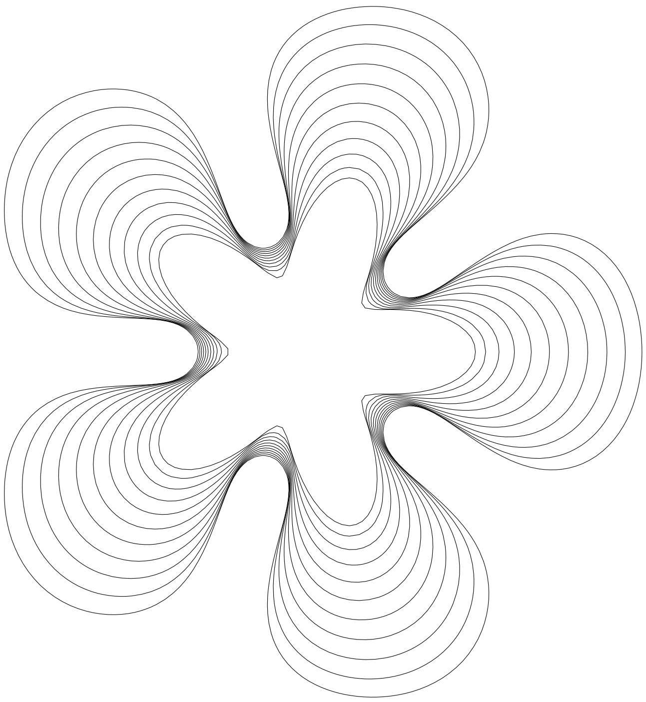
Numerische Simulation von Erstarrungsprozessen unterkühlter Flüssigkeiten unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden

Tilman Neunhoeffer



Fakultät für Informatik
der Technischen Universität München

Numerische Simulation von Erstarrungsprozessen unterkühlter Flüssigkeiten unter Berücksichtigung von Dichteunterschieden

Tilman Neunhoeffer

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Informatik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:		Univ.-Prof. Dr. Heinz-Gerhard Hegering
Prüfer der Dissertation:		
	1.	Univ.-Prof. Dr. Christoph Zenger
	2.	Univ.-Prof. Dr. Michael Griebel

Die Dissertation wurde am 25. Juni 1997 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Informatik am 28. Juli 1997 angenommen.

Kurzfassung

Fluide können unter bestimmten Voraussetzungen unter ihren Gefrierpunkt abgekühlt werden, ohne sich zu verfestigen. Der Erstarrungsprozeß wird dann erst durch das Einbringen eines Gefrierkeims angestoßen, und der Feststoff wächst nicht vom Rand des Fluidbehälters aus, sondern um den Keim. In den klassischen Modellen hängt das Wachstum des Feststoffs von der Krümmung der Phasengrenze zwischen Fluid und Feststoff und vom Unterkühlungsgrad ab. Abhängig von den physikalischen Parametern können die entstehenden Kristalle sehr komplizierte dendritische Geometrien annehmen. Zur Simulation dieses rein thermischen Vorgangs gibt es zahlreiche numerische Methoden.

In dieser Arbeit wird nun ein erweitertes physikalisches Modell verwendet, das neben dem Energietransport den Dichteunterschied beim Übergang von der flüssigen zur festen Phase mit berücksichtigt. Durch die Expansion oder Kontraktion des Stoffes beim Phasenübergang wird in dem Fluid eine Strömung angetrieben. Diese Strömung beeinflußt neben der Position der Phasengrenze zwischen Flüssigkeit und Feststoff während der Erstarrung die endgültige Gestalt des Feststoffs. Bei Stoffen, deren Dichte in der festen Phase größer als in der fluiden Phase ist, können auch Kavitäten entstehen.

Wir entwickeln einen Algorithmus, der mit der Methode der Finiten Differenzen in zwei Raumdimensionen die Lösung des erweiterten Modells numerisch approximiert. Der Algorithmus besteht aus zwei Komponenten. Eine Komponente beinhaltet die Lösung der Temperaturgleichung. Hier wird auch die Bewegung der Phasengrenze bestimmt. Die zweite Komponente berechnet die Strömung des Fluids. Dabei muß ein Strömungslöser verwendet werden, der variable Geometrien behandeln kann. Dazu sind in der zugrundeliegenden Chorinschen Projektionsmethode bzw. dem SIMPLE-Verfahren spezielle Randbedingungen zu implementieren.

Die beweglichen Ränder an der Grenze zwischen fester und flüssiger Phase sowie an der Fluidoberfläche werden durch masselose Partikel beschrieben, die miteinander verbunden werden. Diese Partikel werden mit den für die Ränder berechneten Geschwindigkeiten bewegt.

In zahlreichen numerischen Experimenten wird der Einfluß der verschiedenen Parameter studiert.

Inhaltsverzeichnis

Erklärung der Zeichen und Abkürzungen

Wir geben hier jeweils die zweidimensionalen Bezeichnungen an. Im dreidimensionalen Fall ist gegebenenfalls die dritte Komponente hinzuzufügen.

$f^{(n)}$	Funktionswert zum Zeitpunkt $t^{(n)}$
f^{it}	Iterierte in SOR-Iterationsschritt it
$\hat{f}$	Funktion in Polarkoordinaten
$C_{i,j}$	Gitterzelle, die das Gebiet $[(i-1)\delta x, i\delta x] \times [(j-1)\delta y, j\delta y]$ abdeckt
E	$:= \int \rho\, e\, dx$: Wärme
F	Wärmequelle
L	latente Wärme
T	Temperatur
$T_{i,j}$	diskreter Temperaturwert am Zellmittelpunkt $((i-0.5)\delta x, (j-0.5)\delta y)$
T_m	Schmelztemperatur an planaren Oberflächen
T_{Γ_1}	Temperatur an der Phasengrenze
V_Γ	Betrag der Geschwindigkeit des Rands Γ
$\vec{V}_\Gamma$	Geschwindigkeit des Rands Γ
a	kinetischer Koeffizient in der Gibbs-Thomson-Bedingung
c	spezifische Wärmekapazität
d	$:= \dfrac{k}{\rho\, c}$: Wärmediffusionskoeffizient
e	Enthalpie
g	chemisches Potential
$\vec{g} := (g_x, g_y)$	Gravitation
h	Wärmeübergangskoeffizient an der Fluidoberfläche
$i_{\max}$	Anzahl der Zellen in x–Richtung
$j_{\max}$	Anzahl der Zellen in y–Richtung
$\vec{j}$	$:= \rho\, \vec{v}$: Massenfluß
k	Wärmeleitkoeffizient
$\vec{m}$	Impuls

n_1	Anzahl der Partikel auf der Phasengrenze Γ_1
n_2	Anzahl der Partikel auf der Fluidoberfläche Γ_2
$\vec{n}$	Einheitsnormalenvektor: an Γ_1 ins Fluid gerichtet, an Γ_2 und Γ_3 nach außen gerichtet
p	Druck
p^*	Referenzdruck (atmosphärischer Druck)
$p_{i,j}$	diskreter Druckwert am Zellmittelpunkt $((i-0.5)\delta x, (j-0.5)\delta y)$
$\vec{p}_k$	massenloses Partikel zur diskreten Beschreibung der Ränder
$\vec{q}$	Wärmefluß
s	Entropie
t	Zeit
$\vec{t}$	Tangentialvektor
u	Geschwindigkeitskomponente in x–Richtung
$u_{i,j}$	diskreter Wert für die horizontale Geschwindigkeitskomponente am Kantenmittelpunkt $(i\,\delta x, (j-0.5)\delta y)$
v	Geschwindigkeitskomponente in y–Richtung
$v_{i,j}$	diskreter Wert für die vertikale Geschwindigkeitskomponente am Kantenmittelpunkt $((i-0.5)\delta x, j\,\delta y)$
$\vec{v} := (u,v)^T$	Geschwindigkeit des Fluids
$\vec{x} := (x,y)^T$	Ortsvektor
Γ_1	Phasengrenze zwischen Fluid und Feststoff
Γ_2	freie Fluidoberfläche zur Luft
Γ_3	Rand des Behälters bzw. des Berechnungsgebiets
Ω_l	Gebiet des Fluids
Ω_s	Gebiet des Feststoffs
α	Upwind–Diskretisierungsfaktor
β	$:= -\dfrac{1}{\rho_l}\dfrac{\partial \rho_l}{\partial T}$: Volumenexpansionskoeffizient
δx	Schrittweite in x–Richtung
δy	Schrittweite in y–Richtung
δt	Zeitschrittweite
γ	Oberflächenspannung

κ	Krümmung
μ	dynamische Viskosität
ρ	Dichte
σ	Produktionsrate der Entropie
τ	$:= \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$: viskoser Anteil des Spannungstensors
ω	Relaxationsfaktor bei der SOR-Iteration

Indizes:

l	Fluid
s	Feststoff
1	Phasengrenze
2	Fluidoberfläche
3	Behälterwand

1 Einleitung

1.1 Gefrierprozesse

Während der Verfestigung von Flüssigkeiten und Gasen entwickeln sich einige der schönsten in der Natur vorkommenden Formen. Man denke hier etwa an die vielfältigen Strukturen von Schneeflocken und Bergkristallen, siehe Abbildung 1.1. Die Entstehung dieser Strukturen ist in den Naturwissenschaften von Bedeutung, z.B. in den Geo- und Klimawissenschaften. Doch auch in den Materialwissenschaften spielen Erstarrungsprozesse eine große Rolle. Abhängig von diversen Parametern wie der Zusammensetzung der Schmelze oder der Umgebungstemperatur können sich die unterschiedlichsten Mikrostrukturen ergeben, die großen Einfluß auf die makroskopischen Materialeigenschaften haben können. Genannt seien hier die Festigkeit bzw. Elastizität sowie das elektrische und magnetische Verhalten der Festkörper. Bei der Züchtung von Siliziumkristallen für Computerchips ist es z.B. von erstrangiger Bedeutung, möglichst Einkristalle zu erzeugen. Nicht zuletzt sei auf die Bedeutung von Gefrierprozessen in der Lebensmitteltechnik hingewiesen. In allen genannten technischen Bereichen läßt sich die Erstarrung insbesondere durch die Steuerung der Abkühlung beeinflussen.
Trotz der großen Bedeutung sind noch nicht alle Aspekte des Gefrierens und des Kristallwachstums vollends verstanden. Eine der größten Schwierigkeiten bei der experimentellen Untersuchung dieser Prozesse ist die sehr sensible Abhängigkeit der entstehenden Strukturen von den physikalischen Parametern. So können zum Beispiel aus einer nahezu planaren Fläche Verästelungen (sog. *Dendriten*) herauswachsen, die sich erst in wesentlich komplizierteren Strukturen wieder stabilisieren.
Bei der Untersuchung von Erstarrungsprozessen muß zunächst zwischen Reinstoffen und Stoffgemischen (Legierungen) unterschieden werden. Beide Prozesse verlaufen äußerlich ähnlich, werden aber von unterschiedlichen physikalischen Größen dominiert.
Das Gefrieren von Reinstoffen wird in erster Linie durch den Energietransport bestimmt. Insbesondere muß die beim Gefrieren freiwerdende Schmelzenergie (*latente Wärme*) von der Phasengrenze zwischen fester und flüssiger Phase abtransportiert werden. Dabei sind zwei grundlegend verschiedene Erstarrungsarten zu unterscheiden: die Erstarrung von einer gekühlten Wand aus und die Verfestigung unterkühlter Flüssigkeiten an einem Kristallisationskern.
Zur Veranschaulichung betrachten wir einen ganz mit Flüssigkeit gefüllten Behälter, vgl. Abbildung 1.2, siehe [Langer, 1980]. Bei der Erstarrung von der Wand aus liegt die Temperatur des Fluids über dem Gefrierpunkt, und das Fluid wird an der Wand des Fluidbehälters, deren Temperatur unter dem Gefrierpunkt liegt, gekühlt. Die Phasengrenze bewegt sich hier gleichförmig in die Mitte des Behälters hinein. Die Schmelzenergie wird durch den Feststoff hindurch aus dem System abgeführt. Mathematisch wird die Bewegung der Phasengrenze durch die Stefan-Bedingung modelliert, die besagt, daß die Geschwindigkeit proportional zum Sprung des Temperaturgradienten an der Phasengrenze ist und daß in den Proportionalitätsfaktor die Schmelzenergie eingeht, [Stefan, 1889].
Unterkühlte Flüssigkeiten gefrieren hingegen anders. Hier wird das Fluid durch Wärmeentzug

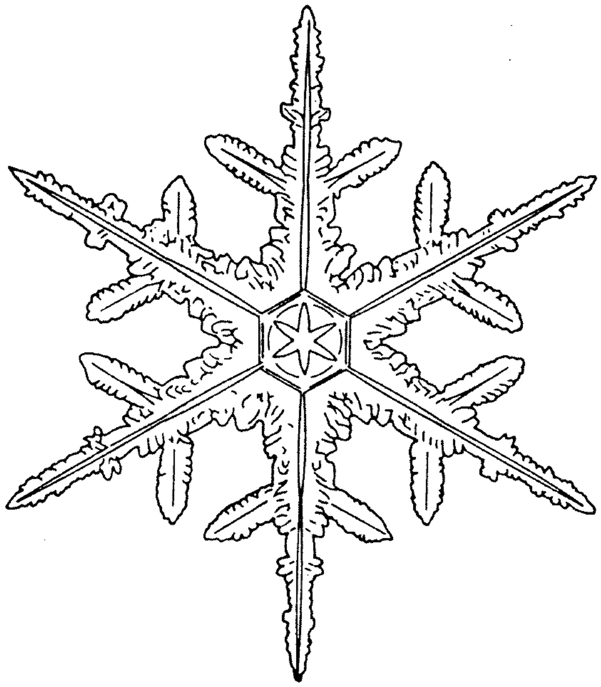


Abbildung 1.1 nach einer Fotografie einer Schneeflocke, aus [Nakaya, 1954], [Langer, 1980]

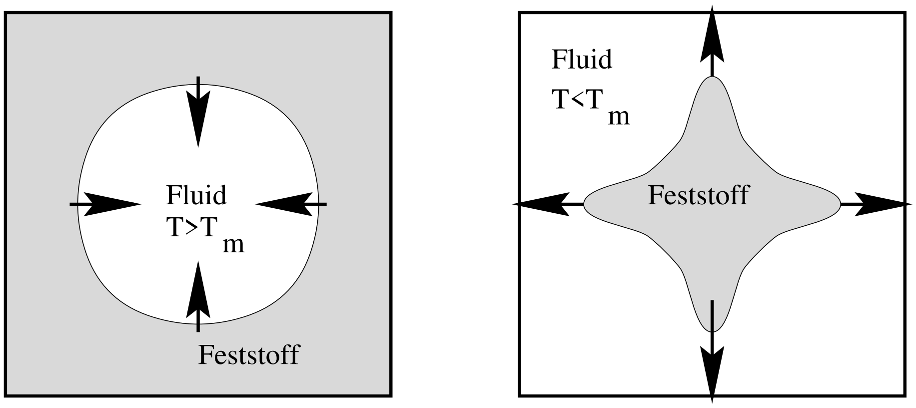


Abbildung 1.2 Erstarrungsmöglichkeiten: von der Wand aus (links) und aus einer unterkühlten Schmelze (rechts), die Pfeile geben die Erstarrungsrichtung an

zunächst unter seinen Gefrierpunkt abgekühlt, ohne zu erstarren. So ist es z.B. möglich, Wasser im Labor unter Ausschluß von Umwelteinflüssen wie z.B. Erschütterungen auf eine Temperatur von $-40°$C abzusenken. Silikate können sogar mehrere hundert Grad unter ihren Schmelzpunkt abgekühlt werden, ohne zu kristallisieren. Sie werden zu sehr zähen Flüssigkeiten. Man spricht dann auch von einem glasförmigen Zustand. Obwohl unter dem Gefrierpunkt der feste Zustand eines Materials auf einem niedrigeren Energieniveau als der flüssige Zustand liegt, wird nicht der energetisch niedrigere feste Zustand angenommen. Dies liegt daran, daß eine Energiebarriere überwunden werden muß, um den Phasenwechsel anzustoßen und von dem metastabilen flüssigen in den stabilen festen Zustand zu gelangen. Diese Barriere wird umso niedriger, je tiefer die Temperatur sinkt.
Allerdings ist es durch das Einbringen von Kristallisationskernen in unterkühlte Flüssigkeiten oder durch Erschütterungen meist sehr leicht möglich, diese Energiebarriere zu überwinden und eine sehr schnelle Erstarrung auszulösen. Die Schmelzenergie muß dabei über das Fluid abtransportiert werden. Neben der Stefan-Bedingung spielt jetzt in der Modellbildung die Gibbs-Thomson-Bedingung eine wesentliche Rolle, die, wie wir in Kapitel 2 sehen werden, einen Zusammenhang zwischen dem Unterkühlungsgrad, der Geschwindigkeit und der Krümmung der Phasengrenze sowie dem Druck an der Phasengrenze herstellt.
Im Gegensatz zum stabil verlaufenden Verfestigungsprozeß von der Wand aus ist die Erstarrung unterkühlter Flüssigkeiten ein instabiler Prozeß. So hängt die Geschwindigkeit der Phasengrenze neben dem Unterkühlungsgrad auch von der Krümmung der Phasengrenze ab. Eine Erhöhung der Unterkühlung wirkt beschleunigend, eine hohe Krümmung dagegen bremsend. Dieses Gleichgewicht kann zusätzlich durch anisotrope Zusammenhänge der genannten Größen beeinflußt werden. So kann sich zum Beispiel eine große Krümmung beim Wachstum in eine bestimmte Richtung stärker auswirken als beim Wachstum in eine andere Richtung. Das Zusammenspiel dieser Effekte führt zu den vielfältigen Strukturen beim Kristallwachstum.
Die Erstarrung von Legierungen kann mathematisch ähnlich wie die Erstarrung von Reinstoffen aus einer unterkühlter Schmelze formuliert werden. Sie ist ein ebenso instabiler Prozeß. Allerdings dominiert hierbei nicht die Wärmeausbreitung den Verlauf der Erstarrung, sondern die Ausbreitung chemischer Stoffe. Die Erstarrung von Legierungen wird daher meist mit einem isothermen Modell beschrieben, das als variable Größe nur das chemische Potential einer Legierungskomponente beinhaltet [Langer, 1980], [Kurz & Fisher, 1986]. Für dieses Potential, das von der Stoffkonzentration abhängt, läßt sich wie für die Temperatur bei Reinstoffen eine Diffusionsgleichung formulieren, die an der Phasengrenze mit einer der Stefan- und der Gibbs-Thomson-Bedingung analogen Bedingung ergänzt wird. So lassen sich die dendritischen Mikrostrukturen in erstarrten Legierungen beschreiben. Als zusätzliches Problem bei der Modellbildung kommt hier die Existenz von heterogenen Zonen (*mushy regions*) hinzu, die gleichzeitig erstarrtes und flüssiges Material enthalten.
Einen guten Überblick über die mathematische Modellbildung bei Gefrierprozessen liefern die Bücher [Kurz & Fisher, 1986] und [Alexiades & Solomon, 1993] sowie die Übersichtsartikel [Rappaz, 1989] und [Battle, 1992].

1.2 Numerische Simulation des Kristallwachstums

Neben der experimentellen und theoretischen Untersuchung physikalischer Phänomene etabliert sich in den letzten Jahren mehr und mehr die numerische Simulation als dritter Weg. Die theoretisch hergeleiteten mathematischen Gleichungen sind meist so komplex, daß sie analytisch nicht mehr zu lösen sind. Die moderne Computertechnik erlaubt es aber, mit Diskretisierungsmethoden die Gleichungen näherungsweise zu lösen. Mit wachsender Rechnerleistung und verbesserten Algorithmen können so physikalische Versuche mehr und mehr ergänzt und zum Teil ersetzt werden. Neben der Einsparung aufwendiger Versuchsaufbauten kann die numerische Simulation auch zu gänzlich neuen Erkenntnissen führen. So ist es im Vergleich zu physikalischen Experimenten wesentlich schneller möglich, bestimmte Versuchsparameter oder -geometrien zu verändern. Außerdem können im gesamten Versuchsgebiet Meßdaten gewonnen werden, wohingegen im Experiment nur an bestimmten Punkten Meßgeräte eingesetzt werden können. Schließlich können Simulationen auch dann durchgeführt werden, wenn Experimente gar nicht möglich sind. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn das Experiment zu gefährlich wäre, die Abmessungen des Experiments zu groß oder zu klein wären oder die Vorgänge sehr langsam oder sehr schnell ablaufen.

Die Berechnung von Strömungen und des Wärmetransports sind zwei der wichtigsten Einsatzgebiete der numerischen Simulation. Zur Lösung der Standardprobleme gibt es zahlreiche numerische Algorithmen. Eine Übersicht über die Verfahren in der Strömungsmechanik bieten z.B. [Roache, 1976], [Chorin & Marsden, 1979], [Peyret & Taylor, 1983], [Anderson et al., 1984], [Sod, 1985], [Oran & Boris, 1987], [Fletcher, 1991] und [Quaterpelle, 1993]. Bücher, die die Simulation des Wärmetransports behandeln, sind u.a. [Patankar, 1980], [Shih, 1984] und [Minkowycz, 1988]. Darüber hinaus gibt es Fachzeitschriften wie das International Journal for Numerical Methods in Fluids, Numerical Heat Transfer A & B und das International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, die nur aktuelle Forschungsberichte aus diesem Bereich veröffentlichen. Die am weitesten verbreiteten Diskretisierungsmethoden sind Finite Elemente, Finite Differenzen und Finite Volumen. Es kommen aber u.a. auch Kollokations- und Spektralmethoden zum Einsatz.

Die Simulation von Phasenübergängen erfordert die Behandlung von a priori unbekannten, sich bewegenden Rändern, die an die verwendeten Algorithmen eine zusätzliche Herausforderung stellen. Dabei stellt das Stefan-Problem, bei dem neben der Temperaturgleichung nur die Stefan-Bedingung an der Phasengrenze betrachtet wird, eine der klassischen Problemstellungen in der numerischen Behandlung freier Randwertprobleme dar.

Die numerischen Verfahren für freie Randwertprobleme teilen sich in mehrere Klassen auf: in Front-Tracking-, Front-Fixing- und Fixed-Domain-Methoden, siehe z.B. [Crank, 1984]. Bei Front-Tracking-Methoden wird der Rand explizit dargestellt. Dabei wird das Diskretisierungsgitter entweder mitbewegt, oder die Punkte eines festen Gitters werden je nach Lage des Randes aufgeteilt. Front-Fixing-Methoden transformieren das Gebiet dagegen so, daß der Rand immer auf der gleichen Linie zu liegen kommt und sich die Transformationsfunktion mit der Zeit ändert. Fixed-Domain-Methoden schließlich verwenden eine zusätzliche Funktion, an Hand der entschieden wird, wo der Rand verläuft. Ja nach Lage der Punkte des festen Gitters werden dann gegebenenfalls unterschiedliche Formeln betrachtet. Sehr weit verbreitet ist hier die Enthalpie-Methode (siehe u.a. [Crank, 1984], [Voller et al., 1990], [Alexiades & Solomon, 1993]), bei der die Stefan-Bedingung in die Energiegleichung integriert wird, in dem man die Energiegleichung

für die Enthalpie statt für die Temperatur formuliert. Die Enthalpie unterscheidet sich von Fluid zu Feststoff um die latente Wärme. Die Lage der Phasengrenze kann dann aus der Größe der Enthalpie ermittelt werden.
Die erste Arbeit, in der die numerische Simulation von Gefrierprozessen unterkühlter Schmelzen unter Berücksichtigung der Stefan- und der Gibbs-Thomson-Bedingung an der Phasengrenze beschrieben wird, ist [Smith, 1981]. Sie basiert auf der Enthalpie-Methode. Es wird aber wie in [Tacke & Harnisch, 1991], wo diese Methode auf drei Raumdimensionen erweitert wird, berichtet, daß das Wachstum des Festkörpers von dem numerischen Gitter bestimmt wird und somit die Diskretisierung unphysikalische Effekte hervorruft.
Eine Erweiterung der Enthalpie-Methode stellt das in [Fix & Lin, 1988], [Kobayashi, 1993] und [Caginalp & Socolovsky, 1994] verwendete Phasenfeld-Modell dar. Im Gegensatz zur Enthalpie-Methode wird hier nicht die an der Phasengrenze unstetige Enthalpie als Unbekannte verwendet, sondern neben der Temperatur eine Phasen-Funktion ϕ. Im Feststoff wird diese Funktion auf -1, im Fluid auf +1 gesetzt. Allerdings wird ϕ in einem Übergangsbereich der Breite ε um die Phasengrenze geglättet, so daß ϕ stetig wird. Die Phasengrenze entspricht dann einer Null-Höhenlinie der Phasen-Funktion.
Dem Phasenfeld-Modell sehr ähnlich ist die Level-Set-Methode, die in [Sethian & Strain, 1992] in der Verbindung mit Randintegral-Methoden auf das Erstarrungsproblem angewendet wird.
Weitere Lösungsansätze verwenden Finite Elemente auf mit Front-Tracking-Methoden bewegten Gittern ([Sullivan et al., 1987]). [Schmidt, 1996] verwendet adaptive Finite-Element-Methoden zur Lösung des Problems in drei Raumdimensionen. In [Almgren, 1993] wird schließlich ein Variationsansatz verwendet, bei dem ein verallgemeinertes Energiefunktional minimiert wird. [Mackenbrock, 1995] entwickelte eine verallgemeinerte Enthalpie-Methode, mit der ein gemischtes thermisch-chemisches Erstarrungsmodell numerisch gelöst wird.
Der Einfluß von Konvektionsströmungen auf den Gefrierprozeß ohne Beachtung der Gibbs-Thomson-Bedingung wird in [Yeoh et al., 1990] mit Fixed-Domain-Methoden und Finiten Differenzen und in [Oosthuizen & Paul, 1996] mit Finiten Elementen numerisch untersucht.

1.3 Zu dieser Arbeit: Der Einfluß von Dichteunterschieden

Wir wollen uns in dieser Arbeit auf die Verfestigung von Reinstoffen aus unterkühlten Schmelzen beschränken und hier insbesondere den Einfluß von Dichteunterschieden beim Gefrieren mit berücksichtigen. Die meisten physikalischen Stoffe unterliegen beim Übergang von der flüssigen zur festen Phase einer Dichteänderung. Am bekanntesten ist, daß sich Wasser um circa 10 Prozent ausdehnt, was zum Beispiel dazu führt, daß mit Wasser gefüllte Flaschen im Gefrierfach platzen können. Es gibt allerdings auch Stoffe, die sich zusammenziehen. So hat u.a. festes Lithium ein um 25 Prozent geringeres Volumen als flüssiges Lithium. Bei solchen Stoffen können also Löcher und Risse beim Gefrieren enstehen.
Die vorliegende Arbeit soll nun einen Beitrag dazu leisten, den Einfluß der Dichteunterschiede auf den Gefrierprozeß unterkühlter Fluide mit dem Hilfsmittel der numerischen Simulation zu untersuchen.
Dazu erweitern wir das Modell für das Erstarren unterkühlter Schmelzen, das die Stefan- und die Gibbs-Thomson-Bedingung enthält, um die Berücksichtigung von Dichteunterschieden beim Gefrieren. Neben dem Auftrieb wärmeren Fluids wird hier die Strömung durch die Expansion

bzw. Kontraktion des Stoffes beim Phasenübergang angetrieben. Außer der Energiegleichung muß also auch die Strömung berücksichtigt werden.
In Kapitel 2 wird zunächst die Herleitung des mathematischen Modells beschrieben. In Kapitel 3 entwickeln wir dann einen Algorithmus, der die Lösung des Modells näherungsweise bestimmt. Dabei spaltet sich der Algorithmus in ein Verfahren zur Berechnung der Temperatur und eines zur Berechnung der Strömung in veränderlichen Geometrien auf. Beide Verfahren arbeiten mit Finiten Differenzen als Diskretisierungsmethode auf äquidistanten Gittern. Zur Beschreibung der freien Ränder verwenden wir eine Front-Tracking-Methode. Dabei werden die Ränder mit einer eigenen Datenstruktur beschrieben, mit deren Hilfe die Zellen des zugrundeliegenden Gitters in Fluid-, Feststoff- und restliche Zellen aufgeteilt werden und die Diskretisierungsabstände in der Nähe der Ränder modifiziert werden. In Kapitel 4 zeigen wir dann zahlreiche Simulationsbeispiele, die die Mächtigkeit des vorgeschlagenen Algorithmus' belegen.
Ich bedanke mich insbesondere bei Prof. Dr. Christoph Zenger und Prof. Dr. Michael Griebel für die Aufgabenstellung und die vielfältigen Ideen und Tips bei der Erstellung dieser Arbeit. Bei Dr. Willi Merz bedanke ich mich für die Herleitung des dieser Arbeit zugrunde liegenden mathematischen Modells. Weiterhin gilt mein Dank Dr. Hans-Joachim Bungartz und Dipl.-Phys. Christoph Kranz für die kritische Durchsicht dieser Arbeit und meinen Kollegen Dipl.-Inf. Ralf Ebner, Dipl.-Inf. Anton Frank, Dipl.-Math. Thomas Grauschopf, Dipl.-Math. Florian Meier, Dr. Alexander Pfaffinger und Dr. Stefan Zimmer für vielfältige Tips. Vor allem aber war Dipl.-Math. Thomas Dornseifer jederzeit zu Diskussionen mathematischer und programmier-technischer Fragestellungen bereit und half mir auch bei so manchen Problemen während der Gestaltung der Abbildungen und des Layouts dieser Arbeit. Nicht zuletzt danke ich der Bayerischen Forschungsstiftung und dem Bayerischen Forschungsverbund für Technisch-Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen FORTWIHR für die finanzielle Unterstützung.

2 Das mathematische Modell

Zunächst wollen wir die Herleitung des mathematischen Modells kurz beschreiben. Grundlage sind die Erhaltungsgleichungen für Energie, Masse und Impuls, aus denen wir partielle Differentialgleichungen für die Temperatur T, für die Fluidgeschwindigkeit $\vec{v}$ und für den Druck im Fluid p herleiten können. Dazu betrachten wir einen mit unterkühltem Fluid gefüllten, nach oben offenen Behälter Ω_0. In das Fluid wird zum Zeitpunkt $t = 0$ ein Kristallisationskern eingeführt, an dem das Fluid mit der Zeit gefriert. Das Gebiet das vom Fluid eingenommen wird, bezeichnen wir mit Ω_l und das Gebiet des Feststoffs mit Ω_s. Der Rest des Behälters ist mit Luft gefüllt. Allerdings vernachlässigen wir dort die Strömung sowie Temperatur- und Druckunterschiede, so daß dieses Gebiet in den Simulationen nicht betrachtet wird. Die Grenze zwischen Fluid und Feststoff ist Γ_1, die Grenze zwischen Fluid und Luft ist Γ_2 und die Wand des Behälters ist Γ_3 (siehe Abbildung 2.1). Wir setzen dabei voraus, daß das Eis in Ruhe ist, also $\vec{v} = 0$ in Ω_s gilt.

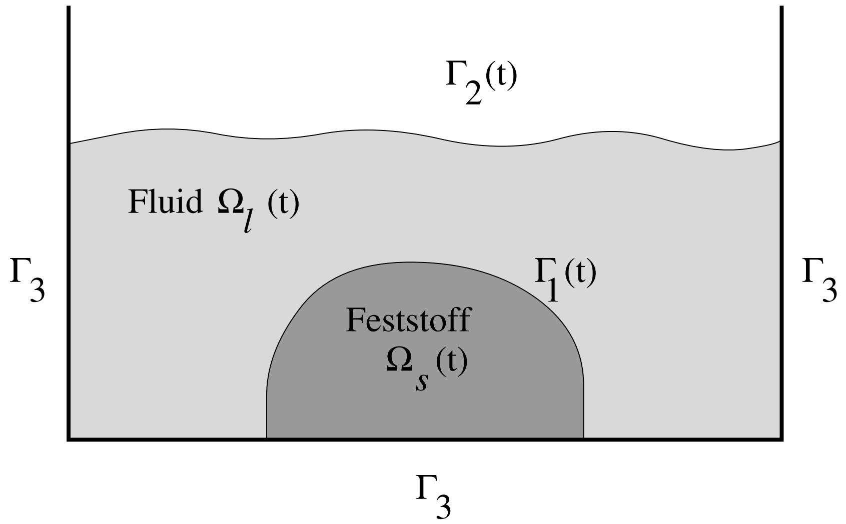


Abbildung 2.1 Geometrie des mit unterkühlter Flüssigkeit gefüllten Behälters

Bei der Herleitung müssen wir insbesondere auf die Randbedingungen an der Phasengrenze Γ_1 eingehen, die durch die Stefan-Bedingung und die Gibbs-Thomson-Bedingung gegeben sind. Bei Berücksichtigung von Dichteunterschieden während der Erstarrung müssen beide Bedingungen gegenüber dem bezüglich der Strömung im Fluid stationären Fall erweitert werden.

