Experiments umfaßt Vorratsbehälter, Tor und Ausbreitungskanal sowie die umgebenden Strukturen, siehe Abb. 4.5-1. Dabei berücksichtigen wir, daß das Tor eine geringere Breite als der Kanal besitzt. Auch die Reibung an Seitenwänden wird auf diese Weise erfaßt, die jedoch angesichts der kleinen hydrodynamischen Grenzschichtdicken (Oxid : 0.35 mm, Metall : 0.09 mm) im Vergleich zu den Kanalbreiten keinen großen Einfluß ausübt. Den Koordinatenursprung $x_1 = 0$ setzen wir an den Beginn des Kanals, das Tor öffnet zur Zeit $t = 0$.

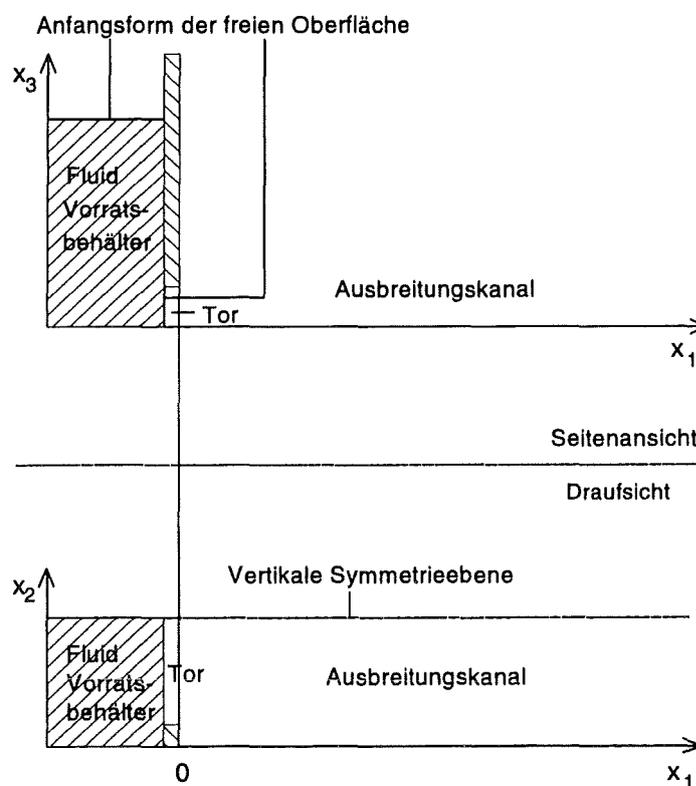


Abb. 4.5-1 : Geometriemodell für KATS-5 und KATS-6.

Folgende Daten charakterisieren das Problem :

<u>Variable</u>	<u>Einheit</u>	<u>KATS-5 Al₂O₃</u>	<u>KATS-6 Fe</u>
<u>Geometrie :</u>			
Kanalbreite	m	0.4	0.2
Torhöhe	m	0.05	0.05
Bodenfläche des Behälters	m ²	0.141	0.072
Einströmfläche	m ²	0.017	0.007
Fluidmasse	kg	146	165
<u>Anfangsbedingungen :</u>			
Fluidhöhe im Behälter	m	0.353	0.33
Fluidtemperatur	K	2393	1958
<u>Thermodynamische Randbedingungen :</u>			
Temperatur des Substrats	K	300	300
Umgebungstemperatur	K	300	300
für Strahlung			
Emissivität der Umgebung	-	0.94	0.94

Tabelle 4.5-1a : In der Simulation der KATS-5 und -6 Experimente verwendete Daten.

Unter Vernachlässigung der Keramikplatten an der Oberfläche modellieren wir das Substrat als Beton und verwenden folgende Material- sowie Diskretisierungsdaten :

<u>Materialeigenschaft</u>	<u>Einheit</u>	<u>Al₂O₃</u>	<u>Fe</u>	<u>Beton</u>
Dichte	10 ³ kg / m ³	3.7 - 2.5	7. - 6.9	2.4
Dynamische Viskosität (flüssig)	10 ⁻³ Pa s	100 - 60	6 - 4	-
Oberflächenspannungs-Koeffizient	N / m	0.7	1.4	-
Spezifische Wärme bei				
konstantem Druck	J / (kg K)	1406	800	500
Latente Wärme	MJ / kg	1.1	0.2	2.5
Wärmeleitfähigkeit	W / (m K)	1.5	65.	1.75
Liquidustemperatur	K	2198	1809	1573
Solidustemperatur	K	1850	1809	1273
Strahlungs-Emissivität	-	0.9	0.38	-
<u>Diskretisierung :</u>				
Maschenlänge in x ₁ -Richtung	mm	50 - 200	50 - 200	
Maschenlänge in x ₂ -Richtung	mm	30 - 35	30 - 35	

Diskretisierungseigenschaft	Einheit	Al ₂ O ₃	Fe
Maschenlänge in x ₃ -Richtung	mm	1 - 30	0.5 - 30
Zeitschritt	ms	5 - 30	5 - 20

Tabelle 4.5-1b : In der Simulation der KATS-5 und -6 Experimente verwendete Daten.

In den Rechnungen nicht benötigte Daten des Strukturmaterials Beton sind durch Striche gekennzeichnet. Die Emissivität der Eisenschmelze ist der Arbeit von Bober und Singer [3] entnommen. Da das Eisen an der Oberfläche oxidiert, Fromm und Gebhardt [30], was mit einem Anstieg der Emissivität auf ca. 0.8 verknüpft ist, stellt der Wert von 0.38 eine untere Schranke dar. Infolge der Wechselwirkung des Aluminiumoxids mit der Cordierit-Auskleidung des Vorratsbehälters verwenden wir für die flüssige Phase der Oxidschmelze Daten der dynamischen Viskosität des binären SiO₂-Al₂O₃-Gemischs von Elyutin et. al. [17], mit einem Molanteil des Siliziumoxids von 10 %.

Unter den Materialdaten ist insbesondere die dynamische Viskosität im Bereich zwischen Liquidus- und Solidustemperatur mit Unsicherheit behaftet, zu deren Modellierung wir die empirische Beziehung (2.4-4) von Thomas verwenden. Bei der Oxidschmelze liefern thermodynamische Gleichgewichtsrechnungen mit dem Rechenprogramm GEMINI, Steinbrück [81], Liquidus- und Solidustemperatur sowie den temperaturabhängigen Volumenanteil der festen Phase, der in der Thomas-Relation zugrundegelegt wird. Darum ist die Viskosität der oxidischen Mischschmelze mit temperaturabhängigen Daten vorgegeben.

Die Experimente sind durch folgende dimensionslose Zahlen charakterisiert :

Variable	KATS-5 Al ₂ O ₃	KATS-6 Fe
Reynolds	$3.3 * 10^3$	$5.6 * 10^4$
Froude	2 - 4	2 - 6
Bond	$2 * 10^6$	$4 * 10^6$
Prandtl	32	0.06

Tabelle 4.5-2 : Dimensionslose Zahlen der KATS-5 und -6 Experimente.

In der folgenden Tabelle fassen wir einige Ergebnisse unserer Rechnungen zusammen :

Variable	Einheit	KATS-5 Al ₂ O ₃	KATS-6 Fe
Zeit maximaler kinetischer Energie	s	1.3	1.7
Propagationszeit der Front zur Endposition	s	15	> 15

Variable	Einheit	KATS-5 Al ₂ O ₃	KATS-6 Fe
Beginn der Erstarrung	s	0.3	0.5
Vollständige Erstarrung einzelner Maschen	s	> 16	1.4
Endposition der Front	m	7	> 9
Maximale Höhe des Fluids zur Zeit t = 15 s	m	0.0185	0.013
Minimale hydrodynamische Grenzschichtdicke	mm	0.35	0.09
Minimale thermodynamische Grenzschichtdicke	mm	0.11	0.2
Maximale Fluidtemperatur zur Zeit t = 15 s	K	2220	1825
Minimale Fluidtemperatur zur Zeit t = 15 s	K	1880	1760

Tabelle 4.5-3 : Ergebnisse der Simulation der KATS-5 und -6 Experimente.

Die minimalen hydro- und thermodynamischen laminaren Grenzschichtdicken werden dabei mit folgenden Relationen abgeschätzt :

$$\delta_h \propto (\xi - \xi_b) \text{Re}^{-\frac{1}{2}} \quad ; \quad \delta_t \propto \delta_h \text{Pr}^{-\frac{1}{3}}, \quad (4.5-1)$$

Landau und Lifshitz [51] 1989.

Für die KATS-5 und -6 Tests, die wir auf Gittern mit 50x6x25 und 50x3x25 Maschen simulieren, zeigt Abb. 4.5-2 die freie Oberfläche sowie den Vergleich der Frontpropagation von Rechnung, Thermoelement- und Videofilmdaten, sofern verfügbar, in Kanalmitte. Die Darstellungen der Höhe der freien Oberfläche beschränken sich auf Werte kleiner als die Torhöhe von 0.05 m, darum sind die anfänglich großen Höhen im Fluidbehälter nicht sichtbar. Man erkennt den zeitlichen Verlauf des Strömungsvorgangs aus dem Vorratsbehälter in den Ausbreitungskanal sowie die Propagation der Front.

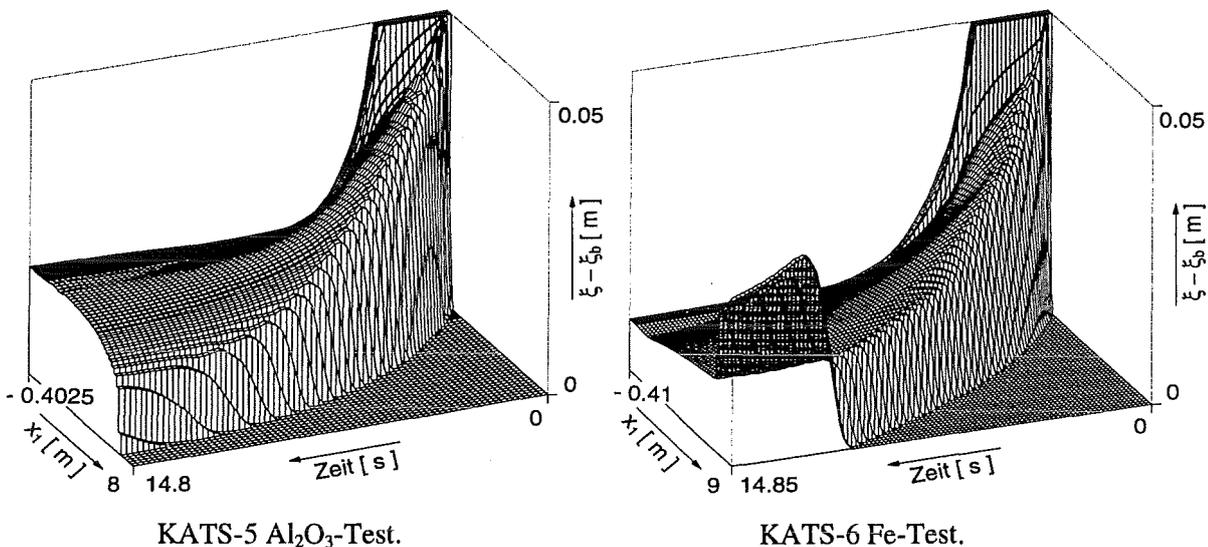


Abb. 4.5-2a : Freie Oberfläche.

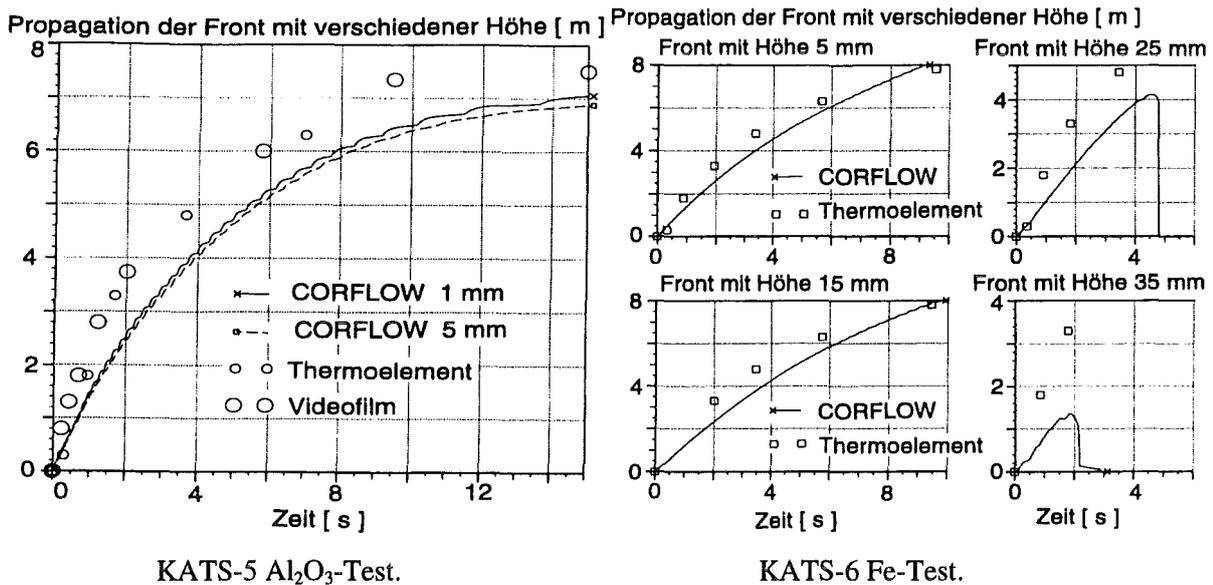


Abb. 4.5-2b : Frontpropagation.

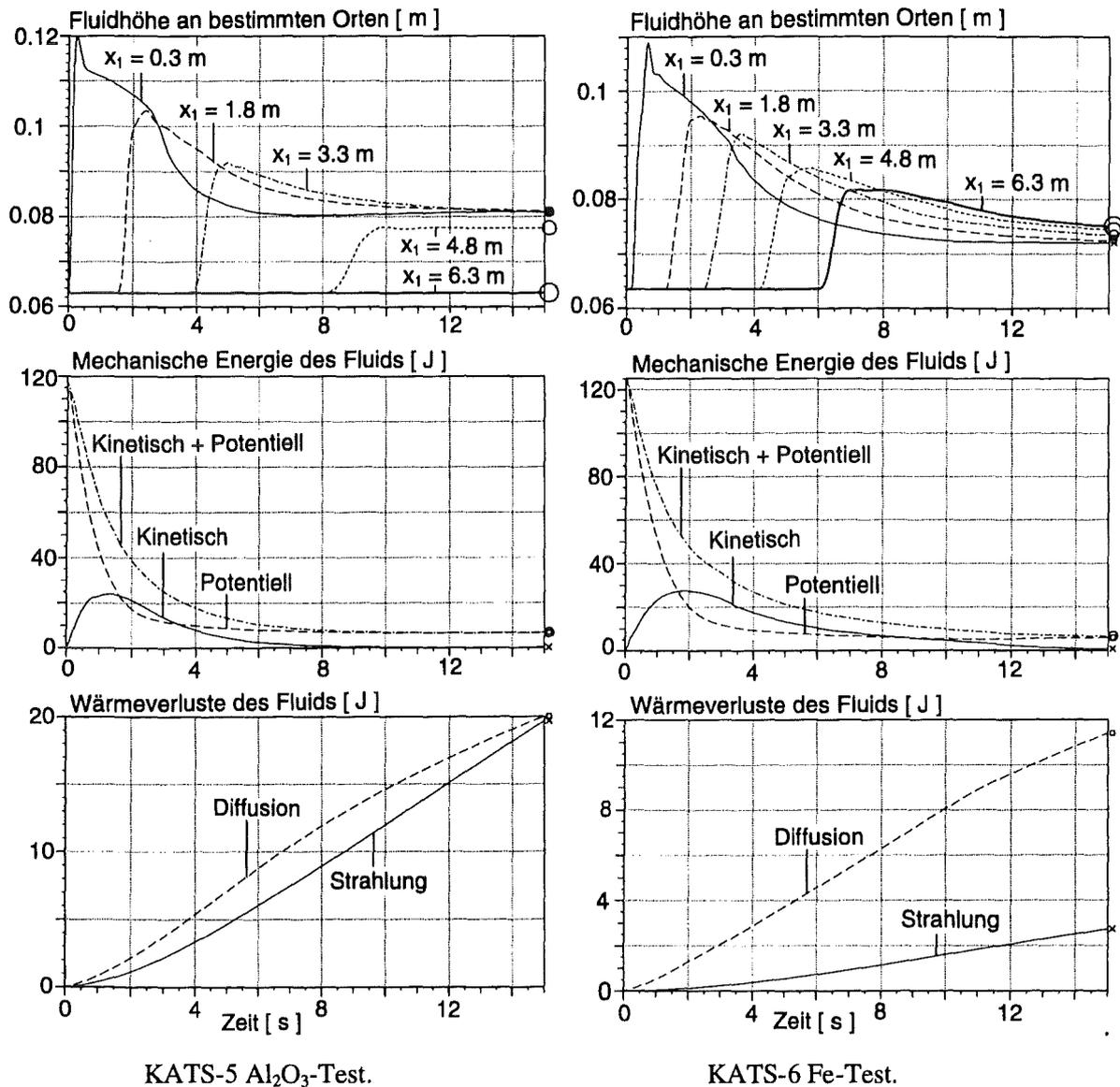
Bei anfänglicher Unterschätzung der Frontgeschwindigkeit (0 - 2 s) ergibt die Rechnung bei KATS-5 eine zu geringe gesamte Ausbreitungslänge. Bei KATS-6 unterschätzt die Rechnung die Frontgeschwindigkeit zu Beginn (0 - 4 s) und überschätzt sie anschließend, so daß die Endposition der Front das experimentelle Ergebnis von ca. 8.5 m übertrifft und nach ca. 11.5 s den Rand des Rechengitters bei 9 m erreicht. An den unteren, als Frontdetektoren verwendeten Thermoelementen stimmt das KATS-6-Rechenergebnis gut mit den experimentellen Daten überein, während die Frontpropagation an den oberen Thermoelementen unterschätzt wird. Die zeitliche Veränderung der Fluidhöhe an den Thermoelementpositionen zeigt Abb. 4.5-3.