2.1 Die Gleichungen für die Temperatur

Zur Herleitung der Temperaturgleichung betrachten wir zunächst die Enthalpie e, mit der der Wärmeinhalt E eines Stoffes mit Dichte ρ und Volumen V berechnet werden kann (vgl. z.B. [Bejan, 1984], [Alexiades & Solomon, 1993]):

$$E = \int_V \rho\, e\, d\vec{x}. \tag{2.1}$$

Die Enthalpie hängt von der Temperatur des Stoffs und dessen Phase ab. Sie unterscheidet sich bei der Schmelztemperatur T_m zwischen Feststoff und Fluid um die latente Wärme bzw. Schmelzwärme L:

$$e := \begin{cases} c_l\,(T - T_m) & \text{im Fluid } \Omega_l, \\ c_s\,(T - T_m) - L & \text{im Feststoff } \Omega_s. \end{cases} \tag{2.2}$$

Dabei ist c die spezifische Wärmekapazität.
Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik folgt, daß die zeitliche Änderung der Enthalpie e der Wärmezufuhr gleichzusetzen ist. Letztere setzt sich zusammen aus inneren Wärmequellen F (z.B. durch elektrische Arbeit) und dem Wärmefluß $\vec{q}$ über den Rand:

$$\frac{\partial(\rho\, e)}{\partial t} = -\mathrm{div}\,\vec{q} + F. \tag{2.3}$$

Der Wärmefluß $\vec{q}$ kann in einen zum Temperaturgradienten proportionalen *konduktiven* Anteil und einen zur Fluidgeschwindigkeit und zum Enthalpiegehalt proportionalen *konvektiven* Anteil aufgeteilt werden:

$$\vec{q} = -k\,\mathrm{grad}\,T + \rho\, e\, \vec{v}. \tag{2.4}$$

Dabei ist k der Wärmeleitkoeffizient.
Unter Vernachlässigung der inneren Wärmequellen ergibt sich aus (2.2), (2.3) und (2.4) die Temperaturgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathrm{div}(\vec{v}\,T) = \frac{k}{\rho\, c} \triangle T. \tag{2.5}$$

Wir setzen dabei voraus, daß die Stoffgrößen c, k und ρ in jeder Phase konstant sind. Mit der Annahme, daß der Feststoff in Ruhe ist, und unter Verwendung der Indizes l für das Fluid und s für den Feststoff, erhalten wir die zwei Temperaturgleichungen für das Fluid

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathrm{div}(\vec{v}\,T) = \frac{k_l}{\rho_l\, c_l} \triangle T \tag{2.6}$$

und für den Feststoff

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_s}{\rho_s\, c_s} \triangle T. \tag{2.7}$$

Als Randbedingung an der Behälterwand können wir die Temperatur vorgeben,

$$T(\vec{x}) = T_{\Gamma_3}(\vec{x}), \qquad \vec{x} \in \Gamma_3, \tag{2.8}$$

oder den Wärmefluß über die Wand,

$$k\,\frac{\partial T}{\partial n}(\vec{x}) = \vec{q}_{\Gamma_3}(\vec{x}), \qquad \vec{x} \in \Gamma_3. \tag{2.9}$$

Einen Spezialfall stellt hier die adiabatische Randbedingung mit $\vec{q}_{\Gamma_3} = 0$ dar, die bei isolierten Wänden verwendet wird.
An der Fluidoberfläche Γ_2 ist der Wärmefluß proportional zur Differenz der Temperatur des Fluids $T(\vec{x})$ und der Luft T^*:

$$k\,\frac{\partial T}{\partial n}(\vec{x}) = -h\,(T(\vec{x}) - T^*), \qquad \vec{x} \in \Gamma_2. \tag{2.10}$$

Der Proportionalitätsfaktor ist der Wärmeübergangskoeffizient h. Die Normalenvektoren $\vec{n}$ an Γ_2 und Γ_3 sind jeweils nach außen gerichtet.
Am schwierigsten sind die Randbedingungen an der Phasengrenze Γ_1 zwischen Fluid und Feststoff, die Stefan-Bedingung und die Gibbs-Thomson-Bedingung, zu gewinnen. Sie beeinflussen wesentlich den gesamten Gefrierprozeß. Im folgenden orientieren wir uns an der Arbeit von Willi Merz in [Griebel et al., 1997].
Zur Herleitung der Stefan-Bedingung stellen wir die Energiebilanz für das Fluid und den Feststoff auf. Dazu betrachten wir zunächst den Wärmeinhalt des Fluids:

$$E_l(t) := \int_{\Omega_l(t)} \rho_l\, e_l\, d\vec{x}. \tag{2.11}$$

Die Zeitableitung von Integralen skalarer Funktionen f über ein sich mit der Zeit änderndes Gebiet $\Omega(t)$, das sich mit einer Geschwindigkeit $\vec{v}$ bewegt, kann mit dem Transporttheorem

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega(t)} f\, d\vec{x} = \int_{\Omega(t)} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(f\,\vec{v})\right) d\vec{x} \tag{2.12}$$

umgewandelt werden. Die Anwendung des Transporttheorems auf die Wärme (2.11) ergibt mit dem Gauß'schen Integralsatz

$$\frac{dE_l}{dt} = \int_{\Omega_l(t)} \frac{\partial(\rho_l\, e_l)}{\partial t} d\vec{x} - \int_{\Gamma_1} \rho_l\, e_l\, \vec{V}_{\Gamma_1}\cdot\vec{n}\, d\vec{s} + \int_{\Gamma_2} \rho_l\, e_l\, \vec{V}_{\Gamma_2}\cdot\vec{n}\, d\vec{s}. \tag{2.13}$$

Dabei ist $\vec{V}_{\Gamma_i}$ die Geschwindigkeit des Rands Γ_i, $i = 1, 2$, und die Behälterwand Γ_3 ist in Ruhe. Um nicht von der Notation anderer Arbeiten abzuweichen, ist der Normalenvektor $\vec{n}$ auf Γ_1 *ins Fluid* gerichtet und auf Γ_2 *aus dem Fluid heraus*. Unter Verwendung der Energiegleichung (2.6) in der Enthalpieform

$$\frac{\partial(\rho_l\, e)}{\partial t} = -\operatorname{div}(\rho_l\, e_l\, \vec{v}) + k_l \,\triangle T \tag{2.14}$$

ergibt sich

$$\frac{dE_l}{dt} = -\int_{\Gamma_1} \rho_l\, e_l(\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v})\cdot\vec{n}\, d\vec{s} - \int_{\Gamma_1} k_l\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_l d\vec{s} + \int_{(\Gamma_2\cup\Gamma_3)\cap\partial\Omega_l} k_l\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_l d\vec{s}. \tag{2.15}$$

Analog kann für die zeitliche Änderung des Wärmeinhalts des sich nicht bewegenden Feststoffs

$$\frac{dE_s}{dt} = \int_{\Gamma_1} \rho_s\, e_s\, \vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n}\, d\vec{s} + \int_{\Gamma_1} k_s\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_s\, d\vec{s} + \int_{(\Gamma_2 \cup \Gamma_3) \cap \partial\Omega_s} k_s\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_s\, d\vec{s} \tag{2.16}$$

hergeleitet werden.
Aus der Energieerhaltung folgt nun, daß dem Gesamtsystem nur von außen Wärme zugeführt werden kann, d.h.

$$\frac{dE_l}{dt} + \frac{dE_s}{dt} = \int_{\Gamma_2 \cup \Gamma_3} k\, \frac{\partial T}{\partial n}\, d\vec{s}. \tag{2.17}$$

Mit (2.15) und (2.16) folgt

$$\int_{\Gamma_1} \left((\rho_l\, e_l\, (\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v}) - \rho_s\, e_s\, \vec{V}_{\Gamma_1}) \cdot \vec{n} + k_l\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_l - k_s\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_s \right) d\vec{s} = 0. \tag{2.18}$$

Schließlich setzen wir die Enthalpie e gemäß (2.2) ein und gehen von der integralen zur lokalen Form über. Dies ist möglich, weil die eben angestellten Betrachtungen nicht nur für den gesamten Fluidbehälter, sondern für jedes beliebige Kontrollvolumen gültig sind. Es ergibt sich so mit dem Betrag der Geschwindigkeit der Phasengrenze

$$V_{\Gamma_1} := \vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n} \tag{2.19}$$

die Stefan-Bedingung

$$\left[k\, \frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l + \rho_l\, c_l (T - T_m)(\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v}) \cdot \vec{n} - \rho_s\, c_s (T - T_m) \vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n} = -\rho_s\, L\, V_{\Gamma_1}. \tag{2.20}$$

Dabei bezeichnet $[.]_s^l$ den Sprung an der Phasengrenze:

$$\left[k\, \frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l := k_l\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_l - k_s\, \frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_s. \tag{2.21}$$

Betrachtet man Gefriervorgänge ohne Berücksichtigung von Dichteunterschieden und setzt man außerdem die spezifischen Wärmekapazitäten c in Fluid und Feststoff gleich, so erhält man die klassische Stefan-Bedingung

$$\left[k\, \frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l = -\rho\, L\, V_{\Gamma_1}. \tag{2.22}$$

Als zweite Bedingung an der Phasengrenze Γ_1 leiten wir die Gibbs-Thomson-Bedingung her, die besagt, daß die Temperatur der Phasengrenze nicht genau der Schmelztemperatur planarer stationärer Grenzflächen entspricht, sondern von der Krümmung, der Geschwindigkeit und dem Druck abhängt. Zur Herleitung betrachten wir wiederum die Enthalpie, die sich aus dem chemischen Potential g, der Temperatur T und der Entropie s wie folgt berechnet:

$$e = g + Ts. \tag{2.23}$$

Wenn wir dies in die lokale Form von (2.18) einsetzen und mit $\vec{j}_s := -\rho_s \vec{V}_{\Gamma_1}$ bzw. $\vec{j}_l := -\rho_l(\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v})$ den Massenfluß über die Phasengrenze auf der Feststoff- bzw. Fluidseite bezeichnen, so erhalten wir

$$\left[(g + Ts)\, \vec{j} \cdot \vec{n} - k\, \frac{\partial T}{\partial n} \right]_s^l = 0. \tag{2.24}$$

Mit der Entropie-Produktionsrate

$$\sigma(T) := \left[s\, \vec{j} \cdot \vec{n} - \frac{k}{T} \frac{\partial T}{\partial n} \right]_s^l \tag{2.25}$$

ergibt sich hieraus

$$\left[g\, \vec{j} \cdot \vec{n} \right]_s^l = -\sigma(T)\, T. \tag{2.26}$$

In [Charach & Zemel, 1992] wird für das chemische Potential g die Beziehung

$$-\frac{1}{T} \, [g]_s^l = a\, \vec{j} \cdot \vec{n} \tag{2.27}$$

mit dem kinetischen Koeffizienten a postuliert, so daß für die Entropie-Produktionsrate aus (2.26) und (2.27)

$$\sigma(T) = a\, (\vec{j} \cdot \vec{n})^2 \tag{2.28}$$

folgt. Aus (2.26) wird dann unter Berücksichtigung der Stetigkeit des Massenflusses an der Phasengrenze und mit $\vec{j} = -\rho_s \vec{V}_{\Gamma_1}$

$$[g]_s^l = a\, \rho_s\, T_m\, \vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n}. \tag{2.29}$$

Unter Verwendung der thermodynamischen Beziehungen bei konstantem Druck p bzw. konstanter Temperatur T

$$\left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_p = -s \qquad \text{und} \qquad \left. \frac{\partial g}{\partial p} \right|_T = -\frac{1}{\rho} \tag{2.30}$$

wird ebenfalls in [Charach & Zemel, 1992] das chemische Potential g um die Schmelztemperatur T_m und einen Referenzdruck p^* entwickelt. Lassen wir die Terme quadratischer und höherer Ordnung weg, so ergibt sich

$$g(T,p) = g(T_m, p^*) + \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_{(T_m, p^*)} (T - T_m) + \left. \frac{\partial g}{\partial p} \right|_{(T_m, p^*)} (p - p^*). \tag{2.31}$$

Mit (2.30) folgt

$$g(T,p) - g(T_m, p^*) = -s|_{T_m} (T - T_m) + \frac{p - p^*}{\rho}. \tag{2.32}$$

Nach [Alexiades & Solomon, 1993] gilt bei der Schmelztemperatur T_m planarer Phasengrenzen für die Entropiedifferenz an der Phasengrenze

$$(s|_l - s|_s)|_{T_m} = \frac{L}{T_m}, \tag{2.33}$$

so daß wir schließlich für die Differenz des chemischen Potentials

$$[g]_s^l = -\frac{L\,(T - T_m)}{T_m} + \left[\frac{p - p^*}{\rho}\right]_s^l \tag{2.34}$$

erhalten. Wenn wir dies nun in (2.29) einsetzen, ergibt sich

$$\frac{T - T_m}{T_m} = -\frac{a\,\rho_s\,T_m\,V_{\Gamma_1}}{L} + \frac{1}{L}\left[\frac{p - p^*}{\rho}\right]_s^l. \tag{2.35}$$

Außerdem gilt für die Druckdifferenz an der Phasengrenze die Laplace-Young-Beziehung

$$p|_s = p|_l + \gamma_1\,\kappa_1, \tag{2.36}$$

siehe z.B. [Alexiades & Solomon, 1993, S. 89]. Hier ist γ_1 die Oberflächenspannung an der Phasengrenze und κ_1 die mittlere Krümmung der Phasengrenze, deren Vorzeichen so gewählt ist, daß die Krümmung für konvexen Feststoff positiv ist. Wir können so letztendlich aus (2.35) und (2.36) die Gibbs-Thomson-Bedingung

$$\frac{T - T_m}{T_m} = -\frac{a\,\rho_s\,T_m\,V_{\Gamma_1}}{L} - \frac{\gamma_1\,\kappa_1}{L\,\rho_s} + \left[\frac{1}{\rho}\right]_s^l \frac{p_l - p^*}{L} \tag{2.37}$$

ableiten. Dies entspricht bis auf den kinetischen Term auch der in [Alexiades & Solomon, 1993, S. 93] hergeleiteten Beziehung.
Insbesondere folgt aus der Gibbs-Thomson-Bedingung, daß die Temperatur der Phasengrenze um so mehr nach unten von der Schmelztemperatur abweicht, je größer die Krümmung κ_1 und die Geschwindigkeit V_{Γ_1} ist. Andererseits beschleunigt eine große Unterkühlung die Geschwindigkeit und starke Krümmungen schwächen diese ab, wie auch die Mullins-Sekerka Stabilitätsanalyse zeigt (siehe [Mullins & Sekerka, 1963], [Langer, 1980]).
Die dritte Bedingung an der Phasengrenze neben der Stefan- und der Gibbs-Thomson-Bedingung ist die Stetigkeit der Temperatur

$$T|_l = T|_s. \tag{2.38}$$

2.2 Die Gleichungen für die Strömung

Die Strömung im Fluid Ω_l kann durch die Navier-Stokes-Gleichungen für das Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}$ und den Druck p beschrieben werden. Sie leiten sich aus den Erhaltungssätzen für Masse und Impuls her. Dazu betrachten wir ein beliebiges Kontrollvolumen des Fluids $V(t) \subset \Omega_l(t)$, das sich mit der Zeit bewegt. Die Massenerhaltung besagt nun, daß die Masse des Kontrollvolumens in der Zeit konstant bleiben muß, d.h.

$$\frac{d}{dt}\int_{V(t)} \rho_l\, d\vec{x} = 0. \tag{2.39}$$

Mit dem Transporttheorem (2.12) folgt daraus

$$\int_{V(t)} \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \mathrm{div}\,(\rho_l\,\vec{v})\right)\, d\vec{x} = 0. \tag{2.40}$$

Da diese Gleichung für beliebige Kontrollvolumina V gilt, muß der Integrand Null sein, woraus sich die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \, \vec{v}) \, d\vec{x} = 0 \tag{2.41}$$

ergibt. Wenn wir Dichteänderungen innerhalb des Fluids vernachlässigen, d.h. $\rho_l = \text{const.}$ wählen, wird aus (2.41) die Kontinuitätsgleichung für inkompressible Fluide

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0. \tag{2.42}$$

Der Impuls von V ist das Produkt aus Masse und Geschwindigkeit:

$$\vec{m} := \int_{V(t)} \rho_l \, \vec{v} \, d\vec{x}. \tag{2.43}$$

Nach dem zweiten Newtonschen Gesetz entspricht der zeitlichen Änderung des Impulses die Summe der auf das Kontrollvolumen wirkenden Kräfte:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \sum_i F_i. \tag{2.44}$$

Diese Summe setzt sich aus Volumen- und Oberflächenkräften zusammen. Volumenkräfte sind beispielsweise die Gravitationskraft oder magnetische Kräfte. Oberflächenkräfte werden unter anderem durch Druck oder Reibung hervorgerufen. Wir wollen hier die Schwerkraft

$$F_1 = \int_{V(t)} \rho_l \, \vec{g} \, d\vec{x} \tag{2.45}$$

mit der Schwerebeschleunigung $\vec{g}$ und die in inkompressiblen Newtonschen Fluiden wirkende Oberflächenkraft

$$F_2 = \int_{\partial V(t)} (-p + \tau) \, \vec{n} \, d\vec{s} \tag{2.46}$$

mit der dynamischen Viskosität μ und dem viskosen Anteil des Spannungstensors

$$\tau := \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)_{i,j=1,2(,3)}, \tag{2.47}$$

der die Reibungskraft beschreibt, betrachten. Mit diesen Krafttermen erhalten wir aus (2.44) unter Verwendung des Transporttheorems (2.12) und der Kontinuitätsgleichung (2.42) die Impulsgleichung in differentieller Form:

$$\rho_l \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v} \otimes \vec{v}) \right) = -\operatorname{grad} p + \mu \, \triangle \vec{v} + \rho_l \, \vec{g}. \tag{2.48}$$

Die Schreibweise $\vec{a} \otimes \vec{b}$ stellt das Tensorprodukt zweier Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ dar:

$$(\vec{a} \otimes \vec{b})_{i,j} := a_i \, b_j. \tag{2.49}$$

Die Rückkopplung der Temperatur auf die Strömung wird üblicherweise durch die Boussinesq-Approximation modelliert [Oberbeck, 1879], [Boussinesq, 1903]. Dabei wird der Einfluß der Temperatur, den sie auf die Dichte des Fluids hat, auf die Gravitationskraft beschränkt. Außerdem wird die Dichte um eine Referenztemperatur, zu der wir hier die Schmelztemperatur T_m bestimmen, linearisiert:

$$\rho_l(T) = \rho_l^\infty(1 - \beta\,(T - T_m)). \tag{2.50}$$

Dabei bezeichnet β den Volumenexpansionskoeffizienten

$$\beta := -\frac{1}{\rho_l^\infty}\frac{\partial \rho_l}{\partial T}. \tag{2.51}$$

Der Einfachheit halber schreiben wir im folgenden statt ρ_l^∞ wieder ρ_l. Aus (2.48) wird so unter Berücksichtigung dieser Auftriebskraft

$$\rho_l\,\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}\otimes\vec{v})\right) = -\operatorname{grad} p + \mu\,\triangle\vec{v} + \rho_l\,(1 - \beta\,(T - T_m))\,\vec{g}. \tag{2.52}$$

Eine Reihe von Simulationsbeispielen von Strömungen, die alleine durch Temperaturunterschiede angetrieben werden, ist in [Griebel et al., 1995] zu finden. In unserem Fall wird die Strömung allerdings nicht alleine durch die Temperaturunterschiede, sondern auch durch die Dichteänderung beim Gefrieren, die sich in einer Fluidverdrängung an der Phasengrenze äußert, angetrieben. Dies wird durch die Randbedingung für die Fluidgeschwindigkeit $\vec{v}$ an der Phasengrenze Γ_1 modelliert,

$$\vec{v}(\vec{x}) = \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_l}\right)\,\vec{V}_{\Gamma_1}, \qquad \vec{x}\in\Gamma_1, \tag{2.53}$$

die sich aus der Massenbilanz an der Phasengrenze ergibt. An der freien Oberfläche des Fluids Γ_2 verwenden wir

$$-p\,\vec{n} + \tau\,\vec{n} = -\gamma_2\kappa_2\,\vec{n} - p^*\vec{n}. \tag{2.54}$$

Hier ist p^* der Referenzdruck außerhalb des Fluids, γ_2 der Oberflächenspannungskoeffizient und κ_2 die Krümmung des freien Rands, deren Vorzeichen so gewählt sei, daß κ_2 positiv ist, wenn die Fluidoberfläche konvex ist (siehe [Landau & Lifschitz, 1966]).
An der Behälterwand Γ_3 verwenden wir die Haftbedingung

$$\vec{v}(\vec{x}) = 0, \qquad \vec{x}\in\Gamma_3. \tag{2.55}$$

2.3 Zusammenfassung des gesamten Modells

Zum Abschluß dieses Kapitels wollen wir das gesamte mathematische Modell nochmals übersichtlich zusammenstellen.
Im Fluid Ω_l haben wir die Temperaturgleichung (2.6)

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}\,T) = \frac{k_l}{\rho_l\,c_l}\,\triangle T, \tag{2.56}$$

die Impulsgleichung (2.52)

$$\rho_l \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \mathrm{div}\,(\vec{v} \otimes \vec{v}) \right) = -\mathrm{grad}\, p + \mu \, \triangle \vec{v} + \rho_l \, (1 - \beta \, (T - T_m)) \, \vec{g} \tag{2.57}$$

sowie die Kontinuitätsgleichung (2.42)

$$\mathrm{div}\vec{v} = 0 \tag{2.58}$$

hergeleitet. Die Temperaturverteilung im Feststoff Ω_s wird durch die Temperaturgleichung (2.7)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_s}{\rho_s \, c_s} \triangle T \tag{2.59}$$

beschrieben.
An der Phasengrenze zwischen Fluid und Feststoff gilt die Stefan-Bedingung (2.20)

$$\left[k \, \frac{\partial T}{\partial n} \right]_s^l + \rho_l \, c_l (T - T_m)(\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v}) \cdot \vec{n} - \rho_s \, c_s (T - T_m) \vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n} = -\rho_s \, L \, V_{\Gamma_1}, \tag{2.60}$$

die Gibbs-Thomson-Bedingung (2.37)

$$\frac{T - T_m}{T_m} = -\frac{a \, \rho_s \, T_m \, V_{\Gamma_1}}{L} - \frac{\gamma_1 \, \kappa_1}{L \, \rho_s} + \left[\frac{1}{\rho} \right]_s^l \frac{p_l - p^*}{L}, \tag{2.61}$$

die Randbedingung für die Fluidgeschwindigkeit (2.53)

$$\vec{v}(\vec{x}) = \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_l} \right) \vec{V}_{\Gamma_1}, \qquad \vec{x} \in \Gamma_1, \tag{2.62}$$

und die Stetigkeit der Temperatur (2.38)

$$T|_l = T|_s. \tag{2.63}$$

An der freien Oberfläche des Fluids Γ_2 sind die Temperatur durch (2.10)

$$k \, \frac{\partial T}{\partial n}(\vec{x}) = -h \, (T(\vec{x}) - T^*), \qquad \vec{x} \in \Gamma_2, \tag{2.64}$$

und die Geschwindigkeit durch (2.54)

$$-p \, \vec{n} + \tau \, \vec{n} = -\gamma_2 \kappa_2 \, \vec{n} - p^* \vec{n} \tag{2.65}$$

gegeben.
An der Behälterwand Γ_3 muß die Geschwindigkeit die Haftbedingung (2.55)

$$\vec{v}(\vec{x}) = 0, \qquad \vec{x} \in \Gamma_3, \tag{2.66}$$

und die Temperatur die Dirichlet-Bedingung (2.8)

$$T(\vec{x}) = T_{\Gamma_3}(\vec{x}), \qquad \vec{x} \in \Gamma_3, \tag{2.67}$$

oder die Neumann-Bedingung (2.9)

$$k\,\frac{\partial T}{\partial n}(\vec{x}) = q_{\Gamma_3}(\vec{x}), \qquad \vec{x} \in \Gamma_3, \tag{2.68}$$

erfüllen.

2.4 Spezialfälle

Vernachlässigt man bestimmte Teile des im vorigen Abschnitt beschriebenen mathematischen Modells, so erhält man eine ganze Reihe vereinfachter Modelle, für die zahlreiche numerische Lösungsmethoden entwickelt wurden.

Beschränkt man sich auf die Impulsgleichung (2.57) und die Kontinuitätsgleichung (2.58) sowie Bedingungen am Gebietsrand Γ_3, so kann man instationäre, laminare Strömungen inkompressibler, viskoser Fluide ohne ($\beta = 0$) und mit ($\beta \neq 0$) Temperatureinfluß beschreiben. Dabei kann die Temperatur vorgegeben oder durch die Temperaturgleichung (2.56) gegeben sein. Nimmt man einen sich bewegenden Rand Γ_1 und die Randbedingung (2.62) hinzu, so lassen sich Strömungen, die durch Geometrieänderungen angetrieben werden, modellieren. Für Strömungen mit freien Randwerten muß dagegen der freie Rand Γ_2 mit der Randbedingung (2.65) beachtet werden.

Setzt man dagegen die Dichte im Fluid ρ_l und im Feststoff ρ_s gleich, so entfällt die gesamte Strömungsberechnung, und das Modell reduziert sich auf das rein thermische u.a. in [Langer, 1980], [Sullivan et al., 1987], [Sethian & Strain, 1992], [Schmidt, 1996] betrachtete Modell zur Erstarrung unterkühlter Schmelzen. Dabei werden meist auch die anderen physikalischen Konstanten wie die spezifische Wärmekapazität c und der Wärmeleitkoeffizient k in Fluid und Feststoff gleichgesetzt. Man erhält dann im Gesamtgebiet Ω die Temperaturgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho\, c} \triangle T \tag{2.69}$$

und auf der Phasengrenze Γ_1 die Stefanbedingung

$$\left[k\,\frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l = -\rho\, L\, V_{\Gamma_1} \tag{2.70}$$

sowie die Gibbs-Thomson-Bedingung

$$\frac{T - T_m}{T_m} = -\frac{a\,\rho\, T_m\, V_{\Gamma_1}}{L} - \frac{\gamma_1\, \kappa_1}{L\, \rho}. \tag{2.71}$$

Das Modell wird mit einer Anfangsbedingung und einer Randbedingung auf Γ_3 für die Temperatur komplettiert. Oft wird hier auch der kinetische Term vernachlässigt, d.h. $a = 0$ gesetzt.

Setzt man zusätzlich die Oberflächenspannung $\gamma_1 = 0$, so entfällt die Gibbs-Thomson-Bedingung ganz. Die Temperatur der Phasengrenze ist dann T_m, und man erhält das klassische Stefan-Problem zur Beschreibung von Phasenübergängen.

Betrachtet man schließlich alleine die reduzierte Gibbs-Thomson-Bedingung (2.71) ohne den Temperaturterm, so erhält man die Cahn-Allen-Gleichung für *Mean-Curvature-Flow-Probleme*

$$V_{\Gamma_1} = -\gamma_1 \kappa_1, \tag{2.72}$$

bei denen sich die Oberfläche gemäß ihrer mittleren Krümmung bewegt, [Allen & Cahn, 1972].

3 Der numerische Algorithmus

Als Kernstück dieser Arbeit beschreiben wir jetzt den Algorithmus zur numerischen Approximation der Lösung des im vorigen Kapitel hergeleiteten Modells. Zunächst wollen wir die verschiedenen Möglichkeiten zur Auswahl des Gitters und zur Beschreibung der freien Ränder aufzeigen. Anschließend gehen wir nach einem groben Überblick über den Algorithmus auf seine beiden Teilkomponenten, den Strömungslöser und den Temperaturlöser, genauer ein.

3.1 Das Gitter

In der numerischen Simulation werden Differentialgleichungen, deren Lösung in einem unendlich-dimensionalen Funktionenraum gesucht wird, in der Regel auf einem Gitter diskretisiert. Dabei wird die Lösung nicht mehr in allen Punkten des Grundgebiets gesucht, sondern durch eine endliche Anzahl von Freiheitsgraden, die sich meist mit bestimmten Gitterpunkten identifizieren lassen, approximiert. Die drei gebräuchlichsten Diskretisierungsverfahren sind *Finite Elemente, Finite Volumen* und *Finite Differenzen*.
Bei der *Finiten-Elemente-Methode*, für die eine ausgereifte mathematische Theorie besteht, werden die Differentialgleichungen in einer variationellen, integralen Form geschrieben. Der unendlich-dimensionale Lösungsraum wird dann durch einen endlich-dimensionalen Teilraum ersetzt, der meist stückweise stetige, auf jedem Gitterelement polynomiale Funktionen enthält. Indem als Testfunktionen in der variationellen Formulierung die einzelnen Basisfunktionen des endlich-dimensionalen Teilraums, oder bei Petrov-Galerkin-Ansätzen auch eines anderen Raums, eingesetzt werden, ergeben sich die einzelnen Gleichungen des zu lösenden Gleichungssystems, siehe z.B. [Strang & Fix, 1973], [Ciarlet, 1978], [Braess, 1992].
Bei der *Finiten-Volumen-Methode*, die insbesondere in den Ingenieurwissenschaften eingesetzt wird, wird bei der Diskretisierung von Erhaltungsgleichungen die integrale Form der Differentialgleichung auf einzelnen Gitterelementen betrachtet und mit dem Gauß'schen Integralsatz in ein Oberflächenintegral über den Elementrand umgewandelt. Dann wird der Fluß der einzelnen Größen wie zum Beispiel Masse, Impuls oder Energie über eine Kante (bzw. Seitenfläche in 3D) des Teilelements durch einen im Kantenmittelpunkt lokalisierbaren Term ersetzt. Bei Erhaltungsgleichungen muß nun die Summe der Flüsse über die Kanten eines Gitterelements Null sein, so daß sich für jedes Gitterelement eine Gleichung ergibt, siehe u.a. [Patankar, 1980].
Bei der *Methode der Finiten Differenzen* werden schließlich die Differentialquotienten einer Differentialgleichung durch Differenzenquotienten ersetzt, die Funktionswerte benachbarter Gitterpunkte beinhalten, so daß für jeden Gitterpunkt eine Gleichung entsteht, siehe u.a. [Hackbusch, 1986], [Smith, 1994].
Alle drei Diskretisierungsmethoden beruhen darauf, daß das zugrundeliegende Lösungsgebiet mit einem Gitter überzogen wird. Dabei unterscheidet man gewöhnlich *strukturierte, blockstrukturierte* und *unstrukturierte Gitter*, siehe z.B. [Thompson et al., 1985], [Thompson & Hamann, 1997], vgl. Abbildung 3.1.

Bei der Verwendung *unstrukturierter Gitter* wird ein beliebiges Gebiet in einzelne Dreiecke und Vierecke (in 3D Tetraeder, Prismen und Hexaeder) zerlegt. *Unstrukturierte Gitter* sind die universellste Art, Gebiete mit einem Gitter zu versehen. Es ist allerdings meist sehr aufwendig, ein solches Gitter zu erzeugen und abzuspeichern. So müssen neben den Koordinaten der Eckpunkte der Elemente auch die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den einzelnen Elementen abgespeichert werden. Außerdem dürfen die Elemente nicht zu stumpfe Winkel besitzen. Auch bei sich zeitlich verändernder Geometrie, wie es bei der Simulation von Gefrierprozessen der Fall ist, zeigen sich Nachteile. Entweder muß in jedem Zeitschritt der Gittergenerator neu angeworfen werden oder die Gitterpunkte bewegen sich mit dem Gebiet mit. Letzteres kann aber dazu führen, daß sich in einigen Teilgebieten die Gitterpunkte auseinanderbewegen, in anderen aber häufen oder sich die Zellen stark deformieren. Das Gitter muß dann zumindest lokal adaptiert werden. Darüber hinaus ist ein Transfer zwischen unterschiedlich feinen Gittern oft nur mit einer komplett neuen Vernetzung möglich. So ist es zum Beispiel oft von Interesse, eine Berechnung mit einer höheren Genauigkeit zu wiederholen. Ebenso soll oft nach einer Änderung der physikalischen Parameter auf einem gröberen Gitter eine erste schnelle Vorstudie erstellt werden, nach der entschieden werden kann, ob sich die Berechnung mit höherer Auflösung überhaupt lohnt. Auch bei Mehrgitter- und Multilevelverfahren sind Gitter unterschiedlicher Auflösung erforderlich.

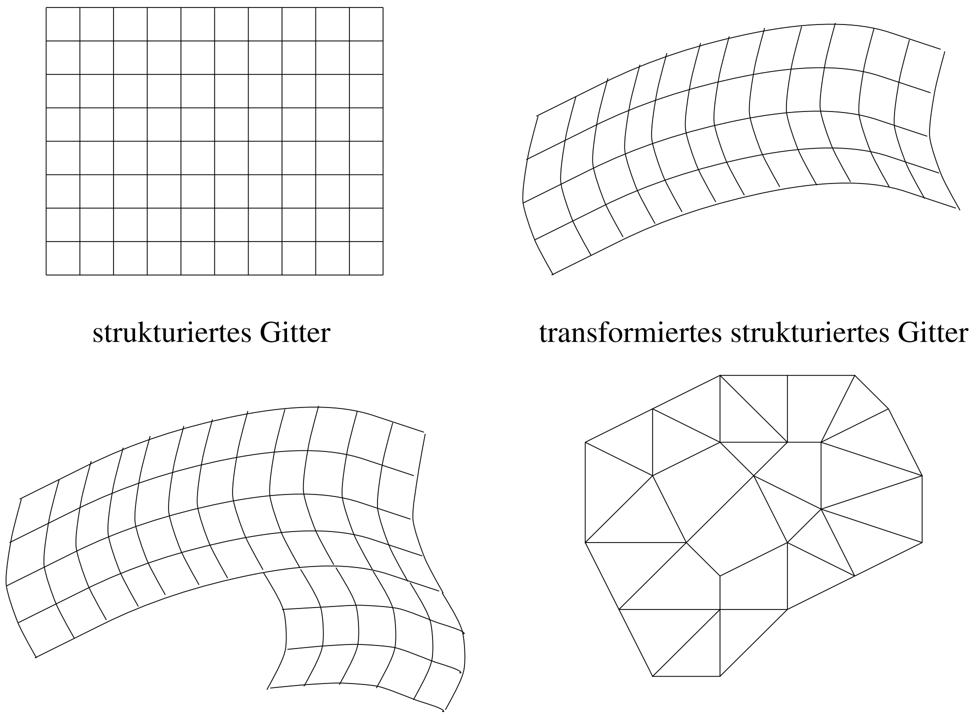


Abbildung 3.1 Verschiedene Gittertypen

Bei *strukturierten Gittern* kann dagegen direkt aus der Position eines Gitterpunktes in der Datenstruktur auf die Koordinaten und die Nachbarpunkte geschlossen werden. Meist werden

rechteckige Grundgebiete mit strukturierten Gittern versehen. Dabei werden randparallele Gitterlinien verwendet, so daß kleine Rechtecke als Gitterelemente entstehen. Diese Rechtecke können durch ein oder zwei Diagonalen auch noch in Dreiecke zerlegt werden. Die Unbekannten werden dann in einer array-artigen Datenstruktur abgespeichert. Da die Abspeicherung der Punktkkordinaten entfällt, benötigen *strukturierte Gitter* wesentlich weniger Speicher als *unstrukturierte Gitter*.
Will man nicht-rechteckige Gebiete mit *strukturierten Gittern* behandeln, so kann man Transformationstechniken verwenden, die das physikalische Gebiet auf ein rechteckiges Berechnungsgebiet transformieren. Man kann aber auch wie im folgenden Abschnitt beschrieben das physikalische Gebiet in ein rechteckiges Grundgebiet einbetten und mit einer weiteren Datenstruktur bestimmte Teile des Grundgebiets ausblenden.
Bei komplizierteren Gebieten werden häufig *blockstrukturierte Gitter* verwendet. Hier wird das Gebiet in grobe Teilgebiete zerlegt, die dann einzeln auf rechteckige Berechnungsgebiete transformiert werden. Eine besonders speichereffiziente strukturierte Gitterart stellen die *Dünnen Gitter* dar (siehe [Zenger, 1991], [Bungartz, 1992], zur Anwendung von Transformationstechniken auf Dünne Gitter siehe [Dornseifer, 1997]).
Die Möglichkeiten, beliebig komplizierte Geometrien mit Transformationsmethoden und *blockstrukturierten Gittern* zu diskretisieren, sind beschränkt. Außerdem kann es bei bewegten Geometrien erforderlich werden, die Aufteilung des Gebiets in einzelne Blöcke neu vorzunehmen. Wir haben uns daher in dieser Arbeit dafür entschieden, das Gebiet in ein zeitlich unveränderliches rechteckiges Grundgebiet einzubetten. Das Berechnungsgebiet wird dann wie im folgenden Abschnitt beschrieben mit einer eigenen Datenstruktur markiert, was den Aufwand zur Bewegung des Berechnungsgebiets erheblich reduziert.
Die Teillöser unseres Programms, der Strömungs- und der Temperaturlöser, verwenden zur Diskretisierung Finite-Differenzen-Verfahren auf einem in der numerischen Strömungsmechanik weit verbreiteten versetzten, achsenparallelen Gitter (engl. *staggered grid*), bei dem die einzelnen Variablen nicht in den gleichen Punkten lokalisiert sind. Das rechteckige Grundgebiet $\Omega_0 := [0,a] \times [0,b]$, das zu jedem Zeitpunkt das Fluidgebiet Ω_l und das Feststoffgebiet Ω_s enthält, wird mit einem Gitter aus $i_{\max} \times j_{\max}$ Zellen gleicher Größe überzogen. Die Gitterlinien haben dabei einen Abstand $\delta x := a/i_{\max}$ in x-Richtung und $\delta y := b/j_{\max}$ in y-Richtung.

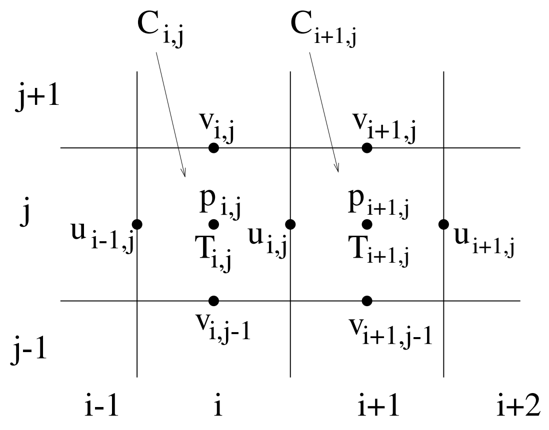


Abbildung 3.2 Lage der Unbekannten im versetzten Gitter

Die Unbekannten werden nun an den folgenden Positionen des versetzten Gitters diskretisiert: Die Temperatur $T_{i,j}$ und der Druck $p_{i,j}$ liegen im Mittelpunkt der Zelle $C_{i,j} := [(i-1)\delta x, i\delta x] \times [(j-1)\delta y, j\delta y]$, während die Geschwindigkeit in x-Richtung $u_{i,j}$ im Mittelpunkt der rechten vertikalen Kante der Zelle $C_{i,j}$ und die Geschwindigkeit in y-Richtung $v_{i,j}$ im Mittelpunkt der oberen horizontalen Kante von $C_{i,j}$ liegt (siehe Abbildung 3.2).

3.2 Beschreibungsmöglichkeiten allgemeiner Geometrien in strukturierten Gittern

Neben den im vorigen Abschnitt erwähnten Transformationstechniken gibt es in der Literatur im wesentlichen drei verschiedene Möglichkeiten, beliebige Geometrien in strukturierten Gittern zu beschreiben: die *Marker-and-Cell-Methode*, die *Volume-of-Fluid-Methode* und die *Surface-Marker-Methode*. Alle drei werden insbesondere bei Strömungsproblemen mit freien Rändern und Mehrphasenströmungen verwendet.

3.2.1 Die Marker-and-Cell-Methode (MAC)

Die in [Harlow & Welch, 1965] eingeführte *Marker-and-Cell-Methode* verwendet zur Markierung des Fluidgebiets massenlose Partikel, die über das gesamte Fluidgebiet verteilt werden. Die Zellen des rechteckigen Grundgebiets, die Partikel enthalten, sind Fluidzellen. In ihnen werden Druck und Geschwindigkeiten berechnet. Die Zellen, die ganz in festen Hindernissen liegen, werden als Hinderniszellen, und die restlichen Zellen als leere Zellen bezeichnet, siehe Abbildung 3.3. Die Zelltypen werden in einem Integer-Array codiert, in dem aus einer Bit-Darstellung zur leichteren Identifizierung der an den Rändern liegenden Zellen nicht nur der Zelltyp selbst, sondern für jede Zelle auch die Typen der Nachbarzellen ermittelt werden können (vgl. [Griebel et al., 1995, Kapitel 6]). Die Bewegung des Gebiets wird realisiert, indem die Partikel fortbewegt werden. Dazu ist die Kenntnis der Geschwindigkeit im gesamten Gebiet notwendig. Aus den neu berechneten Partikelpositionen werden anschließend die Fluidzellen für den nächsten Zeitschritt ermittelt. Diese Methode ist sehr einfach zu implementieren. Das Aufeinanderstoßen zweier Fluidgebiete sowie die Aufspaltung zweier Gebiete erfordern keinen zusätzlichen algorithmischen Aufwand.
Allerdings hat die *Marker-and-Cell-Methode* zahlreiche Nachteile, die sie für unsere Problemstellung als unattraktiv erscheinen lassen. Zunächst fällt natürlich der hohe Speicheraufwand ins Auge, da, um im Inneren des Fluids keine unphysikalischen Löcher entstehen zu lassen, pro Fluidzelle eine größere Anzahl von Partikeln gespeichert werden muß (in der Anfangskonfiguration in 2D mindestens 3x3 oder 4x4). Darüber hinaus ist es sehr schwierig, aus der Partikelmenge die exakte Position des Gebietsrands herauszufinden, so daß Krümmungsberechnungen sehr ungenau werden, [Dehmel, 1996]. Auch die in unserer Finiten-Differenzen-Methode benötigten Schnittpunkte des Rands mit Gitterlinien können nicht genau genug bestimmt werden. Ebenso macht die Bewegung des Gebiets große Probleme, wenn statt der Geschwindigkeit des gesamten Gebiets nur die Geschwindigkeit des Rands bekannt ist. So ist in unserem Beispiel die Geschwindigkeit der Phasengrenze durch die Stefan- und die Gibbs-Thomson-Bedingung

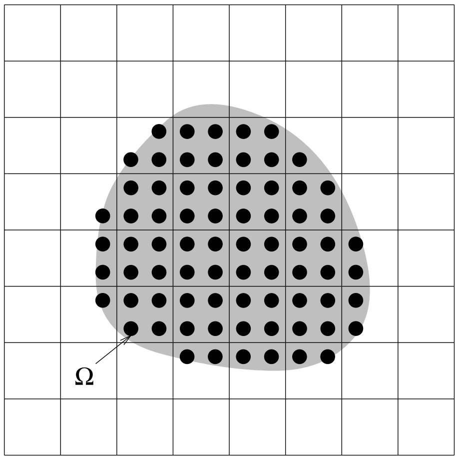


Abbildung 3.3 Gebietsbeschreibung mit der Marker-and-Cell-Methode

vorgegeben. Als zusätzliche Schwierigkeit tritt auch noch die Beschreibung des Phasenübergangs von der flüssigen zur festen Phase auf, wofür Algorithmen zur Vernichtung von Fluidpartikeln in dem gefrierenden Bereich entwickelt werden müßten.

3.2.2 Die Surface-Marker-Methode (SM)

Im Gegensatz zur Marker-and-Cell-Methode wird bei der *Surface-Marker-Methode* [Chen et al., 1991] statt dem gesamten Gebiet nur der Rand mit Partikeln $\vec{p}_k, k = 1, \ldots, n$, markiert. Diese beschreiben, durch einen Polygonzug verbunden, den Rand. Zur Bewegung ist nicht die Kenntnis der Geschwindigkeit im gesamten Gebiet, sondern nur am Rand für jedes Randpartikel erforderlich, was bei unserer Problemstellung wesentlich günstiger ist, vgl. Abbildung 3.4.
Um bei sich zeitlich vergrößernden Gebieten die Randbeschreibung nicht zu ungenau werden zu lassen, sollte nach jedem Zeitschritt der Abstand zweier benachbarter Partikel $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ kontrolliert werden. Falls der Abstand größer als eine bestimmte Schranke wird – empfehlenswert ist hier der Abstand zweier Gitterlinien – wird ein neues Partikel eingesetzt. Damit wir bei Krümmungsberechnungen nicht für neu eingesetzte Partikel den Krümmungswert Null erhalten, dürfen neue Partikel aber nicht im Mittelpunkt der Verbindungslinie von $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ eingesetzt werden. Vielmehr muß das neue Partikel im Mittelpunkt eines Kreisbogens gesetzt werden, der durch die beiden benachbarten Partikel $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ verläuft und dessen Krümmung der Mittelwert der Krümmungen der Kreise durch $\vec{p}_{k-1}$, $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ sowie durch $\vec{p}_k$, $\vec{p}_{k+1}$ und $\vec{p}_{k+2}$ ist. Alternativ zur Verbindung durch Polygonzüge können die Partikel auch gleich durch diese Kreisbögen verbunden werden, so daß die Bestimmung der Schnittpunkte des Rands mit den Gitterlinien noch etwas genauer wird.
Mit Hilfe dieser Randbeschreibung werden nun die Zellen des Gitters analog zur Marker-and-Cell-Methode verschiedenen Typen zugeordnet. Entscheidend für den Typ der Zelle ist, in welchem Teilgebiet der Mittelpunkt der Zelle liegt. Zu Beginn der Berechnung werden alle Zelltypen gemäß der Anfangsgeometrie bestimmt. Im Berechnungsverlauf wird in jedem Zeitschritt im Zuge einer effizienten Bestimmung der neuen Zelltypen nicht jede Zelle betrachtet, sondern

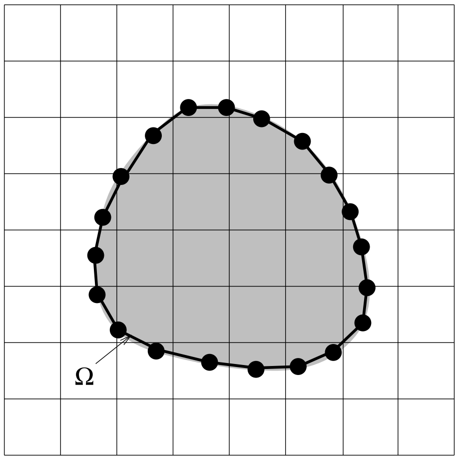


Abbildung 3.4 Gebietsbeschreibung mit der Surface-Marker-Methode

nur die Zellen in der Nähe der Ränder. Dazu wird bei der Bewegung zweier aufeinanderfolgender Partikel $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ das überstrichene Gebiet betrachtet. Eine Zelle, deren Mittelpunkt in diesem Gebiet liegt, wechselt dann ihren Typ, siehe Abbildung 3.5.

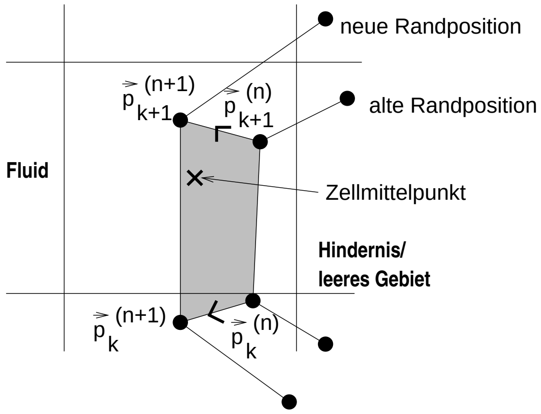


Abbildung 3.5 Bewegung des Rands bei der Surface-Marker-Methode: Fluidzelle wird zu Hinderniszelle bzw. leerer Zelle

Neben der einfachen Randbewegung ist die leichte Krümmungsberechnung ein weiterer Vorteil. Auch die Schnittpunkte des Rands mit den Gitterlinien lassen sich mit einigem algorithmischen Aufwand berechnen, indem man die Liste der Partikel abläuft. Jedenfalls verfügt man über eine, für Strömungssimulationen wichtige stetige Darstellung des Gebietsrands. Und der Speicheraufwand ist natürlich auch wesentlich geringer als bei der MAC-Methode, da statt dem Volumen nur noch der Rand mit Partikeln belegt ist.

Der größte Nachteil der *Surface-Marker-Methode* zeigt sich beim Aufeindertreffen zweier Gebietsteile oder bei der Aufspaltung des Gebiets. Hier müssen zwei unterschiedliche Partikellisten zu einer einzigen zusammengeführt werden oder eine Partikelliste muß in zwei Listen aufgeteilt werden. Dazu müssen Kriterien angegeben werden, wann aufgrund der einzelnen Partikelpositionen so etwas zu geschehen hat. Während bei Strömungsberechnungen ohne Oberflächenspannung Partikel im Inneren des Fluidgebiets nach dem Aufeinandertreffen zweier Gebiete nicht stören, wird das Zusammenführen zweier Partikelketten für Krümmungsberechnungen essentiell. Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich in 3 Raumdimensionen. Hier ist statt einem eindimensionalen Polygonzug ein zweidimensionales Dreiecksnetz zur Beschreibung der Oberfläche nötig, das aus Listen von Dreiecken, Kanten und Ecken, sogenannten *vef-Graphen*, besteht, siehe z.B. [Bungartz et al., 1996]. Damit werden Nachbarschaftsbeziehungen zwischen einzelnen Partikeln beschrieben, die zur Bestimmung von Schnittpunkten mit Gitterlinien, zur Krümmungsberechnung und zum Hinzufügen neuer Partikel notwendig sind.

3.2.3 Die Volume-of-Fluid-Methode (VOF)

Ein weiteres, in der Simulation von Zweiphasenströmungen weit verbreitetes Verfahren, ist die erstmals in [Hirt & Nichols, 1981] unter diesem Titel erwähnte *Volume-of-Fluid-Methode*. Hier wird das Fluidgebiet durch eine Volumenfunktion c charakterisiert. Diese nimmt in Fluidzellen den Wert 1 an, in Nicht-Fluid-Zellen den Wert Null und in Zellen, die zum Teil mit Fluid gefüllt sind, gibt sie den Volumenanteil des Fluids am gesamten Zellvolumen wieder. Mittels der hyperbolischen Evolutionsgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} c = 0, \tag{3.1}$$

die mit speziellen Verfahren integriert werden muß, wird die zeitliche Fortbewegung des Fluidgebiets ermittelt. Zur Darstellung des Rands des Fluidgebiets gibt es zwei Möglichkeiten, siehe Abbildung 3.6. In [Hirt & Nichols, 1981] wird zunächst die in [Noh & Woodward, 1976] eingeführte *Simple-Line-Interface-Calculation (SLIC)* verwendet, bei der der Rand parallel zu den Gitterlinien verläuft. Er wird durch das Volumenverhältnis der Zelle selbst und in den Nachbarzellen bestimmt. In [Youngs, 1982] wird von dieser stückweise konstanten Randapproximation zur *Piecewise-Linear-Interface-Calculation (PLIC)* übergegangen, bei der der Rand pro Zelle durch ein lineares aber nicht achsenparalleles Randstück approximiert wird. Dazu ist neben dem Volumenverhältnis c für jede Randzelle noch die Normale des Randstücks abzuspeichern.
Auch diese Methode verbraucht wesentlich weniger Speicher als die MAC-Methode. Krümmungen können einfach aus der Volumenfunktion c mittels

$$\kappa = -\frac{\triangle c}{2\,||\operatorname{grad} c||} \tag{3.2}$$

berechnet werden. Auch die Aufteilung und Zusammenführung mehrerer Fluidgebiete ist leicht zu realisieren. Außerdem ist für die Abspeicherung der Oberfläche keine eigene Datenstruktur wie bei der Surface-Marker-Methode erforderlich, bei der die Oberfläche mit einer eigenen Liste von Partikeln abgespeichert wird. Bei der VOF-Methode wird dagegen die Oberflächenstruktur im Gitter selbst für jede Zelle abgespeichert, so daß sehr schnell von jeder Zelle aus auf den durch sie verlaufenden Rand zugegriffen werden kann. Schnittpunkte des Rands mit bestimmten Koordinatenlinien können so sehr einfach berechnet werden. Allerdings ist der Rand

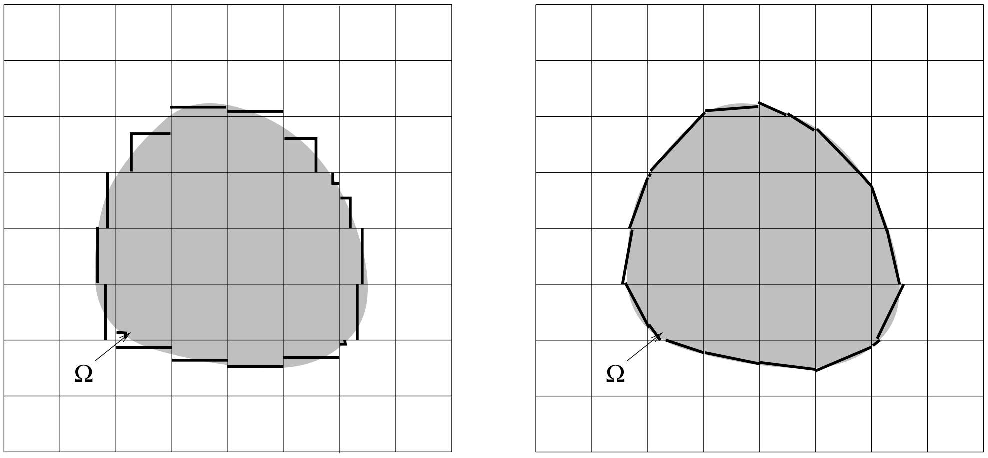


Abbildung 3.6 Gebietsbeschreibung mit der Volume-of-Fluid-Methode, links: SLIC, rechts: PLIC

beim SLIC- *und* PLIC-Ansatz an den Gitterlinien unstetig.
Ein weiterer Nachteil gegenüber der SM-Methode ist die algorithmisch aufwendigere Randbewegung über die Integration von (3.1). Hierzu wird wie beim MAC-Verfahren die Geschwindigkeit im gesamten Gebiet und nicht nur am Rand wie bei der Surface-Marker-Methode benötigt. Darüber hinaus kommt es bei eckigen Gebieten zur Abrundung der Ecken, einer „numerischen Oberflächenspannung". Schließlich kann der SLIC-Ansatz zu unphysikalischen Gebietsablösungen, sogenanntem „floatsam" führen, [Lafaurie et al., 1994].
Einen Überblick über die Entwicklung der VOF-Methode findet sich in [Kothe & Rider, 1994], ein Vergleich mit den anderen Verfahren in [Kothe & Rider, 1995], [Zaleski, 1995].
Abschließend seien die Vor- und Nachteile der einzelnen Varianten in Tabelle 3.1 nochmals zusammengestellt. Dabei besagt ein Pluszeichen, daß die Methode hier ihre Stärken besitzt, Minuszeichen bezeichnen die Schwächen, und Kreise besagen, daß diese Anforderung mit etwas Aufwand zu erfüllen ist.

Kriterium	MAC	SM	VOF
Bewegung des Gebiets	+	+	○
Bewegung des Rands	-	+	-
Ablösen/Zusammenführen	+	-	+
Krümmungsberechnung	-	+	+
Speicherbedarf	-	+	+
Schnittpunktbestimmung	-	○	+
Randstetigkeit	○	+	-
Phasenwechsel	-	+	-

Tabelle 3.1 Vergleich der Verfahren zur Geometriebeschreibung

3.2.4 Anwendung der Surface-Marker-Methode auf das Gefrieren unterkühlter Fluide

Nach Abwägung der einzelnen Vor- und Nachteile der oben aufgeführten Methoden haben wir uns für die Markierung des Fluid- und Feststoffgebiets beim Gefrierprozeß mit der *Surface-Marker-Methode* entschieden. Die Phasengrenze Γ_1 und die Fluidoberfläche Γ_2 werden durch Ketten massenloser Partikel $\vec{p}_k, k = 1, \ldots, n_1$ für Γ_1 und $\vec{p}_k, k = n_1 + 1, \ldots, n_1 + n_2$ für Γ_2 beschrieben. Die Zellen des rechteckigen Gesamtgebiets werden so in Fluid-, Feststoff- und leere Zellen aufgeteilt, vgl. Abbildung 3.7.
Die Geschwindigkeitswerte zur Bewegung der Ränder ergeben sich für die Phasengrenze Γ_1 aus der Stefan- und der Gibbs-Thomson-Bedingung (2.60) und (2.61), während sie für die Fluidoberfläche Γ_2 aus der Oberflächenbedingung (2.65) errechnet werden. Die für den expliziten Strömungsalgorithmus notwendige Stabilitätsbedingung (3.38) gewährleistet, daß sich die Ränder in *einem* Zeitschritt nicht mehr als *eine* Gitterzelle weiterbewegen.

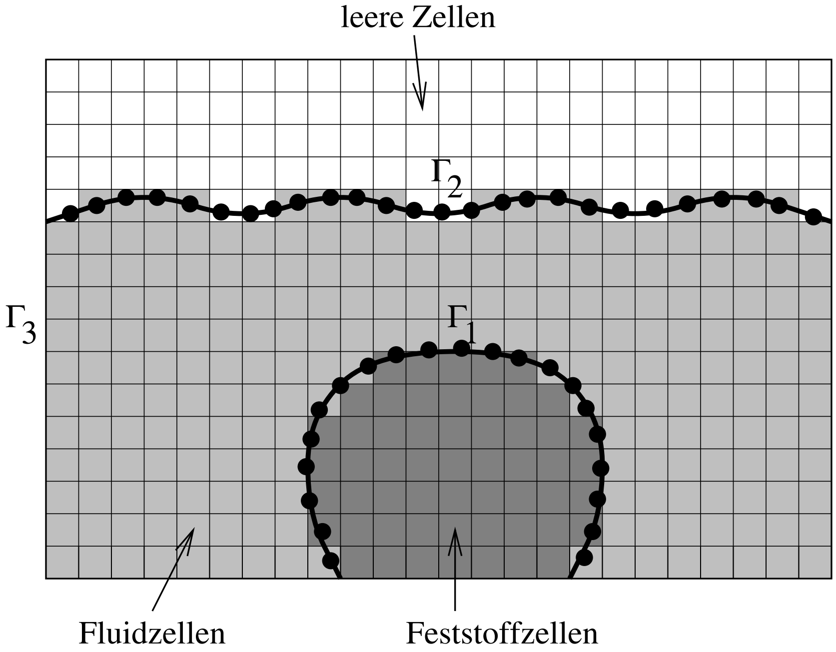


Abbildung 3.7 Aufteilung des Gesamtgebiets in Fluid-, Feststoff- und leere Zellen mit der Surface-Marker-Methode

3.3 Überblick über den numerischen Algorithmus

Der hier vorgeschlagene numerische Algorithmus besteht aus zwei gekoppelten Teilen. Der erste enthält die Berechnung der Strömung aus den Gleichungen (2.57) und (2.58) unter Berücksichtigung des freien Fluidrands und sich bewegender Hindernisse (hier der wachsende Feststoff). Er kann für beliebige Strömungsprobleme mit sich verändernder Geometrie eingesetzt werden. Der zweite Teil behandelt den Energietransport und den Verfestigungsprozeß, der durch

die Temperaturgleichungen (2.56) und (2.59) sowie die Stefan- und Gibbs-Thomson-Bedingung (2.60) und (2.61) beschrieben wird. Damit kann auch der in vielen anderen Arbeiten behandelte Gefrierprozeß ohne Berücksichtigung der Strömung im Fluid simuliert werden.
Der Fluidlöser beeinflußt in dem Lösungsprozeß die Temperatur sowohl durch den konvektiven Term in der Temperaturgleichung im Fluid (2.56) als auch durch die Veränderung der Fluidoberfläche Γ_2. Im Gegenzug gehen die Ergebnisse des Energieteils in den Boussinesqterm der Impulsgleichung (2.57) ein, in die Randbedingung für die Fluidgeschwindigkeit an der Phasengrenze (2.62) und in die Veränderung des Fluidgebiets durch die wandernde Phasengrenze Γ_1.

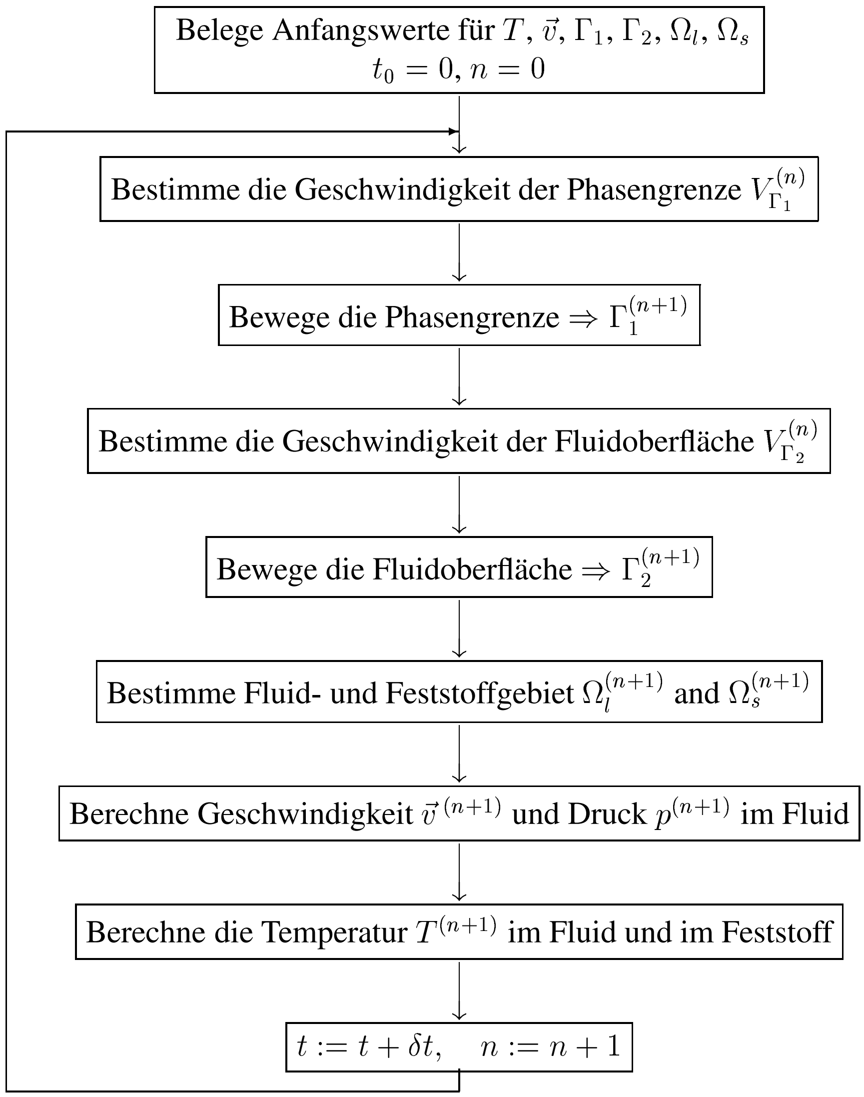


Abbildung 3.8 Flußdiagramm zum gesamten Algorithmus

Zur Diskretisierung der Ortsableitungen verwenden wir Finite Differenzen auf einem versetzten Gitter. Die Zeit wird ebenfalls mit Finiten Differenzen diskretisiert und in Intervalle $[t^{(n)}, t^{(n+1)}]$

der Länge $\delta t^{(n)} := t^{(n+1)} - t^{(n)}$ zerlegt. Die Zeitschrittweite $\delta t^{(n)}$ kann dabei entweder konstant oder adaptiv gewählt werden. Bei einer expliziten Zeitdiskretisierung der Impulsgleichungen müssen bei der Wahl der Zeitschrittweite die Stabilitätsbedingungen (3.37) und (3.38) beachtet werden. Bei semi-impliziter Diskretisierung ist lediglich die Beachtung von (3.38) erforderlich. Der zeitliche Ablauf der Berechnung ist in Abbildung 3.8 dargestellt.

3.4 Die Berechnung der Strömung

Das mathematische Modell aus Kapitel 2 erfordert einen Strömungslöser, mit dem zwei unterschiedliche Gebietsänderungen betrachtet werden können. Einerseits verändert sich das Fluidgebiet Ω_l durch die Bewegung des Phasenrandes, dessen Geschwindigkeit allein durch den Temperaturlöser bestimmt wird. Für die Geschwindigkeit werden somit Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben, während für den Druck keine physikalischen Randbedingungen existieren. An der freien Fluidoberfläche ist die Geschwindigkeit des Rands dagegen durch die in Gleichung (2.65) beschriebene Dynamik des Fluids und durch die Inkompressibilitätsbedingung in der Kontinuitätsgleichung (2.58) gegeben. Dazu steckt in (2.65) noch eine Randbedingung für den Druck. Die Bewegung der Fluidoberfläche wird also von dem Fluidlöser selbst ermittelt. Beide Komponenten lassen sich mit der im vorigen Abschnitt beschrieben Surface-Marker-Methode gut behandeln.

Neben der Wahl des Gitters und der Diskretisierungsmethode unterscheiden sich die Verfahren der numerischen Strömungsmechanik insbesondere in der Behandlung der Zeitableitung und der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung.

Wir verwenden hier eine Finite-Differenzen-Diskretisierung auf dem in Abschnitt 3.1 eingeführten versetzten Gitter, bei der die Kopplung des Drucks an die Geschwindigkeit nach der Chorinschen Projektionsmethode durchgeführt wird, [Chorin, 1968]. Dabei wird in jedem Zeitschritt mit einer expliziten Zeitdiskretisierung der Impulsgleichungen ein vorläufiges, divergenzbehaftetes Geschwindigkeitsfeld berechnet, das mit dem über die Kontinuitätsgleichung bestimmten Druck so korrigiert wird, daß es divergenzfrei wird. Alternativ dazu verwenden wir auch eine Variante des SIMPLE-Verfahrens, bei dem das vorläufige Geschwindigkeitsfeld nicht durch eine explizite Zeitdiskretisierung, sondern durch eine semi-implizite Zeitdiskretisierung aus der Lösung zweier Konvektions-Diffusions-Gleichungen gewonnen wird.

Der verwendete Strömungscode NaSt2D wurde zunächst am Lehrstuhl für Ingenieuranwendungen in der Informatik und numerische Programmierung der Technischen Universität München im Rahmen eines Praktikums für Informatikstudenten entwickelt und eingesetzt, da er sehr leicht verständlich und einfach zu implementieren ist, [Griebel et al., 1995]. Durch die Möglichkeit, die Zellen wie oben beschrieben aufzuteilen, zeigte sich der Algorithmus bezüglich der Gebietsgeometrie als sehr flexibel. So ist es möglich, Strömungen durch sehr zerklüftete Geometrien wie zum Beispiel poröse Medien ohne großen Aufwand bei der Gittergenerierung zu simulieren. Auch die Simulation freier Randwertprobleme, bei denen sich das Strömungsgebiet mit der Zeit verändert, ist sehr einfach. Durch die oben beschriebene Markierung des Fluidgebiets entfällt das Mitbewegen des Gitters, was zu stark deformierten Gitterzellen führen könnte. Außerdem kann das Gitter in einer einfachen Feldstruktur abgespeichert werden. Es müssen auch keine aufwendigen Listen von Elementen, Kanten und Knoten wie bei unstrukturierten Gittern

verwendet werden, so daß der Speicheraufwand sehr gering ist. Im Gegensatz zu den in [Griebel et al., 1995] beschriebenen Algorithmen präsentieren wir hier ein insbesondere bezüglich der Approximation der Randwerte an der Phasengrenze und der Fluidoberfläche verbessertes Verfahren.
Neben diesen Erweiterungen, die die Simulation von Strömungen mit bewegten Hindernissen erst ermöglichen, wurde der Grundcode auch ins dreidimensionale übertragen [Wagner, 1995], in 3D parallelisiert [Kreißl & Rykaschewski, 1996], freie Randwertprobleme in 3D implementiert [Dehmel, 1996] und eine Gitterverwaltung für adaptive Gitterverfeinerungen implementiert [Wagner, 1997]. Außerdem wurde er zur Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen am Beispiel einer Mikropumpe in 2D [Meier, 1995] und 3D [Deisz, 1995], [Bungartz et al., 1997] eingesetzt. Effizienzsteigerungen wurden durch die Implementierung des SIMPLE-Verfahrens und algebraischer Mehrgitterlöser (AMG) erzielt. AMG wurde dabei einerseits zur Lösung der Druck- und andrerseits zur Lösung der bei der semi-impliziten Zeitdiskretisierung der Impulsgleichungen im SIMPLE-Verfahren vorkommenden Konvektions-Diffusions-Gleichungen eingesetzt. Dabei zeigte sich, daß in zwei wie in drei Raumdimensionen die Konvergenzgeschwindigkeit des AMG-Lösers unabhängig von der Struktur der Hindernisse und der Konvektionsstärke ist [Griebel et al., 1996].
Simulationsergebnisse ohne Phasenwechsel mit NaSt2D und der 3D-Erweiterung NaSt3D sind in [Griebel et al., 1995] dokumentiert und im WWW unter
http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/forschung/visualisierung/praktikum.html und
http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/persons/neunhoef/simulation.html zu sehen.

3.4.1 Die Diskretisierung im Ort

Zunächst betrachten wir die Diskretisierung der Ortsableitungen in der Impuls- und der Kontinuitätsgleichung.
Die x-Komponente der Impulsgleichung (2.57) wird in den Mittelpunkten der vertikalen Kanten mit Finiten Differenzen diskretisiert, während die y-Komponente in den Mittelpunkten der horizontalen Kanten approximiert wird. Exemplarisch wird hier im weiteren die x-Komponente behandelt.
Zur Diskretisierung des diffusiven Anteils verwenden wir den klassischen Differenzenoperator zweiter Ordnung

$$[\triangle u]_{i,j} := \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\delta y^2}. \tag{3.3}$$

Bei der Behandlung des Terms $\partial(u^2)/\partial x$ wird die zentrale Differenz für u^2 aus den in den benachbarten Zellmittelpunkten gemittelten Geschwindigkeiten gebildet (+ in Abbildung (3.9)). Für $\partial(uv)/\partial y$ werden dagegen u und v jeweils im oberen und unteren rechten Eckpunkt der Zelle (i,j) gemittelt ($\times$ in Abbildung (3.9)) und daraus die zentrale Differenz der Produkte gebildet:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial(u^2)}{\partial x}\right]_{i,j} &:= \frac{((u_{i+1,j} + u_{i,j})/2)^2 - ((u_{i,j} + u_{i-1,j})/2)^2}{\delta x}, \qquad (3.4)\\
\left[\frac{\partial(uv)}{\partial y}\right]_{i,j} &:= \frac{(u_{i,j+1} + u_{i,j})/2 \cdot (v_{i+1,j} + v_{i,j})/2 - (u_{i,j} + u_{i,j-1})/2 \cdot (v_{i+1.j-1} + v_{i,j-1})/2}{\delta y}.
\end{aligned}$$

Insgesamt werden dazu die in Abbildung 3.9 markierten Geschwindigkeitswerte benötigt.

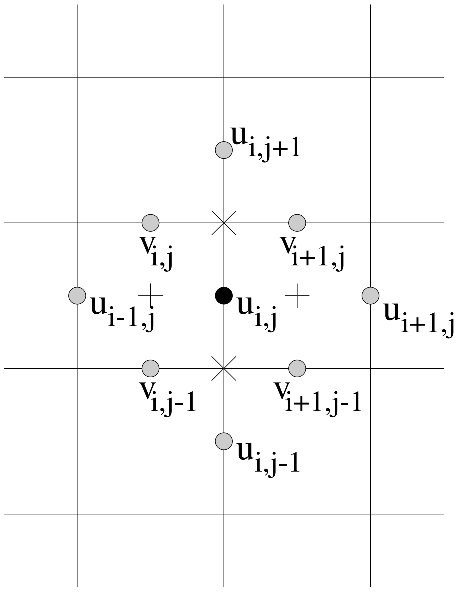


Abbildung 3.9 Werte, die zur Diskretisierung der x-Komponente der Impulsgleichung im Mittelpunkt der rechten Kante von Zelle $C_{i,j}$ benötigt werden

Ist die Strömung stark konvektiv wie bei kleinen Viskositäten μ oder großen Geschwindigkeiten $\vec{v}$, so treten bei der zentralen Differenzenapproximation der konvektiven Terme Stabilitätsprobleme auf, die mit einer einseitigen Approximation verhindert werden können. Deren Approximationsgüte ist allerdings nicht mehr $O(\delta x^2)$, sondern nur noch $O(\delta x)$. Eine Variante ist das *Donor-Cell-Verfahren* [Gentry et al., 1966] zur Diskretisierung konvektiver Terme der Form $\partial(ku)/\partial x$ mit einer in den Zellmittelpunkten diskretisierten Funktion k (vgl. Abbildung (3.10)):[1]

$$\left[\frac{d(ku)}{dx}\right]_i^{\mathrm{dc}} := \frac{k_{i+1,j}\, u_r - k_{i,j}\, u_l}{\delta x}, \tag{3.5}$$

wobei u_r und u_l gemäß der Vorzeichen von k_r und k_l gewählt werden:

$$u_r := \begin{cases} u_{i,j} & k_r > 0 \\ u_{i+1,j} & k_r < 0 \end{cases}, \qquad u_l := \begin{cases} u_{i-1,j} & k_l > 0 \\ u_{i,j} & k_l < 0 \end{cases}.$$

Um auch noch bis zu einem gewissen Grad von der besseren Approximationsordnung der zentralen Differenzen profitieren zu können, wird in [Hirt et al., 1975] eine Mittelung der beiden Diskretisierungsmöglichkeiten gemäß

$$\alpha \cdot \text{upwind-Differenz} + (1-\alpha) \cdot \text{zentrale Differenz} \tag{3.6}$$

[1] Hier muß man sich u als eine physikalische Größe vorstellen, die konvektiv mit der Geschwindigkeit k in x-Richtung transportiert wird. Bei der Upwind-Diskretisierung gehen dann immer die Terme von u ein, die der Strömungsrichtung entgegengesetzt (stromaufwärts = *upwind*) gelegen sind.

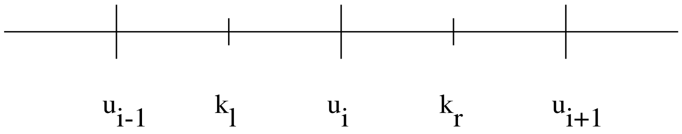


Abbildung 3.10 Lage der diskreten Variablen bei der Donor-Cell-Diskretisierung

vorgeschlagen. Der reelle Parameter α muß dabei aus dem Intervall $[0,1]$ gewählt werden, und zwar um so größer, je größer der konvektive Wert k ist. Für $\alpha = 1$ ergibt sich das Donor-Cell-Schema, für $\alpha = 0$ die zentrale Differenz. Insgesamt erhält man so die folgenden modifizierten Diskretisierungsterme:

$$
\begin{aligned}
\left[\frac{\partial(u^2)}{\partial x}\right]_{i,j} &:= \frac{1}{\delta x}\left(\left(\frac{u_{i,j}+u_{i+1,j}}{2}\right)^2 - \left(\frac{u_{i-1,j}+u_{i,j}}{2}\right)^2\right) \\
&+ \frac{\alpha}{\delta x}\left(\frac{|u_{i,j}+u_{i+1,j}|}{2}\frac{(u_{i,j}-u_{i+1,j})}{2} - \frac{|u_{i-1,j}+u_{i,j}|}{2}\frac{(u_{i-1,j}-u_{i,j})}{2}\right), \\
\left[\frac{\partial(uv)}{\partial y}\right]_{i,j} &:= \frac{1}{\delta y}\left(\frac{(v_{i,j}+v_{i+1,j})}{2}\frac{(u_{i,j}+u_{i,j+1})}{2} - \frac{(v_{i,j-1}+v_{i+1,j-1})}{2}\frac{(u_{i,j-1}+u_{i,j})}{2}\right) \\
&+ \frac{\alpha}{\delta y}\left(\frac{|v_{i,j}+v_{i+1,j}|}{2}\frac{(u_{i,j}-u_{i,j+1})}{2} - \frac{|v_{i,j-1}+v_{i+1,j-1}|}{2}\frac{(u_{i,j-1}-u_{i,j})}{2}\right).
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

Der Druckgradient wird durch die zentrale Differenz

$$
\left[\frac{\partial p}{\partial x}\right]_{i,j} := \frac{p_{i+1,j}-p_{i,j}}{\delta x}
\tag{3.8}
$$

approximiert. Die Temperatur am Kantenmittelpunkt im Boussinesq-Term wird durch Mittelung der Temperaturen $T_{i,j}$ und $T_{i+1,j}$ in den benachbarten Zellmittelpunkten gewonnen. Die Diskretisierung der y-Komponente der Impulsgleichung erfolgt analog.
Die Kontinuitätsgleichung (2.58) wird schließlich im Zellmittelpunkt der Zelle (i,j) durch zentrale Differenzen diskretisiert:

$$
\frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{\delta x} + \frac{v_{i,j}-v_{i,j-1}}{\delta y} = 0.
\tag{3.9}
$$

3.4.2 Die Randbedingungen an festen Rändern und an bewegten Hindernissen

An der Behälterwand Γ_3 und an der Phasengrenze zwischen Fluid und Feststoff Γ_1 haben wir Dirichlet-Randbedingungen für die Geschwindigkeitskomponenten normal und tangential zum Rand gemäß (2.66) und (2.62) gegeben.[2] Liegt der Rand auf einer Gitterlinie, so kann die normale Geschwindigkeitskomponente direkt im Kantenmittelpunkt gesetzt werden. Die Bedingung für die tangentiale Geschwindigkeitskomponente muß dagegen durch eine Mittelwertbildung erfüllt werden. Dies zeigen wir am Beispiel eines senkrechten Randstücks, an dem das Fluid rechts liegt. Der Gitterwert der vertikalen Geschwindigkeitskomponente zwischen zwei an das Fluid angrenzenden Randzellen $v_{i,j-1}$ wird hier aus dem angrenzenden, im Fluid liegenden Wert $v_{i,j}$ und dem auf dem Rand liegenden, in der Dirichlet-Randbedingung gegebenen Wert v_{rand} bestimmt (siehe Abbildung 3.11):

$$v_{i,j-1} = 2v_{\text{rand}} - v_{i,j}. \tag{3.10}$$

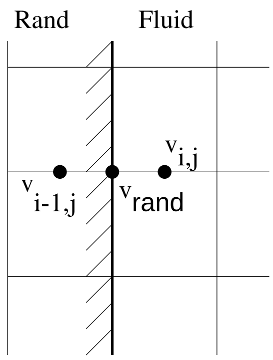


Abbildung 3.11 Randwertdiskretisierung an senkrechtem Rand auf einer Gitterlinie

Beliebige Ränder könnten nun wie in [Griebel et al., 1995] beschrieben durch gestufte Ränder auf Gitterlinien approximiert werden.
Bei bewegten Rändern kann dann die Randbewegung nur in diskreten Schritten erfolgen. Es ist nur möglich zu unterscheiden, ob sich der Rand eine ganze Zelle oder überhaupt nicht fortbewegt. Diese diskrete Randbewegung ist allerdings für eine genaue Approximation der Strömung bei bewegten Rändern nicht ausreichend. Es ist daher erforderlich, in die Bestimmung der Werte an Kanten zwischen Fluid- und Randzellen die genaue Randlage mit einzubeziehen.
In [Callies, 1997] wurde dazu eine auf [Tome & McKee, 1994] zurückgehende Randapproximation implementiert. Statt der konstanten Interpolation der Randwerte vom exakten Verlauf der Randlinie auf die Rankanten wird hier eine lineare Interpolation verwendet. Numerische Experimente mit Strömungen durch ein gebogenes Rohr zeigen, daß diese verbesserte Randapproximation die Approximationsgüte für die Geschwindigkeiten im gesamten Strömungsgebiet von $O(\delta x)$ auf $O(\delta x^2)$ verbessert, unter der Voraussetzung, daß bei den konvektiven Termen der Impulsgleichung zentrale Differenzen verwendet werden.