Zudem sind in Abb. 4.5-3 die mechanische Energie und die mittels Wärmeleitung und Strahlung an die Umgebung abgegebene thermische Energie des Fluids dargestellt. Die Maximalwerte der kinetischen Energie betragen etwa 20 % der potentiellen Anfangsenergie, das Zeitintervall in dem die kinetische die potentielle Energie übersteigt ist bei KATS-5 kürzer als bei KATS-6.

Bei KATS-5 übertrifft die Energieübertragung durch Wärmeleitung diejenige durch Strahlung um ca. 15 %, während sie bei KATS-6 infolge der niedrigeren Anfangstemperatur und Emissivität sowie der hohen Wärmeleitfähigkeit des Eisens um etwa 300 % größer ist. Da das Geometriemodell nur eine der symmetrischen Kanalhälften darstellt, sind alle in den Abbildungen auftretenden extensiven Variablen um den Faktor 0.5 reduziert.

Am Ende der Rechnungen zur Zeit 15 s befindet sich das Fluid im Inneren noch in der flüssigen Phase, seine Maximaltemperatur liegt bei KATS-5 bzw. -6 noch um ca. 20 bzw. 15 K über der Liquidustemperatur, siehe Abb. 4.5-4. Darum tritt im berechneten Zeitintervall, das sich an den Meßdaten orientiert, keine vollständige Immobilisierung der Oberfläche des Fluids ein. Die Minimaltemperatur, die in substratnahen Maschen angenommen wird, bleibt bei KATS-5 oberhalb der Solidustemperatur, entsprechend einem maximalen Feststoffanteil von etwa 90 %. Bei KATS-6

treten dagegen bereits ab ca. 1.4 s vollständig erstarrte Maschen auf, erkenntlich am Ende der Phase konstanter Minimaltemperatur bei Solidustemperatur.



KATS-5 Al₂O₃-Test.

KATS-6 Fe-Test.

Abb. 4.5-3 : Fluidhöhe an den Thermoelementen, mechanische Energie des Fluids und Energietransfer an die Umgebung.

Abb. 4.5-4 zeigt auch die Aufheizung des Substrats am Beginn des Ausbreitungskanals. In Substratmaschen die Fluidmaschen direkt benachbart sind treten Temperaturen oberhalb der Liquidustemperatur des Betons auf. Man erkennt die Verzögerung der Aufheizung durch den Phasenübergang. Tiefer liegende Substratmaschen werden aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit des Betons kaum aufgeheizt.

Insgesamt liefern die Rechenergebnisse angesichts der Unsicherheit in den Materialdaten und der verwendeten numerischen Auflösung, die nicht fein genug ist um turbulente Strömungen zu beschreiben und die Grenzschichten aufzulösen, eine hinreichend realitätsnahe Simulation der experimentellen Abläufe.

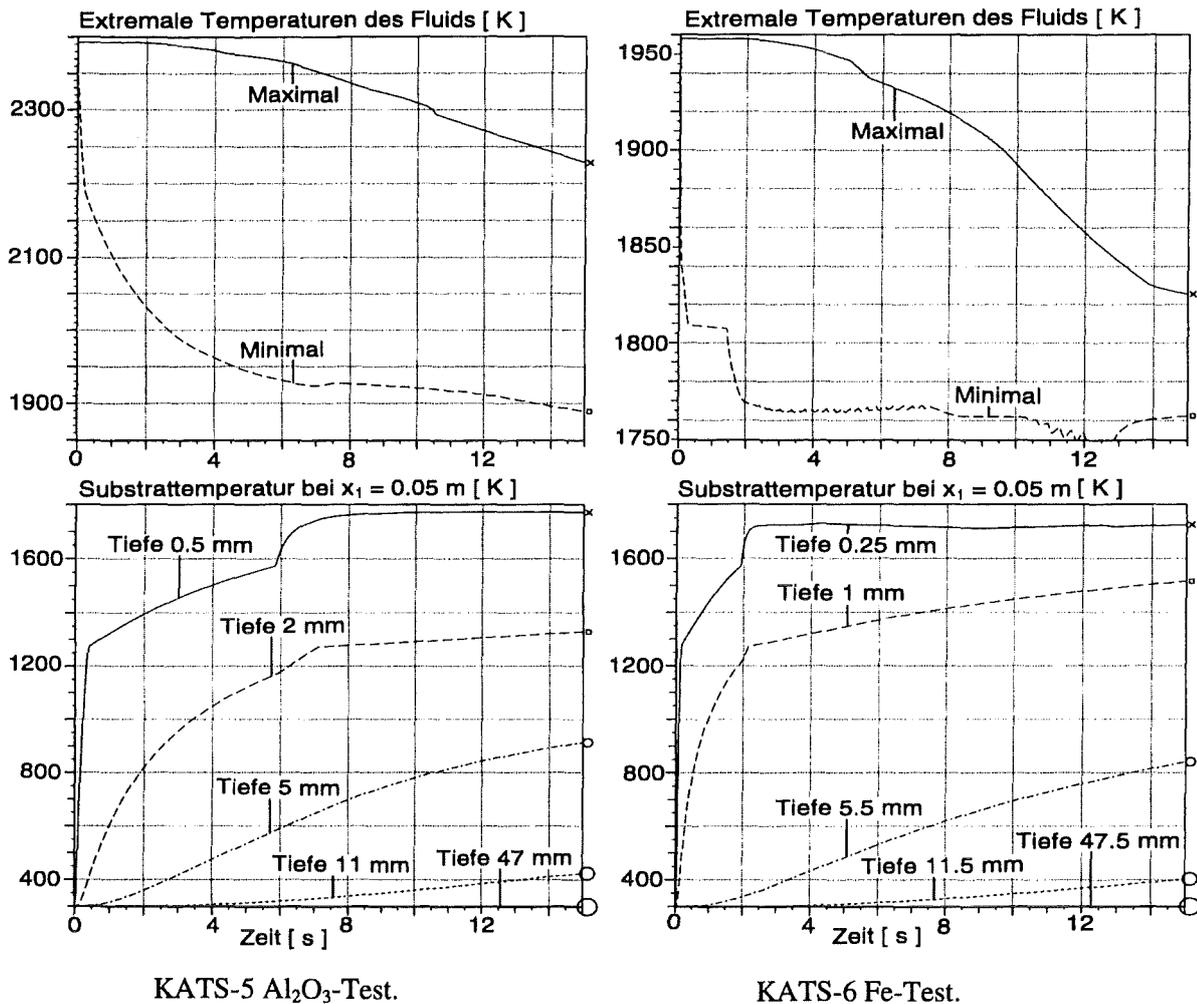


Abb. 4.5-4 : Extremale Fluidtemperaturen und Substrattemperaturen.

4.6 Corium-Rückhaltung in der Kaverne eines KKW's

Bei einem schweren Unfall in einem Kernkraftwerk versagt der Reaktordruckbehälter, und das sich dabei bildende Corium verlagert sich anschließend in die Kaverne, Hassmann, Hosemann und Peehs [39]. Corium besteht aus nicht mischbaren oxidischen und metallischen Konstituenten. Aufgrund seiner höheren Dichte geht man davon aus, daß sich das oxidische Corium in der Kaverne unterhalb der metallischen Phase anordnet. Darum befindet sich zunächst oxidisches Corium in Kontakt mit der Kaverne.

Bei Reaktoren mit Gußeisenkaverne, die mit Beton als Opfermaterial ausgekleidet ist, erodiert der Beton dann in etwa einer Stunde, wie man numerischen Analysen mit Hilfe des Rechenprogramms WECHSL, Foit, Reimann et. al. [28], entnimmt. Infolge der Corium-Beton-Wechselwirkung wird die Betonstruktur zerstört und das oxidische Corium mit Zersetzungsprodukten des Betons vermischt. Dabei entsteht eine glasartige Oxidschmelze mit einer Differenz von Liquidus- und Solidustemperatur von etwa 1150 K, die sich im betrachteten Temperaturbereich in teilweise erstarrtem Zustand befindet. Dies führt zu einer Inversion oxidischer und metallischer Coriumschichten, da die Dichte

des Oxids aufgrund der Betonzumischung geringer wird als die des Metalls. Dann befindet sich metallisches Corium in Kontakt mit der Gußeisenkaverne.

Nach der Rückhaltungsphase in der Kaverne sieht das Konzept die Ausbreitung und anschließende Stabilisierung der Kernschmelze vor, wobei die Nachzerfallsleistung hauptsächlich in eine Wasserüberdeckung abgeführt wird. Darum besitzt die Gußeisenkaverne eine Sollbruchstelle, die als Tor zum Ausbreitungsraum wirkt.

Die technische Aufgabenstellung besteht darin, eine konstruktive Auslegung von Kaverne und Tor zu finden, welche die Toröffnung zu vorgegebener Zeit sicherstellt. Dazu wird eine transiente Analyse der Wärmeübertragungsvorgänge im Corium und in den umgebenden Strukturen vorgenommen, die folgende physikalische Phänomene enthält :

- Strahlung des Coriums in die Umgebung,
- Wärmeleitung zwischen Corium und Kaverne sowie innerhalb der Kaverne,
- Nachzerfallsleistung des Coriums,
- konvektive und diffusive Wärmetübertragung im Corium.

Infolge der Nachzerfallsleistung heizt sich das Corium im Inneren auf, während es durch Wärmeübertragung an die Umgebung äußerlich abkühlt. Dadurch entsteht eine mechanisch instabile Konfiguration, die zu einer Naturkonvektionsströmung führt.

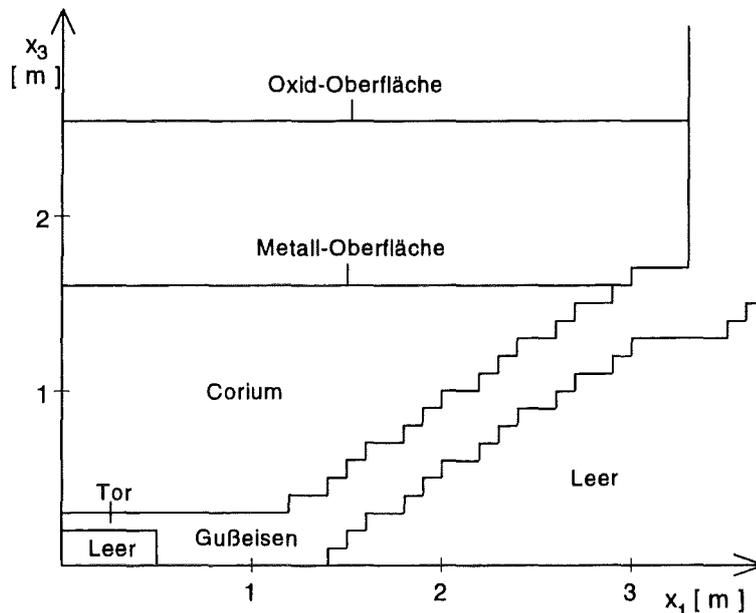


Abb. 4.6-1 : Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Geometriemodell.

Da das vorgestellte Verfahren nicht auf heterogene Fluide anwendbar ist, betrachten wir die Rückhaltung oxidischen und metallischen Coriums in der Gußeisenkaverne separat. Abb. 4.6-1 zeigt das zweidimensionale, zylindersymmetrische Geometriemodell. Man erkennt die Positionen der horizontalen Oberflächen von Oxid- bzw. Metallschmelze, die sich ergeben, wenn sich nur eine der

beiden Schmelzearten in der Kaverne befindet. Die geometrische Anordnung der Gußeisenkaverne und des Tores zum Ausbreitungsraum sind ebenfalls dargestellt.

Die Stoffeigenschaften von Corium sind nur näherungsweise bekannt. Bei oxidischem Corium mit Betonbeimischung beobachtet man nicht-Newtonsches Verhalten sowie Hysterese, Seiler und Ganzhorn [74]. Zur Simulation des Fließverhaltens oxidischen Coriums mit Betonbeimischung verwenden wir experimentelle Daten von Roche et. al. [69], die mit einem Bingham-Modell interpretiert werden können, Epstein [18]. Unter der Voraussetzung konstanter spezifischer Wärme erhält man aus (2.4-2) den Massenanteil der festen Phase im Intervall zwischen Liquidus- und Solidustemperatur :

$$x_{so} := \frac{T_{\ell s} - T}{T_{\ell s} - T_{ss}}$$

Setzt man zudem $\mu_{\ell i} = \mu(T_{\ell s})$, $\mu_{so} = \mu(T_{ss})$, so hängt die Gemischviskosität (2.4-3) nur von der Temperatur ab. Ausgehend von $\mu_{\ell i} = \mu(T_{\ell s})$, $\mu_{so} = \mu(T_{ss})$ bestimmen wir die Modellparameter μ_{so} und r in (2.4-3) für Temperaturen oberhalb von 1950 K durch Anpassung an die experimentellen Daten von Roche et. al.. Zur Modellierung der Gemischviskosität metallischen Coriums verwenden wir dagegen die empirische Beziehung (2.4-4) von Thomas.