[2] Die Diskretisierung weiterer Randbedingungen wie Rutsch-, Ausström- und periodischen Randbedingungen bei Finiten-Differenzen-Verfahren in versetzten Gittern ist u.a. in [Griebel et al., 1995, Kapitel 3] beschrieben.

Wir nehmen von jetzt ab an, daß der Rand durch einen Polygonzug bzw. durch Kreisbögen approximiert wird, wie bei der Surface-Marker-Methode, oder sogar exakt gegeben ist. Die Geschwindigkeiten auf dem Rand sind an den Partikeln gegeben und somit durch lineare Interpolation auf dem ganzen Rand verfügbar. Anstatt nun einfach wie in [Griebel et al., 1995] konstant auf die nächstliegende Randkante[3] zu interpolieren, wollen wir hier eine lineare Interpolation bzw. Extrapolation verwenden.
Um an allen Kanten, die zwischen zwei Fluidzellen liegen, die Impulsgleichungen mit den Formeln für den diffusiven Anteil (3.3) und den konvektiven Anteil (3.4) bzw. (3.7) diskretisieren zu können, benötigen wir gemäß Abbildung 3.9 Geschwindigkeitswerte an den Kanten im Fluid, an den Randkanten (Quadrate in Abbildung 3.12) und an Kanten, die zwischen zwei an Fluidzellen angrenzenden Randzellen liegen (Kreise in Abbildung 3.12).

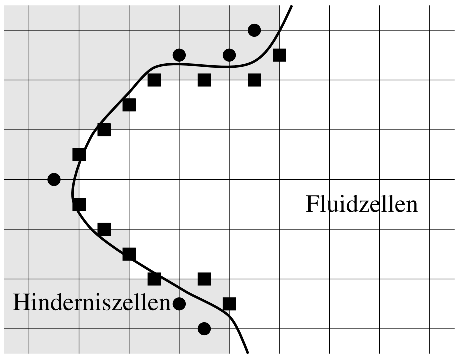


Abbildung 3.12 Notwendige Randwerte

Am Beispiel der in Abbildung 3.13 dargestellten Konfiguration wollen wir jetzt die Bestimmung der Geschwindigkeiten an diesen Kanten beschreiben. Die Geschwindigkeit $u_{i,j}$ auf der Randkante wird durch lineare Interpolation entlang der auf der Kante senkrecht stehenden, gestrichelt dargestellten Mittellinie gewonnen. Die verwendeten Interpolationswerte sind die auf der gegenüberliegenden Kante liegende Geschwindigkeit im Fluid $u_{i-1,j}$ und die Randgeschwindigkeit beim Schnittpunkt von Randlinie und Zell-Mittellinie u_r.
Die Geschwindigkeit $v_{i+1,j}$ zwischen den beiden Randkanten wird durch Extrapolation entlang der Gitterlinie, auf der $v_{i+1,j}$ liegt, berechnet. Dazu verwenden wir den nächsten im Fluid liegenden Geschwindigkeitswert $v_{i,j}$ und die Randgeschwindigkeit auf dem Schnittpunkt von Randlinie und Gitterlinie v_r. Da der Extrapolationsfehler sehr groß werden kann, wenn der Schnittpunkt von Randlinie und Gitterlinie sehr nahe am Kantenmittelpunkt der oberen Kante von Zelle (i, j) liegt, ist in solchen Fällen die Geschwindigkeit $v_{i-1,j}$ zu verwenden. Wir verwenden in unseren Simulationsrechnungen den Wert $v_{i-1,j}$, wenn der Abstand kleiner als $\delta x/10$ wird. Die Interpolationen in y-Richtung verlaufen analog.

[3] Eine Randkante ist eine Kante zwischen einer Fluid- und einer Nicht-Fluidzelle.

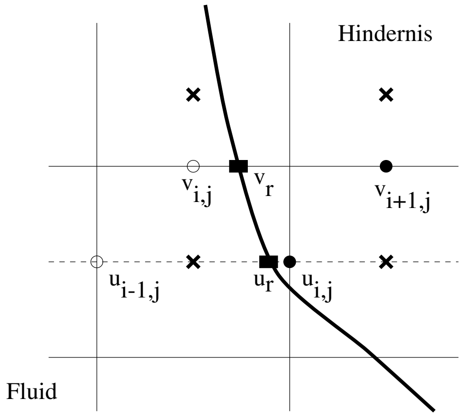


Abbildung 3.13 Interpolation der Randwerte am Hindernisrand

3.4.3 Die Randbedingungen an der Fluidoberfläche

Die Randbedingungen an der Fluidoberfläche sind in (2.65) gegeben. Durch Multiplikation der vektorwertigen Gleichung (2.65) mit dem Normaleneinheitsvektor $\vec{n}$ und dem Tangentialeinheitsvektor $\vec{t}$ erhalten wir die beiden skalaren Gleichungen

$$\begin{aligned} -(p - p^*) + \vec{n}^T \tau \vec{n} &= -\gamma_2 \kappa_2, & (3.11) \\ \vec{t}^T \tau \vec{n} &= 0. & (3.12) \end{aligned}$$

Eine Möglichkeit zur Diskretisierung der Randbedingungen besteht nun darin, wie in [Tome & McKee, 1994] und [Griebel et al., 1995, Kapitel 6] beschrieben, die Fluidoberfläche durch einen Polygonzug aus linearen Randstücken pro Gitterzelle zu approximieren, die parallel oder diagonal zu den Gitterlinien verlaufen. Dies führt aber zum Teil zu sehr großen Druck- und Geschwindigkeitsspitzen am Rand, so daß wir hier auch an der Fluidoberfläche eine gegenüber [Griebel et al., 1995] verbesserte Approximation der Randwerte verwenden.
Dazu transformieren wir zunächst den Spannungstensor τ lokal in jedem Randpunkt in Polarkoordinaten. Dabei bezeichnet $\hat{u}$ die normale und $\hat{v}$ die tangentiale Geschwindigkeitskomponente. Der Ursprung des polaren Koordinatensystems ist der Mittelpunkt des Krümmungskreises in dem jeweiligen Randpunkt:

$$\hat{\tau} = \mu \begin{pmatrix} 2\,\dfrac{\partial \hat{u}}{\partial r} & r\,\dfrac{\partial}{\partial r}\left(\dfrac{\hat{v}}{r}\right) + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \hat{u}}{\partial \phi} \\ r\,\dfrac{\partial}{\partial r}\left(\dfrac{\hat{v}}{r}\right) + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \hat{u}}{\partial \phi} & 2\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \hat{v}}{\partial \phi} + \dfrac{\hat{u}}{r}\right) \end{pmatrix}. \tag{3.13}$$

Die beiden Komponenten der Randbedingung (3.11) und (3.12) werden somit zu

$$\begin{aligned} -(p - p^*) + 2\,\mu\,\frac{\partial \hat{u}}{\partial r} &= -\gamma_2 \kappa_2, & (3.14) \\ \frac{\partial \hat{v}}{\partial r} - \frac{\hat{v}}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \hat{u}}{\partial \phi} &= 0. & (3.15) \end{aligned}$$

Während bei den Dirichlet-Randbedingungen an Γ_1 und Γ_3 beide Geschwindigkeiten vorgegeben sind und der Druck am Rand sich aus der Kontinuitätsgleichung ergibt, stellt (3.14) eine Dirichlet-Randbedingung für den Druck dar. Wir müssen also zur Bestimmung der beiden Geschwindigkeitskomponenten neben (3.15) die Kontinuitätsgleichung (2.58) heranziehen, die ebenfalls in Polarkoordinaten transformiert wird:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial r} + \frac{\hat{u}}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \hat{v}}{\partial \phi} = 0. \tag{3.16}$$

Diese drei Gleichungen können nun an den einzelnen Partikelpositionen $\vec{p}_k$, $k = n_1{+}1, \ldots, n_1{+}n_2$, die die Fluidoberfläche beschreiben, diskretisiert werden. Dazu werden die radialen Ableitungen mit einseitigen Differenzen diskretisiert:

$$\left[\frac{\partial \hat{u}}{\partial r}\right]_k := \frac{\hat{u}_k - \hat{u}_{k,fluid}}{\delta r} \quad \text{und} \quad \left[\frac{\partial \hat{v}}{\partial r}\right]_k := \frac{\hat{v}_k - \hat{v}_{k,fluid}}{\delta r}. \tag{3.17}$$

Dabei sind $\hat{u}_k$ bzw. $\hat{v}_k$ die jeweiligen Geschwindigkeitskomponenten beim Partikel $\vec{p}_k$, und $\hat{u}_{k,fluid}$ bzw. $\hat{v}_{k,fluid}$ sind die Geschwindigkeitskomponenten am Punkt $\vec{x}_{k,fluid} := \vec{p}_k - \delta r\, \vec{n}_k$, der in Normalenrichtung mit Abstand δr von $\vec{p}_k$ entfernt im Fluid liegt. Die Normale wird dabei durch die Senkrechte $\vec{n}_k$ auf der Verbindungsgeraden der beiden angrenzenden Partikel $\vec{p}_{k-1}$ und $\vec{p}_{k+1}$ angenähert. Die Fluidgeschwindigkeiten $\hat{u}_{k,fluid}$ und $\hat{v}_{k,fluid}$ werden durch bilineare Interpolation aus den umliegenden Gitterwerten von u und v und Transformation von den kartesischen in die polaren Werte gewonnen. Diese Gitterwerte liegen an den Ecken der in Abbildung 3.14 schraffierten (horizontal für u, vertikal für v) Rechtecke. Als Diskretisierungsabstand $\delta r := \sqrt{\delta x^2 + \delta y^2}$ wählen wir die Länge der Diagonalen einer Gitterzelle.

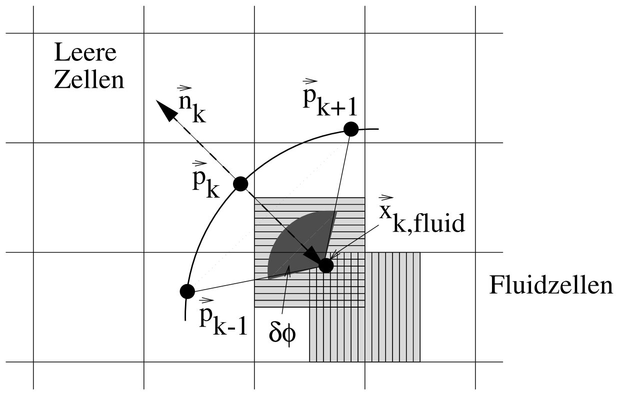


Abbildung 3.14 Diskretisierung der Randbedingungen an der Fluidoberfläche

Die tangentialen Ableitungen werden auf dem Kreisbogen durch die drei aufeinanderfolgenden Partikel $\vec{p}_{k-1}, \vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ mit zentralen Differenzen diskretisiert:

$$\left[\frac{\partial \hat{u}}{\partial \phi}\right]_k := \frac{\hat{u}_{k+1} - \hat{u}_{k-1}}{\delta \phi} \quad \text{und} \quad \left[\frac{\partial \hat{v}}{\partial \phi}\right]_k := \frac{\hat{v}_{k+1} - \hat{v}_{k-1}}{\delta \phi}. \tag{3.18}$$

Der Diskretisierungswinkel $\delta\phi$ ist dabei der Winkel zwischen den Geraden, die den Mittelpunkt des Krümmungskreises mit den Punkten $\vec{p}_{k-1}$ und $\vec{p}_{k+1}$ verbinden (siehe Abbildung 3.14).

Setzen wir nun diese Diskretisierungen in die zweite Randgleichung (3.15) und die Kontinuitätsgleichung (3.16) ein, so erhalten wir ein unsymmetrisches, indefinites lineares Gleichungssystem für die normalen und tangentialen Geschwindigkeitskomponenten $\hat{u}_k$ und $\hat{v}_k$, $k = n_1 + 1, \ldots, n_1 + n_2$, an den einzelnen Partikeln der Fluidoberfläche:

$$\frac{\hat{v}_k - \hat{v}_{k,fluid}}{\delta r} - \frac{\hat{v}_k}{r} + \frac{\hat{u}_{k+1} - \hat{u}_{k-1}}{r\,\delta\phi} = 0, \tag{3.19}$$

$$\frac{\hat{u}_k - \hat{u}_{k,fluid}}{\delta r} + \frac{\hat{u}_k}{r} + \frac{\hat{v}_{k+1} - \hat{v}_{k-1}}{r\,\delta\phi} = 0. \tag{3.20}$$

Zur Lösung dieses Systems aus $2 \cdot n_2$ Gleichungen mit ebenso vielen Unbekannten verwenden wie die Kaczmarz-Iteration, siehe [Kaczmarz, 1937], [Hackbusch, 1991].
Anschließend wird mit den so bestimmten Geschwindigkeitswerten der Druck für jedes Randpartikel aus der diskreten Version der Randbedingung (3.14) bestimmt. Danach wird für jedes Partikel die Rücktransformation der Geschwindigkeitswerte in kartesische Koordinaten durchgeführt. Aus diesen Geschwindigkeitswerten pro Partikel können dann wie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben die Geschwindigkeitswerte vom Rand auf die Randkanten und Kanten zwischen zwei leeren Zellen, die an Fluidzellen angrenzen, interpoliert bzw. extrapoliert werden.
Während an der Behälterwand und an der Phasengrenze zwischen fest und flüssig keine physikalischen Randwerte für den Druck gegeben waren, haben wir an der Fluidoberfläche nun auch Druckrandwerte für jedes Partikel bestimmt, die auf die Druckwerte zu leeren Zellen benachbarter Fluidzellen, sogenannten Oberflächenzellen, übertragen werden müssen. Der Druck wird dann für die Oberflächenzellen nicht wie im folgenden Abschnitt 3.4.4 beschrieben bestimmt, sondern dient als Randwert für die Berechnung des Drucks in den inneren Fluidzellen.
Zur Bestimmung des Drucks in den Oberflächenzellen verwenden wir wiederum eine Interpolationsroutine, in der Druckwerte auf dem Rand und Druckwerte in Fluidzellen, die nicht leeren Zellen benachbart sind, in die Berechnung eingehen. Dabei müssen zahlreiche Typen von Oberflächenzellen unterschieden werden.

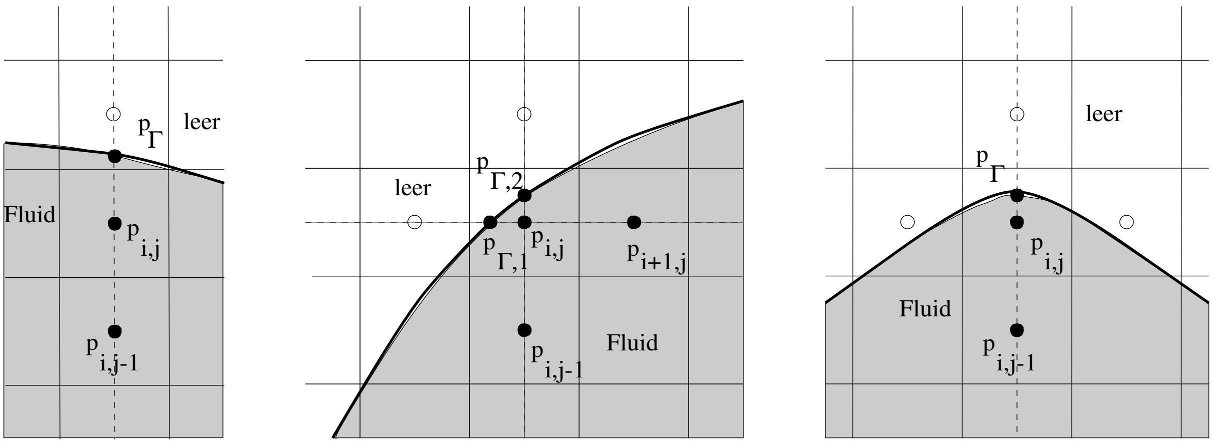


Abbildung 3.15 Interpolation der Druckwerte in Oberflächenzellen (links mit einer, in der Mitte mit zwei, rechts mit drei benachbarten leeren Zellen)

Bei Oberflächenzellen mit nur einer leeren Nachbarzelle wird entlang der Zellmittellinie interpoliert, die auch durch die benachbarte leere Zelle verläuft. In Abbildung 3.15, links, ist dies am Beispiel einer oben benachbart liegenden leeren Zelle veranschaulicht. Der Druckwert $p_{i,j}$ in der Oberflächenzelle berechnet sich aus dem Wert in der unten benachbarten Fluidzelle $p_{i,j-1}$ und aus dem Wert auf dem Schnittpunkt von Rand und Zellmittellinie p_Γ, der durch Interpolation der Druckwerte der benachbarten Randpartikel gewonnen wird.
Bei Oberflächenzellen mit zwei leeren Nachbarzellen wird entlang beider Zellmittellinien interpoliert und die beiden Interpolationswerte gemittelt. Für eine Zelle mit links und oben benachbarten leeren Zellen berechnet sich der Druck $p_{i,j}$ in der Oberflächenzelle beispielsweise aus den Druckwerten in den beiden benachbarten Fluidzellen $p_{i+1,j}$ und $p_{i,j-1}$ sowie den Werten an den Schnittpunkten der beiden Zellmittellinien mit dem Rand $p_{\Gamma,1}$ und $p_{\Gamma,2}$, siehe Abbildung 3.15, Mitte.
Bei Oberflächenzellen mit drei benachbarten Fluidzellen wird ähnlich wie bei Zellen mit einer benachbarten leeren Zelle vorgegangen. Die Interpolationslinie ist hier nun die Zellmittellinie, die durch die benachbarte Fluidzelle verläuft, Abbildung 3.15, rechts.

3.4.4 Die Zeitdiskretisierung und die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung

Nachdem wir alle Ortsdiskretisierungen behandelt haben, verbleibt nun noch die Beschreibung der Zeitdiskretisierung und der Behandlung der Kopplung zwischen Impulsgleichungen und Kontinuitätsgleichung. Wir verwenden in unserem Algorithmus entweder ein bezüglich der Geschwindigkeiten explizites Zeitschrittverfahren, d.h., alle Ortsableitungen der Geschwindigkeiten in den Impulsgleichungen werden im Zeitschritt $t^{(n)} \rightarrow t^{(n+1)}$ zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ ausgewertet, oder ein semi-implizites Verfahren. Der Druck in den Impulsgleichungen sowie die Geschwindigkeiten in der Kontinuitätsgleichung sollen zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ betrachtet werden.
Die expliziten Verfahren haben gegenüber der semi-impliziten Variante einen geringeren Speicher- und Rechenaufwand pro Zeitschritt, da die diskreten Impulsgleichungen explizit fortgeschrieben werden können und nicht ein lineares Gleichungssystem darstellen, dessen Lösung wesentlich aufwendiger ist. Andererseits erlauben semi-implizite Verfahren wesentlich größere Zeitschritte, da sie nicht so restriktive Stabilitätsbedingungen an die Zeitschrittweite stellen. Da aber die Randbewegung nahezu die gleichen Anforderungen an die Zeitschrittweite stellt – im wesentlichen darf sich ein Fluidpartikel in einem Zeitschritt nicht weiter als eine Zelle fortbewegen – können semi-implizite Verfahren ihren großen Vorteil bei zeitlich veränderlichen Geometrien nur bedingt ausspielen.
In der Literatur finden sich in erster Linie drei Verfahren zur expliziten Diskretisierung der Impulsgleichungen, das Marker-and-Cell-Verfahren (MAC), das Simplified-Marker-and-Cell-Verfahren (SMAC) und die Chorinsche Projektionsmethode. Wie wir sehen werden, sind die Verfahren im wesentlichen äquivalent und unterscheiden sich nur in der Behandlung der Randbedingungen und der Berechnungsreihenfolge in einem Zeitschritt.
In allen Verfahren verwenden wir zur Diskretisierung der Zeit in der Impulsgleichung einen einfachen Euler-Schritt

$$\left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}\right]^{(n)} := \frac{\vec{v}^{\,(n+1)} - \vec{v}^{\,(n)}}{\delta t}. \tag{3.21}$$

Es wird dann jeweils aus den Impulsgleichungen ein vorläufiges, nicht divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld berechnet, bei MAC ohne Berücksichtigung des Druckgradienten, bei SMAC und der Chorinschen Projektionsmethode unter Verwendung des Drucks zum alten Zeitpunkt $p^{(n)}$. Dieses vorläufige Feld wird dann durch Änderung des Drucks so korrigiert, daß die Kontinuitätsgleichung erfüllt wird. Während bei MAC so der Druck zum neuen Zeitpunkt $p^{(n+1)}$ in einer aus der Kontinuitätsgleichung abgeleiteten Poissongleichung bestimmt wird, wird bei SMAC nur ein Druckkorrekturterm δp berechnet, der auf $p^{(n)}$ aufaddiert wird. In beiden Fällen wird aber die Geschwindigkeit $\vec{v}^{\,(n+1)}$ erst nach Berechnung des Drucks bestimmt. Bei der Chorinschen Projektionsmethode wird dagegen bei der iterativen Lösung der Druckgleichung nach jeder Änderung eines Druckwerts diese Druckänderung sofort zu den benachbarten Geschwindigkeitswerten addiert, so daß man eine simultane Druck-Geschwindigkeitsiteration erhält.
Das klassische Verfahren mit semi-impliziter Diskretisierung der Impulsgleichungen ist das SIMPLE-Verfahren. Hier wird das vorläufige Geschwindigkeitsfeld nicht explizit aus den Werten zum alten Zeitpunkt $\vec{v}^{\,(n)}$ bestimmt, sondern aus einem linearen Gleichungssystem, in dem in den Ortsableitungstermen zum Teil bereits die vorläufigen Geschwindigkeitswerte zum neuen Zeitpunkt verwendet werden. Die Berechnung des Drucks und der endgültigen Geschwindigkeitswerte erfolgt dann entweder wie bei SMAC oder der Chorinschen Projektionsmethode.

MAC – Marker-and-Cell

In der *Marker-and-Cell-Methode*[4] [Harlow & Welch, 1965] wird die Zeitdiskretisierung (3.21) in die Impulsgleichung (2.57) eingesetzt. Die Geschwindigkeitsableitungen werden zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ und der Druckgradient wird zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ betrachtet. Faßt man alle Geschwindigkeitsterme mit den Volumenkräften zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ zu

$$\vec{F}^{(n)} := \vec{v}^{\,(n)} + \delta t \left(\frac{\mu}{\rho_l} \triangle \vec{v}^{\,(n)} - \operatorname{div}\left(\vec{v}^{\,(n)} \otimes \vec{v}^{\,(n)}\right) + \left(1 - \beta\left(T^{(n)} - T_m\right)\right) \vec{g} \right) \tag{3.22}$$

zusammen, so erhält man die Geschwindigkeit zum neuen Zeitpunkt $t^{(n+1)}$, indem man den bis jetzt noch unbekannten Gradienten des Drucks zu dem vorläufigen Geschwindigkeitsfeld $F^{(n)}$ hinzufügt:

$$\vec{v}^{\,(n+1)} = \vec{F}^{(n)} - \frac{\delta t}{\rho_l} \operatorname{grad} p^{(n+1)}. \tag{3.23}$$

Die Kontinuitätsgleichung (2.58), die von $\vec{v}^{\,(n+1)}$ erfüllt werden muß, führt nun mit (3.23) zu einer Potentialgleichung für den Druck $p^{(n+1)}$:

$$\triangle p^{(n+1)} = \frac{\rho_l}{\delta t} \operatorname{div} \vec{F}^{(n)}. \tag{3.24}$$

Im Algorithmus wird also zunächst $\vec{F}^{(n)}$ aus (3.22) berechnet. Anschließend wird der Druck durch eine iterative Lösung der Poissongleichung (3.24) bestimmt und nach (3.23) von $\vec{F}^{(n)}$ subtrahiert um $\vec{v}^{\,(n+1)}$ zu erhalten.

[4] Man beachte, daß der Begriff *Marker-and-Cell* sich einerseits auf die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung, andererseits aber auch auf die in Abschnitt 3.2.2 erwähnte Gebietsbeschreibung bezieht.

Zur eindeutigen Lösbarkeit dieser Gleichung benötigen wir noch Randbedingungen für den Druck. An der Fluidoberfläche sind diese durch (3.11) gegeben. An den anderen Randstücken multiplizieren wir die zeitdiskrete Impulsgleichung (3.23) mit dem Normalenvektor $\vec{n}$ und erhalten so

$$\frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial n} = \frac{\rho_l}{\delta t}\left(\vec{F}^{(n)} - \vec{v}^{\,(n+1)}\right)\cdot\vec{n}. \tag{3.25}$$

Setzen wir am Rand das vorläufige Geschwindigkeitsfeld $\vec{F}^{(n)}$, für dessen Diskretisierung auf den Randkanten wir nicht alle Geschwindigkeitswerte zur Verfügung haben, gleich der neuen Geschwindigkeit $\vec{v}^{\,(n+1)}$, so erhalten wir für den Druck die homogene Neumann-Randbedingung

$$\frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial n} = 0. \tag{3.26}$$

Schließlich wird nach der Druckberechnung aus (3.24) und (3.26) das neue Geschwindigkeitsfeld mit (3.23) berechnet.

Zur Ortsdiskretisierung der Terme in $\vec{F}$ verwenden wir die in Abschnitt 3.4.1 eingeführten Formeln. Aus der Druckgleichung (3.24) erhalten wir durch Diskretisierung für eine Fluidzelle $C_{i,j}$, $i = 1,\ldots,i_{\max},\ j = 1,\ldots,j_{\max}$,, mit $\vec{F} := (F,G)^T$

$$\begin{aligned}\frac{p^{(n+1)}_{i+1,j} - 2p^{(n+1)}_{i,j} + p^{(n+1)}_{i-1,j}}{(\delta x)^2} &+ \frac{p^{(n+1)}_{i,j+1} - 2p^{(n+1)}_{i,j} + p^{(n+1)}_{i,j-1}}{(\delta y)^2}\\ &= \frac{1}{\delta t}\left(\frac{F^{(n)}_{i,j} - F^{(n)}_{i-1,j}}{\delta x} + \frac{G^{(n)}_{i,j} - G^{(n)}_{i,j-1}}{\delta y}\right).\end{aligned} \tag{3.27}$$

Dieses lineare Gleichungssystem für die Druckwerte $p_{i,j}$ in den Fluidzellen wird mit dem SOR-Verfahren gelöst (*successive over relaxation*). Unter Verwendung des Startwerts $p^0 := p^{(n)}$ und mit der Abkürzung $rhs_{i,j}$ für die rechte Seite der Druckgleichung (3.27) in der Zelle $C_{(i,j)}$ ergibt sich folgender Algorithmus:

$it = 1,\ldots,it_{\max}$
  $i = 1,\ldots,i_{\max}$
    $j = 1,\ldots,j_{\max}$
      Falls $C_{i,j}$ Fluidzelle, berechne

$$\begin{aligned} d^{it}_{i,j} &:= \frac{p^{it}_{i+1,j} - 2p^{it}_{i,j} + p^{it+1}_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{p^{it}_{i,j+1} - 2p^{it}_{i,j} + p^{it+1}_{i,j-1}}{\delta y^2} - rhs_{i,j},\\ p^{it+1}_{i,j} &:= p^{it}_{i,j} - \omega\left(\frac{2}{\delta x^2} + \frac{2}{\delta y^2}\right)^{-1} d^{it}_{i,j},\end{aligned} \tag{3.28}$$

Falls $\left(\sum_{i,j}(d^{it}_{i,j})^2/(\text{Anzahl Fluidzellen})\right)^{1/2} < \varepsilon$
  Setze $p^{(n+1)} := p^{it+1}$ und breche die Iteration ab.

Der Relaxationsparameter ω muß aus dem Intervall $[0,2]$ gewählt werden. Für $\omega = 1$ erhält man das Gauß-Seidel-Verfahren.

Zur Realisierung der Randbedingung (3.26) gibt es dabei zwei Möglichkeiten. Erstens können die Randwerte nach jedem einzelnen SOR-Schritt auf die Randzellen übertragen werden. Dabei muß in Randzellen mit mehreren benachbarten Fluidzellen über die Druckwerte dieser Fluidzellen gemittelt werden. Die andere Möglichkeit besteht darin, in dem Gleichungssystem (3.27) direkt den jeweiligen Randwert zu eliminieren. Die zweite Methode entspricht einer reinen SOR-Iteration auf dem semidefiniten System der diskretisierten Poissongleichung mit Neumann-Randbedingungen. Sie erlaubt nicht so große Relaxationsparameter ω wie die erste Methode, bei der bei der Berechnung der Druckwerte am Rand liegender Fluidzellen immer die Werte aus dem vorhergehenden Iterationsschritt berücksichtigt werden. Die erste Methode entspricht so am Rand dem Vorgehen bei der Jacobi-Iteration.

SMAC – Simplified-Marker-and-Cell

Bei der *Simplified-Marker-and-Cell-Methode* (SMAC), [Amsden & Harlow, 1970], wird in die Berechnung des vorläufigen Geschwindigkeitsfeldes $\vec{v}^*$ im Gegensatz zu MAC der Druck zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ mit einbezogen:

$$\vec{v}^* := \vec{F}^{(n)} - \frac{\delta t}{\rho_l} \operatorname{grad} p^{(n)}. \tag{3.29}$$

Von diesem neuen vorläufigen Geschwindigkeitsfeld muß dann statt dem Druck $p^{(n+1)}$ nur noch ein Druckkorrekturterm $\delta p^{(n+1)}$ subtrahiert werden, um das neue Geschwindigkeitsfeld zu erhalten:

$$\vec{v}^{(n+1)} = \vec{v}^* - \frac{\delta t}{\rho_l} \operatorname{grad} \delta p^{(n+1)}. \tag{3.30}$$

Aus der Kontinuitätsgleichung (2.58) folgt dann für $\delta p^{(n+1)}$ die Potentialgleichung

$$\triangle(\delta p^{(n+1)}) = \frac{\rho_l}{\delta t} \operatorname{div} \vec{v}^*. \tag{3.31}$$

Für den Druckkorrekturterm werden ebenso homogene Neumann-Randbedingungen verwendet, wenn auf dem Rand $\vec{v}^* = \vec{v}^{(n+1)}$ gesetzt wird. Die Diskretisierung erfolgt analog zu (3.27). Gelöst wird das lineare Gleichungssystem wiederum mit dem SOR-Verfahren. Das Geschwindigkeitsfeld zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ wird anschließend mit (3.30) gewonnen. Der Druck zum neuen Zeitpunkt wird durch

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} + \delta p^{(n+1)} \tag{3.32}$$

bestimmt.
Die MAC und die SMAC-Methode liefern trotz der unterschiedlichen Bezeichnungen die gleichen Ergebnisse, denn aus (3.24) und der Definition von $\vec{v}^*$ (3.29) folgt

$$\triangle p^{(n+1)} = \frac{\rho_l}{\delta t} \operatorname{div} \vec{v}^* + \triangle p^{(n)}, \tag{3.33}$$

woraus mit (3.32) die SMAC-Poissongleichung (3.31) wird. Außerdem entspricht die Korrektur des Geschwindigkeitsfeldes (3.30) in SMAC zusammen mit (3.29) und (3.32) der Korrektur (3.23) bei MAC.

Die Chorinsche Projektionsmethode

Eine weitere Variante ist die in [Chorin, 1968] und [Temam, 1969] eingeführte und unter anderem in [Hirt & Cook, 1972] und [Hirt et al., 1975] verwendete Projektionsmethode. Hier wird wie bei der SMAC-Methode das vorläufige Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}^*$ unter Einbeziehung des Drucks $p^{(n)}$ mit (3.29) berechnet. Dann wird aber nicht zunächst die Druckkorrektur, die anschließend erst auf die Geschwindigkeiten aufaddiert wird, berechnet, sondern es werden Druck und Geschwindigkeiten simultan iteriert. Dazu wird iterativ in jeder Zelle die Druckkorrektur $\delta p_{i,j}^{it}$ so bestimmt, daß lokal in der jeweiligen Zelle die Divergenz zu Null wird. Die Geschwindigkeiten werden dabei analog zu der SMAC Methode in (3.30) korrigiert. Die Druckänderung $\delta p_{i,j}^{it}$ in der Zelle $C_{i,j}$ im Iterationsschritt it wirkt sich also wie folgt auf die Geschwindigkeiten auf den Zellkanten aus:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{it+1/2} &:= u_{i,j}^{it} + \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta x}\,\delta p_{i,j}^{it}, \qquad & u_{i-1,j}^{it+1} &:= u_{i-1,j}^{it+1/2} - \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta x}\,\delta p_{i,j}^{it}, \\ v_{i,j}^{it+1/2} &:= v_{i,j}^{it} + \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta y}\,\delta p_{i,j}^{it}, \qquad & v_{i,j-1}^{it+1} &:= v_{i,j-1}^{it+1/2} - \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta y}\,\delta p_{i,j}^{it}. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Setzt man nun diese korrigierten Geschwindigkeitswerte in die Kontinuitätsgleichung ein, so erhält man für die Druckkorrektur die Gleichung

$$\delta p_{i,j}^{it} := \frac{\rho_l}{\delta t}\left(\frac{2}{\delta x^2} + \frac{2}{\delta y^2}\right)^{-1}\left(\frac{u_{i,j}^{it} - u_{i-1,j}^{it+1/2}}{\delta x} + \frac{v_{i,j}^{it} - v_{i,j-1}^{it+1/2}}{\delta y}\right). \tag{3.35}$$

Verwendet man in der Druckkorrektur zusätzlich einen Relaxationsparameter $\omega \in [0,2]$, so erhält man mit den Startwerten $p^0 := p^{(n)}$ und $\vec{v}^{\,0} := \vec{v}^*$ die folgende Iteration:

$it = 1,\ldots,it_{\max}$
  Setze Randwerte für u^{it}, v^{it}
  $i = 1,\ldots,i_{\max}$
    $j = 1,\ldots,j_{\max}$
      Falls $C_{i,j}$ Fluidzelle, berechne

$$\begin{aligned} d_{i,j}^{it} &:= \frac{u_{i,j}^{it} - u_{i-1,j}^{it+1/2}}{\delta x} + \frac{v_{i,j}^{it} - v_{i,j-1}^{it+1/2}}{\delta y}, \\ \delta p_{i,j}^{it} &:= \frac{\omega\,\rho_l}{\delta t}\left(\frac{2}{\delta x^2} + \frac{2}{\delta y^2}\right)^{-1} d_{i,j}^{it}, \\ p_{i,j}^{it+1} &:= p_{i,j}^{it} + \delta p_{i,j}^{it}, \\ u_{i,j}^{it+1/2} &:= u_{i,j}^{it} + \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta x}\,\delta p_{i,j}^{it}, \quad u_{i-1,j}^{it+1} := u_{i-1,j}^{it+1/2} - \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta x}\,\delta p_{i,j}^{it}, \\ v_{i,j}^{it+1/2} &:= v_{i,j}^{it} + \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta y}\,\delta p_{i,j}^{it}, \quad v_{i,j-1}^{it+1} := v_{i,j-1}^{it+1/2} - \frac{\delta t}{\rho_l\,\delta y}\,\delta p_{i,j}^{it}, \end{aligned} \tag{3.36}$$

  Falls $\left(\sum_{i,j}(d_{i,j}^{it})^2/(\text{Anzahl Fluidzellen})\right)^{1/2} < \varepsilon$
    Setze $p^{(n+1)} := p^{it+1}$, $u^{(n+1)} := u^{it+1}$, $v^{(n+1)} := v^{it+1}$ und breche die Iteration ab.

Am Rand des Fluidgebiets gibt es wie bei der MAC-Methode zwei Alternativen. Der Übertragung der Randwerte nach jedem SOR-Schritt bei MAC entspricht hier, die Modifikation der Geschwindigkeitswerte (3.34) auf Randkanten nicht vorzunehmen. Anders ausgedrückt wird dabei in Fluidzellen benachbarten Randzellen die gleiche Druckkorrektur wie in der angrenzenden Fluidzelle vorgenommen, so daß der Korrekturterm, der von der Fluidzelle aus auf die Geschwindigkeit der Randkante aufaddiert wurde, von der Randzelle aus wieder abgezogen wird.
Bei der zweiten Alternative, die der zweiten Möglichkeit für MAC entspricht, wird davon ausgegangen, daß eine Korrektur der Geschwindigkeitswerte nur für Kanten zwischen zwei Fluidkanten möglich ist. Bei der Berechnung von $\delta p_{i,j}^{it+1}$ wird also nicht mehr durch $2/\delta x^2 + 2/dy^2$ geteilt, sondern durch $(\epsilon_r + \epsilon_l)/\delta x^2 + (\epsilon_o + \epsilon_u)/\delta y^2$. Die Parameter ϵ_x nehmen dabei den Wert 1 an, wenn in der jeweiligen Richtung rechts ($x = r$), links ($x = l$), oben ($x = o$) oder unten ($x = u$) eine Fluidzelle liegt. Sie erhalten dagegen den Wert 0, wenn die jeweilige Nachbarzelle keine Fluidzelle ist.
Die Chorinsche Projektionsmethode bringt im Vergleich zu MAC und SMAC Vorteile, wenn die Geschwindigkeiten auf den Randkanten zu Beginn des jeweiligen Zeitschritts nicht bekannt sind, wie es zum Beispiel bei krummlinigen Rändern, bei Ausströmbedingungen und auch an der Fluidoberfläche der Fall ist. Hier werden jeweils die Werte auf den Randkanten aus Werten im Fluid berechnet, die ihrerseits zu Beginn eines Zeitschritts noch nicht bekannt sind. Bei der MAC- und SMAC-Methode werden somit die Randwerte für $\vec{F}^{(n)}$ bzw. $\vec{v}^{\,*}$ nicht auf $\vec{v}^{\,(n+1)}$ sondern nur auf $\vec{v}^{\,(n)}$ gesetzt. Bei der Projektionsmethode werden die Werte auf den Randkanten dagegen im Iterationsverlauf angepaßt.

Stabilitätsbedingungen bei expliziter Zeitdiskretisierung

Bei allen drei Varianten mit expliziter Zeitdiskretisierung in den Impulsgleichungen müssen noch Stabilitätsbedingungen an die Schrittweiten δx, δy und δt gestellt werden:

$$\frac{2\,\delta t\,\mu}{\rho_l} < \left(\frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2}\right)^{-1} \tag{3.37}$$

und

$$|u_{\max}|\,\delta t < \delta x, \qquad |v_{\max}|\,\delta t < \delta y, \tag{3.38}$$

(siehe z.B. [Tome & McKee, 1994]). Dabei sind $|u_{\max}|$ und $|v_{\max}|$ die maximalen Absolutwerte der im Gitter vorkommenden Geschwindigkeiten. (3.38) sind die *Courant-Friedrichs-Lewy Bedingungen* (CFL-Bedingungen). Sie bedeuten, daß kein Partikel des Fluids in einem Zeitschritt der Länge δt mehr als eine Gitterweite δx oder δy zurücklegen darf. (3.37) resultiert aus der Stabilitätsanalyse für eine explizite Zeitdiskretisierung der Diffusionsgleichung, während (3.38) aus der Analyse einer Konvektionsgleichung herrühren. Eine ausführliche Stabilitätsanalyse findet sich z.B. in [Peyret & Taylor, 1983] oder [Roache, 1976].
Bei Problemen mit veränderlicher Geometrie müssen die CFL-Bedingungen auch erfüllt sein, um sicherzustellen, daß bei der Berechnung der Geschwindigkeitswerte $\vec{v}^{\,(n+1)}$ an jeder Kante zwischen zwei Fluidzellen von $\Omega_l^{(n+1)}$ die Werte von $\vec{v}^{\,(n)}$ bekannt sind. Bewegt sich der Rand nur um maximal eine Zellschicht weiter, so sind diese Werte immer vorhanden, da bei

der Belegung der Randwerte in Abschnitt 3.4.2 auch Werte an Kanten zwischen zwei an Fluidzellen angrenzenden Hinderniszellen oder leeren Zellen bestimmt werden. Wäre es dagegen erlaubt, daß sich der Rand um mehr als eine Zellschicht in Richtung Hindernis oder leeres Gebiet weiterbewegen kann, so sind nicht an allen neu im Fluid liegenden Kanten die alten Geschwindigkeitswerte bekannt.
Basierend auf den Stabilitätsbedingungen (3.37), (3.38) wird in [Tome & McKee, 1994] eine adaptive Zeitschrittweitensteuerung verwendet. Dabei wird δt für den nächsten Zeitschritt so gewählt, daß jede der drei Bedingungen erfüllt ist:

$$\delta t := \lambda \min\left(\frac{\rho_l}{2\mu}\left(\frac{1}{\delta x^2}+\frac{1}{\delta y^2}\right)^{-1}, \frac{\delta x}{|u_{\max}|}, \frac{\delta y}{|v_{\max}|}\right). \tag{3.39}$$

Der Faktor $\lambda \in]0,1]$ ist ein Sicherheitsfaktor. Natürlich kann der Algorithmus auch mit einer fest vorgegebenen Zeitschrittweite durchlaufen werden, die in jedem Zeitschritt die Stabilitätsbedingung erfüllt.

SIMPLE – Semi-Implicit-Method for Pressure-Linked-Equations

Solch restriktive Anforderungen an die Zeitschrittweite müssen bei semi-impliziten Zeitdiskretisierungen nicht gestellt werden, um die Stabilität des Algorithmus' zu gewährleisten. Hier werden im Gegensatz zum SMAC-Verfahren und zur Chorinschen Projektionsmethode bei der Berechnung des vorläufigen Geschwindigkeitsfeldes nicht alle Ortsableitungen zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ ausgewertet. Statt dessen werden in einer sogenannten semi-impliziten Zeitdiskretisierung der Impulsgleichung der diffusive Term zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ und die Geschwindigkeiten im konvektiven Term einmal zum Zeitpunkt $t^{(n)}$, das andere Mal aber zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ ausgewertet, so daß wir aus der Impulsgleichung

$$\vec{v}^{\,(n+1)}+\delta t\left(-\frac{\mu}{\rho_l}\triangle\vec{v}^{\,(n+1)}+\mathrm{div}(\vec{v}^{\,(n)}\otimes\vec{v}^{\,(n+1)})+\frac{1}{\rho_l}\mathrm{grad}\,p^{(n+1)}\right)=\vec{v}^{\,(n)}+\delta t\,\vec{g}(T^{(n)}) \tag{3.40}$$

erhalten. Dabei enthalte $\vec{g}(T^{(n)}) := (1-\beta\,(T^{(n)}-T_m))\,\vec{g}$ den temperaturabhängigen Boussinesq-Term.
Unter Verwendung des Drucks zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ wird nun das vorläufige Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}^{\,\star}$ aus der linearen Konvektions-Diffusions-Gleichung bestimmt, bei der wir im Gegensatz zu (3.40) den alten Druck $p^{(n)}$ verwenden:

$$\vec{v}^{\,\star}+\delta t\left(-\frac{\mu}{\rho_l}\triangle\vec{v}^{\,\star}+\mathrm{div}(\vec{v}^{\,(n)}\otimes\vec{v}^{\,\star})+\frac{1}{\rho_l}\mathrm{grad}\,p^{(n)}\right)=\vec{v}^{\,(n)}+\delta t\,\vec{g}(T^{(n)}). \tag{3.41}$$

Diese Gleichung wird nach der Ortsdiskretisierung wiederum mit dem SOR-Verfahren gelöst. Dabei stehen wir vor der Wahl, die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems in jedem Iterationsschritt neu zu berechnen, was die Rechenzeit erhöht, oder die Koeffizienten abzuspeichern, so daß für jede Gitterzelle 10 weitere Elemente gespeichert werden müssen und der Speicherbedarf gegenüber den expliziten Methoden in etwa verdoppelt wird. Da $\vec{v}^{\,\star}$ wie bei den expliziten Verfahren nicht divergenzfrei ist, müssen auch hier Korrekturen $\vec{v}\,'$ und p' aus der Kontinuitätsgleichung berechnet werden, so daß wir durch die Additionen

$$\vec{v}^{\,(n+1)} = \vec{v}^{\,\star} + \vec{v}^{\,\prime}, \qquad p^{(n+1)} = p^{(n)} + p' \tag{3.42}$$

die Geschwindigkeit und den Druck zum neuen Zeitpunkt erhalten. Wegen der semi-impliziten Zeitdiskretisierung läßt sich $\vec{v}^{\,\prime}$ aber nicht wie bei den expliziten Verfahren direkt aus p' ermitteln. Die Subtraktion der Gleichung (3.41) für $\vec{v}^{\,\star}$ von der zeitdiskreten Impulsgleichung (3.40) ergibt zunächst eine Konvektions-Diffusions-Gleichung für die Geschwindigkeitskorrektur $\vec{v}^{\,\prime}$:

$$\vec{v}^{\,\prime} + \delta t \left(-\frac{\mu}{\rho_l} \triangle \vec{v}^{\,\prime} + \operatorname{div}(\vec{v}^{\,(n)} \otimes \vec{v}^{\,\prime}) + \frac{1}{\rho_l} \operatorname{grad} p' \right) = 0. \tag{3.43}$$

Mit der Abkürzung

$$S(\vec{v}^{\,\prime}) := -\frac{\mu}{\rho_l} \triangle \vec{v}^{\,\prime} + \operatorname{div}(\vec{v}^{\,(n)} \otimes \vec{v}^{\,\prime}) \tag{3.44}$$

erhalten wir

$$\vec{v}^{\,\prime} + \delta t \, S(\vec{v}^{\,\prime}) + \frac{\delta t}{\rho_l} \operatorname{grad} p' = 0. \tag{3.45}$$

In der Literatur gibt es nun verschiedene Ansätze, $S(\vec{v}^{\,\prime})$ zu approximieren. Bei dem von uns sowie u.a. in [Nonino & del Giudice, 1985], [Kim & Chung, 1988] und [Cheng & Armfield, 1995] verwendeten Ansatz wird $S(\vec{v}^{\,\prime})$ durch Null ersetzt. Wir erhalten so wie bei SMAC und Chorin aus der Kontinuitätsgleichung für $\vec{v}^{\,(n+1)}$ die Poissongleichung für die Druckkorrektur

$$\triangle p' = \frac{\rho_l}{\delta t} \operatorname{div} \vec{v}^{\,\star}. \tag{3.46}$$

Wenn wir $\vec{v}^{\,\star}$ am Rand auf $\vec{v}^{\,(n+1)}$ setzen, erhalten wir wiederum homogene Neumann-Randbedingungen für die Druckkorrektur. Ist $\vec{v}^{\,(n+1)}$ auf den Randkanten nicht bekannt, so gibt es analog zur Chorinschen Projektionsmethode auch hier die Möglichkeit der simultanen Druck-Geschwindigkeits-Iteration (3.36).

Neben $S(\vec{v}^{\,\prime}) = 0$ gibt es noch weitere Approximationen. Dabei wird nach der Ortsdiskretisierung $S_h(\vec{v}^{\,\prime}_h)$ als Produkt einer Matrix A mit dem Vektor der diskreten Geschwindigkeitskorrekturen $\vec{v}^{\,\prime}_h$ geschrieben:

$$S_h(\vec{v}^{\,\prime}_h) =: A(\vec{v}_h^{(n)}) \, \vec{v}^{\,\prime}_h. \tag{3.47}$$

Die Gleichung (3.45) für die Geschwindigkeitskorrektur lautet somit in Matrix-Vektor-Schreibweise

$$\left(I + \delta t A(\vec{v}_h^{(n)}) \right) \vec{v}^{\,\prime}_h + \frac{\delta t}{\rho_l} \operatorname{grad}_h p'_h = 0. \tag{3.48}$$

In der Originalversion des SIMPLE Algorithmus' [Patankar & Spalding, 1972] wird nun die Matrix A durch ihre Diagonale $D(\vec{v}_h^{(n)}) := \operatorname{diag}(A(\vec{v}_h^{(n)}))$ ersetzt und aus (3.48) läßt sich $\vec{v}^{\,\prime}_h$ gewinnen:

$$\vec{v}^{\,\prime}_h = -\frac{\delta t}{\rho_l} \left(I + \delta t \, D(\vec{v}_h^{(n)}) \right)^{-1} \operatorname{grad}_h p'_h. \tag{3.49}$$

Setzen wir dies nun in die Kontinuitätsgleichung ein, so erhalten wir die Druckkorrekturgleichung

$$\mathrm{div}_h \left(I + \delta t\, D(\vec{v}_h^{(n)})\right)^{-1} \mathrm{grad}_h\, p'_h = \frac{\rho_l}{\delta t}\, \mathrm{div}\, \vec{v}^{\,\star}_h, \tag{3.50}$$

in deren Koeffizienten die Geschwindigkeit $\vec{v}_h^{(n)}$ eingeht.
Beim SIMPLEC-Algorithmus (SIMPLE Consistent) von [Patankar, 1981] wird statt dessen die Matrix $A(\vec{v}_h^{(n)})$ durch die Diagonalmatrix, deren Diagonalelemente die Zeilensummen von $A(\vec{v}_h^{(n)})$ sind, ersetzt (sog. *lumping*). Bei Verwendung klassischer Upwind-Verfahren oder alleiniger zentraler Differenzen bei der Diskretisierung des konvektiven Terms in den Impulsgleichungen zeigt sich, daß SIMPLEC mit der zunächst beschriebenen SIMPLE-Variante mit $S(\vec{v}\,') = 0$ identisch ist.
Bei bewegten Geometrien kann das SIMPLE Verfahren bzgl. der Stabilitätsbedingungen seine Vorteile nur ausspielen, wenn (3.37) gegenüber (3.38) die schärfere Bedingung ist. Wie oben erwähnt muß nämlich (3.38) bei bewegten Geometrien unabhängig von der Zeitdiskretisierung beachtet werden, um ausreichend Anfangswerte im zu Fluid umgewandelten Gebiet zu bekommen. Bei gleicher Zellgröße in x- und y-Richtung $\delta x = \delta y =: h$ tritt dieser Fall ein, wenn

$$h < \frac{4\mu}{\rho_l\, |w_{\max}|}, \tag{3.51}$$

mit $|w_{\max}| := \max(|u_{\max}|, |v_{\max}|)$ gilt. Ein Beispiel, bei dem sich aufgrund der Stabilitätsbedingungen der Einsatz des SIMPLE-Verfahrens lohnt, bringen wir in Abschnitt 4.3.3.
Den Einfluß der Zeitdiskretisierung auf die Konvergenz des Algorithmus' diskutieren wir in Abschnitt (4.1.1).

Weitere Verfahren

Neben den hier beschriebenen, am häufigsten verwendeten Verfahren zur Behandlung der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung gibt es eine Vielzahl weiterer Verfahren. So können die Impulsgleichungen auch voll implizit diskretisiert werden, so daß $\vec{v}^{\,\star}$ aus einer nichtlinearen Gleichung berechnet werden muß. Außerdem gibt es Verfahren, die das Problem nicht in die Impulsgleichung und eine aus der Kontinuitätsgleichung gewonnene Druckkorrekturgleichung aufspalten, sondern Impuls- und Kontinuitätsgleichung mit iterativen Algorithmen zur Lösung von Sattelpunktsproblemen gemeinsam behandeln. Ein Spezialfall ist SIMPLER (SIMPLE revised) von [Patankar, 1980]. Eine gute Übersicht über die einzelnen Varianten und eine einheitliche Notation ist in [Turek, 1995] zu finden.

3.4.5 Der Druck an bewegten Rändern

Probleme bereitet allerdings die Druckberechnung an bewegten Hindernissen mit dem beschriebenen Algorithmus. Immer wenn eine Zelle infolge der Randbewegung ihren Typ ändert, d.h., wenn eine Fluidzelle zur Hinderniszelle wird oder umgekehrt, ändert sich die Berechnungsvorschrift für die Geschwindigkeiten an den neuen bzw. alten Randkanten.
Wir betrachten exemplarisch eine Zelle $C_{i-1,j}$, die in einem Zeitschritt von einer Fluid zu einer Hinderniszelle wird. Der Rand bewegt sich von links nach rechts, vgl. Abbildung 3.16. Der exakte Geschwindigkeitsverlauf wird mit der dicken Linie gekennzeichnet. Zur Zeit $t^{(n)}$ liegt

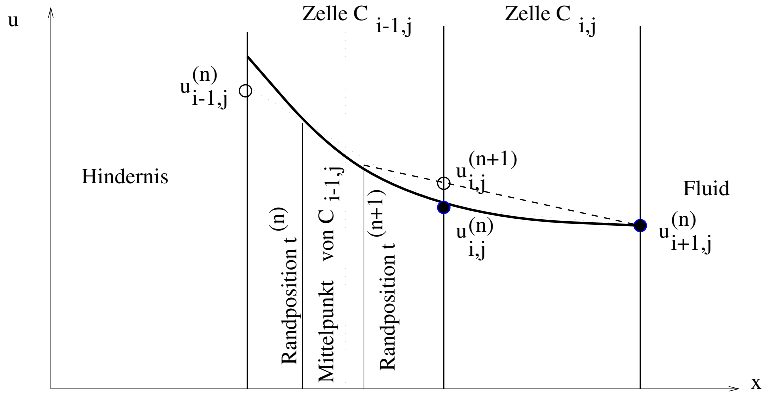


Abbildung 3.16 Berechnung der Geschwindigkeit an Randkanten, Schnitt entlang einer zur x-Achse parallelen Linie

der Rand noch links vom Mittelpunkt der Zelle $C_{i-1,j}$. Die Geschwindigkeit auf der rechten Kante $u_{i,j}$ wird aus der Diskretisierung der Impulsgleichungen berechnet. Zum Zeitpunkt $t^{(n+1)}$ liegt der Mittelpunkt von $C_{i-1,j}$ im Hindernis, so daß $u_{i,j}$ nun entlang der in Abbildung 3.16 gestrichelt dargestellten Linie aus dem Geschwindigkeitswert auf dem Rand und $u_{i+1,j}$ linear interpoliert wird. Die Differenz zwischen $u_{i,j}^{(n)}$ und $u_{i,j}^{(n+1)}$ hat die Ordnung $O(\delta x^2)$, unabhängig von der Größe des Zeitschritts δt.

Der Druck muß nun dafür sorgen, daß die Geschwindigkeiten im Fluid sich an die Änderung der Geschwindigkeit an der Randkante anpassen. Den formalen Zusammenhang beschreibt die Druckkorrekturgleichung für die SMAC-Methode (3.31)

$$\triangle(\delta p^{(n+1)}) = \frac{\rho_l}{\delta t} \operatorname{div} \vec{v}^{\,*}. \tag{3.52}$$

Bei der Chorinschen Projektionsmethode und der SIMPLE-Methode besteht eine analoge Beziehung zur Berechnung der Druckkorrektur. Die oben beschriebene Änderung der Geschwindigkeit der Ordnung $O(\delta x^2)$ führt somit zu einer Änderung der Ordnung $O(1)$ in der rechten Seite der Druckkorrekturgleichung, da der Zeitschritt nach der CFL-Bedingung (3.38) bei einer Halbierung der Ortsschrittweite ebenfalls halbiert werden muß. Je kleiner der Zeitschritt gewählt wird, um so größer wird die Änderung im Druck, da dem Druck zur Anpassung der Geschwindigkeitswerte im Inneren des Fluids an die geänderte Randgeschwindigkeit eine um so kürzere Zeit zur Verfügung steht. Wie die numerischen Experimente in Abschnitt 4.1 zeigen, haben diese Drucksprünge keinen nennenswerten Einfluß auf die Geschwindigkeiten.

Eine Bewegung des Rands allein aufgrund von Druckdifferenzen ist daher mit dem beschriebenen Algorithmus nicht möglich. Insbesondere führt die Rückkopplung des Drucks auf die Randgeschwindigkeit zu weiteren sehr großen Druckwerten im darauffolgenden Zeitschritt. Die physikalischen Parameter von Wasser in Abschnitt 4.3.3 zeigen aber, daß der Einfluß des Drucks auf die Bewegung der Phasengrenze in der Gibbs-Thomson-Bedingung so gering ist, daß dieses Problem für den Erstarrungsprozeß von Wasser nicht relevant ist.

3.5 Die Berechnung der Temperatur

Im Gegensatz zur Strömung wird die Temperaturverteilung nicht nur im Fluid, sondern auch im Festkörper berechnet. Sie wird durch die Temperaturgleichungen (2.56) im Fluid und (2.59) im Feststoff, die Randbedingungen an der Fluidoberfläche (2.64) und an der Behälterwand (2.67) bzw. (2.68) sowie die Stefan- und die Gibbs-Thomson-Bedingung (2.60) und (2.61) an der Phasengrenze beschrieben. Außerdem resultiert aus den letzten beiden Bedingungen die Geschwindigkeit der Phasengrenze V_{Γ_1}, die zunächst aus dem Gleichungssystem eliminiert werden soll. Dazu führen wir die Abkürzungen

$$\varepsilon_\kappa := \frac{\gamma_1 T_m}{L\,\rho_s}, \qquad \varepsilon_V := \frac{a\,\rho_s\,T_m^2}{L}, \qquad \varepsilon_p := \frac{T_m}{L}\left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_l}\right) \tag{3.53}$$

ein, mit denen sich die Gibbs-Thomson-Bedingung (2.61) wie folgt schreiben läßt:

$$T - T_m = -\varepsilon_V V_{\Gamma_1} - \varepsilon_\kappa \kappa - \varepsilon_p (p_l - p^*). \tag{3.54}$$

Lösen wir diese Gleichung nach der Geschwindigkeit der Phasengrenze V_{Γ_1} auf und setzen dies sowie die Randbedingung für $\vec{v}$ (2.62) in die Stefanbedingung (2.60)

$$\left[k\,\frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l + \rho_l\,c_l(T - T_m)(\vec{V}_{\Gamma_1} - \vec{v}) \cdot \vec{n} - \rho_s\,c_s(T - T_m)\vec{V}_{\Gamma_1} \cdot \vec{n} = -\rho_s\,L\,V_{\Gamma_1} \tag{3.55}$$

ein, so erhalten wir mit dem ins Fluid zeigenden Normaleneinheitsvektor $\vec{n}$ auf der Phasengrenze die Bedingung

$$\left[k\,\frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l + \frac{1}{\varepsilon_V}\Big(\rho_s\,(c_l - c_s)(T - T_m) + \rho_s L - \gamma_1 \kappa_1\Big)\Big(T_m - T - \varepsilon_\kappa \kappa_1 - \varepsilon_p (p - p^*)\Big) = 0. \tag{3.56}$$

Sie enthält nur noch die Temperatur und den im Fluidlöser berechneten Druck sowie die Krümmung der Phasengrenze als Unbekannte. Diese Gleichung wird nun für jede Partikelposition $\vec{p}_k, k = 1, \ldots, n_1$ mit dem Diskretisierungsabstand δ diskretisiert, indem die Normalableitungen durch

$$\left[\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_s\right]_k := \frac{T_k - T_{k,s}}{\delta}, \quad \left[\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_l\right]_k := \frac{T_{k,l} - T_k}{\delta}, \quad k = 1, \ldots, n_1, \tag{3.57}$$

ersetzt werden, wobei $T_k := T(\vec{p}_k)$, $T_{k,s} := T(\vec{p}_k - \delta \vec{n}_k)$ und $T_{k,l} := T(\vec{p}_k + \delta \vec{n}_k)$. Dabei werden die Temperaturwerte $T_{k,l}$ im Fluid und $T_{k,s}$ im Feststoff analog zu den Geschwindigkeitswerten bei der Diskretisierung der Bedingung am freien Rand in Abschnitt 3.4.3 durch bilineare Interpolation aus den vier umliegenden Gitterwerten in den Zellmittelpunkten gewonnen (siehe Abbildung 3.17, die Interpolationsrechtecke sind grau unterlegt).

Da der Gradient der Temperatur an der Phasengrenze unstetig ist, muß bei der Interpolation darauf geachtet werden, daß alle vier an der Interpolation beteiligten Werte in der gleichen Phase liegen. Der Diskretisierungsabstand δ muß daher mindestens der Länge der Diagonale einer Zelle $\sqrt{\delta x^2 + \delta y^2}$ entsprechen. Alternativ zu der linearen Approximation der Normalenableitungen in (3.57) kann auch die quadratische Approximation

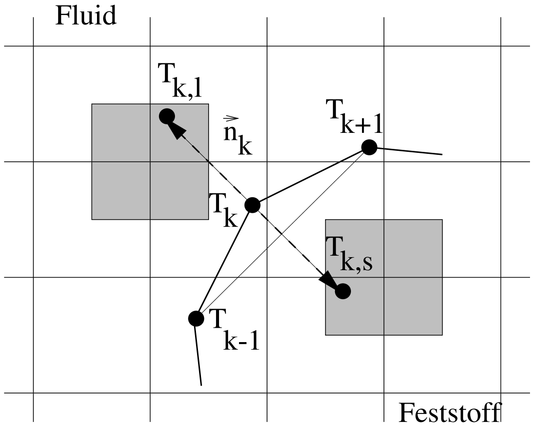


Abbildung 3.17 Diskretisierung der Normalableitungen der Temperatur an der Phasengrenze

$$\left[\frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_s \right]_k := \frac{3T_k - 4T_{k,s} + T_{k,s,2}}{2\delta}, \quad \left[\frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_l \right]_k := \frac{-T_{k,l,2} + 4T_{k,l} - 3T_k}{2\delta}, \quad k = 1, \ldots, n_1, \tag{3.58}$$

verwendet werden, in der neben $T_{k,s}$ und $T_{k,l}$ auch die Temperaturwerte $T_{k,s,2} := T(\vec{p}_k - 2\delta\vec{n}_k)$ und $T_{k,l,2} := T(\vec{p}_k + 2\delta\vec{n}_k)$ eingehen, die den doppelten Diskretisierungsabstand von $\vec{p}_k$ haben. Diese Werte werden ebenso durch bilineare Interpolation ermittelt. Wie wir mit numerischen Experimenten in Abschnitt 4.2.1 zeigen werden, bringt diese quadratische Approximation im Vergleich zur linearen Approximation (3.57) bei sonst gleichen Diskretisierungen deutlich bessere Ergebnisse. Allerdings birgt sie bei zerklüfteten Strukturen und zu grober Diskretisierung wie beispielsweise Dendriten die Gefahr, daß bei der Interpolation von $T_{k,s,2}$ und $T_{k,l,2}$ auf Werte in der anderen Phase zugegriffen wird.

Verwenden wir nun eine der beiden Diskretisierungsarten, so wird aus (3.56) eine quadratische Gleichung für die Temperatur T_k bei $\vec{p}_k$, die bei identischen spezifischen Wärmekapazitäten in Fluid und Feststoff $c_l = c_s$ sogar linear wird. Für diesen Fall kann also T_k direkt berechnet werden, während wir bei $c_l \neq c_s$ die Lösung der quadratischen Gleichung, die näher bei der Schmelztemperatur T_m liegt, verwenden.

Die gleiche Diskretisierungsmethode wird auch auf die Temperaturbedingung an der Fluidoberfläche (2.64) angewendet, so daß dort jeweils eine Bedingung für die Temperatur bei einem Partikel der Fluidoberfläche $\vec{p}_k, k = n_1 + 1, \ldots, n_1 + n_2$ resultiert.

Neben den Randbedingungen müssen natürlich auch noch die Temperaturgleichungen im Fluid und im Feststoff diskretisiert werden. Dies geschieht analog zu der Diskretisierung der Impulsgleichungen in Abschnitt 3.4.1 mit Finiten Differenzen, wobei hier die Zeitableitung mit einem impliziten Eulerschritt diskretisiert wird. Wir erhalten im Fluid[5]

[5]Hier geben wir nur die zentrale Differenzendiskretisierung an, da die Strömungsgeschwindigkeiten bei den Gefrierprozessen so klein sind, daß keine stabilisierenden Upwind-Diskretisierungen nötig sind. Wie bei der Diskretisierung der Impulsgleichungen in (3.7) kann aber auch hier das Donor-Cell Schema angewendet werden, ([Griebel et al., 1995, Kapitel 9]).

$$\begin{aligned}\frac{T_{i,j}^{(n+1)} - T_{i,j}^{(n)}}{\delta t} &= \frac{k_l}{\rho_l\, c_l}\left(\frac{T_{i+1,j}^{(n+1)} - 2T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i-1,j}^{(n+1)}}{\delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{(n+1)} - 2T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i,j-1}^{(n+1)}}{\delta y^2}\right) - \\ &\quad \frac{u_{i,j}^{(n+1)}(T_{i+1,j}^{(n+1)} + T_{i,j}^{(n+1)}) - u_{i-1,j}^{(n+1)}(T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i-1,j}^{(n+1)})}{2\delta x} - \\ &\quad \frac{v_{i,j}^{(n+1)}(T_{i,j+1}^{(n+1)} + T_{i,j}^{(n+1)}) - v_{i,j-1}^{(n+1)}(T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i,j-1}^{(n+1)})}{2\delta y}\end{aligned} \tag{3.59}$$

und im Feststoff

$$\frac{T_{i,j}^{(n+1)} - T_{i,j}^{(n)}}{\delta t} = \frac{k_s}{\rho_s\, c_s}\left(\frac{T_{i+1,j}^{(n+1)} - 2T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i-1,j}^{(n+1)}}{\delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{(n+1)} - 2T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i,j-1}^{(n+1)}}{\delta y^2}\right). \tag{3.60}$$

Diese Gleichungen müssen aber modifiziert werden, falls eine Nachbarzelle von einem anderen Typ ist und so auf einen Temperaturwert in einer leeren Zelle oder einer Zelle der anderen Phase zugegriffen würde. Wegen dem Sprung im Temperaturgradienten würde sich sonst die Approximationsordnung bei der Diskretisierung der Temperaturgleichungen verschlechtern.
Wir verwenden daher in der Nähe einer Randlinie eine Shortley-Weller-Diskretisierung [Shortley & Weller, 1938], [Hackbusch, 1986]. Dabei wird nicht auf den Gitterwert in der benachbarten Zelle zugegriffen, sondern auf den Wert $T_{\Gamma,i,j}$ am Schnittpunkt der Randlinie mit der Mittellinie der jeweiligen Zelle. $T_{\Gamma,i,j}$ wird durch Interpolation der beiden Temperaturwerte T_k und T_{k+1} an den dem Schnittpunkt auf der Randlinie benachbarten Partikelpositionen gewonnen.
Das Shortley-Weller-Schema basiert auf Differenzenquotienten auf nicht-äquidistanten Gittern. Als Beispiel betrachten wir die in Abbildung 3.18 gezeigte Situation, bei der die Phasengrenze die Verbindungslinie zweier horizontal benachbarter Zellmittelpunkte schneidet. In die Differenzenquotienten der Zellen $C_{i,j}$ und $C_{i+1,j}$ geht dabei jeweils der horizontale Abstand vom Zellmittelpunkt zum Rand $\delta r_{i,j}$ bzw. $\delta l_{i+1,j}$ ein.
Für die Diskretisierung des diffusiven Terms erhalten wir in der Zelle $C_{i,j}$ links des Rands

$$\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_{i,j} = \frac{2\,T_{\Gamma,i,j}}{\delta r_{i,j}\,(\delta r_{i,j} + \delta x)} - \frac{2\,T_{i,j}}{\delta r_{i,j}\,\delta x} + \frac{2\,T_{i-1,j}}{\delta x\,(\delta r_{i,j} + \delta x)} \tag{3.61}$$

und in der Zelle $C_{i+1,j}$ rechts des Rands

$$\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_{i+1,j} = \frac{2\,T_{i+2,j}}{\delta x\,(\delta l_{i+1,j} + \delta x)} - \frac{2\,T_{i+1,j}}{\delta l_{i+1,j}\,\delta x} + \frac{2\,T_{\Gamma,i,j}}{\delta l_{i+1,j}\,(\delta l_{i+1,j} + \delta x)}. \tag{3.62}$$

Die Diskretisierung des konvektiven Teils in der Fluidzelle $C_{i,j}$ wird zu

$$\left[\frac{\partial(uT)}{\partial x}\right]_{i,j} = \frac{u_{\Gamma,i,j}\,T_{\Gamma,i,j} - u_{i-1,j}\,(T_{i,j} + T_{i-1,j})/2}{\delta x/2 + \delta r_{i,j}}. \tag{3.63}$$

Wir ersetzen hier also den Wert von uT am Mittelpunkt der rechten Kante der Zelle $C_{i,j}$ durch den Wert $u_{\Gamma,i,j}\,T_{\Gamma,i,j}$ auf der Phasengrenze und verwenden statt dem Diskretisierungsabstand δx den Abstand $\delta x/2+\delta r_{i,j}$ vom Zellmittelpunkt zum Rand. Die Randwerte $u_{\Gamma,i,j}$ und $T_{\Gamma,i,j}$ werden beide durch Interpolation aus den Werten der benachbarten Partikel $\vec{p}_k$ und $\vec{p}_{k+1}$ bestimmt, die aus den diskreten Randbedingungen gewonnen wurden. Die Diskretisierung der Ableitungen in y-Richtung erfolgt analog, ebenso die Diskretisierung an der Fluidoberfläche Γ_2.

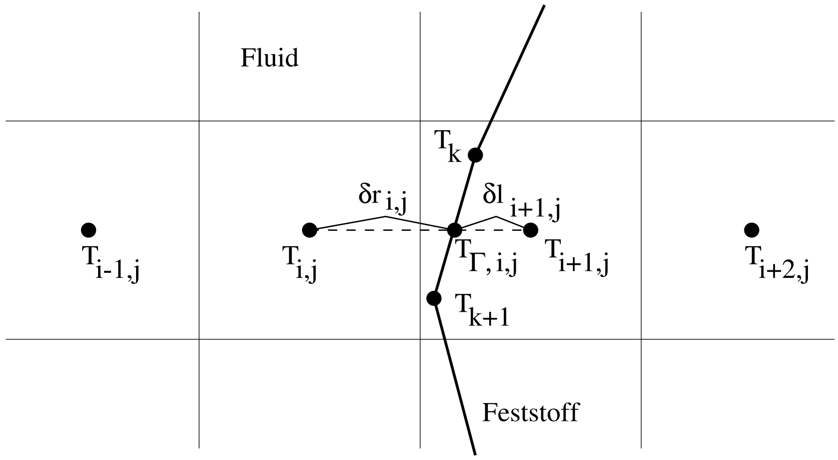


Abbildung 3.18 Shortley-Weller-Diskretisierung der Temperaturgleichungen an der Phasengrenze

Insgesamt erhalten wir jeweils eine Gleichung für die Temperatur T_k bei den Partikeln $\vec{p}_k$, $k = 1, \ldots, n_1 + n_2$ der Phasengrenze Γ_1 aus (3.56) und der Fluidoberfläche Γ_2 aus (2.64), in Verbindung mit der linearen oder der quadratischen Approximation der Normalenableitungen (3.57) bzw. (3.58). Außerdem haben wir je eine Gleichung für die Temperatur $T_{i,j}$ am Mittelpunkt jeder Fluidzelle (3.59) und jeder Feststoffzelle (3.60), die in der Nähe der Ränder gemäß den Shortley-Weller-Diskretisierungen (3.61), (3.62) und (3.63) modifiziert werden. Es ergibt sich also ein Gleichungssystem aus $n_1 + n_2 + n_{\text{liq}} + n_{\text{sol}}$ Gleichungen mit ebenso vielen Unbekannten, das mit einem beliebigen Iterationsverfahren gelöst werden kann. Die Größen n_{liq} und n_{sol} bezeichnen die Anzahl der Fluid- bzw. Feststoffzellen. Wir verwenden in unseren Simulationen wiederum das SOR-Verfahren.

Die Bewegung der Phasengrenze erfolgt, indem die Gibbs-Thomson-Bedingung (3.54) nach der Geschwindigkeit aufgelöst wird und jedes Partikel in einem Euler-Schritt fortbewegt wird:

$$\vec{p}_k^{\,(n+1)} = \vec{p}_k^{\,(n)} - \frac{\delta t}{\varepsilon_V} \left(T_k^{(n)} - T_m + \varepsilon_\kappa \kappa_k^{(n)} + \varepsilon_p (p_k^{(n)} - p^\star) \right) \vec{n}. \tag{3.64}$$

Der Druck p_k bei dem Randpartikel $\vec{p}_k$ wird durch Extrapolation aus den in Normalenrichtung benachbarten Fluidwerten gewonnen.

Da die Krümmung $\kappa^{(n)}$ sich aus der zweiten Ableitung einer in Bogenlänge parametrisierten Kurve berechnet, stellt (3.64) eine explizit diskretisierte Diffusionsgleichung für die Partikelpositionen $\vec{p}_k$ dar. Die stabile Lösung dieser Gleichung erfordert ebenso wie die Diskretisierung der Impulsgleichungen die Beschränkung der Zeitschrittweite. Wenn Δ den minimalen Abstand zweier Partikel bezeichnet, muß hier analog zu (3.37)

$$\frac{2\,\delta t\,\varepsilon_\kappa}{\varepsilon_V} < \Delta^2 \tag{3.65}$$

erfüllt sein, [Sullivan et al., 1987].

Um diese Einschränkung für die Zeitschrittweite zu umgehen, ist es auch möglich, die Krümmung der Phasengrenze implizit in die Berechnung der Geschwindigkeit mit eingehen zu lassen.

Dazu werden die neuen Partikelpositionen $\vec{p}_k^{(n+1)}$ iterativ bestimmt, indem die Iterierte $\vec{p}_k^{it+1}$ mit der aus $\vec{p}_l^{it}, l = k-1, k, k+1$, berechneten Krümmung κ_k^{it} ermittelt wird:

$\vec{p}^0 := \vec{p}^{(n)}, \kappa^0 := \kappa^{(n)}$
$it = 1, 2, \ldots, it_{\max}$
  $k = 1, \ldots, n_1$
    Berechne κ_k^{it} aus $\vec{p}_{k-1}^{it}, \vec{p}_k^{it}, \vec{p}_{k+1}^{it}$,
    $V_k^{it} = -\frac{1}{\varepsilon_V}\left(T_k^{(n)} - T_m + \varepsilon_\kappa \kappa_k^{it} + \varepsilon_p (p_k^{(n)} - p^\star)\right)$,
    $\vec{p}_k^{it+1} = \vec{p}_k^{it} - \lambda\left(\vec{p}_k^{it} - \vec{p}_k^{(n)} - \delta t\, V_k^{it}\, \vec{n}\right)$,
  Falls Residuumsnorm $< \epsilon$
    Setze $\vec{p}_k^{(n+1)} = \vec{p}_k^{it+1}$ und breche die Iteration ab.