Folgende Daten charakterisieren das Problem :

<u>Variable</u>	<u>Einheit</u>	<u>Oxid</u>	<u>Metall</u>
<u>Geometrie :</u>			
Masse	10^3 kg	250	120
Darin enthaltener Betonanteil	10^3 kg	70	0
Volumen	m^3	47.9	18
<u>Anfangsbedingungen :</u>			
Fluidhöhe in Kavernenmitte	m	2.24	1.3
Temperatur	K	2373	2373
<u>Materialeigenschaften :</u>			
Dichte	10^3 kg / m^3	5.3 - 5.1	7.0 - 6.4
Dynamische Viskosität (flüssig)	10^{-3} Pa s	70	4 - 2.5
Dynamische Viskosität (fest)	Pa s	10^3	-
Exponent der Gemischviskosität	-	4.5	-
Oberflächenspannungs-Koeffizient	N / m	0.45	0.45
Spezifische Wärme bei konstantem Druck	J / (kg K)	600 - 700	770 - 800

Variable	Einheit	Oxid	Metall
Latente Wärme	KJ / kg	405	289
Wärmeleitfähigkeit	W / (m K)	3. - 3.2	18.5
Liquidustemperatur	K	2573	1723
Solidustemperatur	K	1423	1723
Strahlungs-Emissivität	-	0.78	0.78
Nachzerfalls-Leistungsdichte	KW / m ³	564	456
<u>Thermodynamische Randbedingungen (für beide Schmelzearten) :</u>			
Wärmeleitfähigkeit des Betons	W / (m K)	1.75	
Temperatur des Betons	K	300	
Umgebungstemperatur für Strahlung	K	1700	
Strahlungs-Emissivität der Umgebung	-	0.94	
<u>Diskretisierung :</u>			
Maschenlänge in horizont. und vertikaler Richtung	mm	100	100
Zeitschritt	ms	10	14

Tabelle 4.6-1 : In der Simulation der Corium-Rückhaltung verwendete Daten.

Die Corium-Rückhaltung wird durch folgende dimensionslose Zahlen charakterisiert :

Variable	Oxid	Metall
Reynolds	164	$5.1 * 10^4$
Froude	$6 * 10^{-4}$	$8 * 10^{-4}$
Prandtl	147	0.11
Rayleigh	$1.6 * 10^{10}$	$1.8 * 10^{11}$

Tabelle 4.6-2 : Dimensionslose Zahlen der Corium-Rückhaltung.

In der folgenden Tabelle fassen wir einige Ergebnisse unserer Rechnungen zusammen :

Variable	Einheit	Oxid	Metall
Maximale Geschwindigkeit (t = 600 s)	m / s	0.11	0.09
Charakterist. Zeit zum Anklingen der Konvektion	s	100	50
Beginn des Erstarrungsprozesses	s	0	250
Zeit des vollständigen Erstarrrens einzelner Maschen	s	> 600	555

Variable	Einheit	Oxid	Metall
Minimale hydrodynamische Grenzschichtdicke	mm	16.	0.9
Minimale thermodynamische Grenzschichtdicke	mm	3.0	1.8
Maximale Fluidtemperatur (t = 600 s)	K	2359	2157
Minimale Fluidtemperatur (t = 600 s)	K	2315	1690
Maximale Tortemperatur (t = 600 s)	K	475	916
Wärmestromdichte Fluid-Seitenwand (t = 600 s)	KW / m ²	108	274
Wärmestromdichte Fluid - Tor (t = 600 s)	KW / m ²	107	271

Tabelle 4.6-3 : Ergebnisse der Simulation der Corium-Rückhaltung.

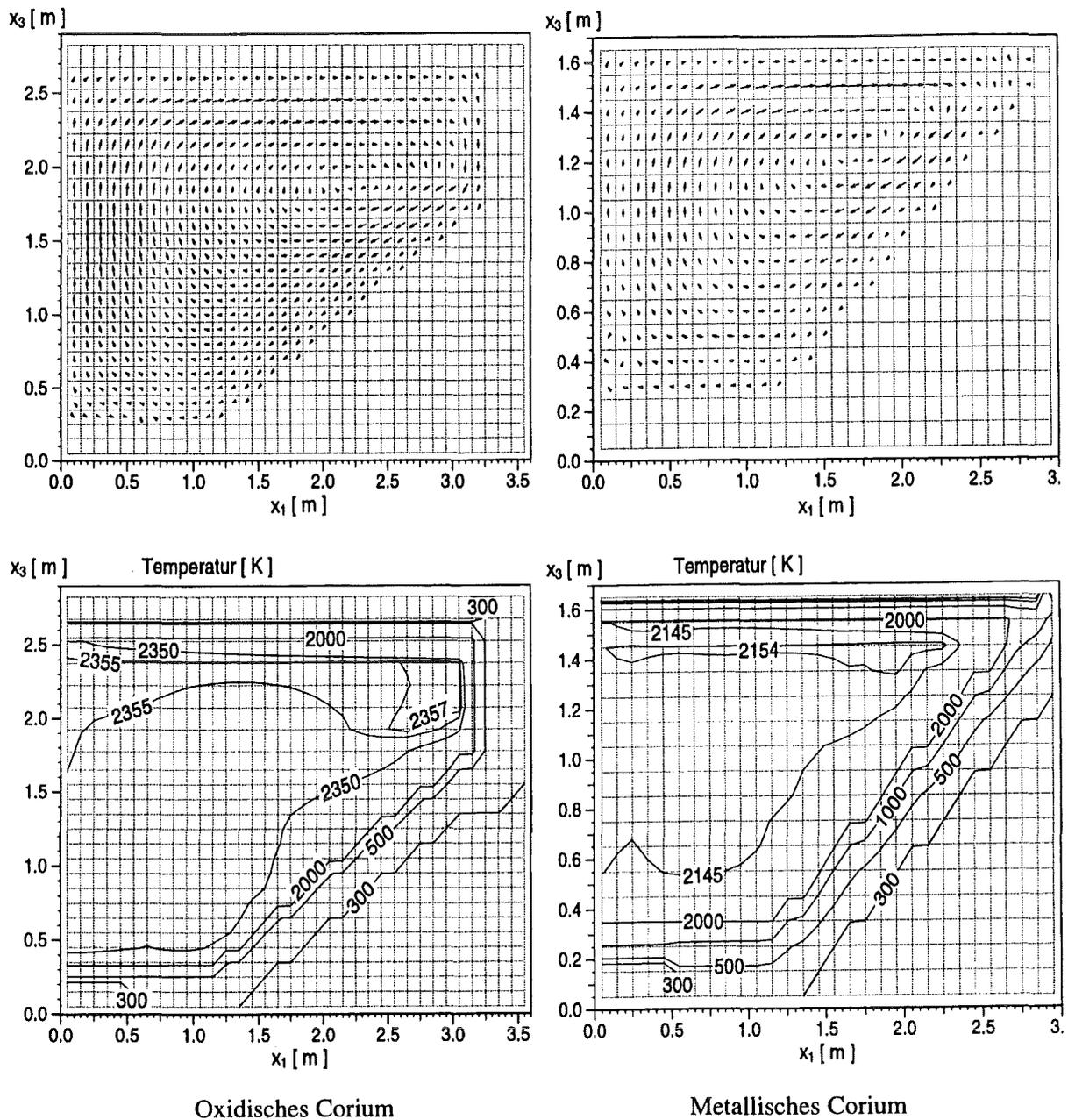


Abb. 4.6-2 : Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Geschwindigkeitsprofile und Isothermen der Naturkonvektion bei t = 600 s.

Die minimalen Grenzschichtdicken sind bei oxidischem Corium um einen Faktor von etwa 30, bei metallischem Corium um einen Faktor von etwa 100 kleiner als die Maschenausdehnungen. Damit ist die Feinheit des Gitters zur Auflösung des Konvektionsprofils in der Grenzschicht nicht ausreichend. Der Einfluß der Wärmeleitung in die Kaverne wird dadurch unter-, derjenige der Strahlung überschätzt. Die verwendeten Maschenlängen wurden in Anbetracht der großen Problemzeit gewählt um die Rechenzeit zu reduzieren. Um zu quantitativen Aussagen zu gelangen sind darum Rechnungen mit feineren Gittern erforderlich. Die in den Rechnungen verwendeten Gitter besitzen für oxidisches Corium $36 \times 1 \times 25$, für metallisches Corium $36 \times 1 \times 20$ Maschen.

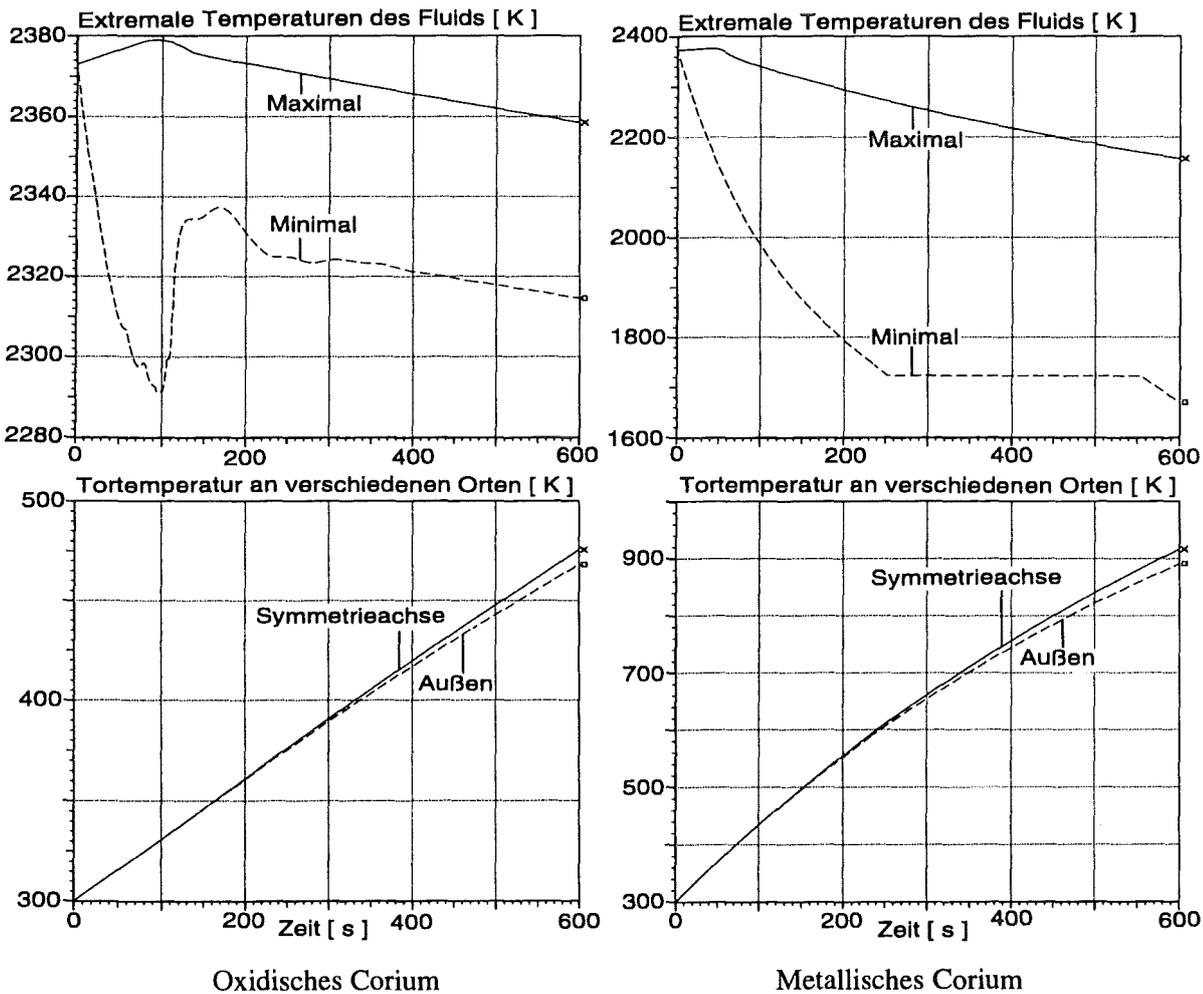


Abb. 4.6-3 : Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Temperaturen von Fluid und Tor zum Ausbreitungsraum.

Abb. 4.6-2 vergleicht Geschwindigkeitsprofile und Isothermen der Naturkonvektionsströmung zur Zeit 600 s. Man erkennt die abwärts gerichtete Strömung entlang der Gußeisenkaverne und die Aufwärtsströmung im Bereich der Symmetrieachse, die sich in Einklang mit dem Temperaturprofil befinden. Die entgegen der Konvektionswalze gerichteten Geschwindigkeiten im unteren Teil nahe der Symmetrieachse sind instationär. Isothermen sind für die Temperaturen 300, 500, 1000 (nur bei Metallschmelze) und 2000 K eingetragen. Diese Isothermen liegen bei oxidischem Corium infolge

der geringeren Wärmeleitfähigkeit dichter aneinander als bei metallischem Corium. Zudem sind folgende Isothermen nahe der Maximaltemperatur eingezeichnet: 2350, 2355 und 2357 K bei oxidischem 2145 und 2154 K bei metallischem Corium. Aufgrund der geringeren Wärmeleitfähigkeit ist das Temperaturniveau bei oxidischem Corium im Fluid insgesamt höher, im Strukturmaterial dagegen niedriger.

Während des Anklingvorgangs der Konvektion entsteht innerhalb des oxidischen Coriums eine Temperaturdifferenz von ca. 90 K, die sich anschließend auf etwa der Hälfte dieses Wertes stabilisiert, siehe Abb. 4.6-3. Im metallischen Corium steigt die Temperaturdifferenz dagegen wesentlich stärker und wird nur durch den Beginn des Erstarrungsvorgangs zeitweise reduziert.

Abb. 4.6-3 zeigt auch den Temperaturanstieg im Tor zum Ausbreitungsraum, der sich bei metallischem gegenüber oxidischem Corium mit beinahe vierfacher Geschwindigkeit vollzieht. Man erkennt auch, daß sich die Aufheizung des Tores gleichmäßig vollzieht, d. h. auf der Symmetrieachse nicht wesentlich schneller als am Übergang zur Kaverne.

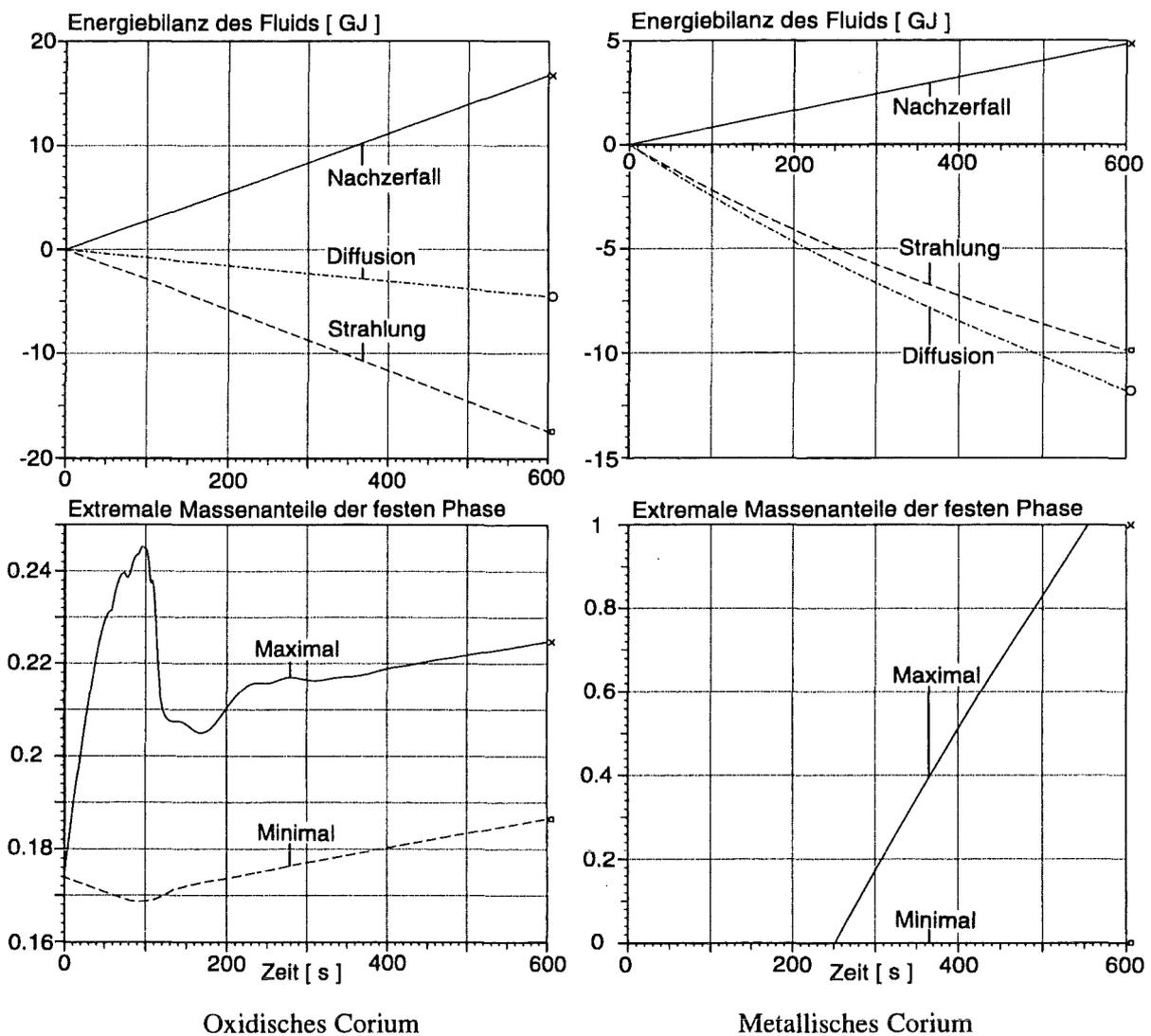


Abb. 4.6-4 : Corium-Rückhaltung in der Kaverne. Energiebilanz und Massenanteile der festen Phase.

Abb. 4.6-4 zeigt die von Nachzerfallsleistung, Wärmeleitung und Strahlung an die Umgebung in das Fluid eingebrachte thermische Energie. Aufgrund der größeren Masse und Nachzerfalls-Leistungsdichte ist die eingebrachte Nachzerfallsenergie bei oxidischem Corium höher als bei metallischem. Durch die größere Wärmeleitfähigkeit ist die Wärmeabfuhr in das umgebende Gußeisen bei metallischem Corium etwas größer als der Energietransfer durch Strahlung, während sie bei oxidischem Corium deutlich geringer ist, was auch langsamere Aufheizung des Tores bewirkt.

Abb. 4.6-4 vergleicht auch das Erstarrungsverhalten der beiden untersuchten Coriumsorten. Infolge der großen Differenz von Liquidus- und Solidustemperatur von 1150 K ist bei oxidischem Corium der Massenanteil der festen Phase nahezu konstant ca. 0,2, entsprechend einer dynamischen Viskosität von etwa 0,78 Pa s. Bei metallischem Corium sind Liquidus- und Solidustemperatur identisch, so daß beim Erreichen der Phasenübergangstemperatur der Anteil der festen Phase rasch anwächst und die ersten Maschen nach 555 s vollständig erstarrt sind.

4.7 Coriumströmung in den Ausbreitungsraum eines KKW's

Die Strömung des Coriums in den Ausbreitungsraum schließt sich an die im vorigen Abschnitt behandelten Prozesse an. Hier betrachten wir allerdings eine Kaverne, die mit dem Opfermaterial Beton ausgekleidet ist. Dabei erodiert die heiße Schmelze nach dem Versagen des Reaktordruckbehälters das Opfermaterial, wobei zusätzliche Oxidschmelze (Schlacke) entsteht. Die Veränderung der Materialeigenschaften der Schmelze bei diesem Vorgang ist erwünscht. Das Versagen eines metallischen Tores am Boden der Kaverne öffnet einen Kanal zum Ausbreitungsraum und leitet den Ausbreitungsvorgang ein.

In unserer Studie nehmen wir an, daß das Corium während des gesamten Ausbreitungsvorgangs als Emulsion vorliegt, bei der die Oxidschmelze, inklusive Schlacke, das metallische Corium einbettet. Diese Annahme ist durch die intensive Durchmischung während der Wechselwirkung der Schmelze mit dem Opferstoff und durch die Dynamik des Ausbreitungsprozesses motiviert. Zudem wird sie durch erfolgreiche Simulation des dreidimensionalen COMAS EU-4 Kernschmelze-Ausbreitungsversuchs mit CORFLOW gestützt, bei der die Annahme ebenfalls verwendet wurde.

Abb. 4.7-1 zeigt das dreidimensionale Geometriemodell, welches Kaverne, Kanal und Ausbreitungsraum simuliert. Da der Reaktor in der x_1 - x_3 -Ebene bei $x_2 = 0$ symmetrisch ist, umfaßt das Modell nur eine Geometriehälfte, um Speicherplatz und Rechenzeit einzusparen. Um den Anfangszustand der über einem leeren Kanal befindlichen mit Fluid gefüllten Kaverne mit einer Höhenfunktion beschreiben zu können, verwendet das Modell eine zweite, nur im Bereich der Kaverne bei $x_2 = 0,6$ m existierende Symmetrieebene, die vom Tor unterbrochen wird. Abb. 4.7-1 zeigt den Anfangszustand in einer Seitenansicht aus der Perspektive der Symmetrieebene und einer Draufsicht in der vertikalen Position des Tores.

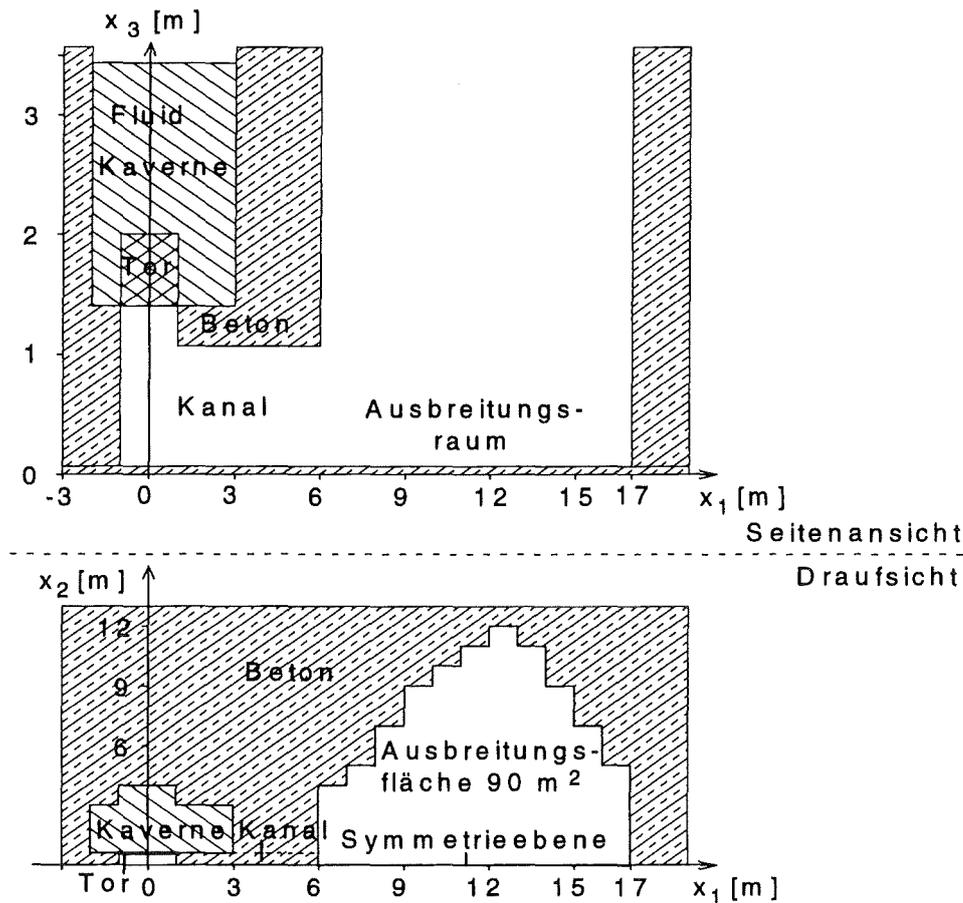


Abb. 4.7-1: Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Geometriemodell.

Das Modell enthält folgende Vereinfachungen der Reaktorbedingungen :

- Neigung von Kavernenboden und Kanal vernachlässigt.
- Näherung der runden vertikalen Wände von Kaverne und Ausbreitungsraum durch Stufen.

Zudem ist das Tor im Modell infolge der Modellierung der freien Oberfläche durch Höhenfunktionen vertikal angeordnet. Beim Reaktor ist das Tor am Kavernenboden horizontal. Dadurch reduziert sich im Modell die effektive Strömungsfläche des Tores, wenn der Füllstand in der Kaverne kleiner als die Torhöhe wird. Auch bewirkt das Modell eine leichte seitliche Ablenkung der Strömung. Alle Vereinfachungen des Geometriemodells sind konservativ in Bezug auf die Schmelzpropagation, da sie die mechanische Energie des Fluids reduzieren.

Infolge der komplexen Geometrie ist die Klassifizierung der Strömungsbereiche mittels der Relationen von Huppert [42] 1982 bzw. Didden und Maxworthy [14] nur näherungsweise möglich. Für die isotherme, zylindersymmetrische Ausbreitung eines konstanten Volumens bzw. Volumenstroms von Corium, mit einer Temperatur von 2400 K, ergeben sich charakteristische Zeiten für den Übergang vom durch Trägheits- und Gravitationskräfte zum durch Zähigkeits- und Gravitationskräfte dominierten Bereich in der Größenordnung von 20 bis 30 s. In dieser Zeit ist der Ausbreitungsprozeß bereits abgeschlossen, der Vorgang ist demnach durch Trägheits- und Gravitationskräfte beherrscht.

Folgende Daten charakterisieren das Problem, wobei Striche anstatt Betondaten in den Berechnungen nicht benötigte Größen kennzeichnen :

<u>Variable</u>	<u>Einheit</u>	<u>Corium</u>	<u>Beton</u>
<u>Geometrie :</u>			
Masse	10^3 kg	376.39	-
Volumen	m^3	59.03	-
<u>Anfangsbedingungen :</u>			
Fluidhöhe über Kavernenboden	m	2.021	-
Temperatur	K	2400 - 2600	300
<u>Materialeigenschaften :</u>			
Dichte	10^3 kg / m^3	6.6 - 6.65	2.4
Dynamische Viskosität (flüssig)	10^{-3} Pa s	90 - 8	-
Dynamische Viskosität (fest)	Pa s	10^6	-
Oberflächenspannungs-Koeffizient	N / m	0.45	-
Spezifische Wärme bei konstantem Druck	J / (kg K)	737	500
Latente Wärme	MJ / kg	1.065	2.5
Wärmeleitfähigkeit	W / (m K)	7.89	1.75
Liquidustemperatur	K	2573	1573
Solidustemperatur	K	1403	1273
Strahlungs-Emissivität	-	0.78	0.94
Nachzerfalls-Leistungsdichte	KW / m^3	547	0
<u>Diskretisierung :</u>		<u>grob</u>	<u>fein</u>
Maschenlänge in x_1 -Richtung (horizontal)	mm	1000	500
Maschenlänge in x_2 -Richtung (horizontal)	mm	300 - 1000	175 - 1000
Maschenlänge in x_3 -Richtung (vertikal)	mm	5 - 800	5 - 800
Zeitschritt	ms	8 - 80	4 - 70

Tabelle 4.7-1 : In der Simulation der Coriumausbreitung verwendete Daten.

Auf die Darstellung der Bestimmung der Materialeigenschaften der einzelnen Schmelzphasen verzichten wir. Dichte, dynamische Viskosität und Wärmeleitfähigkeit der Emulsion werden mittels volumetrischer linearer Mittelung der Materialeigenschaften der einzelnen Phasen bestimmt. Bei der Berechnung der dynamischen Viskosität verwenden wir das Gemischviskositätsmodell von Thomas (2.4-5), mit $x_{\text{soS}} = 0.5$. Die Bestimmung der spezifischen Wärme erfolgt massengemittelt.

Die diskreten Phasenübergänge erfolgen in Metall- und Oxidphase der Emulsion separat. Der Phasenübergang des Metalls findet zwischen 1722 und 1723 K statt. Im Oxid, welches aus Bestandteilen mit recht unterschiedlichen Eigenschaften zusammengesetzt ist, modellieren wir den

Phasenübergang als linear über das Intervall zwischen Solidus- und Liquidustemperatur verteilt, siehe Abb. 4.7-2.

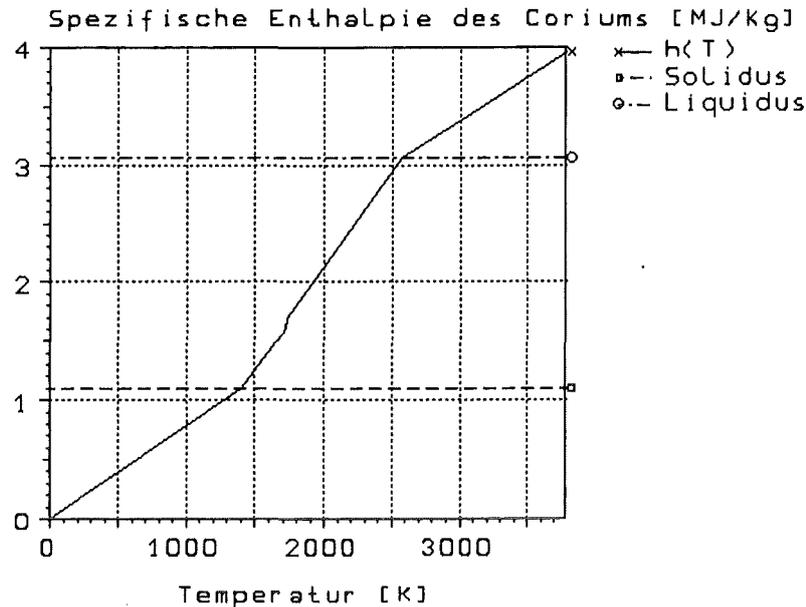


Abb. 4.7-2: Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Spezifische Enthalpie der Coriumemulsion.

Zusätzlich zu den Referenzbedingungen (Basisfall) untersuchen wir, ob reduzierte Werte von Anfangstemperatur oder Torfläche die Schmelzeausbreitung behindern. Zudem wird der Einfluß einer feineren horizontalen Diskretisierung auf das Rechenergebnis studiert. Tabelle 4.7-2 vergleicht die Anfangs- und Randbedingungen sowie einige Rechenergebnisse :

Variable	Einheit	Kleines T_0	Kleines Tor	Basisfall	Feines Gitter
Anfangstemperatur des Fluids	K	2400	2600	2600	2600
Fläche des Tores	m ²	2.4	0.24	2.4	2.4
Propagationszeit der Front zur Außenwand des Ausbreitungsraums	s	3.9	7.3	3.7	4.25
Zeit maximaler kinetischer Energie	s	6	13.7	5.5	5.4
Zeit vollständiger Bedeckung der Ausbreitungsfläche	s	7.3	13	6.7	6.6
Maximale Geschwindigkeit in x_1 -Richtung	m/s	7.9	8.4	8.04	7.5

Tabelle 4.7-2: Vergleich von Anfangs- und Randbedingungen sowie einiger Rechenergebnisse.

Man entnimmt der Tabelle, daß die Ausbreitungsfläche in allen betrachteten Fällen in weniger als 15 s von Corium bedeckt ist. Weiterhin zeigen die Rechnungen, daß sich in jedem Fall, nach der Dämpfung von Gravitationswellen, in weniger als einer Minute eine annähernd homogene Schichthöhe des Coriums im Ausbreitungsraum einstellt.

Wie in der Tabelle ersichtlich, beeinflusst die Reduzierung der Anfangstemperatur um 200 K die Schmelzpropagation kaum. Am Ende der betrachteten Problemzeit von 60 s betragen die extremalen Coriumtemperaturen bei der Rechnung mit niedriger Anfangstemperatur noch 2385 bzw. 2115 K, und liegen damit deutlich oberhalb der Temperatur, bei der die Viskosität sehr hoch wird (etwa 1960 K).

Dagegen zeigt Tabelle 4.7-2, daß eine um 90 % reduzierte Torfläche eine spürbare Verzögerung des Ausbreitungsvorgangs bewirkt. Die erforderliche Zeit zum Erreichen der äußeren Wand und zum vollständigen Bedecken der Ausbreitungsfläche verdoppeln sich gegenüber dem Basisfall beinahe. Nach 60 s Problemzeit beträgt die Fluidhöhe oberhalb des Kavernenbodens noch 41 cm, gegenüber 1 cm in den anderen Fällen. Darum dauert der Ausbreitungsprozeß bei der kleinen Torfläche länger als eine Minute, jedoch ist die gesamte Ausbreitungsfläche nach 60 s vollständig mit Corium bedeckt, bei einer Schichthöhe von 22.7 bis 29.5 cm.