Der Relaxationsparameter λ ist notwendig, um Konvergenz zu erzielen. Er muß sukzessive verkleinert werden, falls das Iterationsverfahren zu divergieren beginnt, d.h. falls die Norm des Residuums $\vec{r}_k^{it} := \vec{p}_k^{it} - \vec{p}_k^{(n)} - \delta t\, V_k^{it}\, \vec{n}, k = 1, \ldots, n_1$, von einem Iterationsschritt zum nächsten ansteigt.

4 Simulationsergebnisse

In einer Vielzahl numerischer Experimente werden wir jetzt die Mächtigkeit des im vorigen Kapitel vorgestellten Algorithmus' aufzeigen. Dabei wollen wir zunächst Beispiele allein mit dem Strömungslöser, dann mit dem Temperaturlöser und schließlich mit der Kopplung beider Löser rechnen. In jedem Abschnitt betrachten wir jeweils als erstes die Fehler der Algorithmen für ein Testbeispiel, bei dem eine analytische Lösung angegeben werden kann und untersuchen daran den Einfluß der einzelnen Komponenten des Algorithmus'. Anschließend präsentieren wir weitere charakteristische Beispiele.

4.1 Simulationen mit dem Strömungslöser

4.1.1 Beispiel mit analytisch bekannter Lösung

Die Konvergenz des Strömungslösers und den Einfluß der einzelnen Komponenten

- Approximation des krummlinigen Hindernisrands,
- Druck-Geschwindigkeits-Kopplung,
- Bewegung des Hindernisrands und
- Diskretisierung der Randbedingung an der Fluidoberfläche

auf den Diskretisierungsfehler wollen wir an dem folgenden Beispiel zeigen.
Dabei wird sich herausstellen, daß wir mit der in dieser Arbeit vorgestellten Approximation der Randlinien am Hindernis und an der Fluidoberfläche mit Polygonzügen bzw. aus Kreisbögen zusammengesetzten Randlinien wesentlich bessere Konvergenzresultate erhalten, als mit einer treppenartigen Randapproximation entlang der Gitterlinien. Die Verwendung des SIMPLE-Verfahrens bringt gegenüber der Chorinschen Projektionsmethode dagegen keine nennenswerten Vorteile.
Wir betrachten die Strömung in dem quadratischen Behälter $\Omega_0 := [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$, aus dem zum Zeitpunkt $t = 0$ ein kreisförmiges Hindernis K_1 mit Mittelpunkt im Ursprung und Radius $R_{1,0} = 0.15$ herausgeschnitten ist. Die Randlinie des Hindernisses bezeichnen wir mit Γ_1. Das radiale, stationäre Geschwindigkeitsfeld

$$\vec{v}(\vec{x}) = \frac{v_0}{|\vec{x}|^2}\,\vec{x} \tag{4.1}$$

und der Druck

$$p(\vec{x}) = -\frac{v_0^2\,\rho_l}{2\,|\vec{x}|^2} + p_0 \tag{4.2}$$

lösen dann die Navier-Stokes Gleichungen (2.57) und (2.58), in denen die Volumenkräfte $\vec{g}$ auf Null gesetzt werden. Als Anfangswert für die Geschwindigkeit $\vec{v}$ wird ebenfalls (4.1) verwendet. Außerdem wählen wir die physikalischen Parameter $\mu = 0.02$, $\rho_l = 1.5$ und $v_0 = 1/6$. Die Simulationen werden auf Gittern mit 20x20, 40x40, 80x80 und 160x160 Zellen durchgeführt. Die zugehörigen Zeitschrittweiten sind 0.00016, 0.00008, 0.00004 und 0.00002. Die Simulationen werden jeweils bis zu einem Endzeitpunkt $t_{\text{end}} = 0.04$ durchgeführt.
Die Fehler werden jeweils in der relativen diskreten L_2-Norm wiedergegeben, d.h. wir summieren für die Geschwindigkeit und die Temperatur die Quadrate der Differenzen zwischen exakter Lösung $f(\vec{x}_{i,j})$ und approximierter Lösung $f_{i,j}$ an den im Fluid liegenden Gitterpunkten $\vec{x}_{i,j}$. Diese Summe wird dann noch durch die Norm der exakten Lösung geteilt.

$$\text{err} := \frac{||f - f_h||_2}{||f||_2} = \left(\frac{\sum_{C_{i,j} \text{Fluidzelle}} (f(\vec{x}_{i,j}) - f_{i,j})^2}{\sum_{C_{i,j} \text{Fluidzelle}} (f(\vec{x}_{i,j}))^2} \right)^{1/2} . \tag{4.3}$$

Bei den Fehlern der Größen am Rand werden jeweils die Quadrate der Differenzen zwischen exaktem Wert $f(\vec{p}_k)$ und berechnetem Wert f_k an den Partikelpositionen $\vec{p}_k$ aufsummiert:

$$\text{err} := \frac{||f - f_h||_2}{||f||_2} = \left(\frac{\sum_k (f(\vec{p}_k) - f_k)^2}{\sum_k (f(\vec{p}_k))^2} \right)^{1/2} . \tag{4.4}$$

Dabei kann f für die Krümmung oder die Geschwindigkeit des Randes stehen. Bei der Berechnung der Fehler der Randpositionen wird für f der Abstand der Partikel vom Mittelpunkt des Anfangskreises eingesetzt.

Strömung mit starrem Hindernis

Zunächst ist das kreisförmige Hindernis in Ruhe. Als Randbedingungen geben wir auf der Kreislinie und am Rand des Behälters Dirichlet-Bedingungen gemäß (4.1) vor. An diesem Beispiel wollen wir zunächst den Einfluß der Approximation des krummlinigen Hindernisrands auf den Fehler studieren.

Gitter	Gitterlinien		Polygonzug		Kreisbögen	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	5.4e-2	—	3.1e-2	—	2.4e-2	—
40x40	1.7e-2	3.2	3.3e-3	9.4	2.7e-3	8.9
80x80	8.7e-3	2.0	7.1e-4	4.6	5.7e-4	4.7
160x160	3.6e-3	2.4	1.9e-4	3.7	1.5e-4	3.8

Tabelle 4.1 L_2-Fehler der Geschwindigkeiten für stationäres Strömungsbeispiel, unterschiedliche Randapproximation, Chorinsche Projektionsmethode, $t = 0.04$

In Tabelle 4.1 vergleichen wir den Geschwindigkeitsfehler der Chorinschen Projektionsmethode für unterschiedliche Randapproximationen in der L_2-Norm. Dabei zeigt sich, daß bei der treppenartigen Approximation des Randes auf Gitterlinien der Fehler bei einer Halbierung der Schrittweite in etwa halbiert wird. Mit der in dieser Arbeit vorgestellten Randapproximation

mit Polygonzügen ergibt sich dagegen eine Fehlerreduktion um den Faktor vier. Dies ist in der Spalte *Quotient* abzulesen, in der wir jeweils den Fehler auf dem Gitter mit $i_{\max} \times j_{\max}$ Zellen durch den Fehler auf dem Gitter mit halb so vielen Zellen in jeder Koordinatenrichtung teilen. Die Absolutwerte der Fehler hängen allerdings stark von der genauen Lage der Randlinie ab, d.h. hier vom Radius. So erklärt sich auch der große Sprung von dem 20×20-Gitter zum 40×40-Gitter, der bei anderen Radien des Kreises nicht so stark ausfällt. Unabhängig vom Radius ergeben sich mit der linearen Randapproximation aber deutlich kleinere Fehlerwerte als mit der gestuften Randapproximation.
Der Fehler wird noch etwas reduziert, wenn wir die Partikel der Randlinie nicht mit einem Streckenzug, sondern mit Kreisbögen verbinden. Eine Reduktion der Fehlerordnung ist dadurch aber, wie zu erwarten, nicht erzielbar. Im folgenden werden wir in den Simulationen den Rand stückweise mit Kreisbögen darstellen.

Strömung mit bewegtem Hindernis

Als nächstes wollen wir den Einfluß der Hindernisbewegung betrachten. Dazu vergrößern wir das kreisförmige Hindernis mit der Geschwindigkeit

$$V_{\Gamma_1} = \frac{V_0}{\sqrt{R_{1,0}^2 + t}} \tag{4.5}$$

in Normalenrichtung. Der Rand $\Gamma_1(t)$ des Kreises $K_1(t)$ hat dann zum Zeitpunkt t den Radius

$$R_1(t) = 2\,V_0\,\sqrt{R_{1,0}^2 + t}\,. \tag{4.6}$$

Um die gleiche Strömungssituation wie bei dem vollständigen Modell mit Temperaturberechnung aus Abschnitt 2.3 zu erhalten, nehmen wir an, daß das Fluid an Γ_1 nicht mit der Randgeschwindigkeit V_{Γ_1} verdrängt wird, sondern mit

$$\vec{v}|_{\Gamma_1} = \frac{v_0}{\sqrt{R_{1,0}^2 + t}}\,\vec{n} = \frac{v_0}{V_0}\,\vec{n}. \tag{4.7}$$

Das Verhältnis v_0/V_0 entspricht dann dem Faktor $1-\rho_s/\rho_l$ aus der Randbedingung für die Fluidgeschwindigkeit (2.62). Neben $v_0 = 1/6$ setzen wir $V_0 = 1/2$, was $1 - \rho_s/\rho_l = 1/3$ entspricht. Am Rand des Behälters verwenden wir wiederum Dirichlet-Randbedingungen gemäß (4.1). So ergibt sich als analytische Lösung in dem zeitabhängigen Fluidgebiet $\Omega_l(t) = \Omega_0 \setminus K_1(t)$ die Geschwindigkeit (4.1) und der Druck (4.2).
Tabelle 4.2 zeigt, daß die Fehler für die Geschwindigkeit in der L_2-Norm bei der Chorinschen Projektionsmethode und dem SIMPLE-Verfahren bei gleicher Zeitschrittweite nur minimal voneinander abweichen. Beide Verfahren zeigen im Mittel eine Fehlerreduktion um einen Faktor größer als drei bei Halbierung der Schrittweite. Die Absolutwerte der Fehler mit bewegtem Hindernis sind im Vergleich zu den Fehlern für das oben betrachtete Beispiel mit starrem Hindernis sogar etwas kleiner. Dies liegt allerdings an der starken Abhängigkeit der Fehlerwerte vom Radius des Hindernisses beim stationären Beispiel.
Wir verwenden im weiteren die Chorinsche Projektionsmethode.

Gitter	Chorin		SIMPLE	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	4.024e-3	—	4.022e-3	—
40x40	1.264e-3	3.3	1.263e-3	3.3
80x80	3.117e-4	3.9	3.109e-4	3.9
160x160	1.176e-4	2.8	1.173e-4	2.8

Tabelle 4.2 Vergleich der Geschwindigkeitsfehler in der L_2-Norm bei der Chorinschen Projektionsmethode und dem SIMPLE-Verfahren, expandierender Kreis, $t = 0.04$

Strömung mit bewegtem Hindernis und freier Fluidoberfläche

Als Drittes wollen wir jetzt noch den Einfluß der Diskretisierung an der Fluidoberfläche betrachten. Dazu verwenden wir wie eben das sich mit der Geschwindigkeit (4.5) ausdehnende kreisförmige Hindernis, das das Fluid mit der Randgeschwindigkeit (4.7) verdrängt. Statt am Rand des Behälters Dirichlet-Bedingungen anzunehmen beschränken wir aber jetzt das Fluidgebiet auf den Kreisring $\Omega_l(t) = K_2(t)\setminus K_1(t)$. Dabei ist $K_2(t)$ ein Kreis mit Radius $R_{2,0} = 3\,R_{1,0}$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Zum Zeitpunkt t ergibt sich für $K_2(t)$ aus der Massenerhaltung der Radius

$$R_2(t) = \sqrt{R_{2,0}^2 + \frac{v_0}{V_0}\left((4\,V_0^2 - 1)R_{1,0}^2 + 4\,V_0^2\,t\right)}\,. \tag{4.8}$$

Auf Γ_2 gilt die Oberflächen-Randbedingung (2.65). Dadurch ist der Druck nicht mehr nur bis auf die Konstante p_0 bestimmt, sondern diese Konstante ergibt sich jetzt zu

$$p_0 = \frac{\gamma_2}{R_2(t)} - \left(\frac{\mu}{3} - \frac{v_0^2\,\rho_l}{2}\right)\frac{1}{(R_2(t))^2}\,. \tag{4.9}$$

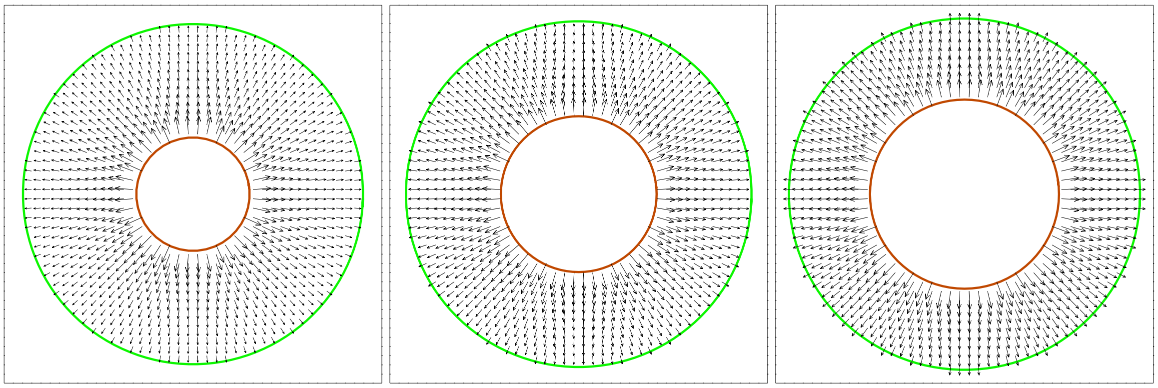


Abbildung 4.1 Hindernisrand, Fluidoberfläche und Geschwindigkeitsfeld bei analytischem Testbeispiel, links: $t = 0.0$, mitte: $t = 0.02$, rechts: $t = 0.04$

Der Rand des Hindernisses, die Fluidoberfläche und das Geschwindigkeitsfeld sind in Abbildung 4.1 dargestellt.

Wir wollen an diesem Beispiel den Unterschied der in [Griebel et al., 1995] beschriebenen Diskretisierung der Randwerte mit der in Abschnitt 3.4.3 vorgeschlagenen Diskretisierung vergleichen.

Gitter	Geschwindigkeit		Randposition		Geschw. Oberfl.		Krümmung Oberfl.	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	3.8e-2	—	7.5e-4	—	1.9e-2	—	1.3e-1	—
40x40	1.9e-2	2.0	2.6e-4	2.9	1.2e-2	1.6	8.1e-2	1.6
80x80	1.0e-2	1.9	2.1e-4	1.2	8.1e-3	1.5	1.8e-1	0.5
160x160	5.4e-3	1.9	1.2e-4	1.8	5.4e-3	1.5	3.1e-1	0.6

Tabelle 4.3 Fehler bei Strömungsbeispiel mit freier Fluidoberfläche, Approximation des Rands durch achsenparallele und diagonale Randstücke, $t = 0.04$

Die in [Griebel et al., 1995] beschriebene Randapproximation mit achsenparallelen und diagonalen Randstücken zeigt in Tabelle 4.3 Fehlerreduktionen um den Faktor zwei und kleiner für die Geschwindigkeit u, die Position der Fluidoberfläche Γ_2 und die Geschwindigkeit der Fluidoberfläche V_{Γ_2}. Die Krümmung wird auf feineren Gittern überhaupt nicht besser, zum Teil sogar schlechter, approximiert.

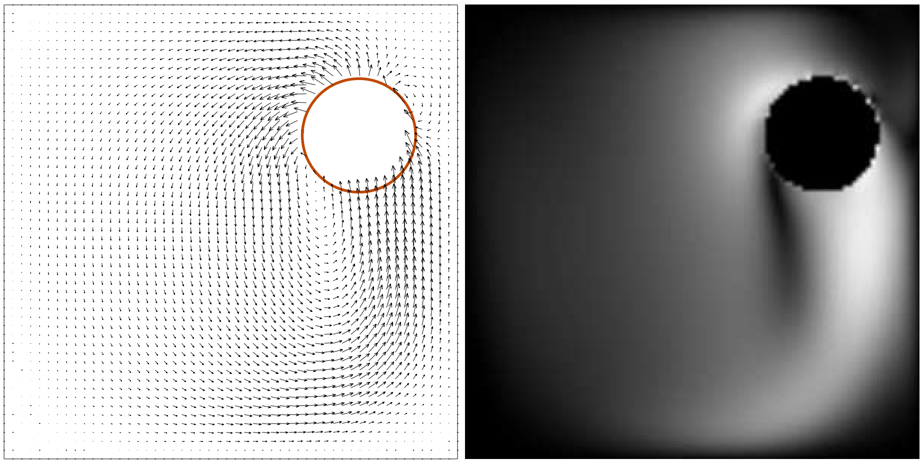
Gitter	Geschwindigkeit		Randposition		Geschw. Oberfl.		Krümmung Oberfl.	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	9.4e-3	—	6.9e-4	—	2.1e-2	—	7.2e-3	—
40x40	2.2e-3	4.1	1.7e-4	4.1	5.2e-3	4.0	3.5e-3	2.1
80x80	4.9e-4	4.5	4.1e-5	4.1	1.1e-3	4.7	1.2e-3	2.9
160x160	1.2e-4	4.1	1.2e-5	3.4	3.3e-4	3.3	6.5e-4	1.9

Tabelle 4.4 Fehler bei Strömungsbeispiel mit freier Fluidoberfläche, Approximation des Rands durch Kreisbögen, $t = 0.04$

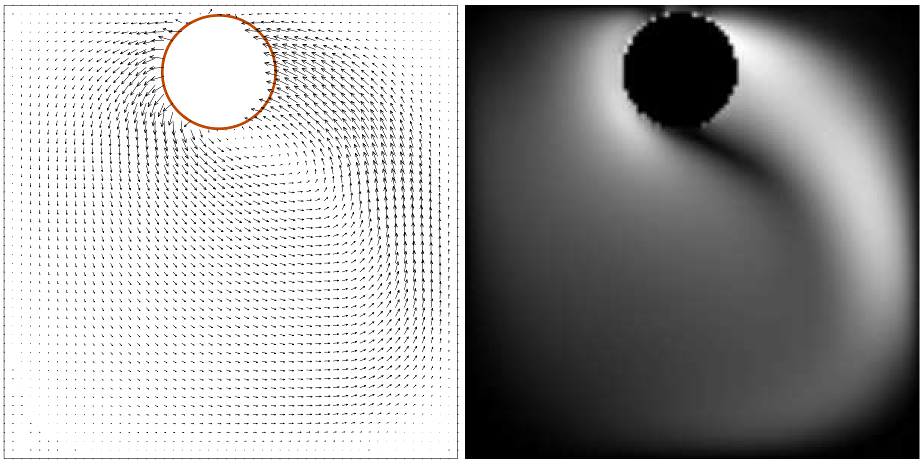
Wenn wir dagegen wie in Abschnitt 3.4.3 beschrieben die Randbedingung durch Transformation auf Polarkoordinaten entlang einer mit Kreisbögen verbundenen Partikelkette diskretisieren, so erhalten wir Fehlerwerte, die bei Halbierung der Schrittweite etwa um den Faktor vier, bei der Krümmung um den Faktor zwei, reduziert werden, siehe Tabelle 4.4. Im Vergleich zu den Fehlerwerten mit Dirichlet-Randbedingungen an der Behälterwand in Tabelle 4.2 sind die Fehlerwerte mit freier Fluidoberfläche bei der Randapproximation durch Kreisbögen in der gleichen Größenordnung.

4.1.2 Rotierender Stab

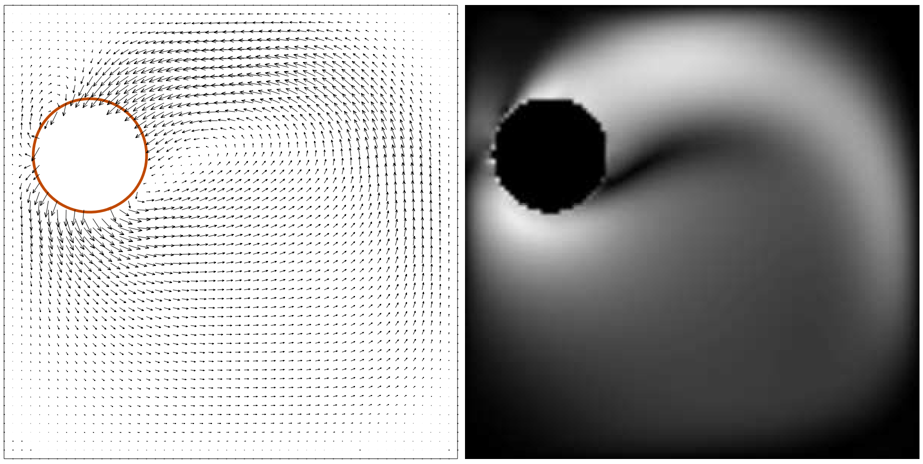
Neben dem eben betrachteten Modellproblem wollen wir jetzt eine realistischere Strömungssituation behandeln. Dazu betrachten wir einen zylindrischen Stab mit Radius $r := 1/8$, der in einem quadratischen Fluidbehälter $\Omega_0 := [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$ um den Mittelpunkt mit der



$t = 4.0$



$t = 5.0$



$t = 6.0$

Abbildung 4.2 Rotierender Stab, Geschwindigkeitsfeld (links) und Grauwertbild des Geschwindigkeitsbetrags (rechts):weiß hohe, schwarz niedrige Geschwindigkeit

Winkelgeschwindigkeit $\omega = 1$ rotiert. Der Abstand des Mittelpunkts des Stabs vom Rotationszentrum ist $R = \sqrt{2}/4$. Der Stab selbst rotiert nicht um seine eigene Achse. Die Viskosität des Fluids beträgt $\mu = 0.001$ und die Dichte $\rho_l = 1.0$.
Durch die Drehbewegung des Stabs wird in dem Fluid eine Strömung angetrieben. In den Simulationsergebnissen in Abbildung 4.2, die auf einem 100×100-Gitter mit $\delta t = 0.001$ gewonnen wurden, erkennt man, wie der Stab das in Bewegungsrichtung liegende Fluid verdrängt und hinter dem Stab das Fluid nachläuft. Wegen der Zähigkeit des Fluids ergibt sich keine stationäre Strömung, sondern das Wirbelzentrum, in dem das Fluid in Ruhe ist, bewegt sich mit dem Stab mit.
An dieser Stelle sei nochmals betont, daß in der Simulation keine Gittertransformationen verwendet werden. Vielmehr wird ein stationäres Gitter verwendet, in dem sich lediglich die Randbedingungen verändern.

4.2 Simulationen mit dem Temperaturlöser

Wenn wir voraussetzen, daß das Fluid und der Feststoff die gleiche Dichte besitzen, so wird nach dem Modell aus Abschnitt 2.3 nur die Temperatur und die damit verbundene Bewegung der Phasengrenze, aber keine Strömung berechnet. Wir können so allein die Temperaturverteilung nach dem in Abschnitt 3.5 beschriebenen Algorithmus berechnen.

4.2.1 Beispiel mit analytisch bekannter Lösung

Zunächst betrachten wir in Anlehnung an [Schmidt, 1996] wiederum ein Beispiel, bei dem eine analytische Lösung bekannt ist. Wir betrachten dazu die Temperaturgleichungen (2.56) und (2.59) mit $k_l = c_l = \rho_l = k_s = c_s = \rho_s = 1$ und $\vec{v} = 0$, die Stefan-Bedingung (2.60) mit $L = 1$ und die Gibbs-Thomson-Gleichung in der Form (3.54) mit den Konstanten $\varepsilon_V = \varepsilon_\kappa =: \varepsilon$ und $\varepsilon_p = 0$. Den Schmelzpunkt setzen wir auf $T_m = 0$.
Wie in dem analytischen Strömungsbeispiel gehen wir zum Zeitpunkt $t = 0$ davon aus, daß der Feststoff im Kreis K_1 mit Radius $R_{1,0} = 0.15$ um den Ursprung des Koordinatensystems liegt. Das Fluid nimmt den Rest des quadratischen Behälters $\Omega_0 := [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$ ein.
Die Temperatur

$$T(\vec{x},t) := \begin{cases} T_{\text{eis}}(t) & \text{für} \quad |\vec{x}| \le R_1(t), \\ T_{\text{eis}}(t) - \dfrac{e^{1/4}}{2} \displaystyle\int_1^{|\vec{x}|/R(t)} \frac{e^{-z^2/4}}{z} dz & \text{für} \quad |\vec{x}| > R_1(t), \end{cases} \tag{4.10}$$

und die Phasengrenze

$$\Gamma_1(t) := \{\vec{x} \in \mathbb{R}^2, |\vec{x}| = R_1(t)\} \tag{4.11}$$

lösen dann das Gleichungssystem

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} &= \triangle T + F && \text{für} \quad \vec{x} \in \Omega_0 \setminus \Gamma_1, \\
\left[\frac{\partial T}{\partial n}\right]_s^l &= -V_{\Gamma_1} && \text{für} \quad \vec{x} \in \Gamma_1, \\
T &= -\varepsilon\, V_{\Gamma_1} - \varepsilon\, \kappa && \text{für} \quad \vec{x} \in \Gamma_1,
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

wenn zu der Temperaturgleichung die Wärmequelle

$$F = \frac{0.75\,\varepsilon}{R_1(t)^3} \tag{4.13}$$

hinzugefügt wird. Die Anfangs- und Randbedingungen werden gemäß (4.10) gesetzt. Dabei ist der Radius der Phasengrenze durch

$$R_1(t) := \sqrt{R_{1,0}^2 + t} \tag{4.14}$$

und die Temperatur des Feststoffs durch

$$T_{\text{eis}}(t) := -\frac{1.5\,\varepsilon}{R_1(t)} \tag{4.15}$$

gegeben. Das Temperaturprofil (4.10) ist in Abbildung 4.3 veranschaulicht.

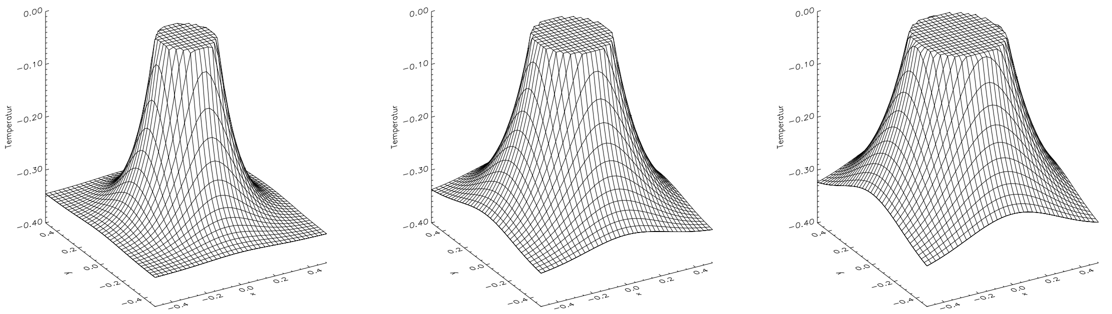


Abbildung 4.3 Temperaturprofil bei analytischem Testbeispiel, links: $t = 0.0$, mitte: $t = 0.02$, rechts: $t = 0.04$

In den folgenden Tabellen und Abbildungen zeigen wir die Simulationsergebnisse auf Gittern mit 20×20, 40×40, 80×80 und 160×160 Gitterzellen. Die zugehörigen Zeitschrittweiten sind $\delta t = 0.00016, 0.00008, 0.00004$ und 0.00002. Den Gibbs-Thomson-Parameter setzen wir auf $\varepsilon = 0.001$ und die Simulationsendzeit beträgt $t_{\text{end}} = 0.04$.
In den Tabellen 4.5 und 4.6 sind die relativen Fehler in der L_2-Norm für die Temperatur T

Gitter	T		Γ_1		V_{Γ_1}		κ_1	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	7.9e-2	—	9.9e-2	—	2.1e-1	—	1.1e-1	—
40x40	4.6e-2	1.7	5.7e-2	1.7	1.2e-1	1.7	6.2e-2	1.8
80x80	2.5e-2	1.8	3.1e-2	1.8	6.3e-2	1.9	3.2e-2	1.9
160x160	1.3e-2	1.9	1.6e-2	1.9	3.3e-2	1.9	1.7e-2	1.9

Tabelle 4.5 L_2-Fehler bei linearer Approximation der Normalableitungen in der Stefan-Bedingung, analytisches Testbeispiel, nur Temperaturlöser, $t = 0.04$

Gitter	T		Γ_1		V_{Γ_1}		κ_1	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	2.8e-2	—	3.4e-2	—	6.1e-2	—	3.9e-2	—
40x40	1.0e-2	2.8	1.2e-2	2.8	2.2e-2	2.8	2.7e-2	1.4
80x80	3.6e-3	2.8	4.1e-3	2.9	7.3e-3	3.0	1.3e-2	2.1
160x160	1.2e-3	3.0	1.4e-3	2.9	2.5e-3	2.9	4.6e-3	2.8

Tabelle 4.6 L_2-Fehler bei quadratischer Approximation der Normalableitungen in der Stefan-Bedingung, analytisches Testbeispiel, nur Temperaturlöser, $t = 0.04$

im gesamten Gebiet Ω_0, für die Position der Phasengrenze Γ_1, gemessen als Abstand vom Ursprung des Koordinatensystems, die Randgeschwindigkeit V_{Γ_1} und die Krümmung der Phasengrenze κ_1 angegeben. Dabei zeigt sich, daß bei linearer Approximation der Temperatur-Normalableitungen (3.57) in der Stefanbedingung in allen vier Größen sich der Fehler bei Halbierung der Gitterweite in etwa halbiert. In den mit *Quotient* überschriebenen Spalten der Tabelle 4.5 ist dies abzulesen. Verwendet man dagegen die quadratische Approximation der Normalableitungen (3.58), so ergibt sich bei Halbierung der Gitterweite eine Reduktion der Fehler um den Faktor drei. Auch die Absolutwerte der Fehler sind deutlich kleiner als bei der linearen Approximation. Daß die Fehler nicht um den Faktor vier reduziert werden, läßt sich mit der Euler-Diskretisierung der Zeitableitungen in der Temperaturgleichung und der Randbewegung erklären, da diese nur von erster Ordnung sind.

In Abbildung 4.4 ist die Abhängigkeit der Fehler für die einzelnen Größen von der Zeit dargestellt. Dabei ist auf die unterschiedliche Normierung der Ordinate für die Fehler der linearen und der quadratischen Methode zu achten. Während der Fehler der Temperatur nahezu linear in der Zeit ansteigt (1. Zeile), wird die Steigung des Fehlers bei der Phasengrenze flacher (2. Zeile), da sich die Approximation der Geschwindigkeit der Phasengrenze mit der Zeit leicht verbessert (3. Zeile).

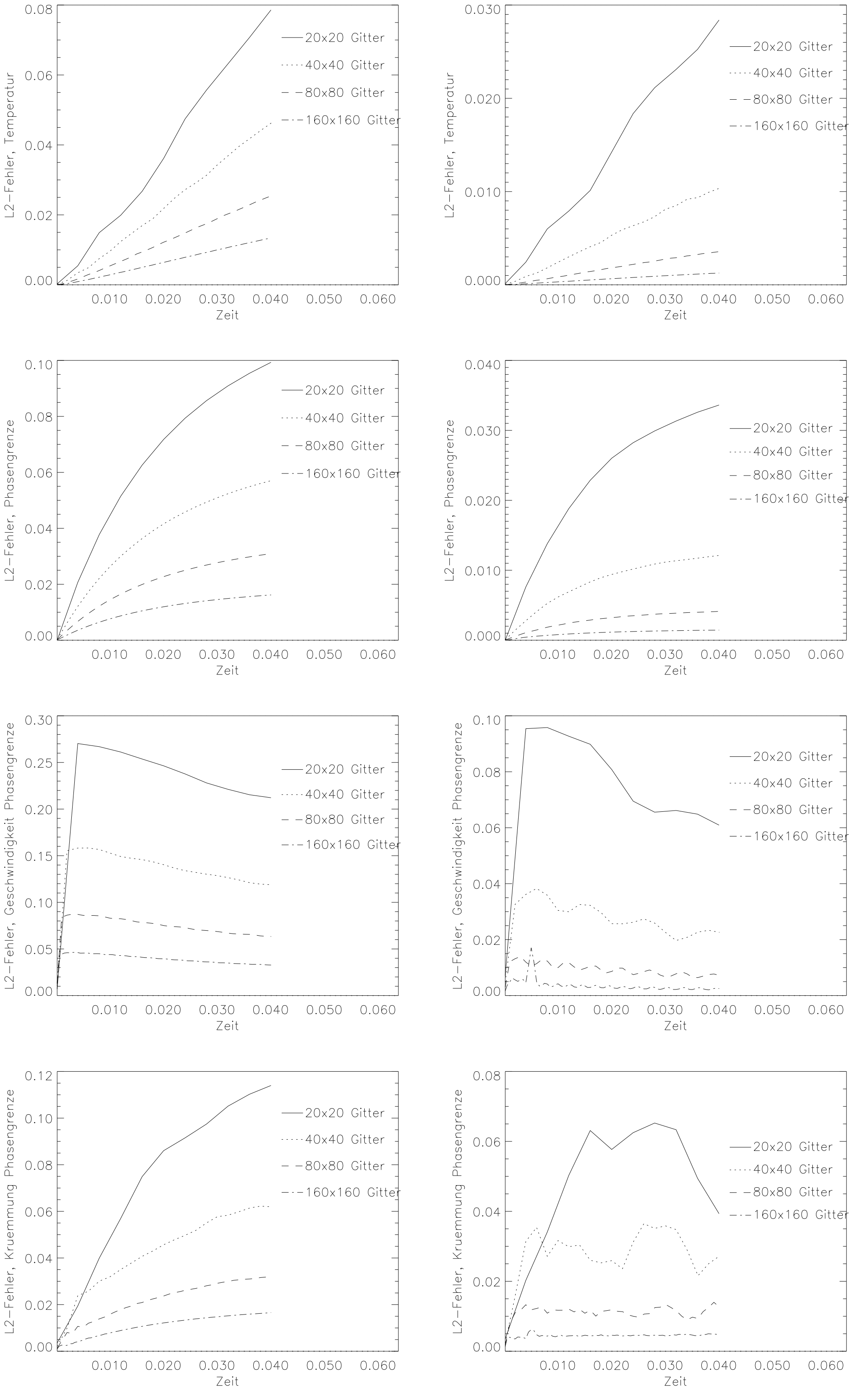


Abbildung 4.4 Vergleich der Fehler mit links linearer und rechts quadratischer Approximation der Normalableitungen in der Stefan-Bedingung, analytisches Testbeispiel, nur Temperaturlöser, zeitlicher Verlauf

4.2.2 Beispiel mit nicht konstanter Krümmung

In einem weiteren Beispiel wollen wir das Verhalten des Algorithmus' bei nicht konstanter Krümmung testen. Dazu wählen wir als Anfangsgeometrie einen kreisförmigen Kristallisationskern, dem eine sinusförmige Modifikation aufgeprägt wird:

$$\begin{pmatrix} x(s) \\ y(s) \end{pmatrix} = \Big(R_{1,0} + a\,\cos(2\,\pi\,k\,s)\Big)\begin{pmatrix} \cos(2\,\pi\,s) \\ \sin(2\,\pi\,s) \end{pmatrix}, \qquad s \in [0,1], \tag{4.16}$$

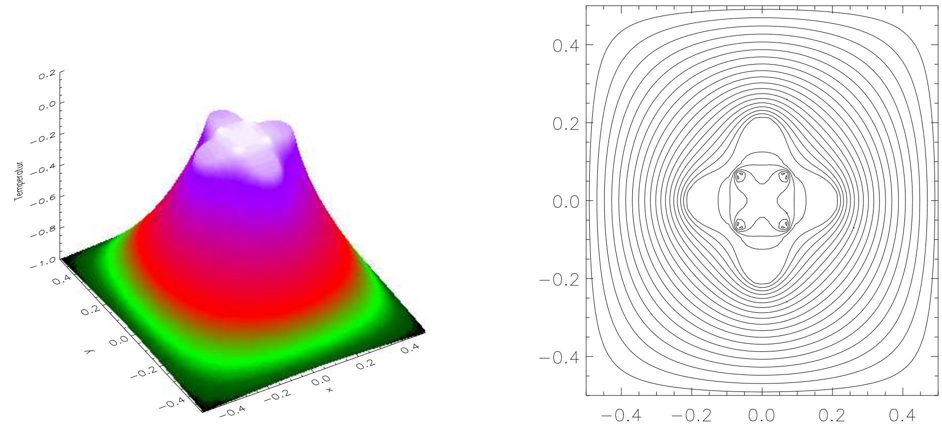
vgl. [Sethian & Strain, 1992].