Abb. 4.7-3 zeigt, daß die kinetische Energie des Fluids im Basisfall (100 %) ein ausgeprägtes Maximum bei 5.6 s aufweist, während bei kleiner Torfläche (10 %) eine vergleichsweise schwache Zeitabhängigkeit besteht. Da das Geometriemodell nur eine der symmetrische Hälften umfaßt, sind die kinetische Energie und alle im Folgenden erwähnten extensiven Variablen um den Faktor 0.5 reduziert. Die Abbildung enthält zudem einen Vergleich der Fluidhöhe über der Ausbreitungsfläche auf der Symmetrieebene an der Außenwand des Ausbreitungsraums für beide Torflächen. Die Fluidhöhe oszilliert bei voller Torfläche, zeigt jedoch einen quasi-stationären Anstieg bei reduzierter Fläche.

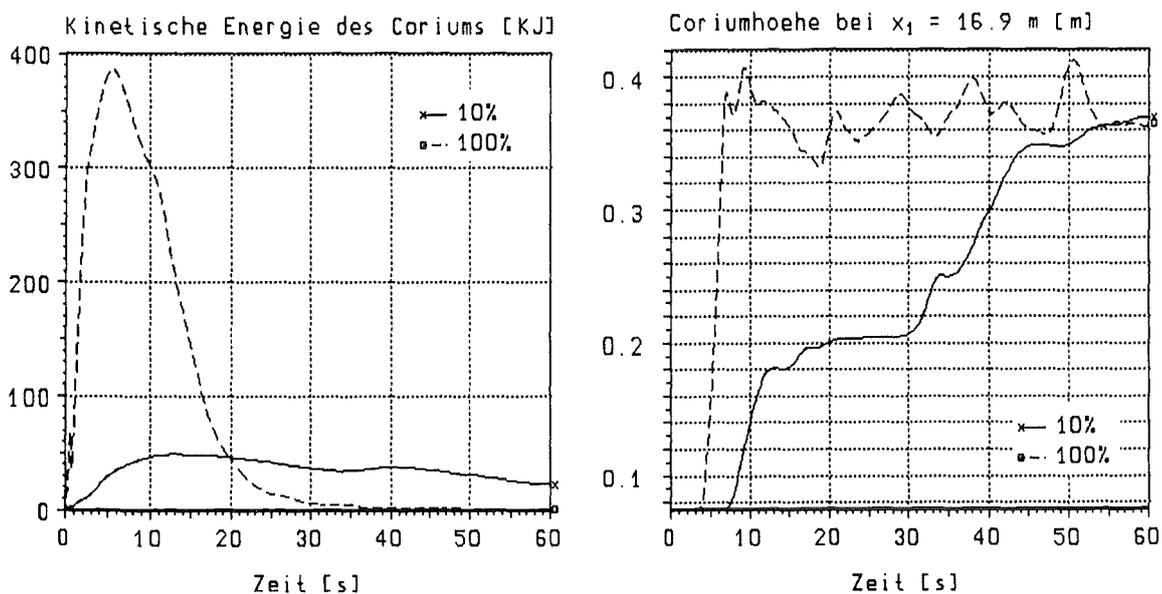
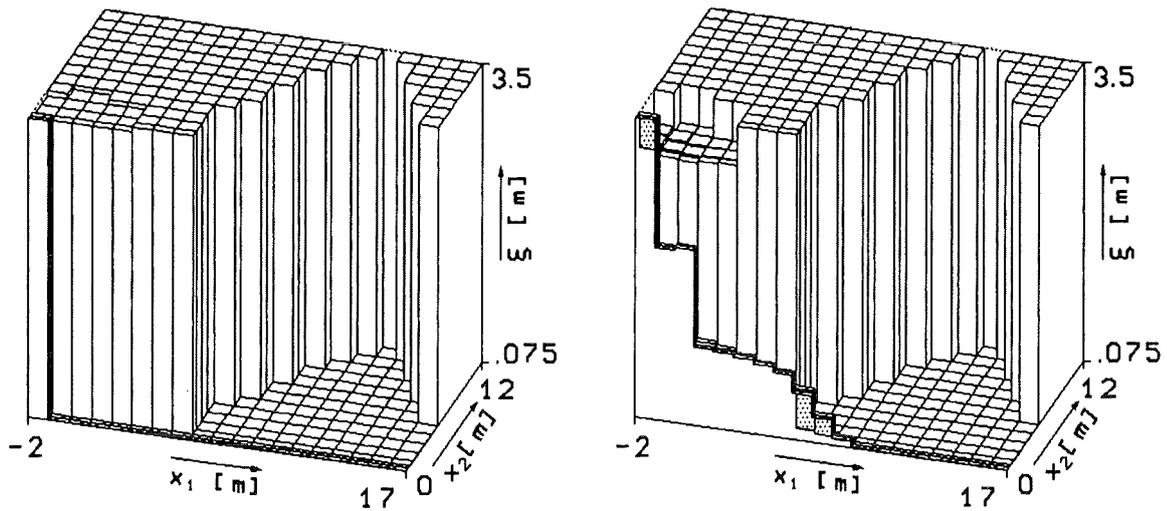
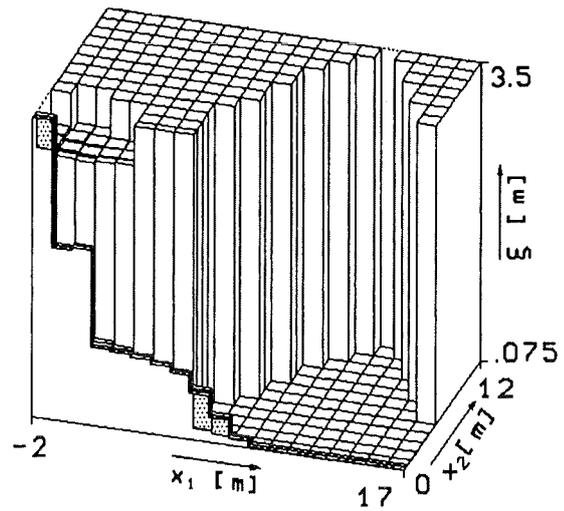


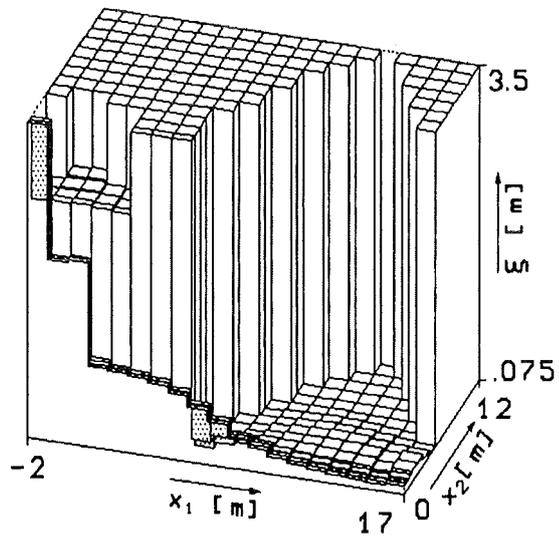
Abb. 4.7-3 : Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Kinetische Energie und Höhe auf der Symmetrieebene an der Außenwand des Ausbreitungsraums des Coriums bei verschiedener Torfläche.



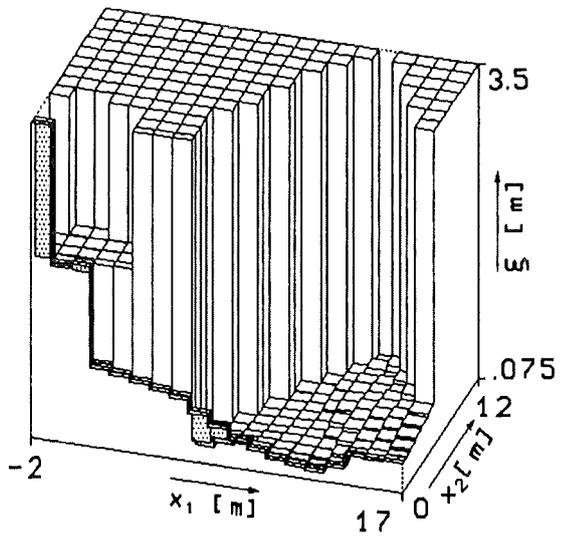
Zeit = 0 s



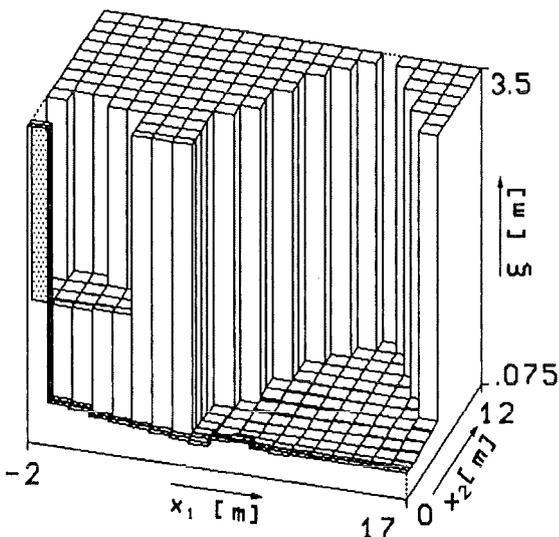
Zeit = 2 s



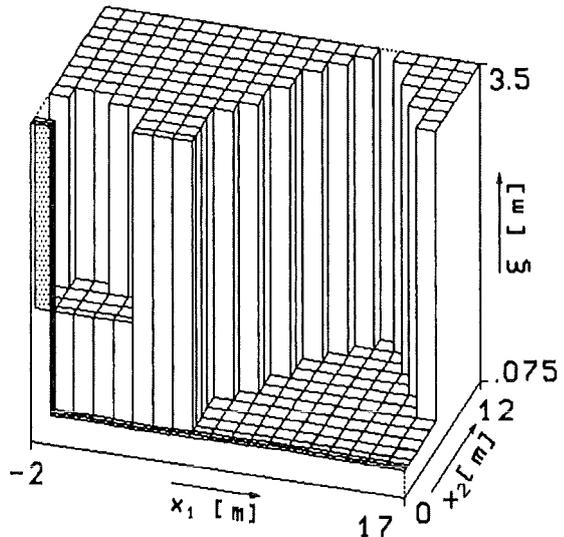
Zeit = 5 s



Zeit = 10 s

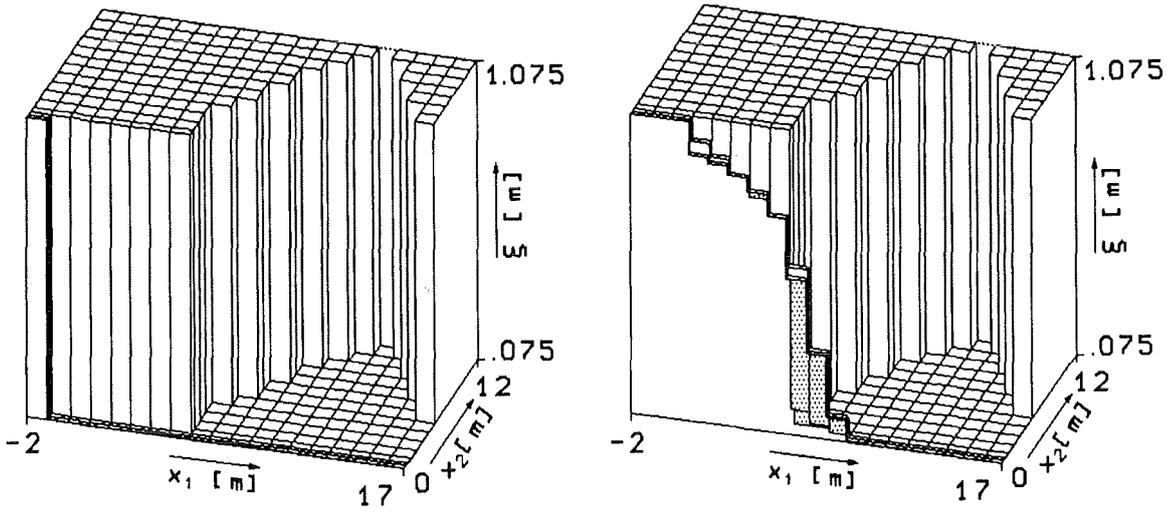


Zeit = 20 s

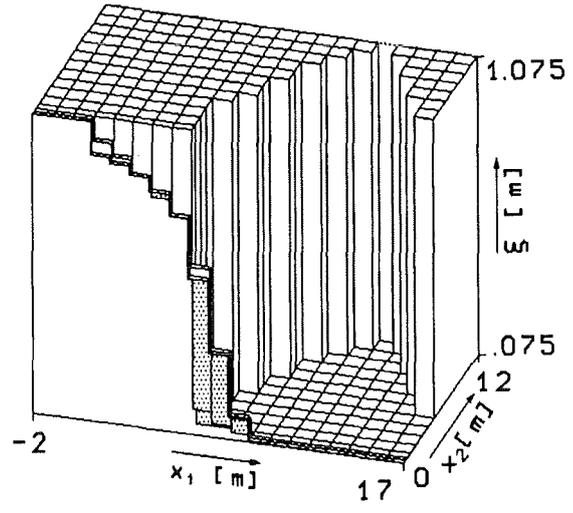


Zeit = 60 s

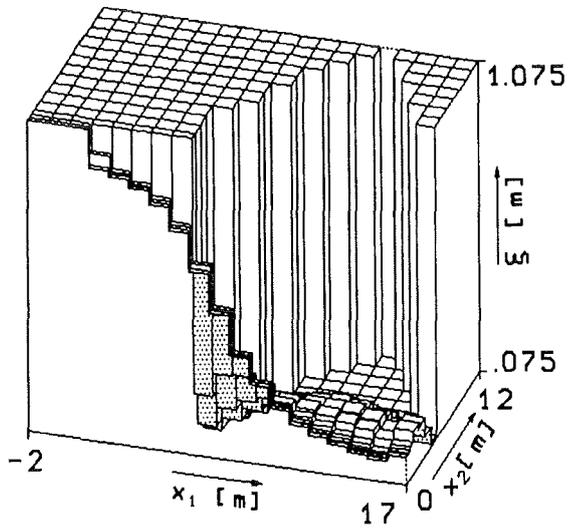
Abb. 4.7-4a : Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Dynamik der freien Oberfläche.



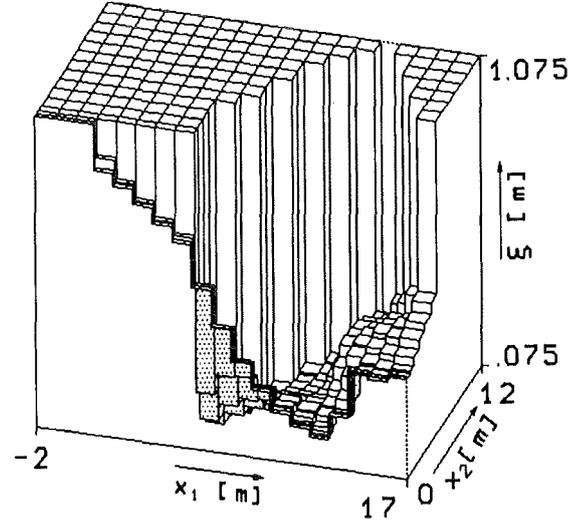
Zeit = 0 s



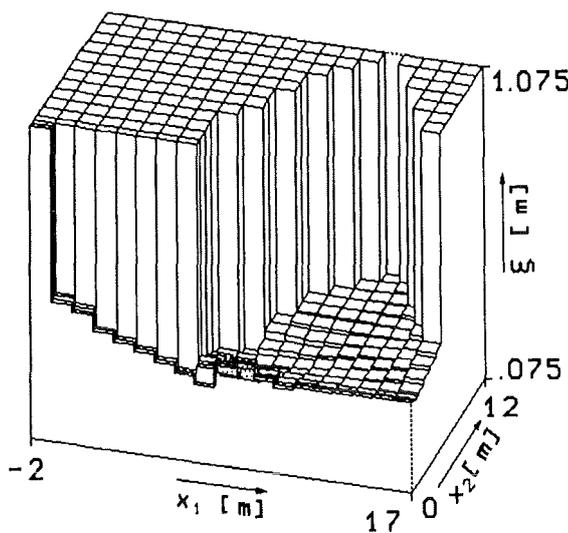
Zeit = 2 s



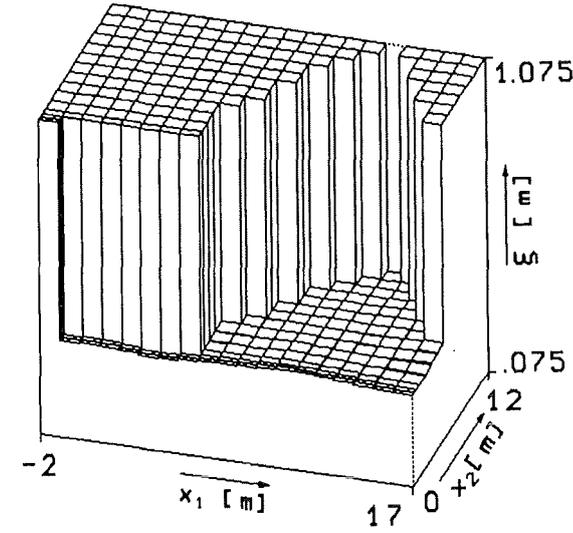
Zeit = 5 s



Zeit = 10 s



Zeit = 20 s



Zeit = 60 s

Abb. 4.7-4b: Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Dynamik der freien Oberfläche.

Um einen Eindruck von der Dynamik des Prozesses zu vermitteln, zeigt Abb. 4.7-4 für den Basisfall eine Sequenz freier Oberflächen zu verschiedener Zeit. Wie in Abb. 4.7-1 ist der Blick auf die vertikale Symmetrieebene des Geometriemodells gerichtet. Strukturen oberhalb der freien Oberfläche wie die Betonstruktur am oberen Ende des Kanals sind nicht dargestellt. Abb. 4.7-4a zeigt das gesamte Geometriemodell, während die Höhenskala in Abb. 4.7-4b bei der Betonstruktur am oberen Ende des horizontalen Teils des Kanals endet, um die Vorgänge im Ausbreitungsraum detaillierter zu erfassen. Das untere Ende der Höhenskala ist in beiden Fällen die Oberfläche des Substrats.

Durch das Tor gelangt die Schmelze von der Kaverne in den Kanal. Nachdem der Kanal durchströmt ist, gelangt das Corium in den Ausbreitungsraum und erreicht dort die Außenwand, bevor die Seitenwände benetzt werden, siehe Abb. 4.7-4b. Dort, sowie nachfolgend an anderen Wänden, wird der Gravitationsstrom reflektiert und umgelenkt, bis sich nach der Dämpfung der Wellen bei $t = 60$ s ein nahezu homogener Füllstand einstellt.

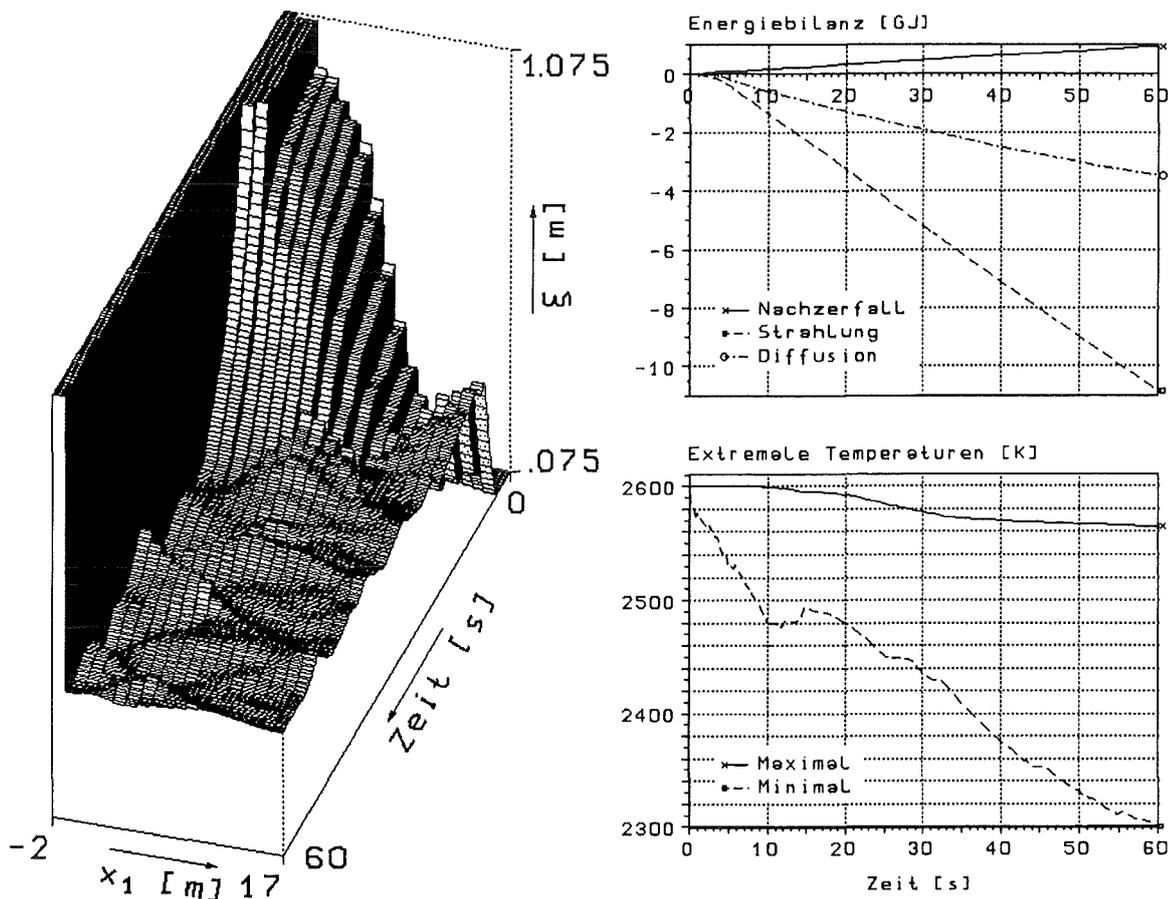


Abb. 4.7-5: Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Freie Oberfläche auf der Symmetrieebene, thermische Energiebilanz und extremale Fluidtemperaturen.

Abb. 4.7-5 zeigt die zeitabhängige freie Oberfläche auf der Symmetrieebene und vermittelt einen Eindruck von den Gravitationswellen. Die Höhenskala ist wie in Abb. 4.7-4b. Zudem enthält Abb. 4.7-5 eine thermische Energiebilanz und extremale Coriumtemperaturen.

Wie bereits bei der Diskussion des Rechenergebnisses bei reduzierter Anfangstemperatur deutlich wurde, beeinflussen Wärmetransportvorgänge die Ausbreitung kaum. Die Wärmeabfuhr aus dem Corium durch Strahlung in die Umgebung ist etwa um den Faktor drei gegenüber der Wärmeleitung in den Beton erhöht, die Nachzerfallswärme ist weniger bedeutend. Die Umgebungstemperatur für die Berechnung des Energieaustauschs durch Strahlung beträgt 300 K, d. h. die Aufheizung der strahlenden Umgebung wird vernachlässigt. Infolge der großen Differenz von Liquidus- und Solidustemperatur von 1170 K variiert der Massenanteil der flüssigen Phase nur schwach, zwischen 1 und 0.78.

Die bislang diskutierten Ergebnisse wurden auf einem Gitter mit 19x14x18 Maschen erzielt, siehe Tabelle 4.7-1. Um den Einfluß der räumlichen Diskretisierung auf die Rechenergebnisse zu untersuchen, wird der Ausbreitungsvorgang zudem auf einem horizontal verfeinerten Gitter mit 38x15x18 Maschen berechnet. Um den Vergleich mit dem groben Gitter zu begünstigen, wird dabei auf die Verfeinerung der Näherung der runden vertikalen Wände von Kaverne und Ausbreitungsraum durch Stufen, siehe Abb. 4.7-1, verzichtet. Der Vergleich von auf beiden Gittern erzielten Rechenergebnissen in Tabelle 4.7-2 und Abb. 4.7-6 zeigt, daß der Einfluß der räumlichen Diskretisierung moderat ist.

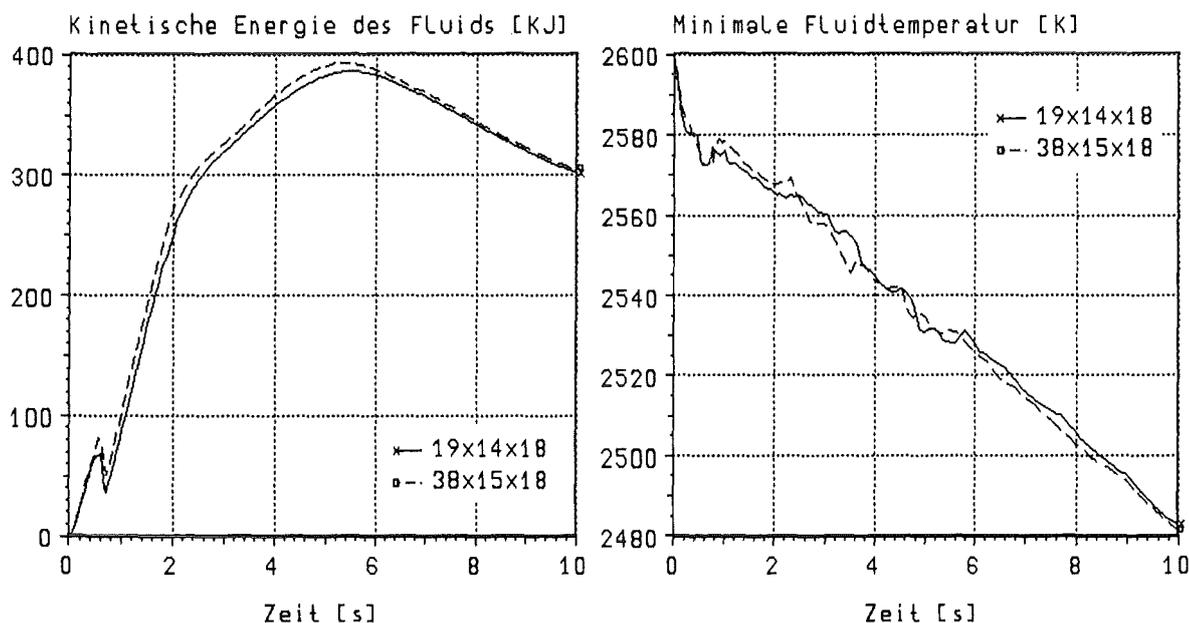


Abb. 4.7-6: Coriumströmung in den Ausbreitungsraum. Vergleich von kinetischer Energie und minimaler Temperatur des Coriums bei grobem und feinem Gitter.

Die mit der Fluidhöhe bei $x_1 = 3$ m, als charakteristischer Länge, gebildeten Reynoldszahlen der analysierten Vorgänge sind von der Größenordnung $0.8 \cdot 10^6$ bis $2.6 \cdot 10^6$. Die Prandtlzahlen betragen 1.8 bei reduzierter Anfangstemperatur und 0.8 in den anderen Fällen. Darum sind hydrodynamische und thermische Grenzschichtdicken von gleicher Größenordnung. Unter der Voraussetzung laminarer Strömung erhalten wir mit (4.5-1) Abschätzungen der Grenzschichtdicken

von 0.5 bis 0.8 mm. Diese Werte sind um etwa eine Größenordnung kleiner als die vertikale Maschenlänge im Kontaktbereich von Fluid und Substrat, was darauf hindeutet, daß der Wärmetransport infolge des groben Gitters unterschätzt werden könnte. Es zeigt sich jedoch, daß eine Reduzierung der vertikalen Maschenweite in diesem Bereich keinen wesentlichen Einfluß auf die Rechenergebnisse des Ausbreitungsvorgangs hat.

Insgesamt ergibt sich, daß eine annähernd homogene Coriumausbreitung unter den betrachteten Bedingungen, in weniger als einer Minute, vor der Erstarrung der Oberfläche erfolgt.

5 Zusammenfassung und abschließende Betrachtungen

5.1 Zusammenfassung der Ergebnisse

Das vorgestellte Verfahren ist imstande, dreidimensionale Strömungen mit freier Oberfläche einkomponentiger inkompressibler Newton-Fluide numerisch zu simulieren. Dabei werden auch Wärmetransportvorgänge und diskrete Phasenübergänge behandelt.

Die Methode wird auf verschiedene Strömungs- und Wärmeübertragungsprobleme angewendet. Dabei können physikalische Prozesse wie Gravitationswellen der freien Oberfläche mit Reflexionen an Strömungswiderständen sowie Kriech- und Naturkonvektionsströmungen gut wiedergegeben werden. Zudem werden die thermodynamischen Wechselwirkungen von Fluid, Strukturmaterialien und Umgebung sowie Phasenübergänge beschrieben. Auch die vielfältigen Abhängigkeiten der Probleme, beispielsweise von Anfangstemperatur, Geometrie und Materialeigenschaften, können reproduziert werden.

Auf diese Weise eignet sich das Verfahren zur Analyse von Experimenten, bei denen eine Schmelze mit einer freien Oberfläche strömt und auch aufschmelzen bzw. erstarren kann, sowie zum Entwurf von Einrichtungen, welche Schmelze zurückhalten können. Dieser letztgenannte Punkt spielt in der Kerntechnik bei Sicherheitsbetrachtungen eine wichtige Rolle. So wird das Verfahren zur Simulation schwerer Unfälle in Kernkraftwerken eingesetzt, bei denen eine Coriumschmelze u. a. erstarren, wiederaufschmelzen und sich auf bereits erstarrtem Material weiter ausbreiten sowie Wärme an darüberliegendes Kühlwasser abgeben kann. Auch die Bewegung einer Kruste auf flüssiger Schmelze kann simuliert werden.

5.2 Perspektiven zukünftiger Weiterentwicklung

In diesem Abschnitt werden Schwachpunkte und Beschränkungen der vorgestellten Methode zusammengestellt und Möglichkeiten zu ihrer Beseitigung diskutiert. Zur Verbesserung der Übersicht gliedern wir dabei in Teilbereiche.

Geometrie

Die Modellierung komplexer Geometrien ist ein Aspekt zukünftiger Weiterentwicklung. Dies kann durch die Einführung krummliniger, schiefwinkliger Koordinatensysteme geschehen. Dazu sind Modifikationen des Algorithmus zur Dynamik freier Oberflächen erforderlich.

Hydrodynamik

Die vorliegende Methode behandelt homogenes, Newtonsches Fluid. Viele technisch wichtige Substanzen, z. B. Corium, sind jedoch aus mehreren nicht mischbaren Komponenten zusammengesetzt, die unterschiedliche Eigenschaften besitzen. Solche Substanzen als homogenes, einkomponentiges Fluid zu beschreiben, kann eine schlechte Näherung sein, z. B. wenn Segregation

anfänglich gemischten Fluids erfolgt. Aus diesem Grund ist die Entwicklung eines Mehrkomponenten-Strömungsmodells ein wichtiges Ziel zukünftiger Weiterentwicklung.