Wir verwenden einen Kreis mit Radius $R_{1,0} = 0.15$, die Frequenz der Störung ist $k = 4$ und deren Amplitude ist $a = 0.06$. Das Grundgebiet ist wiederum das Quadrat $\Omega_0 := [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$. Als Anfangswert für die Temperatur benötigen wir ein stetiges Temperaturfeld. Würden wir zum Zeitpunkt $t = 0$ die Temperatur im Eis auf $T = 0$ und im Fluid auf $T = -1$ setzen, so würde bei der Diskretisierung der Stefan-Bedingung die Geschwindigkeit der Phasengrenze V_{Γ_1} mit kleinerer Gitterweite immer stärker anwachsen, was sich auf den gesamten Simulationsverlauf auswirkt. Daher ermitteln wir ein stetiges Temperaturfeld, indem wir im Fluid und im Feststoff eine Potentialgleichung für die Temperatur lösen. Als Randwerte wählen wir dazu $T = -1.0$ an der Behälterwand Γ_3 und $T = -\varepsilon_\kappa\,\kappa_1$ auf der Phasengrenze Γ_1, was sich aus der Gibbs-Thomson-Bedingung mit $V_{\Gamma_1} = 0$ ergibt. Für $t > 0$ verwenden wir auf Γ_3 adiabatische Randbedingungen für die Temperatur $\partial T/\partial n = 0$. Die Endzeit ist $t_{\mathrm{end}} = 0.02$. Die weiteren Parameter sind wie im vorigen Abschnitt 4.2.1 gewählt. Lediglich die Wärmequelle F in der Temperaturgleichung wurde gegenüber (4.12) wieder auf Null gesetzt.

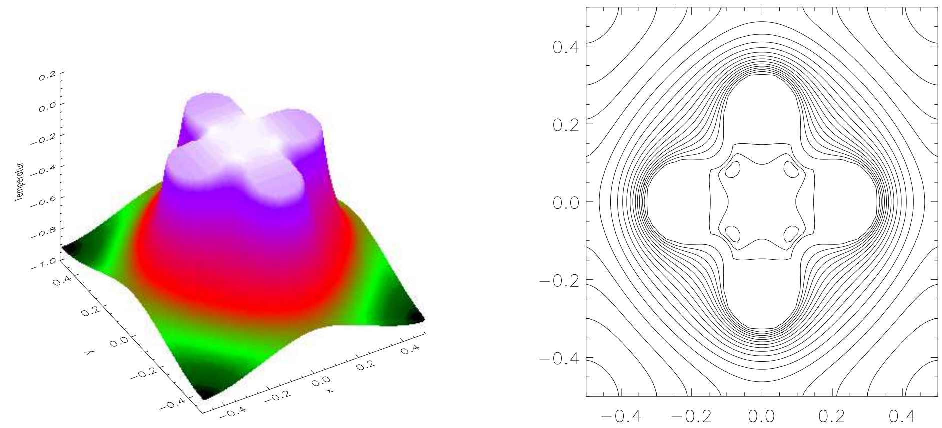
In Abbildung 4.5 ist die Temperaturverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Sie wurde auf einem 80×80-Gitter mit einer Zeitschrittweite $\delta t = 0.00004$ berechnet. Hier sieht man, daß die Temperatur im Feststoff nahezu konstant bleibt und zur Behälterwand hin abfällt. Die Höhenlinien in der rechten Spalte der Abbildung haben dabei den Abstand 0.05 im negativen Temperaturbereich und 0.01 im positiven Bereich. So lassen sich die kleinen Temperaturspitzen an den konkaven Teilen der Phasengrenze darstellen.

In Abbildung 4.6 zeigen wir die Phasengrenze zu den Zeitpunkten $t = m \cdot 0.0016$, $m = 0, \ldots, 12$ auf verschiedenen Gittern. Die Zeitschrittweiten sind $\delta t = 0.00016, 0.00008, 0.00004$ und 0.00002. Durch die starke Krümmung ist das Fluid zum Zeitpunkt $t = 0$ an den Spitzen des Kristalls stärker unterkühlt als an den Einbuchtungen. Dies führt zu dem schnellen Anwachsen der Blätter, wohingegen an den konkaven Stellen, an denen die Temperatur über dem Schmelzpunkt liegt, so gut wie nichts gefriert. Es entwickelt sich so eine Struktur, die einem vierblättrigen Kleeblatt ähnelt. Die Größe der Blätter hängt bis zu einem gewissen Grad von der Diskretisierung ab. Insbesondere wird auf den groben Gittern die Größe unterschätzt. In Abbildung 4.7, in der die Positionen der Phasengrenze zum Zeitpunkt $t = 0.01$ auf verschiedenen Gittern in einem Bild zusammengefaßt sind, zeigt sich aber die Konvergenz des Verfahrens.

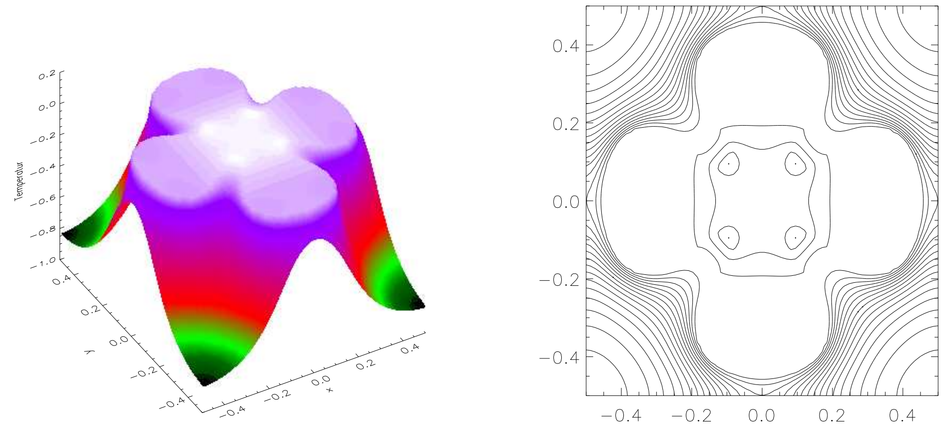
Daß der Algorithmus nicht von den Koordinatenrichtungen beeinflußt wird, zeigen die Simulationen in Abbildung 4.8, bei denen wir mit Frequenzen $k = 5$ und $k = 7$ gestörte Kreise als Anfangsgeometrie für den Feststoff verwenden. Zu sehen sind wieder die Positionen der Phasengrenze zu den Zeitpunkten $t = m \cdot 0.0016, m = 0, \ldots, 10$.



$t = 0.00$

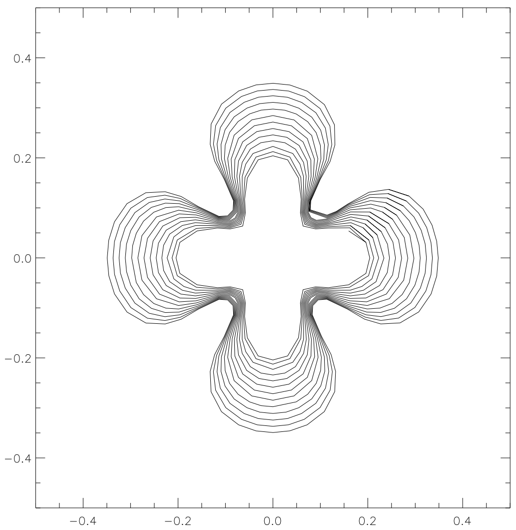


$t = 0.01$

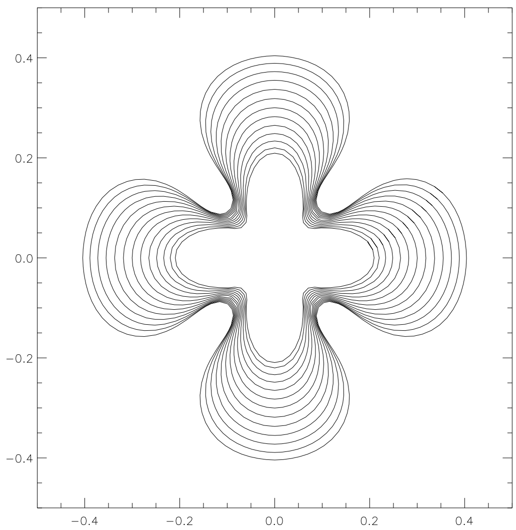


$t = 0.02$

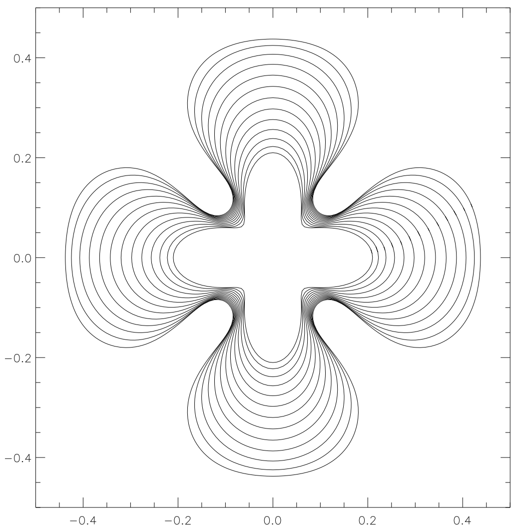
Abbildung 4.5 Temperatur beim „vierblättrigen Kleeblatt" zu verschiedenen Zeitpunkten als Graph und Höhenlinien, 80×80-Gitter, nur Temperaturberechnung



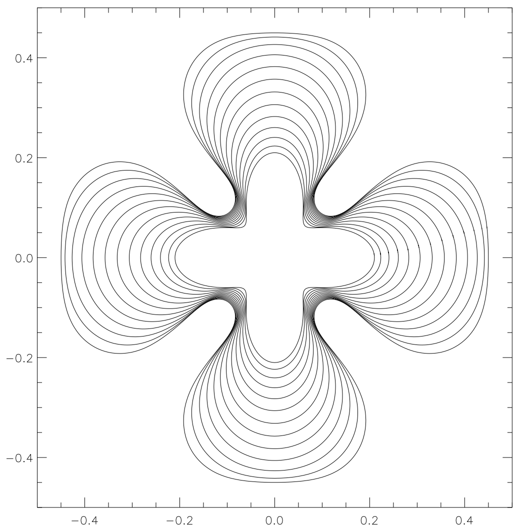
20×20 - Gitter



40×40 - Gitter



80×80 - Gitter



160×160 - Gitter

Abbildung 4.6 Erstarrung des „vierblättrigen Kleeblatts", Positionen der Phasengrenze zu unterschiedlichen Zeitpunkten, nur Temperaturberechnung

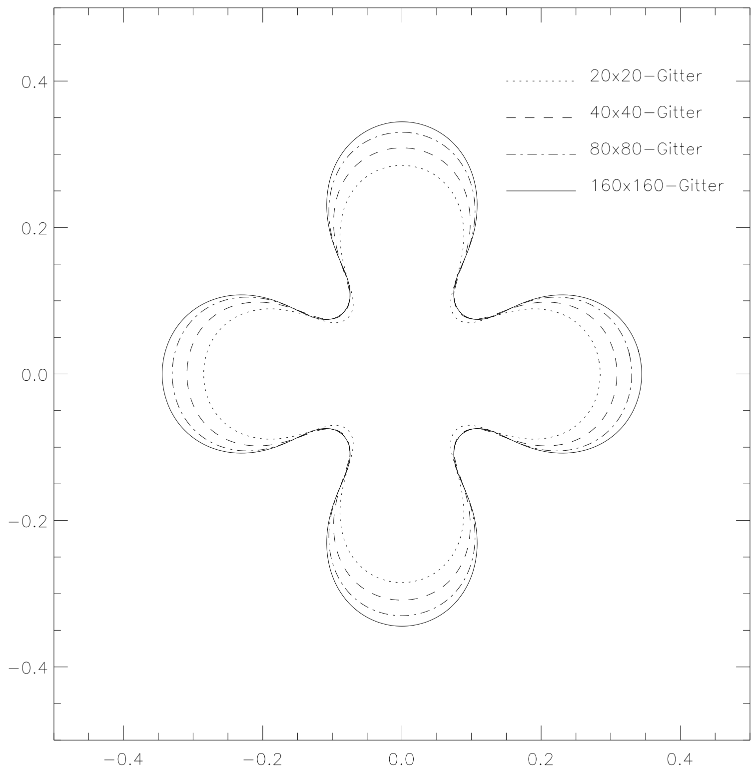


Abbildung 4.7 Phasengrenze des „vierblättrigen Kleeblatts“ bei $t = 0.01$, verschiedene Gitter, nur Temperaturberechnung

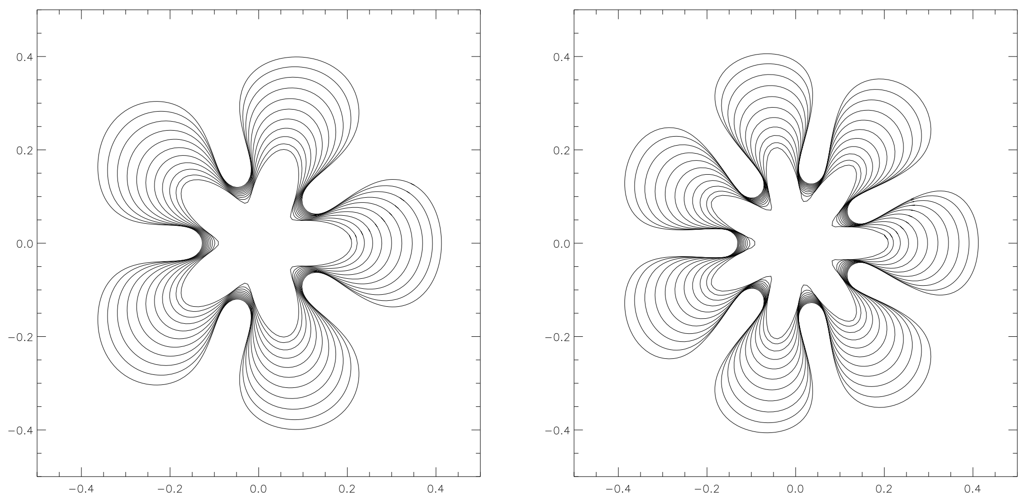


Abbildung 4.8 Wachstum eines mit der Frequenz fünf (links) und sieben (rechts) gestörten Kreises, 80×80-Gitter, nur Temperaturberechnung

4.2.3 Dendritisches Kristallwachstum

Dendritisches Kristallwachstum, bei dem in selbstähnlichen Strukturen mehr und mehr Seitenäste aus den einzelnen Kristallblättern herauswachsen (vgl. den Schneekristall in Abbildung 1.1), laßt sich mit dem bisher beschriebenen Modell nicht behandeln. In zahlreichen Simulationen (u.a. [Ben-Jacob et al., 1984], [Almgren, 1993], [Kobayashi, 1993], [Schmidt, 1996]) wird daher für die Gibbs-Thomson-Parameter $\varepsilon_V = \varepsilon_\kappa$ ein anisotropisches Verhalten gemäß

$$\varepsilon(\vec{n}) = \varepsilon_0 \, (1 + b \, \cos(k \, \varphi)) \tag{4.17}$$

angenommen. Dabei ist φ der Winkel, den die Normale des Rands $\vec{n}$ mit der x-Achse einschließt. Abhängig von dem Verlauf des Rands wächst der Feststoff daher unterschiedlich schnell.

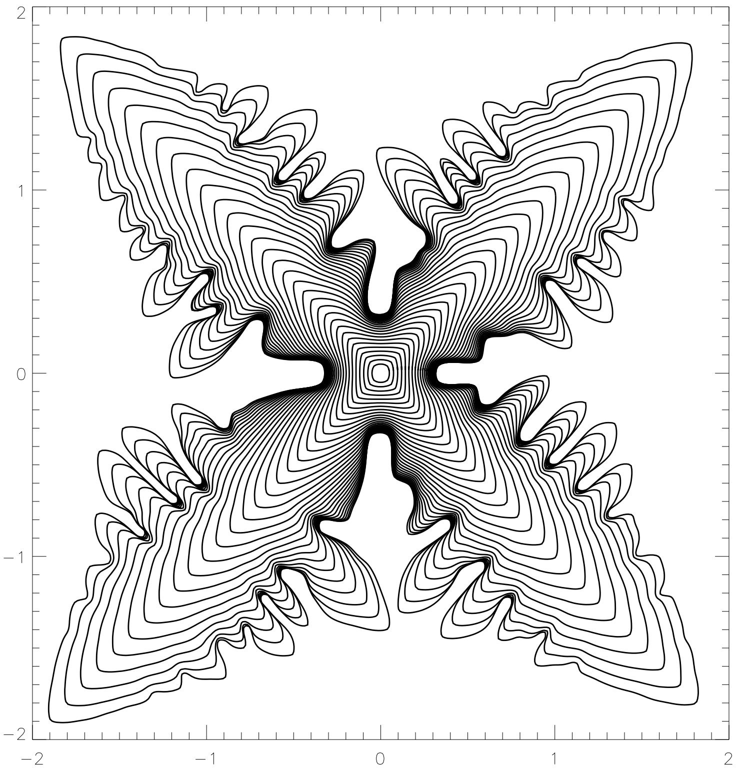


Abbildung 4.9 Dendrit, nur Temperaturberechnung

Abbildung 4.9 zeigt die Positionen der Phasengrenze in Zeitabständen 0.004. Die Frequenz der Anisotropie ist $k = 4$. Die Amplitude haben wir auf $b = 0.6$ gesetzt. Die weiteren physikalischen Parameter sind $\varepsilon_0 = 0.001$ und $L = 1$. Das Grundgebiet $\Omega_0 := [-2, 2] \times [-2, 2]$ ist in 200×200 Gitterzellen zerlegt. Der Feststoff ist zu Beginn kreisförmig mit Radius $R_{1,0} = 0.04$. Die Zeitschrittweite beträgt $\delta t = 0.00001$, und die Anfangstemperatur wurde wieder als Lösung einer Potentialgleichung mit $T|_{\Gamma_3} = -1.0$ an der Behälterwand berechnet. Die Simulation wurde bei einer Zeit $t_{\text{end}} = 0.13$ abgebrochen, als der Kristall die Ecken des Berechnungsgebiets erreicht hatte.

4.3 Simulationsbeispiele für Gefrierprozesse mit Dichteänderungen

Im dritten Teil der Simulationsergebnisse wollen wir jetzt die beiden, in den vorangegangenen Abschnitten einzeln betrachteten Teillöser kombinieren. Dabei betrachten wir zunächst wieder das Beispiel mit analytisch bekannter Lösung und schließen die Arbeit mit zwei weiteren Simulationsbeispielen ab. Dabei verweden wir einmal die physikalischen Parameter von Wasser.

4.3.1 Beispiel mit analytisch bekannter Lösung

Auch für das gesamte Modell aus Abschnitt 2.3 läßt sich für einen Spezialfall eine analytische Lösung konstruieren. Dazu verbinden wir die Problemstellungen aus den Abschnitten 4.1.1 und 4.2.1. In dem Behälter $\Omega_0 := [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$ soll der Feststoff innerhalb des Kreises $K_1(t)$ mit Radius $R_1(t)$ liegen. Das Fluid nimmt wie bei dem analytischen Strömungsbeispiel mit bewegtem Hindernis und freier Fluidoberfläche den Kreisring $\Omega_l(t) = K_2(t) \setminus K_1(t)$ mit äußerem Radius $R_2(t)$ ein.
Wie in Abschnitt 4.2.1 ist die Temperatur durch (4.10) und die Phasengrenze durch (4.11) gegeben. Die Geschwindigkeit der Phasengrenze

$$V_{\Gamma_1} = \frac{\partial R_1(t)}{\partial t} = \frac{1}{2\, R_1(t)} = \frac{1}{2\sqrt{R_{1,0}^2 + t}} \tag{4.18}$$

treibt das Fluid gemäß der Randbedingung (2.62) mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v}|_{\Gamma_1} = \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_l}\right) V_{\Gamma_1} = \frac{\delta V}{2\sqrt{R_{1,0}^2 + t}} \tag{4.19}$$

an. Dabei ist

$$\delta V := (1 - \frac{\rho_s}{\rho_l}) = \rho_s \left(\frac{V_s}{m} - \frac{V_l}{m}\right) = \frac{V_s - V_l}{V_s} \tag{4.20}$$

ein Maß für den Unterschied des Volumens, das die gleiche Masse m in fester ($V_s = m/\rho_s$) und flüssiger Form ($V_l = m/\rho_l$) einnimmt. Mit $V_0 = 1/2$ entspricht dies genau den in Abschnitt 4.1.1 betrachteten Randbedingungen für die Strömung (4.5) und (4.7). Es stellt sich also gemäß den Navier-Stokes-Gleichungen die Geschwindigkeit (4.1) und der Druck (4.2) ein, die wir bereits allein mit dem Strömungslöser untersucht haben. Die Phasengrenze hat dabei den Radius (4.6) und die Fluidoberfläche den Radius (4.8).
Im Gegensatz zu dem mit dem Temperaturlöser in Absatz 4.2.1 untersuchten Modell geht jetzt noch der konvektive Term div $(\vec{v}\,T)$ in die Temperaturgleichung im Fluid ein. Um dessen Einfluß auf die Temperaturverteilung zu eliminieren, kompensieren wir die Auswirkungen des konvektiven Terms auf die Temperatur mit einer Änderung der Wärmequelle F (4.13) im Fluid, d.h. für $R_1(t) < |\vec{x}| \le R_2(t)$ verwenden wir die Wärmequelle

$$\tilde{F} := F + \mathrm{div}\,(\vec{v}\,T) = \frac{0.75\,\varepsilon}{R_1(t)^3} - \frac{\delta V}{4|\vec{x}|^2} e^{(1-\frac{|\vec{x}|}{R_1(t)})^2/4}. \tag{4.21}$$

Statt der Temperaturrandbedingung (2.64) an der Fluidoberfläche verwenden wir schließlich Dirichlet-Randbedingungen gemäß (4.10).

Die Dichte setzen wir im Fluid auf $\rho_l = 1.5$ und im Feststoff auf $\rho_s = 1.0$, so daß sich eine Volumendifferenz $\delta V = 1/3$ ergibt, was dem für den Strömungslöser gewählten Verhältnis v_0/V_0 entspricht. Weiter verwenden wir $k_l = c_l = \rho_l = k_s = c_s = \rho_s = L = 1$, $\varepsilon_V = \varepsilon_\kappa = 0.001$, $\varepsilon_p = 0$, $\mu = 0.02$, $\gamma_2 = 0$, $R_{1,0} = 0.15$ und $R_{2,0} = 0.45$.

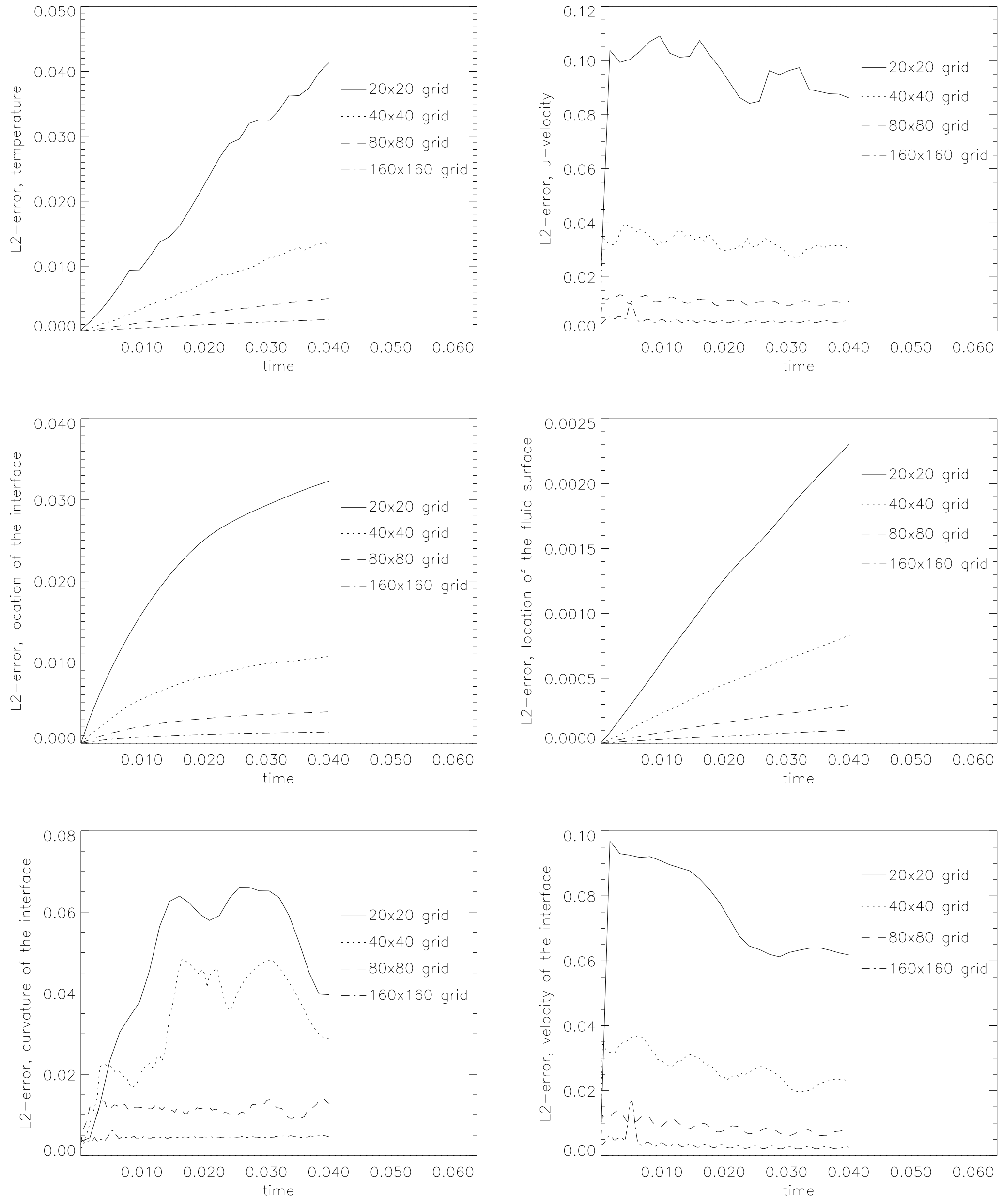


Abbildung 4.10 Fehler für analytisches Testbeispiel, Temperatur- und Strömungslöser, quadratische Approximation der Normalableitungen, zeitlicher Verlauf

Die in Abbildung 4.10 und Tabelle 4.7 dargestellten Fehler für die Temperatur T, die Geschwindigkeit u, die Position der Phasengrenze Γ_1, die Position der Fluidoberfläche Γ_2, der Krümmung

Gitter	T		u		Γ_1		Γ_2	
	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient	Fehler	Quotient
20x20	4.1e-2	—	8.6e-2	—	3.2e-2	—	2.3e-3	—
40x40	1.4e-2	2.9	3.1e-2	2.8	1.1e-2	2.9	8.3e-4	2.8
80x80	5.0e-3	2.8	1.1e-2	2.8	3.9e-3	2.8	2.9e-4	2.9
160x160	1.8e-3	2.8	3.7e-3	3.0	1.4e-3	2.8	1.0e-4	2.9

Tabelle 4.7 Fehler für analytisches Testbeispiel, Temperatur- und Strömungslöser, quadratische Approximation der Normalableitungen, $t = 0.04$

der Phasengrenze κ_1 und der Geschwindigkeit der Phasengrenze V_{Γ_1} zeigen wie bei dem Testbeispiel ohne Dichteunterschied eine Fehlerreduktion um den Faktor drei. Im Vergleich mit den Ergebnissen ohne Dichteunterschied in Tabelle 4.6 und Abbildung 4.4 ist der Fehler in der Temperatur T auf allen Gittern hier nur leicht größer, während die Fehlerwerte für die Phasengrenze Γ_1 sogar etwas kleiner sind. Die Fehler der Geschwindigkeit u und der Fluidoberfläche Γ_2 werden durch den Fehler in der Randgeschwindigkeit der Phasengrenze V_{Γ_1}, die in die Randbedingung der Strömungsgeschwindigkeit eingeht, dominiert und liegen daher über den Fehlerwerten für den reinen Strömungslöser in Tabelle 4.4. Dort wurde die Phasengrenze mit der analytisch exakten Geschwindigkeit bewegt. Insgesamt ergeben sich aber einheitlich gute Konvergenzresultate.

4.3.2 Beispiel mit nicht konstanter Krümmung

Nach der Betrachtung des analytischen Beispiels wollen wir uns jetzt wieder dem „vierblättrigen Kleeblatt“ aus Abschnitt 4.2.2 zuwenden. Wir verwenden bis auf die Dichte des Fluids die gleichen Simulationsparameter, beschränken uns aber auf Berechnungen auf dem 80×80-Gitter. Wir wollen hier den Einfluß des Dichteunterschieds auf den Erstarrungsprozeß betrachten und vergleichen dazu die Ergebnisse mit den Fluiddichten $\rho_l = 1, 1.5, 2$ und 3. Die Dichte des Feststoffs ist weiter $\rho_s = 1$. Dies entspricht Volumenänderungen $\delta V = 0, 1/3, 1/2$ und $2/3$. Die Viskosität ist $\mu = 0.02$.
In Abbildung 4.11 zeigen wir die Geschwindigkeitsfelder sowie die Positionen der Phasengrenze und der Fluidoberfläche für die drei Simulationen mit unterschiedlichen Dichten zu vier aufeinanderfolgenden Zeitpunkten. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Erstarrungsprozessen sind in den Abbildungen 4.12 und 4.13 verdeutlicht, in denen die Positionen der freien Ränder bei *verschiedenen* Dichteunterschieden in *einem* Bild dargestellt sind. Aus Abbildung 4.12, das die freien Ränder zum gleichen Zeitpunkt $t = 0.006$ zeigt ist ersichtlich, daß der Feststoff bei größerer Fluiddichte etwas langsamer wächst. Abbildung 4.13 zeigt, wie die Fluidoberfläche sich in der Nähe der Blätter stärker ausdehnt als in den Zwischenräumen.

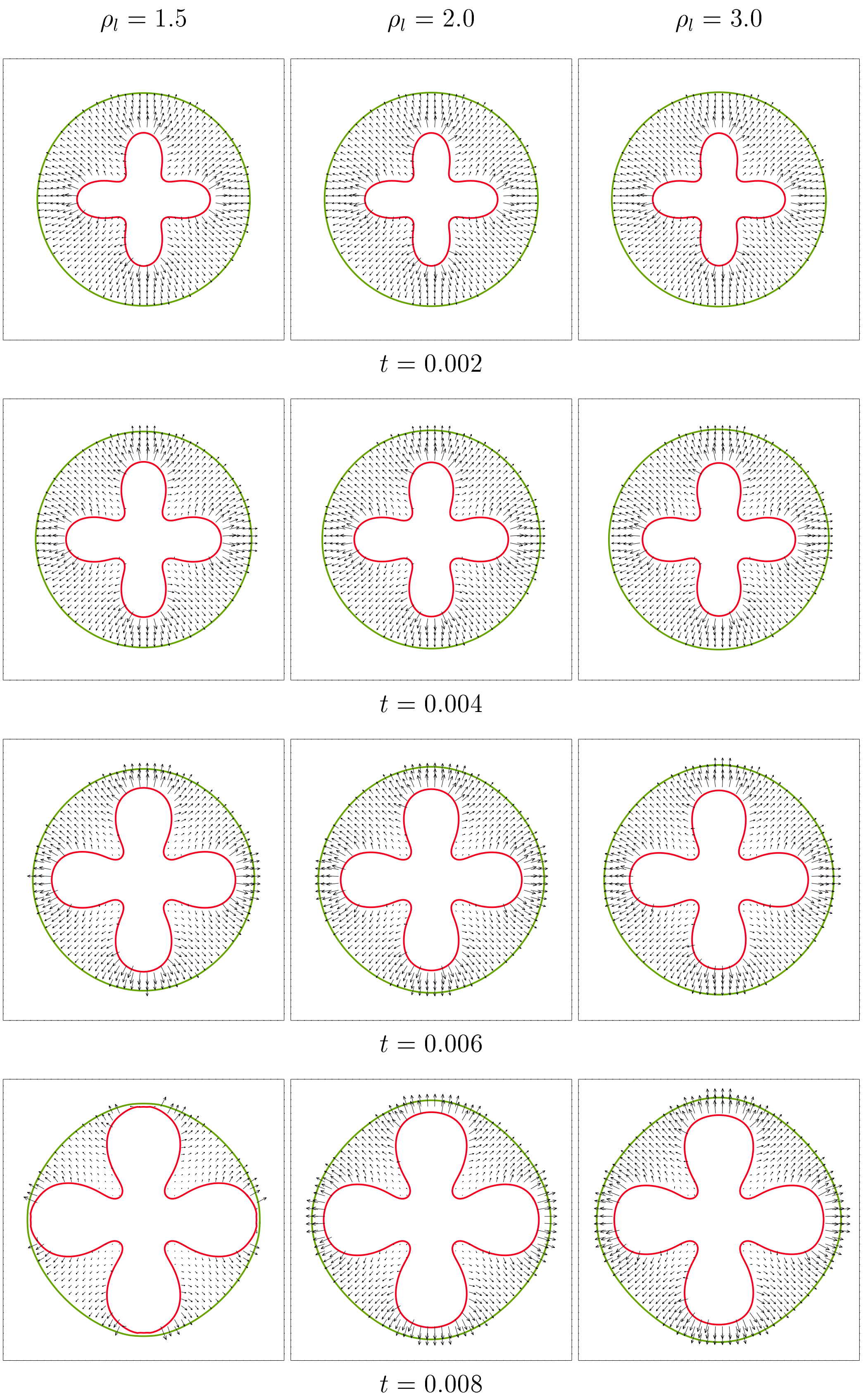


Abbildung 4.11 Erstarrung des „vierblättrigen Kleeblatts“ mit verschiedenen Fluiddichten, Geschwindigkeitsfeld, Phasengrenze und Fluidoberfläche zu unterschiedlichen Zeitpunkten

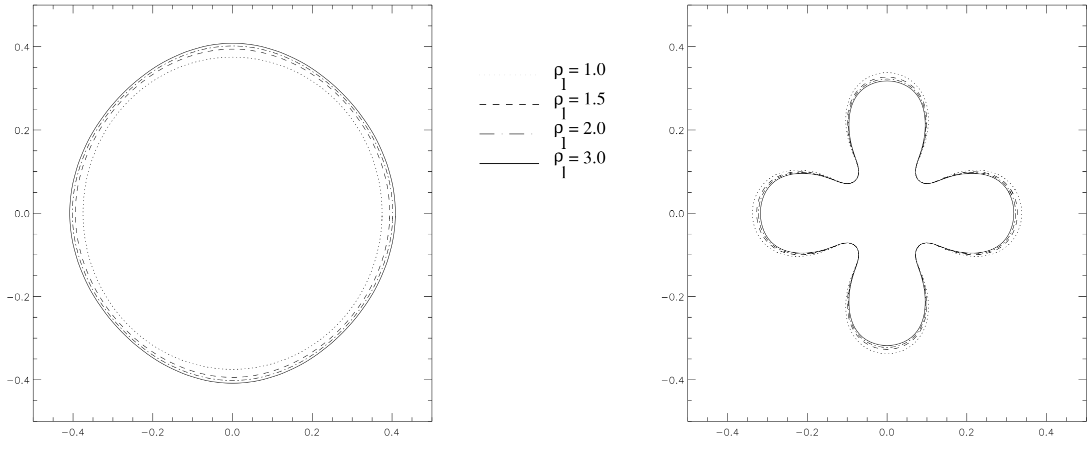


Abbildung 4.12 Erstarrung des „vierblättrigen Kleeblatts“ mit verschiedenen Fluiddichten, Fluidoberfläche (links) und Phasengrenze (rechts) bei $t = 0.006$

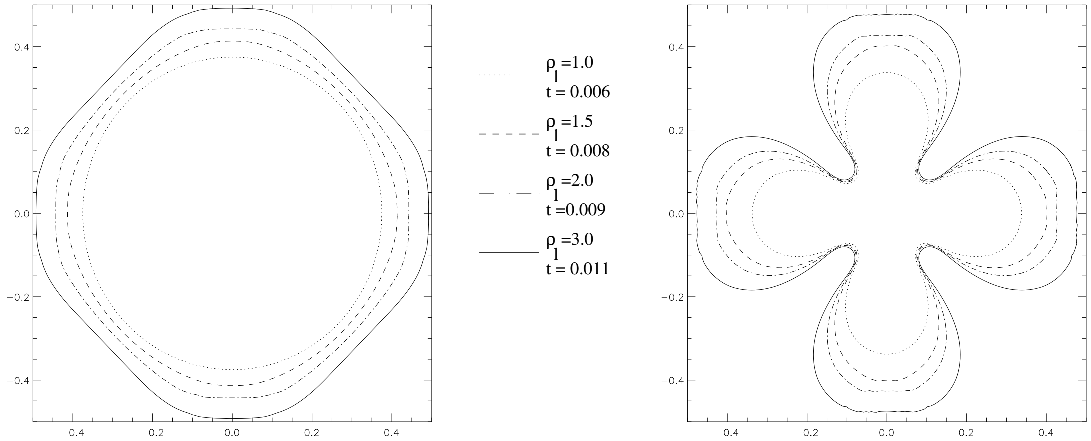


Abbildung 4.13 Erstarrung des „vierblättrigen Kleeblatts“ mit verschiedenen Fluiddichten, Fluidoberfläche (links) und Phasengrenze (rechts), wenn die Phasengrenze die Fluidoberfläche berührt

4.3.3 Beispiel mit physikalischen Parametern

Als letztes Beispiel betrachten wir die Erstarrung von unterkühltem Wasser auf der Mikroebene. Die physikalischen Parameter aus [Müller, 1973], [Pham, 1989] und [Sullivan et al., 1987] sind in Tabelle 4.8 zusammengefaßt.
Sie führen zu den folgenden Faktoren der Gibbs-Thomson-Bedingung (3.54):

$$T - T_m = -4.5 \frac{\mathrm{K\,s}}{\mathrm{m}}\; V_{\Gamma_1} - 2.9 \cdot 10^{-8} \mathrm{K\,m}\; \kappa - 9.9 \cdot 10^{-8} \frac{\mathrm{K\,m^2}}{\mathrm{N}}\,(p_l - p^*). \tag{4.22}$$

Größe	Symbol	Wert	Einheit
dynamische Viskosität	μ	$1.79 \cdot 10^{-3}$	$\mathrm{kg\,m^{-1}s^{-1}}$
Volumenexpansionskoeffizient	β	$-6 \cdot 10^{-5}$	$\mathrm{K^{-1}}$
Dichte des Fluids	ρ_l	$1.00 \cdot 10^{3}$	$\mathrm{kg\,m^{-3}}$
Dichte des Feststoffs	ρ_s	$9 \cdot 10^{2}$	$\mathrm{kg\,m^{-3}}$
Wärmeleitkoeffizient im Fluid	k_l	$5.67 \cdot 10^{-1}$	$\mathrm{W\,K^{-1}m^{-1}}$
Wärmeleitkoeffizient im Feststoff	k_s	2.26	$\mathrm{W\,K^{-1}m^{-1}}$
Spezifische Wärme im Fluid	c_l	$4.2 \cdot 10^{3}$	$\mathrm{J\,K^{-1}kg^{-1}}$
Spezifische Wärme im Feststoff	c_s	$1.9 \cdot 10^{3}$	$\mathrm{J\,K^{-1}kg^{-1}}$
Oberflächenspannung Fluid/Luft	γ_2	$7.3 \cdot 10^{-2}$	$\mathrm{N\,m^{-1}}$
Oberflächenspannung Fluid/Feststoff	γ_1	$2.9 \cdot 10^{-2}$	$\mathrm{N\,m^{-1}}$
Latente Wärme	L	$3.07 \cdot 10^{5}$	$\mathrm{J\,kg^{-1}}$
Schmelztemperatur	T_m	273	K
kinetischer Koeffizient	a	$2.06 \cdot 10^{-2}$	$\mathrm{m^4\,K^{-1}kg^{-1}s^{-1}}$
Wärmeübergangskoeffizient	h	150	$\mathrm{W\,K^{-1}m^{-2}}$

Tabelle 4.8 Physikalische Parameter für Wasser und Eis bei $T = 273K$

Im makroskopischen Fall, bei dem die Krümmungen im Bereich von $10^3 \frac{1}{\mathrm{m}}$ und weniger liegen, können Krümmung und Druck vernachlässigt werden. Im mikroskopischen Fall spielt auch die Krümmung eine wesentliche Rolle. In dem unten diskutierten Beispiel liegen die Krümmungen zwischen $-10^6 \frac{1}{\mathrm{m}}$ und $5 \cdot 10^5 \frac{1}{\mathrm{m}}$, die Geschwindigkeit der Phasengrenze zwischen $0.0005 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$ und $0.011 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$, während der Druck unter $50 \frac{\mathrm{N}}{\mathrm{m}^2}$ bleibt und somit auch hier vernachlässigbar ist.
Als Versuchsanordnung betrachten wir einen nach oben offenen quadratischen Behälterausschnitt $[0, a] \times [0, a]$ mit der mikroskopischen Breite $a = 10\mu$m, vgl. [Sullivan et al., 1987]. Am Boden des mit Wasser gefüllten Behälters liegt eine dünne Eisschicht, die eine sinusförmige Wellung besitzt. Deren Periode entspricht genau dem betrachteten Ausschnitt a, so daß die Phasengrenze zum Zeitpunkt $t = 0$ durch

$$\Gamma_1(0) := \left\{ (x, y) \,\middle|\, y = a \left(0.0625 - 0.0125 \cos \left(\frac{2\,\pi\,x}{a} \right) \right) \right\} \tag{4.23}$$

beschrieben wird.
Die Anfangstemperatur fällt im Fluid exponentiell von der unteren Wand nach oben hin ab:

$$T = T_m + \Delta T (e^{-50y/a} - 1). \tag{4.24}$$

Im Eis setzen wir $T = T_m$. Als Unterkühlungsgrad verwenden wir $\Delta T = 5$K.
An der linken und rechten Wand wird für die Fluidgeschwindigkeit statt der Haftbedingung $\vec{v} = 0$ die Rutschbedingung $u = 0, \partial v / \partial n = 0$ verwendet. Mit Rutschbedingungen werden

häufig Symmetrieebenen beschrieben.
An der oberen Behälterwand verwenden wir Ausströmbedingungen $\partial\vec{v}/\partial n = 0$ für die Geschwindigkeit und die Dirichletbedingung $T(x, a) = T - \Delta T = 268$K. Adiabatische Randbedingungen oder die Übergangsbedingung (2.64) führen dazu, daß die beim Gefrieren frei werdende Schmelzenergie nicht abgeführt werden kann, so daß der Erstarrungsprozeß sehr schnell zum erliegen kommt. Dies ist in Abbildung 4.14 zu sehen, die die Erstarrung mit einer freien Fluidoberfläche bei $y = 0.75\,a$ ohne Dichteunterschiede zeigt. An der Fluidoberfläche ist die Übergangsbedingung (2.64) implementiert.