Experimentelle Ergebnisse geben keinen Hinweis auf nicht-Newtonsches Verhalten von Corium ohne Wechselwirkung mit Beton. Bei Zumischung von Beton-Zersetzungsprodukten beobachtet man nicht-Newtonsches Verhalten oxidischen Coriums, Epstein [18] sowie Seiler und Ganzhorn [74]. Da auch andere technisch bedeutsame Fluide nicht-Newtonsches Verhalten aufweisen, Tanner [83], stellt die optionale Betrachtung dieses Materialverhaltens eine wichtige Erweiterung des Anwendungsbereichs dar, auch wenn die Scherraten, ab denen signifikante Abweichungen von der Linearität auftreten, in vielen Strömungen nicht erreicht werden. Es ist denkbar, nicht-Newtonsches Verhalten durch nichtlineare viskose Spannungstensoren zu beschreiben. Zunächst sollte jedoch analysiert werden, welche Arten von Nichtlinearitäten technisch bedeutsam sind.

Bei der heutigen Leistungsfähigkeit von Rechenmaschinen wäre zur Simulation von Strömungen hoher Reynoldszahlen eine Modellierung der Turbulenz erforderlich.

Die numerische Umsetzung der Spannungs-Randbedingung an der freien Oberfläche (2.3-1) und (2.3-2) ist unvollständig, da ihr numerisches Äquivalent nur in der Druck-Randbedingung besteht, während die Tangentialspannungen nicht erfaßt werden, siehe Abschnitt 3.2.4. Damit ist z. B. der Marangoni-Effekt, Faber [19], in unserem Modell nicht enthalten. Dies könnte durch eine Geschwindigkeits-Randbedingung an der freien Oberfläche geschehen, Hirt und Nichols [40] 1971, die jedoch numerisch schwer zu implementieren ist und nur in der flüssigen Phase Bedeutung besitzt.

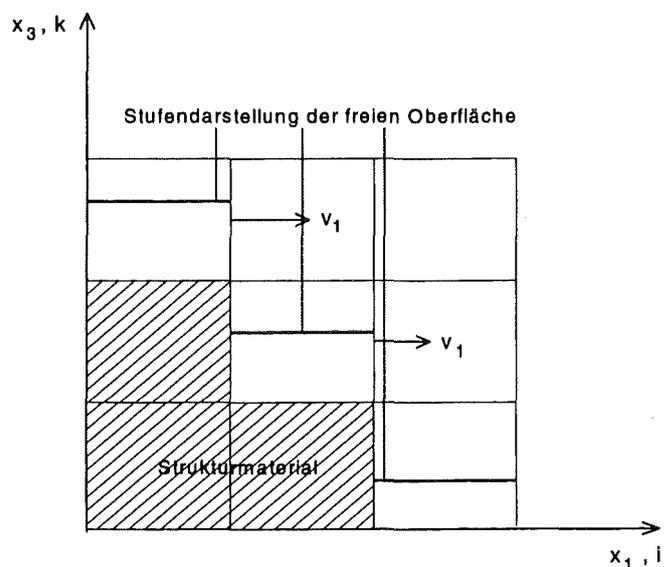


Abb. 5.2-1 : Massenaustausch ohne Impulsaustausch.

Dynamik der freien Oberfläche

Die Definition des Geschwindigkeits-Höhen-Integrals ermöglicht den Austausch von Masse zwischen Maschen benachbarter Säulen, die keinen Impuls austauschen. Dies tritt auf, wenn Fluid in eine tiefer

liegende Masche einer Nachbarsäule strömt (Abb. 5.2-1). In diesem Fall liefert die Sieben-Punkt-Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichung keinen Impulsübertrag. Massentransfer ohne Impulstransfer führt zur Nichterhaltung mechanischer Energie. Da der Effekt nur in Richtung abnehmender potentieller Energie auftritt, siehe Abb. 3.3-1, wird mechanische Energie unabhängig von der Viskosität reduziert. Aus diesem Grund besitzt der Algorithmus für die Dynamik der freien Oberfläche 'numerische Viskosität'. Zur physikalisch richtigen Beschreibung der Strömung über geneigte Strukturmaterialoberflächen sind körperangepasste Koordinatensysteme erforderlich.

Die vorgestellten Methoden zur Beschreibung der freien Oberfläche besitzen beide gewisse Nachteile, welche in Abschnitt 3.3.3 beschrieben sind, und sind nicht zur Beschreibung mehrdeutiger Oberflächen, wie z. B. bei überschlagenden Wellen oder Gasblasen geeignet. Allerdings arbeiten sie wegen ihres geringen Berechnungsaufwands effizient, und ihre Einschränkungen sind für viele Anwendungen akzeptabel, u. a. bei Corium-Ausbreitungsrechnungen.

Die Physik an der Ausbreitungsfront, Brown und Davis [5], wird nicht berücksichtigt, d. h. es wird innerhalb einer Masche kein Bezug auf den Ort der Front und die Dynamik des Kontaktwinkels zwischen Fluid und festen Rändern genommen. Aus diesem Grund ist zu erwarten, daß die vorgestellte Methode nicht geeignet ist, um Strömungen mit freier Oberfläche adäquat zu beschreiben, bei denen die Vorgänge an der Front dominant sind, wie etwa bei dünnen Filmen.

Thermodynamik

Die Aufheizung des Fluids durch die Dissipation der Strömung, die unser Modell im zweiten Term auf der rechten Seite von (2.2-4) erfaßt, wurde im numerischen Verfahren nicht implementiert. Dieser Term ist aufwendig zu diskretisieren und in den meisten Anwendungen um Größenordnungen kleiner als innere Wärmequellen, konvektive und diffusive Wärmeströme. Zur Analyse von Problemen, bei denen die dissipative Aufheizung nicht vernachlässigbar ist, sollte die diskretisierte Wärmetransportgleichung um diesen Term erweitert werden.

Phasenübergänge

Erstarrungsvorgänge im Fluid haben im Bereich der Übergangstemperatur einen dominanten Einfluß auf das Strömungsverhalten. In Abhängigkeit seiner Zusammensetzung kann das Erstarrungsverhalten eines Fluids sehr komplex sein. Die zusätzlichen Spannungen im Fluid infolge des Erstarrungsprozesses müßten berücksichtigt werden, um seine Dynamik realistisch zu beschreiben. Ein wichtiges Problem stellt in diesem Zusammenhang auch die mechanische Stabilität dünner Krusten dar. Da es schwierig ist, dieses komplexe rheologische Verhalten im Detail zu erfassen, verzichtet das vorliegende Modell darauf und beschränkt sich auf die Beschreibung integraler Eigenschaften. Angesichts der Ökonomie des Modells ist die Qualität der Ergebnisse jedoch zufriedenstellend.

Numerik

Da das 'upwind' Verfahren erster Ordnung starke numerisch bedingte Diffusion bewirkt, ist die zusätzliche Bestimmung konvektiver Flüsse mit Verfahren höherer Ordnung und eine Mischung der Flüsse erster und höherer Ordnung, siehe Abschnitt 3.5.3, eine sinnvolle Maßnahme zur Erhöhung der Genauigkeit der Ergebnisse bzw. zur Reduzierung des Rechenaufwandes.

In der Literatur werden schneller konvergierende Algorithmen als die Tschebyscheff-Methode zur Lösung der Poissongleichung für den Druck vorgestellt, z. B. konjugierte Gradienten- oder Multigitter-Methoden, Oran und Boris [61], Zang et. al. [96], Finck v. Finckenstein [25] und Hackbusch [37]. Es sollte überprüft werden, ob die von diesen Verfahren erwartete Konvergenzbeschleunigung den Nachteil des steigenden Speicherplatzbedarfs überkompensiert.

Infolge ihrer modularen Struktur bilden die vorgestellte Methode und das Rechenprogramm CORFLOW eine Basis für zukünftige Weiterentwicklungen. Viele Beschränkungen der vorgestellten Version können durch zusätzlichen Entwicklungsaufwand beseitigt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Ashgriz, N., Poo, J. Y. 1991
FLAIR : Flux line-segment model for advection and interface reconstruction.
J. Comp. Phys., 93, pp. 449-468
- [2] Bardoux, R. 1992
Erstellung eines Computerprogramms zur Berechnung der Ausbreitung eines zähen homogenen Fluids mit inneren Wärmequellen und freier Oberfläche, sowie des Temperaturfeldes im Fluid.
Diplomarbeit TU Dresden, Fachber. Maschinenwesen
- [3] Bober, M., Singer, J. 1985
High temperature vapor pressures of metals from laser evaporation.
High Temp. Sci., 19, pp. 329-345
- [4] Brenig, W. 1983
Statistische Theorie der Wärme. Band 1. Springer-Verlag, Berlin
- [5] Brown, R. A., Davis, S. H. 1994
Free boundaries in viscous flows. Springer-Verlag, New York
- [6] Bulgarelli, U., Casulli, V., Greenspan, D. 1980
On numerical treatment of free surfaces for incompressible fluid flow problems.
Vol. 4, No. 5, pp. 975-983, Pergamon Press, New York
- [7] Bulgarelli, U., Casulli, V., Greenspan, D. 1984
Pressure methods for the numerical solution of free surface fluid flows.
Pineridge Press, Swansea, UK
- [8] Carslaw, H. S., Jaeger, J. C. 1973
Conduction of heat in solids. Oxford University Press
- [9] Casulli, V. 1987
Eulerian-Lagrangian methods for hyperbolic, and convection dominated parabolic problems.
C. Taylor, D. R. J. Owen, E. Hinton : Computational methods for non-linear problems.
Pineridge Press, Swansea, UK, pp. 239-269
- [10] Casulli, V. 1990
Semi-implicit finite difference methods for the 2-dimensional shallow water equations.
J. Comp. Phys., 86, pp. 56-74
- [11] Casulli, V., Cheng, R. T. 1992
Semi-implicit finite difference methods for three-dimensional shallow water flow.
Int. J. Numer. Methods Fluids, 15, pp. 629-648

- [12] Chudanov, V. V., Popkov, A. G., Strizhov, V. F., Vabishchevich, P. N., Aksenova, A. E. 1993
Modelling of core spreading processes. Russian academy of sciences,
Nuclear Safety Institute, Preprint NSI-13-93, March, Moscow, Russia
- [13] Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H. 1928
Über die partiellen Differenzenverfahren der mathematischen Physik.
Math. Ann., 100, pp. 32-74
- [14] Didden, N., Maxworthy, T. 1982
The viscous spreading of plane and axisymmetric gravity currents.
J. Fluid Mech., 121, pp. 27-42
- [15] Dragoni, M., Bonafede, M., Boschi, E. 1986
Downslope flow models of a Bingham liquid : Implications for lava flows.
J. Vulcanology and Geothermal Research, 30, pp. 305-325
- [16] Ehrhard, P. 1996
Spreading of melts in presence of solidification. Proc. 4th Int. Conf. Nuclear Engineering,
New Orleans, Louisiana, USA, March 10-14, 1996, vol. 1, part B, pp. 935-941,
American Society of Mechanical Engineers - Japanese Society of Mechanical Engineers
- [17] Elyutin, V. P. et. al. 1969
Viscosity of alumina. Russian J. Phys. Chem., 43 (3), pp. 316-319
- [18] Epstein, M. 1996
A Bingham plastic interpretation of the ACE viscosity data. FAI/96-92,
Fauske & Associates Inc., Burr Ridge, Illinois, USA
- [19] Faber, T. E. 1995
Fluid dynamics for physicists. Cambridge University press, Cambridge, UK
- [20] Fannelop, T. K., Waldman, G. D. 1972
Dynamics of oil slicks. AIAA J., 10, no. 4, pp. 506-510
- [21] Farmer, M. T., Sienicki, J. J., Spencer, B. W. 1990
The MELTSPREAD-1 computer code for the analysis of transient spreading in containments.
Proc. Nuclear Thermal Hydraulics, Washington, D. C., November 11-16, 1990, pp.21,
American Nuclear Society
- [22] Fichtenholz, G. M. 1986
Differential- und Integralrechnung. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin
- [23] Fieg, G., Huber, F., Werle, H., Wittmaack, R. 1996
Simulation experiments on the spreading behaviour of molten core melts.
Proc. Natl. Heat Transfer Conf., Houston, Texas, USA, Aug. 3-6, 1996, pp. 121-130,
American Nuclear Society

- [24] Filatoff; N., Lasek, A. 1989
On variable viscosity magma flow. *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 32, No. 12, pp. 2485-2492
- [25] Finck v. Finckenstein, K. 1977
Einführung in die numerische Mathematik. Carl Hanser Verlag, München
- [26] Fink, J. H. 1992
Lava flows and domes. K. Ishihara, M. Igushi, K. Kamo : Numerical simulation of lava flows on some volcanoes in Japan. pp. 174-207, Springer-Verlag, Berlin
- [27] Fletcher, C. A. J. 1991
Computational techniques for fluid dynamics. Vol. 1. Springer-Verlag, Berlin
- [28] Foit, J. J., Reimann, M. et. al. 1995
The WECHSL-Mod3 Code : A computer program for the interaction of a core melt with concrete including the long term behaviour. FZK Karlsruhe, IATF, FZKA 5522
- [29] Foit, J. J. 1997
Spreading with variable viscosity. FZK Karlsruhe, IATF, FZKA 6006
- [30] Fromm, E., Gebhardt, E. 1976
Gase und Kohlenstoff in Metallen. Reine und angewandte Metallkunde in Einzeldarstellungen, Bd. 26, Springer-Verlag, Berlin
- [31] Gebhart, B. 1993
Heat conduction and mass diffusion. McGraw-Hill Book Co., Singapore
- [32] Gosman, A. D., Pun, W. M., Runchal, A. K., Spalding, D. B., Wolfshtein, M. 1969
Heat and mass transfer in recirculating flows. Academic press, London
- [33] Greene, G. A. et.al. 1989
Spreading of metallic melts over flooded, horizontal surfaces.
Brookhaven National Laboratory ; Department of Nuclear Energy, Upton, New York
- [34] Gresho, P. M., Sani, R. L. 1987
On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations.
Int. J. Numer. Methods Fluids, Vol. 7, pp. 1111-1145
- [35] Griffiths, R. W., Fink, J. H. 1993
Effects of surface cooling on the spreading of lava flows and domes.
J. Fluid Mech., 252, pp. 667-702
- [36] Grosche, G., Ziegler, V., Ziegler, D. 1988
Ergänzende Kapitel zu N. I. Bronstein, K. Semendjajew : Taschenbuch der Mathematik.
Verlag Harry Deutsch, Frankfurt am Main
- [37] Hackbusch, W. 1993
Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme. B. G. Teubner, Stuttgart

- [38] Harlow, F. H., Welch, J. E. 1965
 Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8, no.12, pp. 2182-2189
- [39] Hassmann, K., Hosemann, J. P., Peehs, M. 1987
 Spaltproduktfreisetzung bei Kernschmelzen, TÜV Rheinland GmbH, Köln
- [40] Hirt, C. W., Nichols, B. D. 1971
 Improved free surface boundary conditions for numerical incompressible-flow calculations. *J. Comp. Phys.*, 8, pp. 434-448
- [41] Hirt, C. W., Nichols, B. D. 1981
 Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries. *J. Comp. Phys.*, 39, pp. 201-225
- [42] Huppert, H. E. 1982
 The propagation of two-dimensional and axisymmetric viscous gravity currents over a rigid horizontal surface. *J. Fluid Mech.*, 121, pp. 43-58
- [43] Huppert, H. E. 1986
 The intrusion of fluid dynamics into geology. *J. Fluid Mech.*, 173, pp. 557-594
- [44] Joseph, D. D. 1976
 Stability of fluid motions. Springer-Verlag, Berlin
- [45] Juric, D., Tryggvason, G. 1996
 A front-tracking method for dendritic solidification. *J. Comp. Phys.*, 123, pp. 127-148
- [46] Kakac, S., Yener, Y. 1993
 Heat conduction, 3rd edition. Taylor & Francis, Washington, DC, USA
- [47] Klingbeil, E. 1966
 Tensorrechnung für Ingenieure. B.I. Hochschul-TB Verlag, Mannheim
- [48] Kolev, N. I. 1997
 Three field modeling with dynamic fragmentation and coalescence : Fiction or daily practice ?
 Presented at American Society of Mechanical Engineers Fluids Engineering Conf., Vancouver, British Columbia, Canada, June 22-26, 1997
- [49] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. 1975
 The classical theory of fields. Pergamon Press, Oxford, UK
- [50] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. 1980
 Course of theoretical physics, Vol. 5 : Statistical physics, Part 1. Pergamon Press, Oxford, UK
- [51] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. 1989
 Course of theoretical physics, Vol. 6 : Fluid mechanics, Pergamon Press, Oxford, UK
- [52] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. 1990
 Course of theoretical physics, Vol. 10 : Physical kinetics, Pergamon Press, Oxford, UK

- [53] Leonard, B. P. 1979
A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 19, pp. 59-98
- [54] Liang, P. Y. 1991
Numerical method for calculation of surface tension flows in arbitrary grids.
AIAA Journal, 29, no. 2, pp. 161-167
- [55] Marsal, D. 1976
Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen.
B.I.-Wissenschaftsverlag, Mannheim
- [56] Marsh, B. D. 1981
On the crystallinity, probability of occurrence, and rheology of lava and magma.
Contributions to mineralogy and petrology, 78, pp. 85-98
- [57] Mashayek, F., Ashgriz, N. 1993
A height-flux method for simulating free surface flows and interfaces.
Int. J. Num. Meth. Fluids, 17, pp. 1035-1054
- [58] Moody, J. F. 1989
First order analyses of molten corium heat transfer. *Proc. Natl. Heat Transfer Conf.*,
Philadelphia, Pennsylvania, USA, August 6-9, 1989, pp. 217-224, American Nuclear Society
- [59] Mouritsen, O. G. 1984
Computer studies of phase transitions and critical phenomena. Springer-Verlag, Berlin
- [60] Ohkawa, T., Tomiyama, A. 1995
Applicability of high order upwind methods to the two fluid model. *Proceedings of the
2nd int. conference on multiphase flow*, April 3-7, Kyoto, Japan, pp. NU15-NU22
- [61] Oran, S., Boris, J. P. 1987
Numerical simulation of reactive flow. Elsevier science publishing, New York
- [62] Patankar, S. V. 1980
Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere publishing corporation, New York
- [63] Peric, M. 1985
A finite volume method for the prediction of 3-dimensional fluid flow in complex ducts.
Ph. D. thesis, University of London, Imperial college, Mech. Eng. Dept.
- [64] Porsching, T. A. 1978
Error estimates for MAC-like approximations to the linear Navier-Stokes equation.
Numer. Math., 29, pp. 291-306
- [65] Prakash, C., Voller, V. R. 1989
On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary
solid-liquid phase change. *Num. Heat Transfer, Part B*, 15, pp. 171-189

- [66] Raithby, G. D. 1976
Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow.
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 9, pp. 153-164
- [67] Renardy, M., Renardy, Y. 1991
On the nature of boundary conditions for flows with moving free surfaces.
J. Comp. Phys., 93, pp. 325-335
- [68] Roache, P. J. 1972
Computational fluid dynamics. Hermosa Publishers, Albuquerque, NM 87108, USA
- [69] Roche, M. F., Steidl, D. V., Leibowitz, L., Fink, J. K., Seghal, B. R. 1994
Viscosity of corium-concrete mixtures at high temperatures. ACE-TR-C37,
Chemical Technology Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439, USA
- [70] Rottman, J. W., Simpson, J. E. 1983
Gravity currents produced by instantaneous releases of a heavy fluid in a rectangular channel.
J. Fluid Mech., 135, pp. 95-110
- [71] Sakimoto, S. E. H., Zuber, M. T. 1995
The spreading of variable-viscosity axisymmetric radial gravity currents : applications to the
emplacement of Venusian 'pancake' domes. J. Fluid Mech., 301, pp. 65-77
- [72] Schade, H. 1970
Kontinuumstheorie strömender Medien. Springer-Verlag, Berlin
- [73] Schwerdtfeger, K. 1992
Metallurgie des Stranggießens. Stahl-Eisen-Verlag, Düsseldorf
- [74] Seiler, J. M., Ganzhorn, J. 1996
Viscosities of corium-concrete mixtures. Proc. 14th European Conf. Thermophysical
Properties, Lyon (France), September 16-19, 1996, pp. 1-13
- [75] Shyy, W. 1994
Computational modeling for fluid flow and interfacial transport. Elsevier, Amsterdam
- [76] Shyy, W., Udaykumar, H. S., Rao, M. M., Smith, R. W. 1996
Computational fluid dynamics with moving boundaries. Taylor & Francis, Washington, USA
- [77] Smith, G. D. 1985
Numerical solution of partial differential equations : Finite difference methods
Oxford applied mathematics and computing science series, Clarendon press, Oxford, UK
- [78] Sotiropoulos, F., Abdallah, S. 1992
A primitive variable method for the solution of 3-dimensional incompressible viscous flows.
J. Comp. Phys., 103, pp. 336-349

- [79] Sparrow, E. M., Patankar, S. V., Ramadhyani, S. 1977
 Analysis of melting in the presence of natural convection in the melt region.
 Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 99, pp. 520-526
- [80] Stedman, S. J., Evans, J. R. G., Woodthorpe, J. 1990
 Rheology of composite ceramic injection moulding suspensions.
 J. Mater. Sci., 25, pp. 1833-1841
- [81] Steinbrück, M. 1995
 Berechnung der Solidus- und Liquidustemperatur von je einer typischen KATS- bzw. PREMIX-Oxidschmelze mit dem Programm GEMINI. FZK IRS4-Notiz Nr. 1283/95, Karlsruhe, Private Mitteilung
- [82] Tamamidis, P., Zhang, G., Assanis, D. A. 1996
 Comparison of pressure based and artificial compressibility methods for solving 3D steady incompressible viscous flows. J. Comp. Phys., 124, pp. 1-13
- [83] Tanner, R. I. 1985
 Engineering rheology. Clarendon press, Oxford, UK
- [84] Thomas, D. G. 1965
 Transport characteristics of suspensions : VIII. A note on the viscosity of Newtonian suspensions of uniform spherical particles. J. Colloid Sci., 20, pp. 267-277
- [85] Tomiyama, A., Matsuoka, T., Fukuda, F., Sakaguchi, T. 1995
 A simple numerical method for solving an incompressible two-fluid model in a general coordinate system. Proc. 2nd Int. Conf. Multiphase Flow, Kyoto, Japan, April 3-7, 1995, pp. NU23-NU30
- [86] Varga, R. S. 1962
 Matrix iterative analysis. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., USA
- [87] VDI, Verein Deutscher Ing. 1988
 VDI-Wärmeatlas. 5. Auflage, VDI-Verlag, Düsseldorf
- [88] Veteau, J. M., Wittmaack, R. 1995
 CORINE experiments and theoretical modelling. Proc. Int. Conf. Fission Safety 1991-1995, Luxembourg, Nov. 20-22, 1995, pp. 271-285
- [89] Voller, V. R., Brent, A. D., Prakash, C. 1989
 The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems.
 Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 32, No. 9, pp. 1719-1731
- [90] Voller, V. R., Cross, M. 1991
 Solidification processes - algorithms and codes. Invited paper of IMA Conference on mathematical modelling of materials processing, Bristol, UK, 23-25.09.

- [91] Voller, V. R., Prakash, C. 1987
A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 30, No. 8, pp. 1709-1719
- [92] Voller, V. R., Swaminathan, C. R. 1991
General source based method for solidification phase change.
Num. Heat Transfer, Part B, 19, pp.175-189
- [93] Wallis, G. B. 1969
One-dimensional two phase flow. McGraw-Hill Book Company, New York
- [94] Widder, D. V. 1975
The heat equation. Academic press, New York
- [95] Wittmaack, R. 1997
Numerical simulation of free surface flows. *Nuclear Technology*, 119, pp. 158-180
- [96] Zang, Y., Street, R. L., Koseff, J. R. 1994
A non-staggered grid, fractional step method for time-dependent incompressible Navier-Stokes equations in curvilinear coordinates. *J. Comp. Phys.*, 114, pp. 18-33
- [97] Zeidler, E. 1990
Nonlinear functional analysis and its applications. Springer-Verlag, New York

Anhang 1 : Gaußscher Integralsatz für Tensoren zweiter Stufe

Der Gaußsche Integralsatz für einen Tensor erster Stufe $a^\ell g_\ell$,

$$\int_{\Omega} \nabla_\ell a^\ell dV = \oint_{\partial\Omega} a^\ell df_\ell,$$

gilt für alle nicht-orthogonalen, krummlinigen Koordinatensysteme, da die Integranden Skalare sind.

Für einen Tensor zweiter Stufe $a^{\ell m} g_\ell g_m$ lautet der entsprechend allgemein gültige Satz

$$\int_{\Omega} g_m \nabla_\ell a^{\ell m} dV = \oint_{\partial\Omega} g_m a^{\ell m} df_\ell, \quad (\text{A1-1})$$

Schade 1970. In Koordinatensystemen mit geradlinigen Basisvektoren ist eine Vereinfachung dieses Ausdrucks möglich. Durch Multiplikation mit g^i erhält man

$$g^i \int_{\Omega} g_m \nabla_\ell a^{\ell m} dV = g^i \oint_{\partial\Omega} g_m a^{\ell m} df_\ell.$$

In kartesischen Koordinaten, bei denen $g_i = g^i = g^i(x_1, x_2, x_3)$, ergibt sich

$$g^i g_m \int_{\Omega} \nabla_\ell a^{\ell m} dV = g^i g_m \oint_{\partial\Omega} a^{\ell m} df_\ell,$$

und damit

$$\int_{\Omega} \nabla_\ell a^{\ell i} dV = \oint_{\partial\Omega} a^{\ell i} df_\ell. \quad (\text{A1-2})$$

Bei Zylinderkoordinaten ist

$$g_1 = g^1 = g^1(x_2) \quad ; \quad g_2 \neq g^2 = g^2(x_1, x_2) \quad ; \quad g_3 = g^3 \neq g^3(x_1, x_2, x_3),$$

wobei x_i krummlinige Koordinaten bezeichnet. In der dritten Raumrichtung erhält man (A1-2), d. h.

$$\int_{\Omega} \nabla_\ell a^{\ell 3} dV = \oint_{\partial\Omega} a^{\ell 3} df_\ell.$$

Einsetzen dieses Resultats in (A1-1) liefert

$$\int_{\Omega} (g_1 \nabla_\ell a^{\ell 1} + g_2 \nabla_\ell a^{\ell 2}) dV = \oint_{\partial\Omega} (g_1 a^{\ell 1} + g_2 a^{\ell 2}) df_\ell.$$

Da g_1 und g_2 von der krummlinigen Koordinate x_2 abhängen, ist im dreidimensionalen Fall keine weitere Vereinfachung möglich. Bei zweidimensionalen Zylinderkoordinaten, d. h. bei polarer Isotropie, sind die Integranden dieses Ausdrucks jedoch koordinatenunabhängig, darum erhält man nach Multiplikation mit g^1

$$\int_{\Omega} \nabla_{\ell} a^{\ell 1} dV = \oint_{\partial\Omega} a^{\ell 1} df_{\ell}.$$

Anhang 2 : Zusammenhang zwischen kovarianten und partiellen Ableitungen der physikalischen Komponenten von Tensoren erster Stufe

In den krummlinigen Koordinaten x_i gilt für die mit einem Stern gekennzeichneten physikalischen Tensorkomponenten der kovarianten Ableitung des kovarianten Tensors v_j

$$\nabla_i v_j = \sqrt{g^{(ii)}} \nabla_i^* \left(\sqrt{g^{(jj)}} v_j^* \right) = \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}} \nabla_i^* v_j^*.$$

Der Zusammenhang zwischen kovarianter und partieller Ableitung ist

$$\nabla_i v_j = \partial_i v_j - \Gamma_{ij}^m v_m = \partial_i \left(\sqrt{g^{(jj)}} v_j^* \right) - \Gamma_{ij}^m \sqrt{g^{(mm)}} v_m^* = (\partial_i^* x^i)^{-1} \partial_i^* \left(\sqrt{g^{(jj)}} v_j^* \right) - \sqrt{g^{(mm)}} \Gamma_{ij}^m v_m^*,$$

Klingbeil [47]. Da

$$\partial_i^* x^i = \partial_i^* \left(\sqrt{g^{(ii)}} x^i \right) = x^i \partial_i^* \sqrt{g^{(ii)}} + \sqrt{g^{(ii)}},$$

ergibt sich

$$\nabla_i^* v_j^* = \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}} \left[\left(x^i \partial_i^* \sqrt{g^{(ii)}} + \sqrt{g^{(ii)}} \right)^{-1} \partial_i^* \left(\sqrt{g^{(jj)}} v_j^* \right) - \sqrt{g^{(mm)}} \Gamma_{ij}^m v_m^* \right].$$

Anhang 3 : Argument-Indikatorfunktionen

Die Indikatorfunktionen für positives und negatives Argument sind definiert durch

$$\forall x \in \mathfrak{R}_+^* : \text{Rp}(x) := 1 \quad \wedge \quad \text{Rn}(x) := 0.$$

$$\forall x \in \mathfrak{R}_-^* : \text{Rp}(x) := 0 \quad \wedge \quad \text{Rn}(x) := 1.$$

$$\text{Rp}(0) := 0 \quad ; \quad \text{Rn}(0) := 0.$$

Sie besitzen folgende Eigenschaften :

$$\forall x \in \mathfrak{R} : \text{Rp}(x) \text{Rn}(x) = 0 \quad \wedge \quad \text{Rp}^2(x) = \text{Rp}(x) \quad \wedge \quad \text{Rn}^2(x) = \text{Rn}(x).$$

Anhang 4 : Typen von Diffusion zwischen benachbarten Kontrollvolumina im Algorithmus zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung

Die folgende Tabelle listet die Typen von Diffusion, die zwischen benachbarten Kontrollvolumina des Navier-Stokes-Lösungsalgorithmus auftreten sowie die zur Steuerung des Algorithmus verwendeten logischen Ausdrücke, die genau einen Typ von Diffusion spezifizieren. Die Richtungsindizes bezeichnen die Richtung der Strömung ($\gamma \in \underline{3} \setminus \{0\}$) bzw. senkrecht zur Strömung ($\delta \in \underline{3} \setminus \{0, \gamma\}$) im betrachteten Diffusionsterm. Bei doppeltem Vorzeichen bezieht sich das obere

auf die Vorwärts-, das untere auf die Rückwärtsrichtung, bei zwei durch Semikolon getrennten Ausdrücken gilt der erste für die Vorwärts-, der zweite für die Rückwärtsrichtung.

Art der Maschen des			
Typ der Diffusion	Nachbar-Kontrollvolumens	Richtung	logischer Ausdruck
Haftbedingung	Leer oder Strukturmaterial	δ	$\neg \ell cd_{i_\delta \pm 1} \wedge \left(\ell ns_{i_\delta \pm 1} \vee \ell ns_{i_\gamma + 1 i_\delta \pm 1} \right)$
Diffusion	Besetzt mit Fluid	γ	$\ell cd_{i_\gamma \pm 1}$
	Besetzt mit Fluid	δ	$\ell cd_{i_\delta \pm 1}$
	Nicht-Fluid	γ	$\neg \ell h_{i_\gamma + 2} ; \neg \ell h_{i_\gamma - 1}$
Keine Diffusion	Unbesetztes Fluid	γ	$\neg \ell cd_{i_\gamma \pm 1} \wedge \left(\ell h_{i_\gamma + 2} ; \ell h_{i_\gamma - 1} \right)$
	Symmetrie od. unbes. Fluid	δ	$\neg \ell cd_{i_\delta \pm 1} \wedge \neg \left(\ell ns_{i_\delta \pm 1} \vee \ell ns_{i_\gamma + 1 i_\delta \pm 1} \right)$

Tabelle A4-1: Typen hydrodynamischer Diffusion zwischen benachbarten Kontrollvolumina.

Die Maschen an deren Rand die Haftbedingung gilt werden mit Hilfe der logischen Variablen ℓns identifiziert, die definiert ist durch

$$\forall (i, j, k) \in \underline{n_1 + 1} \times \underline{n_2 + 1} \times \underline{n_3 + 1}: \ell ns_{ijk} \Leftrightarrow \text{imat} \in \underline{\text{nmat}} \setminus \{1\}.$$