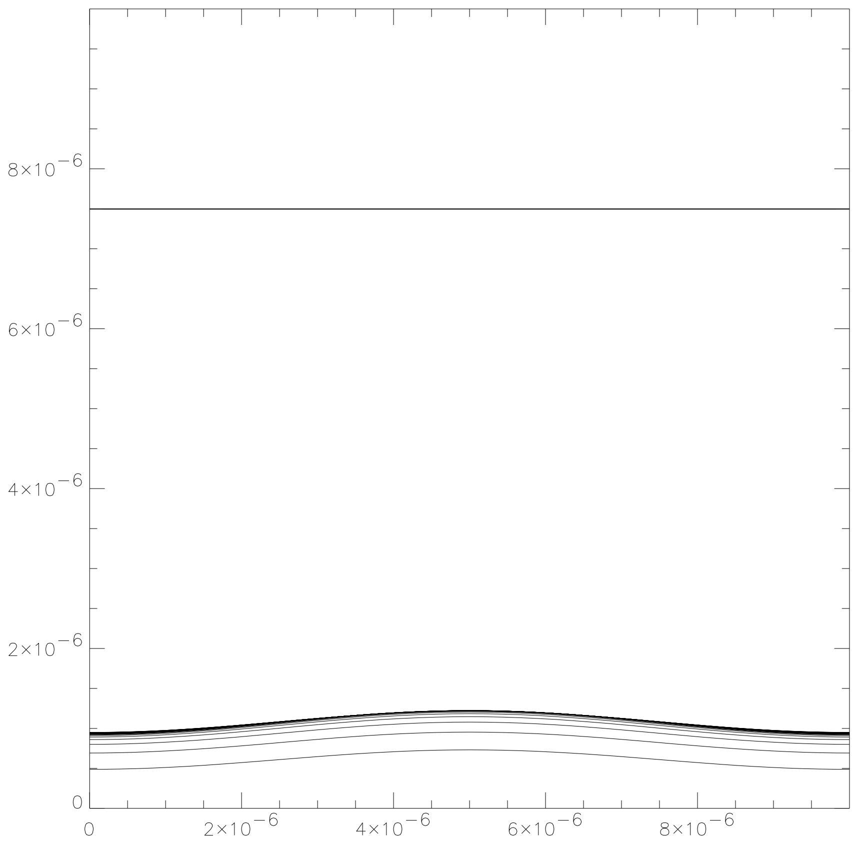


Abbildung 4.14 Erstarrung von Wasser vom Boden aus auf der Mikroebene mit freier Fluidoberfläche, Position der Phasengrenze zu den Zeitpunkten $m \cdot 8 \cdot 10^{-5}$s, $m = 0, \ldots, 43$

Die Simulation haben wir auf einem 40×40-Gitter mit der Zeitschrittweite $\delta t = 8 \cdot 10^{-6}$s ausgeführt. Zur Behandlung der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung verwendeten wir hier das semi-implizite SIMPLE-Verfahren, da die für Verfahren mit freien Rändern notwendige Stabilitätsbedingung (3.38) bei einer Geschwindigkeit der Phasengrenze unter 0.01m/s Zeitschritte $\delta t < 2.5 \cdot 10^{-5}$s erfordert, die zusätzliche, nur für explizite Zeitdiskretisierungen der Impulsgleichungen nötige Bedingung (3.37) dagegen Zeitschrittweiten $\delta t < 9 \cdot 10^{-9}$s verlangt.
In den Abbildungen 4.15 und 4.16 ist zu sehen, wie der Erstarrungsprozeß zunächst schnell verläuft, da das Fluid zu Beginn stark unterkühlt ist. Durch die Schmelzenergie wird es dann

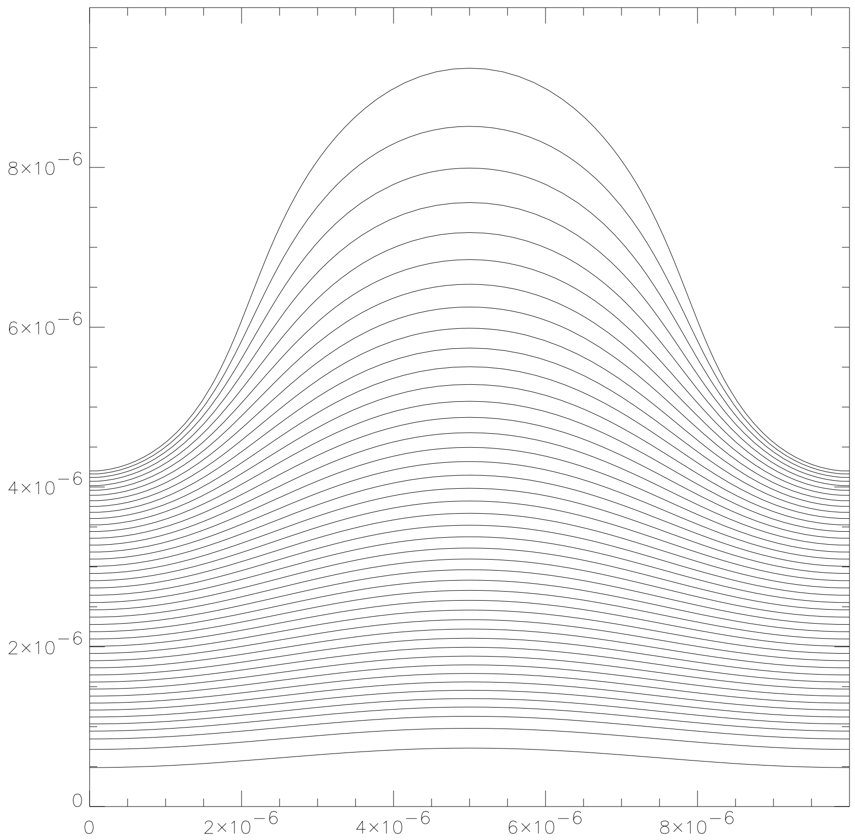


Abbildung 4.15 Erstarrung von Wasser vom Boden aus auf der Mikroebene, Dirichlet-Bedingung am oberen Rand für die Temperatur, Position der Phasengrenze zu den Zeitpunkten $m \cdot 8 \cdot 10^{-5}$s, $m = 0, \ldots, 43$

aber erwärmt, so daß der Erstarrungsprozeß verlangsamt wird. Allerdings wächst das Eis im mittleren Bereich schneller als am Rand, da es weiter in die unterkühlte Flüssigkeit hineinragt. Dies führt zu einer Beschleunigung der Erstarrung in der Mitte, während an den konkaven Teilen links und rechts die Phasengrenze immer langsamer wird.
Der Vergleich der Erstarrungsprozesse mit und ohne Dichteunterschiede in Abbildung 4.17 zeigt deutlich, daß der Erstarrungsprozeß ohne Strömungsberechnung hier langsamer verläuft.

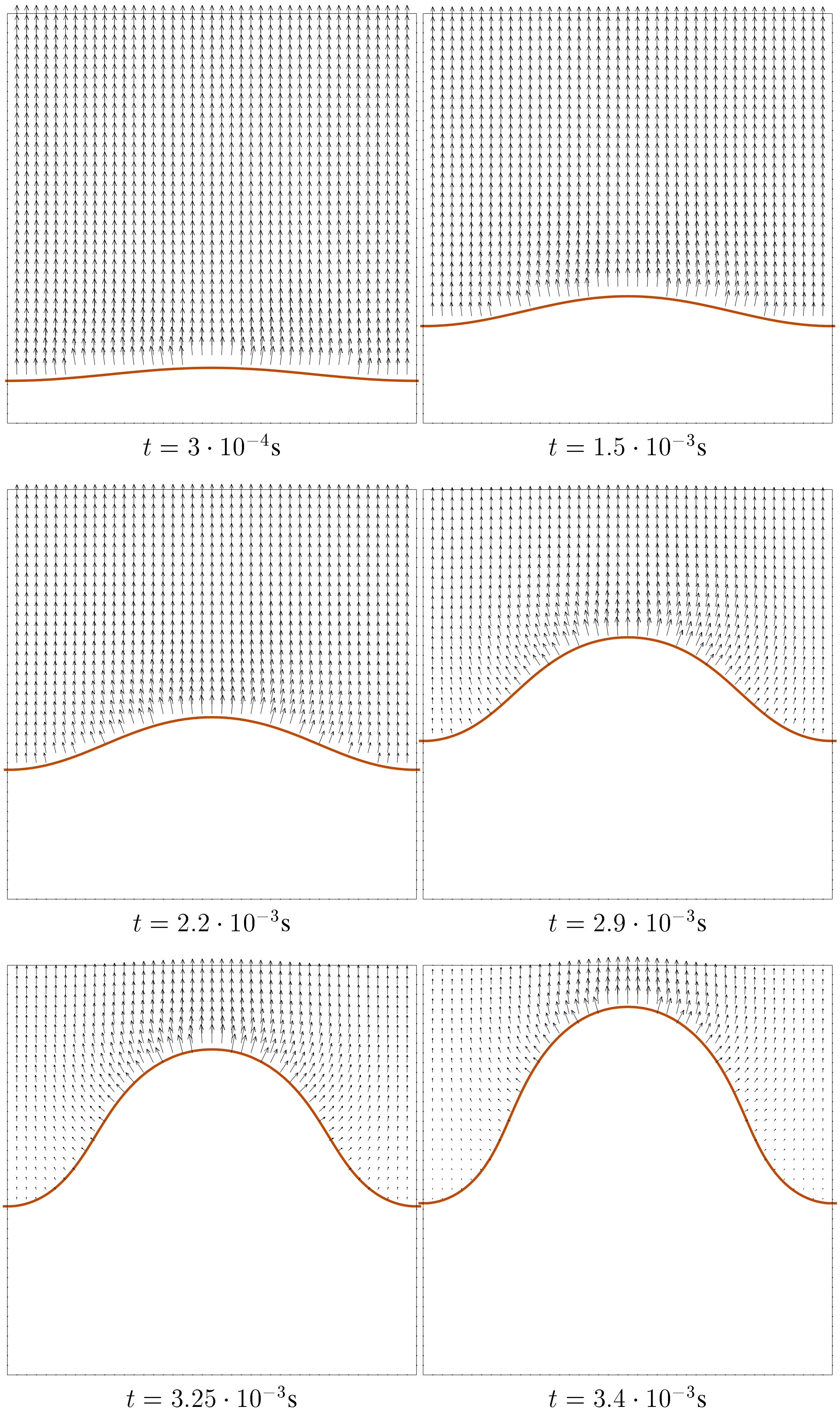


Abbildung 4.16 Erstarrung von Wasser vom Boden aus auf der Mikroebene, Dirichlet-Bedingung am oberen Rand für die Temperatur, Geschwindigkeitsfeld und Position der Phasengrenze (Geschwindigkeitspfeile nicht einheitlich skaliert)

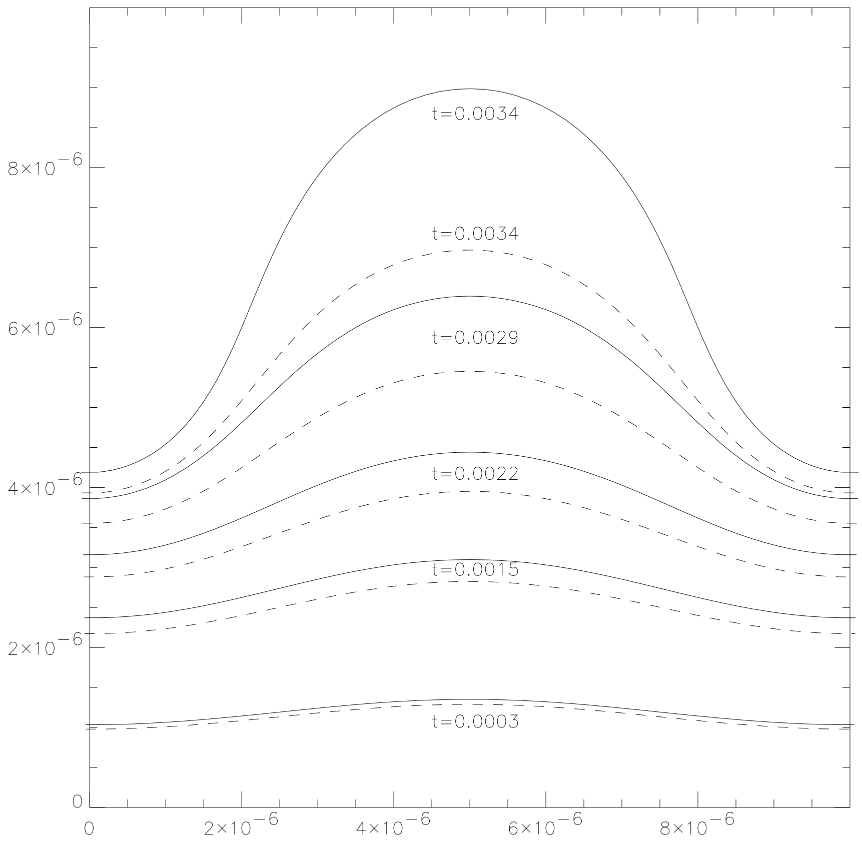


Abbildung 4.17 Erstarrung von Wasser auf der Mikroebene vom Boden aus, Dirichlet-Bedingung am oberen Rand für die Temperatur, Phasengrenze zu verschiedenen Zeitpunkten mit (durchgezogene Linien) und ohne (gestrichelte Linien) Dichteunterschiede

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir einen numerischen Algorithmus entwickelt, der in der Lage ist, Gefrierprozesse unterkühlter Schmelzen zu simulieren. Speziell wird neben den thermischen Effekten auch die Strömung berücksichtigt. Aus mathematischer Sicht handelt es sich dabei um ein System partieller Differentialgleichungen mit freien Rändern. Dabei kommen zwei unterschiedliche freie Ränder, die Phasengrenze zwischen fest und flüssig sowie die Fluidoberfläche vor, an denen unterschiedliche Randbedingungen zu beachten sind.
Als Diskretisierungsmethode haben wir uns für Finite Differenzen auf einem äquidistanten Gitter entschieden. Statt das Gitter mit den sich bewegenden Rändern mitzubewegen, werden die freien Ränder in einer eigenen Datenstruktur in Form von Polygonzügen durch das feste Gitter bewegt. Über die Lage der Polygonzüge werden dann die Zellen des stationären Gitters den einzelnen Teilgebieten Fluid, Feststoff und Luft zugeteilt.
In den numerischen Experimenten zeigte sich, daß der Algorithmus sowohl die Strömung als auch die Temperaturverteilung und das Wachstum des Feststoffs gut wiedergibt.
Um realitätsgetreue Simulationen zu erhalten, muß der Algorithmus zunächst auf drei Raumdimensionen erweitert werden. Die Konzepte lassen sich im wesentlichen übertragen. Lediglich die Beschreibung der freien Ränder mit der Surface-Marker-Methode wird komplizierter. Die Oberflächen sind jetzt zweidimensional und müssen mit einem Dreiecksgitter unter Angabe der einzelnen Dreiecke mit ihren Eckpunkten, Kanten und Nachbardreiecken beschrieben werden. Die für die Schnittpunkt- und Krümmungsberechnung notwendigen Nachbarschaftsbeziehungen zwischen einzelnen Punkten können nicht mehr alleine aus der Lage der Punkte in der Datenstruktur ermittelt werden.
Desweiteren erfordert insbesondere die 3D-Simulation effizientere Algorithmen zur Lösung der linearen Gleichungssysteme als das in dieser Arbeit verwendete SOR-Verfahren. Hier bieten sich Mehrgitterverfahren an. Diese müssen aber mit der zum Teil sehr komplizierten Gebietsstruktur und den Konvektions-Diffusions-Gleichungen zurecht kommen. Einen möglichen Ansatz liefern Algebraische Mehrgitterverfahren (siehe [Griebel et al., 1996]). Außerdem erfordern 3D-Simulationen adaptive Konzepte und die Parallelisierung des Lösers, um ausreichende Auflösungen in der Nähe der Ränder zu erhalten.
Ein weiteres, in dieser Arbeit noch nicht gelöstes Problem stellt das Aufeinandertreffen zweier freier Ränder dar. Einerseits kommt dies gegen Ende der Erstarrung vor, wenn die Phasengrenze die Fluidoberfläche erreicht. Andrerseits muß ein vollständiges Simulationsprogramm auch das Einbringen mehrerer Kristallisationskerne und das Zusammentreffen von zwei verschiedenen Teilen eines Kristalls vor allem bei Dendriten ermöglichen.
Schließlich ist das mathematische Modell erweiterbar, indem der Festkörper nicht festgehalten wird, sondern sich mit der Strömung mitbewegen kann. Hier sind die Randbedingungen an der Phasengrenze nochmals zu erweitern. Dabei stellt die Berechnung der Geschwindigkeit des Festkörpers eine zusätzliche Herausforderung dar. Darüberhinaus kann der Algorithmus auf die Behandlung des Erstarrens von Legierungen erweitert werden.

Literaturverzeichnis

[Alexiades & Solomon, 1993] Alexiades, V. & Solomon, A. (1993). *Mathematical Modelling of Melting and Freezing Processes*. Washington DC: Hemisphere Publishing.

[Allen & Cahn, 1972] Allen, S. & Cahn, J. (1972). A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metall.*, 27, 1084–1095.

[Almgren, 1993] Almgren, R. (1993). Variational algorithms and pattern formation in dendritic solidification. *J. Comp. Phys.*, 106, 337–354.

[Amsden & Harlow, 1970] Amsden, A. & Harlow, F. (1970). A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations. *J. Comp. Phys.*, 6, 322–325.

[Anderson et al., 1984] Anderson, D., Tannehill, J. & Pletcher, R. (1984). *Computational Fluid Mechanics and Thermal Science*. Washington: Hemisphere Publishers.

[Battle, 1992] Battle, T. (1992). Mathematical modelling of solute segregation in solidifying materials. *Int. Mater. Rev.*, 37, 249–270.

[Bejan, 1984] Bejan, A. (1984). *Convection Heat Transfer*. New York: Wiley-Interscience.

[Ben-Jacob et al., 1984] Ben-Jacob, E., Goldenfeld, N., Langer, J. & Schön, G. (1984). String models of interfacial pattern formation. *Physica D*, 12, 245–252.

[Boussinesq, 1903] Boussinesq, J. (1903). Theorie Analytique de la Chaleur. *Gauthier-Villars*.

[Braess, 1992] Braess, D. (1992). *Finite Elemente*. Berlin: Springer.

[Bungartz, 1992] Bungartz, H. (1992). Dünne Gitter und deren Anwendung bei der adaptiven lösung der dreidimensionalen Poisson-Gleichung. Dissertation, TU München, Institut für Informatik.

[Bungartz et al., 1997] Bungartz, H.-J., Frank, A., Meier, F., Neunhoeffer, T. & Schulte, S. (1997). *Fluid Structure Interaction: 3D Numerical Simulation and Visualization of a Micro pump*. SFB-Bericht 342/06/97 A, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/techber/sfb02_97.ps.gz, Institut für Informatik, TU München.

[Bungartz et al., 1996] Bungartz, H.-J., Griebel, M. & Zenger, C. (1996). *Einführung in die Computergraphik*. Wiesbaden: Vieweg.

[Caginalp & Socolovsky, 1994] Caginalp, O. & Socolovsky, E. (1994). Phase field computations of single-needle crystals, crystal growth, and motion by mean curvature. *SIAM J. Sci. Comp.*, 15, 106–126.

[Callies, 1997] Callies, M. (1997). Verbesserte Randapproximation zur Strömungssimulation mit NaSt2D. Fortgeschrittenenpraktikum, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/fopra/callies.ps.gz.

[Charach & Zemel, 1992] Charach, C. & Zemel, A. (1992). Irreversible thermodynamics of phase change heat transfer: Basic principles and applications to latent heat storage. *Open Systems & Information Dynamics*, 1, 423–458.

[Chen et al., 1991] Chen, S., Johnson, D. & Raad, P. (1991). The surface marker method. In L. Wrobel & C. Brebbia (Eds.), *Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, Vol 1 Fluid Flow* (pp. 223–235).: de Gruyter.

[Cheng & Armfield, 1995] Cheng, L. & Armfield, S. (1995). A simplified marker and cell method for unsteady flows on non-staggered grids. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 21, 15–34.

[Chorin, 1968] Chorin, A. (1968). Numerical solution of the Navier-Stokes-equations. *Math. Comput.*, 22, 745–762.

[Chorin & Marsden, 1979] Chorin, A. & Marsden, J. (1979). *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer.

[Ciarlet, 1978] Ciarlet, P. (1978). *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Amsterdam: North-Holland.

[Crank, 1984] Crank, J. (1984). *Free and Moving Boundary Problems*. New York: Oxford University Press.

[Dehmel, 1996] Dehmel, A. (1996). Numerische Simulation dreidimensionaler Strömungen mit freien Randwerten. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/diplarb/dehmel.ps.gz.

[Deisz, 1995] Deisz, U. (1995). Dreidimensionale numerische Simulation einer ventilgesteuerten Mikropumpe. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/diplarb/deisz.ps.gz.

[Dornseifer, 1997] Dornseifer, T. (1997). Diskretisierung allgemeiner elliptischer Differentialgleichungen in krummlinigen Koordinatensystemen auf dünnen Gittern. Dissertation, TU München, Institut für Informatik.

[Fix & Lin, 1988] Fix, G. & Lin, J. (1988). Numerical simulations of nonlinear phase transitions – I. The isotropic case. *Nonlinear Analysis*, 12, 811–823.

[Fletcher, 1991] Fletcher, C. (1991). *Computational Techniques for Fluid Dynamics I & II*. Berlin: Springer, 2nd edition.

[Gentry et al., 1966] Gentry, R., Martin, R. & Daly, B. (1966). An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems. *Journal of Computational Physics*, 1, 87–118.

[Griebel et al., 1995] Griebel, M., Dornseifer, T. & Neunhoeffer, T. (1995). *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik – eine praxisorientierte Einführung*. Wiesbaden: Vieweg.

[Griebel et al., 1997] Griebel, M., Merz, W. & Neunhoeffer, T. (1997). Mathematical modeling and numerical simulation of freezing processes of a supercooled melt under consideration of density changes. to appear.

[Griebel et al., 1996] Griebel, M., Neunhoeffer, T. & Regler, H. (1996). *Algebraic multigrid methods for the solution of the Navier-Stokes equations in complicated geometries*. TU München, Institut für Informatik, SFB-Report 342/01/96 A, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/techber/sfb01_96.ps.gz.

[Hackbusch, 1986] Hackbusch, W. (1986). *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Stuttgart: Teubner.

[Hackbusch, 1991] Hackbusch, W. (1991). *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Stuttgart: Teubner.

[Harlow & Welch, 1965] Harlow, F. & Welch, J. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physics of Fluids*, 8, 2182–2189.

[Hirt & Cook, 1972] Hirt, C. & Cook, J. (1972). Calculating three-dimensional flows around structures and over rough terrain. *J. Comp. Phys.*, 10, 324–340.

[Hirt & Nichols, 1981] Hirt, C. & Nichols, B. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comp. Phys.*, 39, 201–225.

[Hirt et al., 1975] Hirt, C., Nichols, B. & Romero, N. (1975). *SOLA – A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows*. Technical report, Los Alamos Scientific Lab. Rep. LA-5852.

[Kaczmarz, 1937] Kaczmarz, S. (1937). Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichungen. *Bulletin de l'Academie Polonaise des Sciences et Lettres*, A35, 355–357.

[Kim & Chung, 1988] Kim, Y. & Chung, T. (1988). Finite-element analysis of turbulent diffusion flames. *AIAA Journal*, 27, 330–339.

[Kobayashi, 1993] Kobayashi, R. (1993). Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D*, 63, 410–423.

[Kothe & Rider, 1994] Kothe, D. & Rider, W. (1994). Comments on modelling interfacial flows with volume-of-fluid methods. Technical Report LA-UR-94-3384, Los Alamos National Laboratory, http://www.c3.lanl.gov/ wjr/Web_papers/surfer/surfer.ps.Z.

[Kothe & Rider, 1995] Kothe, D. & Rider, W. (1995). Practical considerations for interface tracking methods. Technical Report LA-UR-95-1741, Los Alamos National Laboratory, http://www.c3.lanl.gov/ wjr/Web_papers/practical/practical.ps.Z.

[Kreißl & Rykaschewski, 1996] Kreißl, R. & Rykaschewski, M. (1996). Parallelisierung eines 3D-Codes zur numerischen Simulation nichtstationärer Strömungen und thermischer Effekte in inkompressiblen laminaren Medien. Fortgeschrittenenpraktikum, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/fopra/kreissl.ps.gz.

[Kurz & Fisher, 1986] Kurz, W. & Fisher, D. (1986). *Fundamentals of Solidification*. Aedermannsdorf: Trans Tech Publications.

[Lafaurie et al., 1994] Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S. & Zanetti, G. (1994). Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comp. Phys.*, 113, 134–147.

[Landau & Lifschitz, 1966] Landau, L. & Lifschitz, E. (1966). *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band VI: Hydrodynamik*. Berlin: Akademie Verlag.

[Langer, 1980] Langer, J. (1980). Instabilities and pattern formation in crystal growth. *Reviews of Modern Physics*, 52, 1–28.

[Mackenbrock, 1995] Mackenbrock, A. (1995). Eine verallgemeinerte Enthalpie-Methode zur Modellierung von Phasenumwandlungen in Multikomponentensystemen. Dissertation, TU Clausthal, Shaker Verlag, Aachen.

[Meier, 1995] Meier, F. (1995). Numerische Simulation der Fluid-Struktur-Wechselwirkung am Beispiel einer ventilgesteuerten Mikropumpe. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/diplarb/meierf.ps.gz.

[Minkowycz, 1988] Minkowycz, W. (1988). *Handbook of Numerical Heat Transfer*. New York: Wiley.

[Müller, 1973] Müller, H.-H. (1973). *Meyers Physik-Lexikon*. Mannheim: Bibliogr. Institut.

[Mullins & Sekerka, 1963] Mullins, W. & Sekerka, R. (1963). Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow. *J. Appl. Phys.*, 34, 323–329.

[Nakaya, 1954] Nakaya, U. (1954). Snow crystals. Harvard University, Cambridge Mass.

[Noh & Woodward, 1976] Noh, W. & Woodward, P. (1976). SLIC (simple line interface method). *Lecture Notes in Physics*, 59, 330–340.

[Nonino & del Giudice, 1985] Nonino, C. & del Giudice, S. (1985). An improved procedure for finite-element methods in laminar and turbulent flow. In C. Taylor (Ed.), *Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Part I* (pp. 597–608).: Pineridge.

[Oberbeck, 1879] Oberbeck, A. (1879). Über die Wärmeleitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Strömungen infolge von Temperaturdifferenzen. *Ann. Phys. Chem.*, 7, 271–292.

[Oosthuizen & Paul, 1996] Oosthuizen, P. & Paul, J. (1996). A numerical study of the steady state freezing of water in an open rectangular cavity. *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, 6, 3–16.

[Oran & Boris, 1987] Oran, E. & Boris, J. (1987). *Numerical Simulation of Reactive Flow*. New York: Elsevier.

[Patankar, 1980] Patankar, S. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill.

[Patankar, 1981] Patankar, S. (1981). A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Num. Heat Transfer*, 4, 409–425.

[Patankar & Spalding, 1972] Patankar, S. & Spalding, D. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15, 1787–1806.

[Peyret & Taylor, 1983] Peyret, R. & Taylor, T. (1983). *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer Series in Computational Physics. Berlin: Springer.

[Pham, 1989] Pham, Q. (1989). Effect of supercooling on freezing time due to dendritic growth of ice cristals. *Rev. Int. Froid*, 12, 295–300.

[Quaterpelle, 1993] Quaterpelle, L. (1993). *Numerical Solution of the Incompressible Navier-Stokes Equations*. Basel: Birkhäuser. ISNM 113.

[Rappaz, 1989] Rappaz, M. (1989). Modelling of microstructure formation in solidification processes. *Int. Mater. Rev.*, 34, 93–123.

[Roache, 1976] Roache, P. (1976). *Computational Fluid Dynamics*. Albuquerque: Hermosa.

[Schmidt, 1996] Schmidt, A. (1996). Computation of three dimensional dendrites with finite elements. *J. Comp. Phys.*, 125, 293–312.

[Sethian & Strain, 1992] Sethian, J. & Strain, J. (1992). Crystal growth and dendritic soldification. *J. Comp. Phys.*, 98, 231–253.

[Shih, 1984] Shih, T. (1984). *Numerical Heat Transfer*. Washington: Hemisphere Publ.

[Shortley & Weller, 1938] Shortley, G. & Weller, G. (1938). Numerical solution of Laplace's equation. *J. Appl. Phys.*, 9, 334–348.

[Smith, 1994] Smith, G. (1994). *Numerical Solution of Partial Differential Equations – Finite Difference Methods*. Oxford: Clarendon Press, 3rd edition.

[Smith, 1981] Smith, J. (1981). Shape instabilities and pattern formation in solidification: A new method for numerical solution of the moving boundary problem. *J. Comp. Phys.*, 39, 112–127.

[Sod, 1985] Sod, G. (1985). *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.

[Stefan, 1889] Stefan, J. (1889). Über einige Probleme der Theorie der Wärmeleitung. *S.-B. Wien. Akad. Mat. Nat.*, 98, 173–484.

[Strang & Fix, 1973] Strang, G. & Fix, G. (1973). *An Analysis of the Finite Element Method*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall.

[Sullivan et al., 1987] Sullivan, J., Lynch, D. & O'Neil, K. (1987). Finite element simulation of planar instabilities during solidification of an undercooled melt. *Journal of Computational Physics*, 69, 81–111.

[Tacke & Harnisch, 1991] Tacke, K.-H. & Harnisch, A. (1991). Finite difference enthalpy methods for dendritic growth. In L. Wrobel & C. Brebbia (Eds.), *Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, Vol 2 Heat Transfer* (pp. 165–176).: de Gruyter.

[Temam, 1969] Temam, R. (1969). Sur l'approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 32, 135–153.

[Thompson & Hamann, 1997] Thompson, J. & Hamann, B. (1997). A survey of grid generation techniques and systems with emphasis on recent developments. *Surv. Math. Ind.*, 6, 289–310.

[Thompson et al., 1985] Thompson, J., Warsi, Z. & Mastin, C. (1985). *Numerical Grid Generation: Foundations and Applications*. Amsterdam: North-Holland.

[Tome & McKee, 1994] Tome, M. & McKee, S. (1994). GENSMAC: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *J. Comp. Phys.*, 110, 171–186.

[Turek, 1995] Turek, S. (1995). *A Comparative Study of some Time-Stepping Techniques for the Incompressible Navier-Stokes Equations*. Preprint 95-10, IWR Heidelberg.

[Voller et al., 1990] Voller, V., Swaminathan, R. & Thomas, B. (1990). Fixed grid techniques for phase change problems: A review. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 30, 875–898.

[Wagner, 1995] Wagner, E. (1995). Numerische Simulation und Visualisierung nichtstationärer Strömungen und thermischer effekte in inkompressiblen laminaren Medien in drei Dimensionen. Fortgeschrittenenpraktikum, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/fopra/wagner.ps.gz.

[Wagner, 1997] Wagner, E. (1997). Adaptive Gitterverfeinerung für eine Strömungssimulation in drei Dimensionen. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TU München, http://wwwzenger.informatik.tu-muenchen.de/publikat/diplarb/wagner.ps.gz.

[Yeoh et al., 1990] Yeoh, G., Behnia, M., de Vahl Davis, G. & Leonardi, E. (1990). A numerical study of three-dimensional convection during freezing of water. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 30, 899–914.

[Youngs, 1982] Youngs, D. (1982). Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. In K. Morton & M. Baines (Eds.), *Numerical Methods for Fluid Dynamics* (pp. 273–285).

[Zaleski, 1995] Zaleski, S. (1995). Méthodes de simulation d'interfaces libres entre fluides. Ecole de Printemps, Carcans - Maubuisson.

[Zenger, 1991] Zenger, C. (1991). Sparse Grids. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, 31.